

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

**MODÉLISATION DE LA PROPAGATION DE
POLLUANTS DANS UN MILIEU POREUX SATURÉ ET
NON SATURÉ**

**ABDELFETTAH FREDJ
DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL,
GÉOLOGIQUE ET DES MINES
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL**

**THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIAE DOCTOR (Ph.D)
(GÉNIE CIVIL)
JANVIER 1999**

© Abdelfettah Fredj, 1999.



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions et
services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-42822-2

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTREAL

Cette thèse intitulée:

**MODÉLISATION DE LA PROPAGATION DE
POLLUANTS DANS UN MILIEU POREUX SATURÉ ET
NON SATURÉ**

présentée par: **FREDJ Abdelfettah**

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiae Doctor (Ph.D)

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. PRUD'HOMME Michel, Ph.D., président

M. KAHAWITA René, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. QUACH Tung T., Ph.D., membre

M. DESJARDINS Raymond, M.Ing., membre

À la mémoire de mon beau-frère, Habib Fredj

À la mémoire de mes grands-parents

À mes adorables parents

À mes frères et soeurs

À tous ceux qui me sont chers...

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, le professeur René Kahawita. Ses judicieux conseils techniques ont été indispensables pour mener à bien la réalisation de ce projet. Je lui exprime donc toute ma reconnaissance.

Je remercie également les membres du jury, M. Tung Quach Thanh d'Hydro-Québec, M. Michel Prud'Homme, M. Raymond Desjardins, M. Jean Conan, ainsi que M. René Kahawita, pour avoir accepté de juger cette thèse.

Je remercie sincèrement mes parents, mes frères et soeurs qui m'ont constamment soutenu tout au long de mes études.

Je remercie aussi mon amie Leïla qui m'a constamment épaulé par sa grande compréhension et son encouragement.

Je remercie aussi le corps professoral du département, ainsi que les techniciens de la section hydraulique. Je remercie aussi mes camarades Mustapha Asli, Nacer Zerrouk, Daniel Lavallée et Annie Rochette pour leurs remarques, critiques et suggestions.

Je remercie aussi tous les étudiants aux cycles supérieurs de la section d'hydraulique, qui m'ont permis de travailler dans des conditions exceptionnellement agréables.

Enfin mes remerciements seraient incomplets sans exprimer une pensée à la mémoire de mes grands-parents et mon beau-frère Habib.

RÉSUMÉ

La contamination des eaux souterraines et la pollution du sol par des déchets industriels, par lixiviation des dépotoirs et par des activités agricoles, sont reconnues comme étant le problème environnemental le plus important des deux dernières décennies. La reconnaissance du problème a été suivie par des législations afin de restaurer les sites contaminés et prévenir les problèmes futurs. Reste que la pollution de l'eau souterraine est un problème parfois difficile à détecter (invisibilité, accès coûteux) et souvent impossible à corriger. Dans ce contexte, il est apparu que la modélisation numérique de transport des polluants dans un milieu poreux est nécessaire pour reconstruire l'histoire de pollution, concevoir des stratégies de remédiation et éviter les problèmes futurs

La modélisation mathématique de la migration des contaminants dans un milieu poreux a fait des avancées ces dernières années aussi bien au niveau de la conceptualisation des phénomènes que du couplage avec les équations du transport. Cependant la plupart des modèles existants qui traitent la contamination de la nappe, considèrent que la densité du fluide contenu dans le panache est égale à celle du milieu ambiant. Ces dernières années plusieurs études expérimentales, théoriques et numériques ont abordé la compréhension des migrations de lixiviat à partir des dépotoirs de surface.

Ces travaux impliquent le transport d'un seul panache de polluant. En réalité une source de pollution comporte plusieurs composantes organiques et inorganiques. Il s'agit d'un phénomène de transport plus complexe. Dus aux effets de l'adsorption et de la différence de densité, différents panaches peuvent se former comme ceux observés

observés dans l'aquifère du site d'enfouissement Borden en Ontario et celui de Babylon à New York.

Ces deux dernières décennies plusieurs algorithmes de calcul ont été développés pour résoudre les équations de transport, mais seulement quelques problèmes spécifiques ont été résolus efficacement et exactement. C'est parce qu'il existe une difficulté fondamentale à résoudre les équations de transport dû à leurs caractères hyperbolique et parabolique. Le développement d'une méthode numérique efficace et précise pour résoudre l'équation (parabolique-hyperbolique) de transport est essentielle pour comprendre et simuler les systèmes physiques. De plus, étant donné que l'échelle de temps propre au transport de tels polluants dans le milieu poreux peut être de l'ordre de quelques années, il est important que le schéma utilisé pour la simulation possède des qualités de dispersion numérique minimales. Les méthodes lagrangiennes, et particulièrement le schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front "*an exact peak capturing and oscillation-free scheme*", EPCOF, constituent un choix intéressant.

L'objectif de ce travail est la modélisation numérique des caractéristiques de transport et de dispersion d'un lixiviat comportant plusieurs composantes polluantes dans un milieu poreux en utilisant le schéma "EPCOF". Le code de calcul repose sur un modèle mathématique qui réalise le couplage entre un module hydrodynamique et un module de transport du soluté, en tenant compte du contraste de masse volumique, de la viscosité, de la convection, de la dispersion, de la dégradation et de la sorption sous les conditions d'équilibre et non-équilibre local.

Le modèle appliquera la méthode EPCOF, modifiée pour résoudre les problèmes de transport en deux dimensions sur des maillages non structurés. Le schéma a été utilisé en conjonction avec la méthode des volumes finis, basée sur des éléments triangulaires: les termes convectifs de l'équation de transport sont évalués en utilisant

une technique de suivi des particules arrières “Backward tracking”, une technique de suivi des noeuds avant “forward node ”, et un raffinement adaptatif des maillages. Le terme de diffusion est évalué par son intégration sur un volume de contrôle. Une formulation en volumes finis a aussi été utilisée pour la résolution des équations hydrodynamiques décrivant le champ d’écoulement.

Le modèle a été validé en comparant les résultats numériques obtenus avec les résultats expérimentaux et numériques disponibles dans la littérature. Le modèle ainsi validé a été utilisé pour simuler la migration d’un panache constitué des trois contaminants (chlorite, sulfate et potassium) dans le site d’enfouissement Borden en Ontario. Une bonne concordance entre les résultats numériques et les résultats observés sur le terrain a été observée. Une analyse de la sensibilité a montré que, parmi les facteurs influençant les caractéristiques de l’écoulement et la formation des instabilités, on trouve essentiellement la densité, la sorption, la perméabilité, la dispersivité et la vitesse.

Il a été démontré que la méthode “EPCOF” est capable de résoudre le problème de dispersion +convection avec une grande précision en utilisant un nombre de Péclet variant entre 0 et ∞ et un nombre de Courant élevé, la taille du maillage étant limitée par la précision de calcul des termes diffusifs. Ceci permet de diminuer la durée du temps de calcul. C’est pourquoi notre modèle est avantageux pour des simulations à long terme.

ABSTRACT

Groundwater contamination and soil pollution have become recognized as important environmental problems over the last 20 years. The origins of this contamination range from everyday activities (disposal of urban sewage and industrial wastes, uses of pesticides and fertilizers in agriculture). To more serious disposal problem such as burying of nuclear waste. Recognition of the problem has generally been followed by legislation to remediate the sites and to prevent further contamination. Monitoring and remediation of these sites have proved to be costly and time consuming, and contaminant modeling of the subsurface is necessary in order to reconstruct the pollution history and to devise remediation strategies.

Most transport studies in groundwater have been restricted to transport due to forced convection (i.e. transport driven by a hydraulic gradient). In recent years a variety of experimental and theoretical studies have begun to elucidate the important effects related to flow of variable density. These studies deal with the transport of one component in a variable-density flow system. Real contaminant plumes, however, are comprised of a variety of organic and inorganic species. Due to the retardation effects and to the density difference, different plumes may form as observed at Camp Borden (Ontario) as well as at Babylon (New York). Thus the potential for coupling through reaction and variable density flow have generally remained unexplored.

Numerous computational algorithms have been developed to solve transport equations in the past two decades, but only a few specific problems were solved efficiently and accurately. This is due to the fact that is a fundamental difficulty in solving transport equations due to their mixed parabolic and hyperbolic nature. The development of efficient and accurate numerical methods to solve the mixed parabolic-hyperbolic transport equation is essential to an understanding and simulation of the underlying physical systems.

This work is devoted to the numerical simulation of the transport and dispersion of multispecies contaminant plumes of variable density within the groundwater environment. Particular attention has been paid towards investigating the complex character of these multispecies plumes that may develop in variable density flow systems. The final goal is to be able to predict the movement and ultimate fate of chemicals through a sorbing porous media. Sorption under equilibrium and nonequilibrium conditions, in the latter case using a “dual porosity” concept that subdivides the porous medium into mobile and immobile regions has been modeled.

The model is essentially comprised of two modules: the first calculates the pressure distribution in the domain of interest, which enables computation of the velocities and soil moisture content. The second module computes the migration of the various species taking into account the major processes associated with the transport phenomena in porous media: advection, diffusion, decay and sorption. The influence of density and viscosity on the transport characteristics are also considered. The first module may be used independently of the second, and uses an implicit numerical formulation.

Since typical time scales for the movement of such plumes may attain the order of several years, it is important that the numerical schemes used in the simulation have minimal numerical dispersion as well as being free of spurious oscillation characteristics. Consequently, a hybrid Lagrangian-Eulerian finite volume method with adaptive local grid refinement and peak capturing and oscillation-free (EPCOF), properties has been developed. The scheme uses advection-dispersion decoupling, together with a backward method of characteristics, forward mode tracking, and local grid refinement, to solve the transport equations.

The governing equations for the flow field have been solved using a control volume finite element method implemented on a triangular stencil.

As part of the model validation, an attempt to reproduce experimentally observed gravitational instabilities that form along the lower edge of negatively buoyant plumes was made. The model was able to faithfully reproduce the lobe shaped instabilities in the plume that have been observed as well as to correctly simulate the ambient groundwater flow. Further validation was effected by simulation of field data gathered during observations on the Camp Borden (Ontario) plume site that has given rise to a leachate plume.

This study illustrates also how numerical errors in mass transport code can serve as a perturbing function during numerical computation and lead to the development of instabilities.

A sensitivity analysis shows that organic compounds that may be present, may separate from the dense plume due to sorption and take paths different to those taken by the dense species.

The numerical model developed displays excellent stability characteristics. It completely eliminates numerical oscillations due to the advection terms and can use very large time steps to reduce numerical diffusion. Mesh Peclet numbers ranging from 0 to infinity have been tested. The magnitude of the mesh Courant number is limited only by the accuracy requirements of the dispersion solver.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS.....	v
RÉSUMÉ.....	vi
ABSTRACT	ix
TABLE DES MATIÈRES	xii
LISTE DES TABLEAUX.....	xix
LISTE DES FIGURES	xx
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xxx
CHAPITRE: I: INTRODUCTION	1
CHAPITRE: II: ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE	8
2.1 Introduction	8
2.2 Transport de contaminant dans un milieu poreux.....	8
2.2.1 Effet de la densité.....	9
2.2.1.1 Étude expérimentale.....	9

2.2.1.3	Étude sur le terrain	19
2.2.1.4	Étude numérique	21
2.2.2	Effet de la sorption	29
2.3	Études comparatives.....	35
2.3.1	Études comparatives: transport	35
2.3.2	Études comparatives: écoulement	40
2.4	Objectifs	41
CHAPITRE III: LES ÉQUATIONS DE BASE		43
3.1	Introduction	43
3.2	Équation de continuité.....	43
3.2.1	Détermination des courbes caractéristiques des sols.....	48
3.3	Équation de transport	53
3.3.1	Équation de transport d'un soluté sous condition d'équilibre de sorption...	53
3.3.2	Équation de transport d'un soluté sous condition de non-équilibre de sorption.....	56
3.4	Densité et viscosité.....	61
3.5	Les conditions de frontière.....	63

3.5.1	Conditions de dirichlet	64
3.5.2	Condition frontière de neuman.....	64
3.6	Conclusion.....	65
CHAPITRE: IV SOLUTION NUMÉRIQUE		67
4.1	Introduction	67
4.2	Discrétisation du domaine.....	67
4.3	Discrétisation des équations.....	68
4.3.1	Les fonctions d'interpolations pour, h , \mathcal{C} , d , ρ , k	69
4.3.2	Intégration des équations.....	70
CHAPITRE V: SCHÉMA NON OSCILLATOIRE AVEC ÉVALUATION		
EXACTE DU FRONT		77
5.1	Introduction	77
5.2	Caractérisations des problèmes numériques	79
5.2.1	Schémas aux différences finies	83
5.2.2	Schémas aux caractéristiques.....	84
5.3	Schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front à 1D.....	89
5.3.1	Intégration de l'équation de convection diffusion.....	90

5.3.2 Particularités: principales difficultés.....	95
5.4 Schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front à 2d.....	99
5.5 Technique de suivi des particules.....	105
5.6 Conclusion.....	109
CHAPITRE VI: ÉTUDE NUMÉRIQUE DES TRANSFERTS BIDIMENSIONNELS	
DANS LA ZONE NON SATURÉE, APPLICATION À L'ÉTUDE	
DU DRAINAGE ET DE LA RECHARGE D'UNE NAPPE	
À SURFACE LIBRE	
	111
6.1 Introduction.....	111
6.2 Recharge d'une nappe à surface libre.....	112
6.3 Drainage d'une nappe à surface libre	118
6.4 Drainage d'une nappe à surface libre	122
CHAPITRE VII: MODÉLISATION DE LA MIGRATION D'UN	
CONTAMINANT DENSE DANS UN MILIEU	
POREUX SATURÉ.....	
	125
7.1 Introduction.....	125
7.2 Comparaison de nos résultats avec les observations expérimentales	

	de schincariol et al., 1990.....	127
7.3	Comparaison des nos résultats avec les résultats numériques	
	de schincariol et al., 1995.....	140
7.4	Étude du mécanisme de développement et d'amplification des instabilités	142
7.4.1	Sensibilité des instabilités à la dispersion	143
7.4.2	Sensibilité des instabilités à la taille du maillage du domaine modélisé.	147
7.4.3	Sensibilité des instabilités à la vitesse de l'écoulement.....	149
7.4.4	Sensibilité des instabilités à la perméabilité.....	151
7.5	Conclusion.....	155

CHAPITRE VIII: TRANSPORT D'UN PANACHE À PLUSIEURS

ÉLÉMENTS CONTAMINANTS DANS UN ÉCOULEMENT

À DENSITÉ VARIABLE

8.1	Introduction	156
8.2	Calcul de la densité et de la viscosité.....	156
8.3	Les facteurs influençant la propagation d'un panache à plusieurs éléments	
	contaminants	159
8.3.1	Milieu saturé.....	160
8.3.2	Milieu non saturé.....	164

8.4	Conclusion.....	178
-----	-----------------	-----

CHAPITRE IX: MODÉLISATION DE LA MIGRATION DE CONTAMINANT

DANS LE SITE D'ENFOUISSEMENT BORDEN

EN ONTARIO	180
-------------------------	------------

9.1	Introduction.....	180
-----	-------------------	-----

9.2	Description du site.....	182
-----	--------------------------	-----

9.3	Modélisation de la migration d'un panache constitué de trois éléments contaminants: chlorure, sulfate et potassium	185
-----	---	-----

9.4	Analyse de sensibilité.....	193
-----	-----------------------------	-----

9.4.1	Dispersivités.....	193
-------	--------------------	-----

9.4.2	Effet de la sorption	197
-------	----------------------------	-----

9.4.3	Effet de la densité.....	197
-------	--------------------------	-----

9.5	Conclusion.....	201
-----	-----------------	-----

CHAPITRE X: CHAMPS D'APPLICATION DE LA MÉTHODE EPCOF.....

10.1	Introduction.....	202
------	-------------------	-----

10.2	Les équations de saint-venant	203
------	-------------------------------------	-----

10.3	Simulation d'une brèche de barrage.....	204
------	---	-----

10.4 Conclusion.....206

CHAPITRE XI: CONCLUSIONS.....207

RÉFÉRENCES.....210

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Paramètres représentatifs de différents types de sols (Rawls et al., 1982, in Van Genuchten et al., 1991).....	52
Tableau 6.1	Conditions initiales et aux limites	113
Tableau 6.2	Paramètres de la fonction qui décrit les propriétés hydraulique du sol	113
Tableau 6.3	Conditions initiales et aux limites	120
Tableau 6.4	Paramètres de la fonction qui décrivent les propriétés hydrauliques du sol	120
Tableau 7.1	Paramètres	127
Tableau 8.1	Paramètres de calcul de la densité et de la viscosité	158
Tableau 8.2	Densité et viscosité de NH ₃ [Zhang et al., 1994].....	158
Tableau 8.3	Densité et viscosité de NaCl [Zhang et al., 1994].....	159
Tableau 8.4	Conditions initiales et frontières du problème d'écoulement.....	165
Tableau 8.5	Paramètres de la fonction qui décrit les propriétés hydraulique du sol	166
Tableau 8.6	Conditions initiales et frontières du problème de transport	166
Tableau 8.7	Propriétés des deux contaminants simulés	166
Tableau 8.8	Paramètres de calcul de la densité et de la viscosité	176
Tableau 8.9	Propriétés des contaminants simulés.....	176

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Effets d'un contraste de mobilité défavorable (Backwell et al., 1959) dans (Oltean, 1995; Aachib, 1987).....	9
Figure 2.2	Développement d'un doigt au cours d'un déplacement air -'huile dans (Dombre et Hakim, 1986)	11
Figure 2.3	Influence du paramètre hydrodynamique G^* sur Rm^* (Buès et Aachib, 1991)	14
Figure 2.4	Modes de développement de la zone de mélange (Zilliox et Muntzer., 1975)	15
Figure 2.5	Résultats obtenus en milieu homogène, (a) $C=5000\text{mg/l}$, $t=36\text{h}$; (b) $C=5000\text{mg/l}$, $t=54\text{h}$; (c) $C=2000\text{mg/l}$, $t=72\text{h}$; (Schincariol et al., 1990)	17
Figure 2.6	Résultats obtenus en milieu lenticulaire (Schincariol et al., 1990).....	17
Figure 2.7	Résultats obtenus par (Oostrom et al., 1992).....	18
Figure 2.8	Modèle conceptuel de déploiement d'un panache au site 'enfouissement sanitaire de Babylone à New York (Kimmel et Braids, 1980).....	19
Figure 2.9	Déploiement d'un panache au site d'enfouissement sanitaire de Borden en Ontario (Frind et al., 1985).....	20
Figure 2.10	Résultat obtenu ($C=2000\text{mg/l}$, $t=72\text{h}$) (Fan, 1995).....	24
Figure 2.11	Résultats numériques $C=2000\text{mg/l}$ (a): $\Delta x=15\text{mm}$, $\Delta y=15\text{mm}$, $Pe=14$, $C_r(x)=1$, $C_r(z)=0.5$; (b): $\Delta x=2.5\text{mm}$, $\Delta y=2.5\text{mm}$, $Pe=2.4$, $C_r(x)=1.1$, $C_r(z)=0.5$	26
Figure 2.12	Résultats obtenus par (Zhang et Schwartz. 1995), (a): $C_1=5000\text{mg/l}$	

	(NaCl), $t=420$ jours; (b) $C_1=5000\text{mg/l}$ (NaCl), $t=780$ jours;	
	(c) $C_1=5000\text{mg/l}$ (NaCl), $t=1140$ jours; (d) $C_2=100\text{mg/l}$ (NH ₃),	
	$t=420$ jours; (e) $C_2=100\text{mg/l}$ (NH ₃), $t=780$ jours; (f)	
	$C_2=100\text{mg/l}$ (NH ₃), $t=1140$ jours	50
Figure 3.1	Courbes Caractéristiques du sol ($\phi=0.3$, $K_s=40$ cm/hr)	
	(Vauclin, 1975)	50
Figure 3.2	Conditions aux limites	63
Figure 4.1	Discrétisation du domaine	68
Figure 4.2	(a) Volumes de contrôle; (b) et (c) points de calcul à la frontière	68
Figure 5.1	L'organigramme du code de calcul	78
Figure 5.2	Transport d'un contaminant à travers le milieu poreux	80
Figure 5.3	Effets de la dispersion cinématique	81
Figure 5.4	Courbe de distribution de la concentration dérivé à partir de l'équation	
	de convection dispersion	82
Figure 5.5	Principe de la technique lagrangienne à 1D	85
Figure 5.6	Courbe de distribution de la concentration dérivé à partir de l'équation	
	de convection dispersion (Fredj, 1994)	86
Figure 5.7	Les problèmes numériques causé par la résolution des termes convectifs:	
	(a) perte de front (pic), (b) diffusion numérique, (c) oscillations	
	numériques (Yeh, 1992)	87
Figure 5.8	Définition d'un élément lisse et raide	90
Figure 5.9	Exemple de calcul (1D), utilisant le schéma non oscillatoire avec	
	évaluation exacte du front.	94
Figure 5.10	Domaine de calcul de l'exemple de démonstration	97
Figure 5.11	Problème frontière	98
Figure 5.12	Domaine de calcul	99
Figure 5.13	Technique de suivit de particule arrière (première étape).....	100
Figure 5.14	Technique de suivit de particule avant (étape 2)	101

Figure 5.15	Raffinement des éléments raides par un noeud au centre	104
Figure 5.16	Discrétisation de domaine en utilisant la technique de Delauney.....	105
Figure 5.17	Domaine de calcul de l'exemple de démonstration du schéma de R-Kutta	106
Figure 5.18	Vecteurs vitesse	107
Figure 5.19	Évolution de la position de la particule (a) $t=1000$, (b) $t=2000$	108
Figure 6.1	Domaine de calcul : Application à l'étude de la recharge d'une nappe	112
Figure 6.2	Discrétisation du domaine (Maillage 1).....	114
Figure 6.3	Discrétisation du domaine (Maillage 2).....	114
Figure 6.4	Débit spécifique au temps $t=4h$ (maillage 1).....	115
Figure 6.5	Lignes de pressions au temps $t=4h$, (maillage 1).....	115
Figure 6.6	Débit spécifique au temps $t=8h$ en utilisant le maillage 1	116
Figure 6.7	Lignes de pressions au temps $t=8h$ (maillage 1).....	116
Figure 6.8	Comparaison de l'évolution de la position de la surface libre, expérimentale, schéma des éléments finis (FEM) et calculée en utilisant le (maillage 1).....	117
Figure 6.9	Comparaison de l'évolution de la position du surface libre, expérimentale et calculée en utilisant le (maillage 2)	118
Figure 6.10	Domaine de calcul et conditions aux limites	119
Figure 6.11	Débit spécifique au temps $t=1h$	121
Figure 6.12	Comparaison de l'évolution de la position de la surface libre: expérimentale et calculée à $t=1h$	121
Figure 6.13	Domaine de calcul et conditions aux limites (exemple 3).....	122
Figure 6.14	Débit spécifique et la ligne de la surface libre à $t=1h$	123
Figure 6.15	Lignes de pression à $t=1h$	123
Figure 6.16	Comparaison de l'évolution de la position du surface libre,	

	expérimentale et calculée à $t=0.1, 0.5$ et $1h$	124
Figure 7.1	Domaine de calcul et conditions frontières.....	127
Figure 7.2	Discrétisation du domaine de calcul en utilisant un maillage uniforme	128
Figure 7.3	Discrétisation du domaine de calcul en utilisant un maillage raffiné (maillage2)	128
Figure 7.4	Résultat expérimental du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l de NaCl) à $t=72h$ Schincariol et al., 1990	129
Figure 7.5	Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72h$ en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.03cm$, $\alpha_T=0.003cm$ $P_e=15.5$ et $C_r=2.95$	129
Figure 7.6	Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72h$ en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03cm$, $\alpha_T=0.003cm$, $P_e=15.5$ et $C_r=2.95$	129
Figure 7.7	Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72h$ en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.1cm$, $\alpha_T=0.02cm$ $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$	131
Figure 7.8	Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72h$ en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.1cm$, $\alpha_T=0.02cm$ $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$	131
Figure 7.9	Suivi d'une particule dans le temps ($t=72h$, $C=2000mg/l$)	132
Figure 7.10	Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24h$ Schincariol et al., 1990	133
Figure 7.11	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24h$ en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1cm$, $\alpha_T=0.02cm$ $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$	133

Figure 7.12	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.17$	133
Figure 7.13	Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h Schincariol et al., 1990	134
Figure 7.14	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.01$ cm $P_e=7$	134
Figure 7.15	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.5$	134
Figure 7.16	Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h Schincariol et al., 1990	135
Figure 7.17	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.01$ cm $P_e=7$	135
Figure 7.18	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.6$	135
Figure 7.19	Les champs de vitesse à $t=54$ h ($C=5000$ mg/l)	136
Figure 7.20	Les champs de vitesse à $t=72$ h ($C=5000$ mg/l)	136
Figure 7.21	Suivi d'une particule dans le temps ($t=72$ h, $C=5000$ mg/l)	137
Figure 7.22	Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=10000$ mg/l) à $t=54$ h Schincariol et al., 1990	138
Figure 7.23	Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=10000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=24.4$	138
Figure 7.24	Les champs de vitesse à $t=54$ h ($C=10000$ mg/l)	139

Figure 7.25	Suivi d'une particule du panache de concentration ($C=2000, 5000$ et 10000 mg/l)	139
Figure 7.26	Comparaison entre le code VaporT (a), (b) et (c), Schincariol et al., 1990 et la présente étude (d), ($C=2000$ mg/l, $t=90$ h)	141
Figure 7.27	Déploiement du contaminant ($C=2000$ mg/l) à $t=90$ h (maille 5.0 mm x 5.0 mm, $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=0.0$, maximum $Pe=13$. Schincariol et al., 1995	142
Figure 7.28	Déploiement du contaminant ($C=2000$ mg/l) à $t=90$ h (maille 7.5 mm x 7.5 mm, $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=0.0$, maximum $Pe=19.4$	142
Figure 7.29	Déploiement du contaminant (maille 10 mm x 10 mm, $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=3.0 \times 10^{-5}$, (a) $C=2$ g/l, (b) $C=3$ g/l, (c) $C=5$ g/l, (d) $C=10$ g/l, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)	143
Figure 7.30	Déploiement du contaminant (maille 10 mm x 10 mm, $\alpha_L=6.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=6.0 \times 10^{-5}$, (a) $C=2$ g/l, (b) $C=3$ g/l, (c) $C=5$ g/l, (d) $C=10$ g/l, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)	144
Figure 7.31	Déploiement du contaminant (maille 10 mm x 10 mm, $\alpha_L=1.5 \times 10^{-3}$ m, $\alpha_t=1.5 \times 10^{-4}$ m, (a) $C=2$ g/l, (b) $C=3$ g/l, (c) $C=5$ g/l, (d) $C=10$ g/l, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)	145
Figure 7.32	Contours des concentrations relatives ($C/C_0, C_0=5000$ mg/l) à $t=72$ h, (a) $\alpha_L=1.5 \times 10^{-3}$ m, $\alpha_t=1.5 \times 10^{-5}$ m (b) $\alpha_L=3 \times 10^{-4}$ m, $\alpha_t=3 \times 10^{-5}$ m	146
Figure 7.33	Suivi d'une particule de concentration $500, 1000, 2000, 3000, 5000$ et	

	10000 mg/l de NaCl	146
Figure 7.34	Déploiement du contaminant (maille 15mm x 15mm, $\alpha_L = 6.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t = 6.0 \times 10^{-5}$, maximum Pe=22.4	147
Figure 7.35	Déploiement du contaminant (maille 7.5mm x 7.5mm, $\alpha_L = 3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t = 3.0 \times 10^{-5}$, maximum Pe=20	148
Figure 7.36	Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5000 \text{ mg/l}$) à $t=72\text{h}$, (a) $\Delta x = \Delta y = 10\text{mm}$ (b) $\Delta x = \Delta y = 7.5\text{mm}$	149
Figure 7.37	Contours des concentrations relatives (C/C_0) à $t=72\text{h}$, (a) $C_0 = 3\text{g/l}$, $v/v_0 = 0.75$ (b) $C_0 = 5\text{g/l}$, $v/v_0 = 0.75$ (c) $C_0 = 3\text{g/l}$, $v/v_0 = 1$ (d) $C_0 = 5\text{g/l}$, $v/v_0 = 1$ (e) $C_0 = 3\text{g/l}$, $v/v_0 = 1.5$ (f) $C_0 = 5\text{g/l}$, $v/v_0 = 1.5$	150
Figure 7.38	Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5\text{g/l}$) à $t=54\text{h}$, (a) $v/v_0 = 1$, $\alpha/\alpha_0 = 1.5$ (b) $v/v_0 = 1.5$, $\alpha/\alpha_0 = 1$	151
Figure 7.39	Contours des concentrations relatives (C/C_0) à $t=54\text{h}$, (a) $C_0 = 3\text{g/l}$, $v/v_0 = 0.75$ (b) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_0 = 0.75$ (c) $C_0 = 3\text{g/l}$, $K/K_0 = 1$ (d) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_0 = 1$ (e) $C_0 = 3\text{g/l}$, $K/K_0 = 1.5$ (f) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_0 = 1.5$	152
Figure 7.40	Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5\text{g/l}$) à $t=54\text{h}$, (a) $v/v_0 = 1$, $K/K_0 = 1$, $\alpha/\alpha_0 = 1.5$ (b) $v/v_0 = 1.5$, $K/K_0 = 1$, $\alpha/\alpha_0 = 1$ (c) $K/K_0 = 1.5$, $\alpha/\alpha_0 = 1$	153
Figure 7.41	Déploiement du contaminant (maille 10mm x 10mm, $\alpha_L = 3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_T = 3.0 \times 10^{-5}$, $(K_x/K_z) = 2.5$	153
Figure 7.42	Contours des concentrations relatives (C/C_0), (a) $C_0 = 3\text{g/l}$, $K/K_z = 1$, à $t=90\text{h}$ (b) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_z = 1$ à $t=72\text{h}$ (c) $C_0 = 3\text{g/l}$, $K/K_z = 2.5$, à $t=90\text{h}$ (d) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_z = 2.5$, à $t=72\text{h}$ (e) $C_0 = 3\text{g/l}$, $K/K_z = 5$ à $t=90\text{h}$ (f) $C_0 = 5\text{g/l}$, $K/K_z = 5$ à $t=72\text{h}$	154
Figure 8.1	Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1 = 10,000\text{mg/l}$, $R_1 = 1.0$; (b) $C_2 = 100\text{mg/l}$, $R_2 = 1.8$; (c) $C_1 = 10,000\text{mg/l}$, $R_1 = 1.0$;	

	(d) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=4.0$	161
Figure 8.2	Suivi de particules ($C_1 = 10,000\text{mg/l}$ et $C_2=100\text{mg/l}$).....	161
Figure 8.3	Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (b) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (c) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (d) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=4.0$	162
Figure 8.4	Suivi de particules ($C_1 = 5,000\text{mg/l}$ et $C_2=100\text{mg/l}$).....	163
Figure 8.5	Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (b) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (c) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (d) $C_2=3,000\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (e) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (f) $C_2=3,000\text{mg/l}$, $R_2=1.2$	164
Figure 8.6	Domaine de calcul et conditions initiales et frontières	167
Figure 8.7	Domaine de calcul en utilisant un maillage uniforme	167
Figure 8.8	Lignes de pression et vecteurs de vitesse de l'écoulement permanent: (a) Gambaloti et al., 1996; (b) la présente étude	168
Figure 8.9	Contours de concentrations relatives (C/C_0), à $t=90.775$ jours, des deux contaminants: réactif et non-réactif (a) et (b) Gambaloti et al., 1996, (c) présente étude	169
Figure 8.10	Influence de la fraction de liquide mobile (ϕ) sur la migration d'un polluant (a) $\phi = 0.25$, (b) $\phi = 0.5$, (c) $\phi = 0.75$, (d) $\phi = 1.0$	171
Figure 8.11	Influence de la fraction d'adsorption dans la région mobile (f) sur la migration d'un polluant (a) $f = 0.25$, (b) $f = 0.4$, (c) $f = 0.75$, (d) $f = 1.0$	172
Figure 8.12	Influence du coefficient de transfert de masse (α) entre les régions mobile et immobile sur la migration d'un polluant (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 0.1$, (c) $\alpha = 0.5$, (d) $\alpha = 1.0$	173
Figure 8.13	Influence du coefficient d'adsorption (K_d) sur la migration d'un polluant (a) $K_d = 0.0$, (b) $K_d = 0.5$, (c) $K_d = 1.0$, (d) $K_d = 2.0$	174

Figure 8.14	Contours des concentrations relatives (C/C_0) du contaminant réactif (Li^+ , $C_0=680\text{mg/l}$) dans la région mobile à $t=90.775$ jours.....	177
Figure 8.15	Contours des concentrations relatives (C/C_0) du contaminant non réactif (Br^- , $C_0=100\text{mg/l}$) à $t=90.775$	177
Figure 8.16	Contours des concentrations relatives (C/C_0) de deux contaminants: réactif (NH_3 , $C_0=100\text{mg/l}$) et non-réactif ($NaCl$, $C_0=5000\text{mg/l}$) à $t=90.775$ jours.....	178
Figure 9.1	Localisation du site d'enfouissement sanitaire de Borden (Vue en plan) (d'après MacFarlane et al., 1983).....	181
Figure 9.2	Localisation du site d'enfouissement sanitaire de Borden. La section A-A' est une coupe longitudinale selon l'axe du panache (d'après Frind et Hokkanen, 1987)	182
Figure 9.3	Panache du chlorure selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1979; les contours sont en mg/l (d'après Frind et Hokkanen, 1987)	183
Figure 9.4	Panache du potassium selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1977 et 1978; les contours sont en mg/l [d'après Sykes et al, 1987]	184
Figure 9.5	Panache du sulfate selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1979; les contours sont en mg/l [d'après Sykes et al, 1982]	185
Figure 9.6	Conditions frontières du modèle de l'écoulement	187
Figure 9.7	Conditions frontières du modèle de transport.....	187
Figure 9.8	Fonction de recharge et le niveau de la nappe calibré	188
Figure 9.9	Discrétisation du domaine de calcul	188

Figure 9.10	Lignes d'isopressions à l'état permanent.....	189
Figure 9.11	Vecteurs vitesse à l'état permanent.....	189
Figure 9.12	Évolution du panache du chlorure dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) avec un intervalle de 0.2.....	190
Figure 9.13	Évolution du panache du sulfate dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) avec un intervalle de 0.2.....	191
Figure 9.14	Évolution du panache du Potassium dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, et $R=1.8$, les contours représentent la concentration relative (C/C_0)	192
Figure 9.15	Effet de la dispersivité transversale avec $\alpha_L=10$ m; (a) $\alpha_T=1.0$ m (b) $\alpha_T=0.1$ m (c) $\alpha_T=0.01$ m (d) $\alpha_T=0.005$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2.....	194
Figure 9.16	Effet de la dispersivité transversale avec $\alpha_L=10$ m; (a) $\alpha_T=1.0$ m (b) $\alpha_T=0.1$ m (c) $\alpha_T=0.01$ m (d) $\alpha_T=0.005$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2.....	195
Figure 9.17	Effet de la dispersivité longitudinale avec $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\alpha_L=2.5$ m (b) $\alpha_L=5$ m (c) $\alpha_L=10.0$ m (d) $\alpha_L=20.0$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2	196
Figure 9.18	Effet de l'adsorption sur le déploiement du panache de Potassium avec $\alpha_L=10$ m; $\alpha_T=0.01$ m; (a) $R=3.0$ (b) $R=2.7$; (c) $R=1.8$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2.....	198

- Figure 9.19 Effet de la densité sur le déploiement du panache de chlorure avec $\alpha_L=10$ m; $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$ (b) $\Delta\rho/\rho_0=0.0022$; (c) $\Delta\rho/\rho_0=0.0036$, (d) $\Delta\rho/\rho_0=0.005$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans 199
- Figure 9.20 Effet de la densité sur le déploiement du panache de sulfate avec $\alpha_L=10$ m; $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$ (b) $\Delta\rho/\rho_0=0.0022$; (c) $\Delta\rho/\rho_0=0.0036$, (d) $\Delta\rho/\rho_0=0.0071$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans 200
- Figure 10. 1 Rupture de barrage: $t=7.1$ secondes, $C_r=5$ 205

Liste des sigles et abréviations

C	Concentration de la soluté (ML^{-3})
C_{im}	Concentration de la solution dans la région immobile (ML^{-3})
C_k^{ref}	Concentration de référence du polluant k
C_m	Concentration de la solution dans la région mobile (ML^{-3})
C_s	Concentration injecté ou pompé par la source ou puits (ML^{-3})
C_r	Nombre de Courant
D_{ij}	Tenseur de dispersion hydrodynamique (L^2T^{-1})
D_{xx}, D_{xz}, D_{zz}	Composantes de la dispersion (L^2T^{-1})
D_0	tenseur de diffusion moléculaire (L^2T^{-1})
F	Fraction d'adsorption dans la région mobile
g	Accélération gravitationnelle (LT^{-2})
h	Charge hydraulique (L)
K_d	Coefficient dans l'isotherme de Freundlich
K_{ij}	Tenseur de conductivité hydraulique
K_{xx}, K_{xz}, K_{zz}	Composantes de conductivité hydraulique
K_s	Conductivité hydraulique du milieu saturé
k_r	Conductivité relative (varie entre 0 et 1)
n	Porosité
n_m	Porosité dans la région mobile
n_{im}	Porosité dans la région immobile
$n_t = n_m + n_{im}$	Porosité totale ($n_t = n_m + n_{im}$)
P	Pression ($ML^{-1}T^{-2}$)

q_i	Vitesse de Darcy
Q	Source ou puits
R_d	Coefficient de retard $\left(R_d = 1 + \frac{\rho_b F k_d}{\theta} \right)$
S	Isotherme de Freundlich $((S = K_d C^n)$
S_m	Concentration adsorbé dans la région mobile du sol $(S_m = K_{dm} C_m)$
S_{im}	Concentration adsorbé dans la région immobile du sol $(S_m = K_{dm} C_{im})$
S_p	Coefficient spécifique d'emmagasinement $(M L^{-1} T^{-1})$ $(S_p = \rho_0 g(\alpha + n\beta))$
S_w	Degré de saturation
T	Température
u_i	Vitesse du fluide dans les pores $(u_i = q_i / \theta)$
V_m	Vitesse du contaminant $(V_m = u_i / R_d)$
x_i	Coordonnée spatiale (L)
z	Coordonnée spatiale
α_{im}	Coefficient de transfert de la masse entre la région mobile et immobile
α_L	Dispersivité intrinsèque longitudinale (L)
α_T	Dispersivité intrinsèque transversale (L)
β	Compressibilité de l'eau $\left(\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \right)$
$\delta_{i,j}$	Delta Kronecker $(\delta_{i,j} = 1$ pour $i=j$ et $\delta_{i,j} = 0$ pour $i \neq j)$
λ	Coefficient de dégradation
μ	Viscosité dynamique de l'eau avec une concentration C $(ML^{-1}T^{-1})$
μ_0	Viscosité dynamique de l'eau $(ML^{-1}T^{-1})$

μ_m	Viscosité du mélange $\left(\ln \mu_m = \sum_{k=1}^n w_k \ln \mu_k^{ref} + \left(1 - \sum_{k=1}^n w_k \right) \ln \mu_w^{ref} \right)$
μ_k^{ref}	Viscosité de référence du polluant k ($ML^{-1}T^{-1}$)
θ	Teneur en eau
θ_r	Teneur en effective eau
θ_s	Teneur saturé en eau
θ_m	Teneur en eau dans la dans la région mobile ($\theta_m = n_m s_{wm}$)
θ_{im}	Teneur en eau dans la dans la région mobile ($\theta_{im} = n_{im}$)
ρ_0	Densité de l'eau
ρ	densité du fluide dont la concentration est \mathcal{C}
ρ_{max}	densité du fluide dont la concentration est \mathcal{C}_{max}
ρ_m	Densité du mélange $\left(\rho_m = \rho_0 \left(1 - \sum_{k=1}^n \frac{\mathcal{C}_k}{\mathcal{C}_k^{ref}} \right) + \sum_{k=1}^n \frac{\mathcal{C}_k}{\mathcal{C}_k^{ref}} \rho_k^{ref} \right)$
ρ_k^{ref}	Densité de référence du polluant k

CHAPITRE I

INTRODUCTION

“ Art is the lie that helps us to see the truth ”

— *Pablo Picasso*

L'eau souterraine, bien quelle soit logée dans le sous-sol, n'est pas à l'abri de la pollution. Elle est de plus en plus contaminée par des divers polluants (tableau 1.1). La contamination des eaux souterraines et la pollution du sol par des déchets industriels, par lixiviation des dépotoirs et par des activités agricoles, sont reconnues comme étant le problème environnemental le plus important des deux dernières décennies. Souvent, on se rend compte du problème une fois la cause de la contamination disparue (industrie fermée, lieu d'enfouissement abandonné, etc.). La reconnaissance du problème a été suivie par des législations afin de restaurer les sites contaminés et prévenir les problèmes futurs. Reste que la pollution de l'eau souterraine est un problème parfois difficile à détecter et souvent impossible à corriger. Les méthodes de décontamination de l'eau souterraine ont la réputation d'être coûteuses, longues à donner des résultats et pas toujours efficaces. La prévention est donc l'option à privilégier et demeure la moins onéreuse des mesures de protection de la qualité de l'eau souterraine. Pour ce faire, il est nécessaire de développer des travaux fondamentaux liés à l'impact des activités humaines sur la pollution des nappes aquifères. Dans ce contexte, il est apparu particulièrement intéressant de construire un modèle mathématique afin d'étudier le transport des polluants dans un milieu poreux pour éviter la contamination de l'eau souterraine, composante précieuse de l'environnement et, pour bien des personnes, l'unique source d'eau.

SOURCES PONCTUELLES

Installations septiques.
 Fuites de réservoirs ou de pipelines contenant des produits pétroliers.
 Pertes ou déversements de produits chimiques industriels à l'usine.
 Puits d'injection de déchets industriels (solides et liquides).
 Eaux s'écoulant des dépotoirs (lixiviats).
 Fumiers.
 Fuites des réseaux d'égouts.
 Produits chimiques utilisés dans les usines de préparation de bois traités contre la pourriture.
 Résidus miniers.
 Cendres volantes (poussières) des centrales thermiques alimentées au charbon.
 Lieux d'élimination des boues dans les raffineries de pétrole.
 Épandage des boues résiduaires.
 Cimetières.
 Lieux d'entreposage des sels de déglacage pour routes.
 Ruissellement des sels et autres produits chimiques sur les routes et autoroutes.
 Déversements liés aux accidents routiers ou ferroviaires.
 Goudron de houille dans les anciens lieux de gazéification.
 Usines de béton bitumineux et terrain de nettoyage de l'équipement.

SOURCES DIFFUSES

Engrais sur les terres agricoles.
 Pesticides sur les terres agricoles et les forêts.
 Contaminants dans les précipitations.

Tableau 1. 1 Sources de contamination susceptibles de polluer l'eau souterraine.
 (Environnement Canada, 1993, dans Génie et environnement)

La modélisation mathématique de la migration des contaminants dans un milieu poreux a fait des avancées ces dernières années aussi bien au niveau de la conceptualisation des phénomènes que du couplage avec les équations du transport. Cependant la plupart des modèles existants qui traitent la contamination de la nappe, considèrent que la densité du fluide contenu dans le panache est égale à celle du milieu ambiant. En fait, des études ont montré qu'une densité de 0.2% plus haute que celle de l'eau peut modifier considérablement le comportement du panache. Il faut donc en tenir compte car il existe à la surface du sol plusieurs sources qui ont une différence de densité qui varie entre 0.5% et 4%. Ces différences peuvent faire évoluer l'écoulement

vers un régime instable qui se traduit par l'apparition des instabilités (digitations) et de diffusion au niveau de la zone de mélange ce qui peut rendre difficile la localisation de la zone contaminée.

La plupart des études touchant les écoulements de densité variable dans le milieu poreux sont consacrés au traitement du problème des intrusions salines près des aquifères littorales. Quelques travaux ont abordé la compréhension des migrations de lixiviat à partir des dépotoirs de surface (List, 1965; Wooding, 1969; Schincariol et Schwartz, 1990; Oostrom et 1992; Dorgarten et Tsang, 1991; Koch et Zhang 1992, Schincariol et al. 1994, Fan et Kahawita, 1994). Les résultats expérimentaux et numériques de ces travaux ont montré qu'à partir d'une certaine concentration, l'écoulement perd son caractère stable. Les instabilités qui apparaissent se manifestent par la formation de lobes à la limite inférieure de la zone de mélange qui peuvent être accompagnés d'un phénomène d'enfouissement. De plus, si le nombre de Rayleigh, qui sert de critère de stabilité est dépassé, des instabilités locales de grandes amplitudes peuvent apparaître, modifiant encore plus les caractéristiques dispersives du lixiviat. Cependant une publication (Schincariol et al., 1996) montre que les instabilités (ou digitation) hydrodynamiques produites par les modèles numériques sont dues au caractère diffusif des schémas utilisés et que le critère de stabilité critique basé sur le nombre de Rayleigh n'est pas approprié pour évaluer le problème du transport d'un panache dense.

Ces travaux impliquent le transport d'un seul panache de polluant. En réalité une source de pollution comporte plusieurs composantes. Il s'agit d'un phénomène de transport plus complexe pour lequel on doit coupler le transport de plusieurs panaches réactifs sous l'effet d'une densité variable dans le temps et l'espace. Une seule étude, à notre connaissance, a été menée sur un modèle numérique pour étudier la propagation

de deux panaches au site d'enfouissement de déchets à Babylon, New York (Zhang et Schwartz, 1995)

Un des plus importants processus influençant la propagation d'un contaminant dans un milieu poreux est l'immobilisation par adsorption (sorption en surface des particules de sol) et absorption (sorption à l'intérieur des particules de sol) des contaminants aux sols. Dans la plupart des modèles, la sorption de polluants est simulée par des isothermes et notamment l'isotherme linéaire qui suppose que l'équilibre de sorption "local equilibrium assumption" (LEA) est atteint instantanément immédiatement après la réception du contaminant dans un sol. Cette approche très simplifiée des échanges solide-liquide ne peut se justifier que si:

- Le milieu est homogène et que la composition ionique de la solution est constante (pas de modification de la distribution des différents complexes présents dans la solution)
- Le taux de sorption doit être rapide par rapport aux autres processus (advection, dispersion) qui affectent la concentration du contaminant.

Cependant, dans un milieu poreux la cinétique de la sorption est caractérisée par deux processus dynamiquement distincts. Immédiatement après la réception du contaminant dans un sol, une première phase d'adsorption rapide et relativement réversible compétitionne avec la biodégradation. Elle est suivie par un processus d'absorption plus lent et plus stable, qui dure jusqu'à ce que l'équilibre de sorption soit atteint. Young et Ball, 1994, ont trouvé que la sorption de trichloroethylene et tetrachlorobenzene 1, 2, 4 et 5 prend des années pour atteindre l'équilibre. Dans le cas de non-équilibre de sorption le taux de masse échangée pour atteindre l'équilibre influencera la propagation de la concentration dans l'espace et dans le temps.

Le modèle de porosité double "*dual porosity model*" constitue une approche qui décrit mathématiquement le phénomène de transport dans la condition de non-équilibre

de sorption "*non-LEA*". Cette approche consiste à diviser le phase fluide en deux régions, une région mobile et une région immobile. Le transport de la solution dans la région mobile se fait par advection, diffusion et uniquement par diffusion dans la région immobile.

L'objectif de ce travail est la modélisation numérique des caractéristiques de transport et de dispersion d'un lixiviat comportant plusieurs composantes polluantes dans un milieu poreux saturé et non saturé. Le modèle de transport considère la convection, dispersion, diffusion, réaction chimique, dégradation et la sorption sous les conditions d'équilibre et non-équilibre local. Le modèle tient aussi compte du contraste de masse volumique et de la viscosité. Le développement du code de calcul a été réalisé dans un premier temps pour la simulation d'un panache de polluant de masse volumique variable afin de comprendre le problème de naissance et de l'amplification des instabilités hydrodynamiques. À cette étape, le code a été testé sur des exemples trouvés dans la littérature. La bonne concordance entre ces résultats nous a permis de passer à l'étape finale de l'étude soit le développement du code pour le calcul de plusieurs polluants réactifs.

Le code de calcul repose sur un modèle mathématique qui réalise le couplage entre un module hydrodynamique et un module de transport du soluté, en tenant compte du contraste de masse volumique et de la viscosité. Dans la zone de mélange, la masse volumique et la viscosité dynamique varient linéairement en fonction de la concentration. De plus, la détermination de la conductivité hydraulique tient compte de la variation de la viscosité et de la masse volumique.

Le code de calcul doit résoudre les équations du modèle mathématique. Les méthodes usuelles employées pour les résoudre sont les différences finies, éléments finis et volumes finis. Ces méthodes classiques se heurtent à la diffusion numérique au

niveau des fronts de concentration raides et/ ou à des oscillations numériques au niveau de ce front ou dans leur voisinage lorsque la discrétisation du domaine modélisé est trop grossière. Un critère de discrétisation couramment admis est que la taille de la maille doit être plus petite que le double de la valeur de la dispersivité (Ackerer et al., 1994). Compte tenu des valeurs de dispersivité rencontrées lors de simulation de transport des polluant à plusieurs dimensions (quelques dizaines de centimètres), le nombre de noeuds dans le domaine simulé devient très élevé et le calcul nécessite beaucoup de moyens informatiques. De plus étant donné que l'échelle de temps propre au transport de tels polluants dans le milieu poreux peut être de l'ordre de quelques années, il est important que le schéma utilisé pour la simulation possède des qualités de dispersion numérique minimales. Les méthodes lagrangiennes, et particulièrement le schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front "*an exact peak capturing and oscillation-free scheme*", EPCOF, constituent un choix intéressant. La technique EPCOF est incontestablement la plus précise pour résoudre l'équation d'advection-dispersion à une dimension et elle ne génère aucune dispersion numérique ni instabilité (Cheng et al 1996, Yeh et al 1992).

Le code de calcul appliquera la méthode EPCOF, modifiée pour résoudre les problèmes de transport en deux dimensions sur des maillages non structurés. Le schéma a été utilisé en conjonction avec la méthode des volume finis, basée sur des éléments triangulaires: Les termes convectifs de l'équation de transport sont évalués en utilisant une technique de suivi des particules arrière "Backward tracking", une technique de suivi des noeuds avant "forward node ", et un raffinement adaptatif des maillages. Le terme de diffusion est évalué par son intégration sur un volume de contrôle. Afin de conserver l'aspect physique du problème dans la formulation tout en profitant de la flexibilité que procure les méthodes des volumes de contrôle pour le traitement de géométrie complexe, une formulation en volumes finis a aussi été utilisée pour la résolution des équations hydrodynamiques décrivant le champ d'écoulement.

Plan de la thèse

Le deuxième chapitre présente une revue bibliographique non-exhaustive du problème. Le troisième chapitre est consacré à la présentation des équations de base. Dans le quatrième chapitre nous présentons les intégrations des équations. Dans le cinquième chapitre nous présentons le schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front (EPCOF), nous évoquons ses avantages et ses inconvénients. Dans les chapitres 6, 7, 8, 9 et 10 nous présentons les résultats numériques obtenus avec le présent schéma. Les résultats sont comparés principalement à des résultats expérimentaux et numériques d'autres logiciels provenant de la littérature. Enfin, une conclusion ainsi que des suggestions pour une extension de ce travail sont données au chapitre 11.

CHAPITRE II

Étude bibliographique

2.1 Introduction

L'objectif de ce travail est la modélisation numérique des caractéristiques de transport et de dispersion d'un lixiviat comportant plusieurs composantes polluantes dans un milieu poreux saturé et non saturé. Le modèle de transport considère la convection, la dispersion, la diffusion, la dégradation et la sorption sous des conditions d'équilibre et de non-équilibre local. Le modèle tient aussi compte du contraste de masse volumique et de la viscosité

Afin de justifier le but de notre travail ainsi que la méthodologie utilisée, nous allons donner un aperçu des modèles physiques et numériques élaborés aux cours des deux dernières décennies pour étudier les mécanismes du transport de deux ou plusieurs fluides miscibles et réactifs et non réactifs dans un milieu poreux saturé et non saturé. Nous évoquerons les problèmes qui interviennent lors de l'utilisation des méthodes numériques ainsi que les techniques proposées pour y remédier, en insistant sur l'aspect numérique de la résolution.

2.2 Transport de contaminants dans un milieu poreux

La migration de polluants dans le sol et les eaux souterraines dépend des propriétés physico-chimiques du sol et des contaminants. Parmi les principales propriétés des contaminants qui jouent un rôle important dans le transport et le devenir

des contaminants dans les sols et les eaux souterraines, on retrouve, la solubilité aqueuse, la masse volumique, la viscosité, la biodégradation et la sorption.

2.2.1 Effet de la densité

Parmi les facteurs influençant la dispersion des contaminants en milieux poreux, il semble que les contrastes de masse volumique et de viscosité soient les plus importants. Plusieurs études expérimentales et numériques ont essayé de comprendre l'incidence des contrastes de la masse volumique et de la viscosité sur les caractéristiques de l'écoulement et du transport.

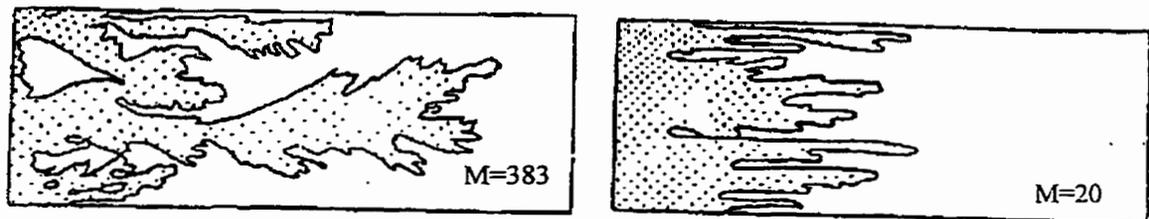


Figure 2.1 Effets d'un contraste de mobilité défavorable (Backwell et al., 1959) dans (Oltean, 1995; Aachib, 1987)

2.2.1.1 Étude Expérimentale

Le déplacement d'un polluant dépend des propriétés hydrodynamiques des fluides. La non uniformité des propriétés hydrodynamiques (masse volumique et/ou viscosité) au sein d'un fluide saturant un milieu poreux sont, en grande partie, à l'origine des instabilités qui y apparaissent. Cette non uniformité peut être due soit à un gradient de température lorsqu'il s'agit d'un seul fluide en écoulement non isotherme, soit à un gradient de concentration lorsqu'il s'agit de l'écoulement isotherme de deux

fluides miscibles de composition chimique différente. Les situations évoquées font intervenir deux mécanismes couplés (Aachib, 1987):

- ☑ Le mécanisme du type Rayleigh-Bernard relatif aux situations de convection naturelle où un fluide initialement au repos se met en mouvement sous l'action des forces de pesanteur en raison d'un gradient de masse volumique.
- ☑ Le mécanisme du type Saffman-Taylor correspondant aux phénomènes de digitation à l'origine desquels se trouve un gradient de viscosité dans un champ de vitesses non nulles; ces digitations ont toujours lieu lorsque le contraste de

mobilité M est défavorable (i.e. $M = \frac{\left(\frac{k_1}{\mu_1}\right)}{\left(\frac{k_2}{\mu_2}\right)} > 1$; dans le cas d'un écoulement

miscible, M se réduit au rapport des viscosités $\left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right)$ (figure 2.1).

D'après Couder et Rabaud (dans Dombre et Hakim, 1986), l'apparition des instabilités peut se décomposer en trois phases distinctes (figure 2.2)

Phase I- perte de stabilité de l'interface (figure 2.2a).

Phase II- développement non linéaire et interaction de perturbations de différentes longueurs d'onde (figure 2.2b)

Phase III- établissement dans un canal très long d'un doigt unique (figure 2.2c)

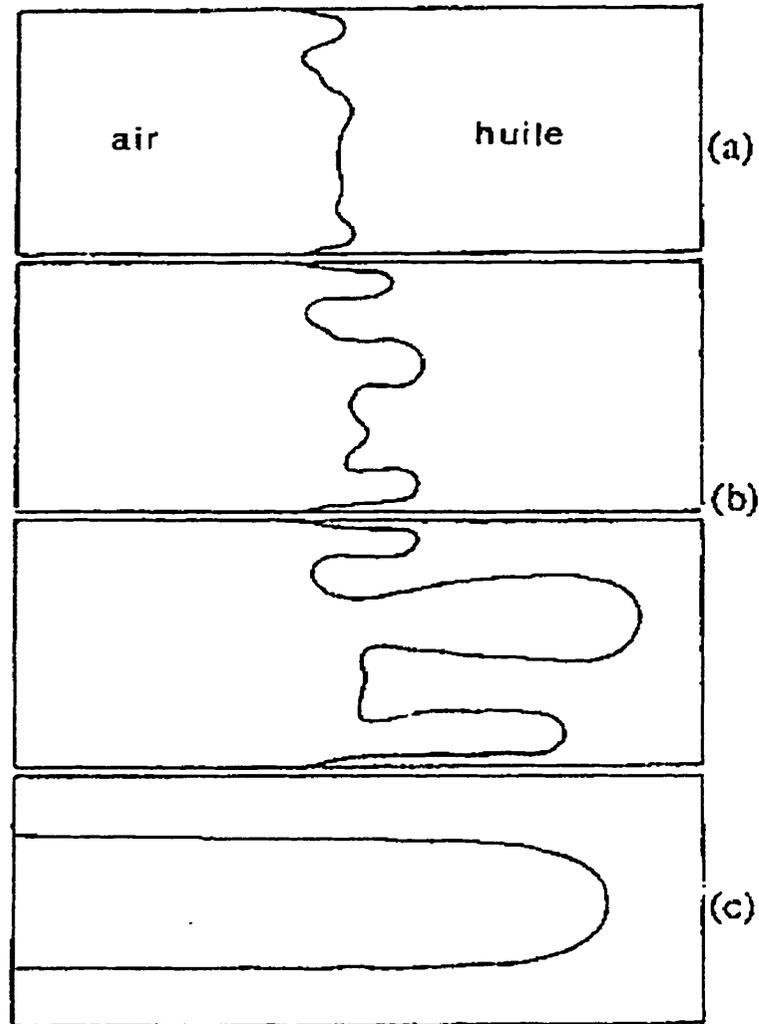


Figure 2. 2 Développement d'un doigt au cours d'un déplacement air -'huile dans
(Dombre et Hakim, 1986)

Wooding (1959), a développé le nombre de Rayleigh pour décrire la stabilité de deux fluides de densité et/ou de viscosité différentes dans un massif poreux homogène cylindrique, d'axe vertical. Le nombre de Rayleigh est défini par

$$\lambda = \frac{d\rho}{dz} \frac{gkb^2}{\mu D^*}$$

où $\frac{d\rho}{dz}$ est le gradient de la densité, g est la constante gravitationnelle, μ est le coefficient de la viscosité moyenne, b est la dimension caractéristique du tube occupé par le milieu poreux et D^* est le coefficient de diffusion. (Backmat et Elrick, 1970; Schincariol, 1993). Le nombre de Rayleigh est proportionnel à la perméabilité, au gradient de la densité et inversement proportionnel à la diffusion. La stabilité d'un système peut être définie en comparant le nombre de Rayleigh calculé et critique. Le nombre de Rayleigh développé par Wooding, (1959), est similaire à celui développé par Rayleigh, (1916); Horton and Roger, (1945) et Lapwood, (1948) pour étudier la convection de chaleur.

List (1965) a effectué une série d'expériences sur un modèle de laboratoire (250cm x 35cm x 15cm) rempli d'un milieu poreux homogène de perméabilité ($K_{sat}=85\text{m/d}$). Une solution saline de concentration égale à 14g/l (soit une différence de densité de 1%) a été injectée verticalement en haut du réservoir. La vitesse horizontale de Darcy dans ces expériences varie de 15 à 36 m/jour. List a remarqué que tous les écoulements étaient stables. Il a conclu que la stabilité de l'écoulement est le résultat du faible contraste de densité et de la valeur de vitesse qui est relativement élevée. Donc, il a effectué d'autres expériences avec une solution plus dense soit 30g/l (une contraste de densité de 2,1%) et une vitesse de Darcy plus faible soit 1,2 m/jour. Sous ces nouvelles conditions, l'écoulement a perdu son caractère stable. Les instabilités se manifestent par la formation de lobes à la limite inférieure de la zone du mélange.

List (1965) a aussi effectué une analyse théorique de stabilité d'un écoulement à densité variable à 2D. Dans cette étude, il a généré une perturbation sinusoïdale au vecteur vitesse et au profil vertical de la densité. Les résultats de cette analyse montrent qu'un panache dense est, en fait, instable, le paramètre gouvernant la stabilité étant le

nombre de Rayleigh. Il a calculé les courbes critiques de stabilité basées sur le nombre de Rayleigh défini par

$$\lambda_r = \frac{lg K \Delta \rho}{\varepsilon D_T \mu} \quad 2.2$$

où l est la zone du mélange entre deux fluides, K est la perméabilité intrinsèque, ε est la porosité, g est la constante gravitationnelle, μ est la viscosité et D_T est la diffusion latérale. L'auteur a remarqué que l'écoulement est toujours instable quand le nombre de Rayleigh est positif, c. à. d. $\Delta\rho > 0$.

Aachib (1987), a étudié l'influence des contrastes de masse volumique et de viscosité sur le déplacement de deux fluides miscibles (CaCl_2 et l'eau) dans une colonne verticale. Deux diamètres de colonne ont été utilisés, 9 et 5 cm, pour des longueurs respectives de 0.505 et 2 m. La colonne était remplie d'un sable de quartz en prenant toutes les précautions pour assurer l'homogénéité de ce dernier. Trois granulométries différentes (0.26, 0.3575 et 1.425 mm) ont été utilisées. L'auteur a montré les paramètres hydrodynamiques et physiques (contraste de la viscosité et de la densité, vitesse de l'écoulement et texture du milieu poreux) qui peuvent influencer la stabilité de l'écoulement. Il a mis en évidence un critère de stabilité critique, en fonction des paramètres hydrodynamiques. Ces critères sont exprimés par des nombres adimensionnels G_{cr}^* et R_{cr}^* .

À partir des expériences, Buès et Aachib, 1991, proposent un critère de stabilité en fonction des paramètres hydrodynamiques décrits par des nombres adimensionnels (G^* , R^*). Le paramètre G^* est défini par

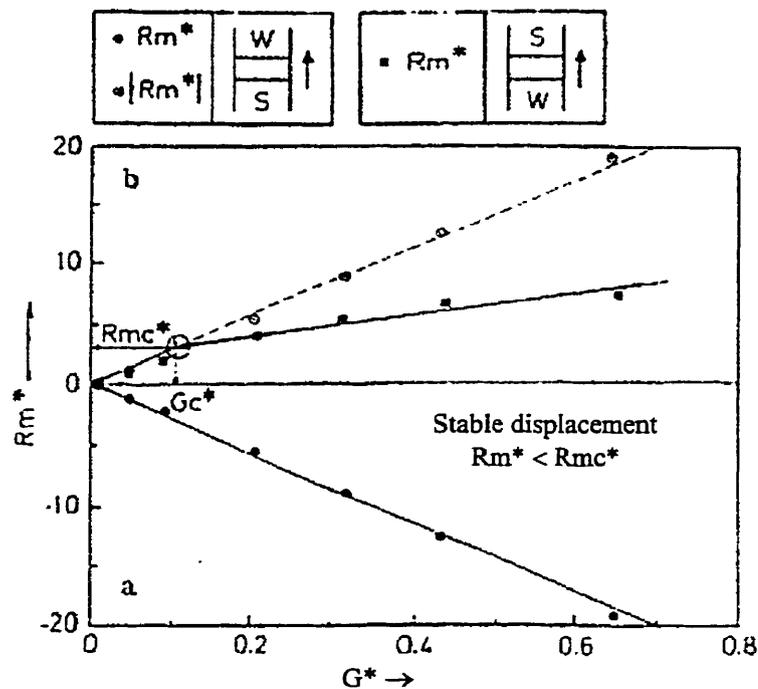


Figure 2. 3 Influence du paramètre hydrodynamique G^* sur Rm^* (Buès et Aachib, 1991)

$$G^* = \frac{kg\Delta\rho}{n\mu_m U} \quad 2.3$$

où n est la porosité, U est la vitesse de l'écoulement dans les pores, μ_m est la viscosité moyenne.

Le paramètre sans dimension Rm^* est défini comme le nombre de Rayleigh modifié, défini par:

$$Rm^* = \frac{(\rho_1 - \rho_2)gkh}{\mu_m D_L} + \frac{P_e^*(\mu_1 - \mu_2)}{\mu_m} \quad 2.4$$

où l'indice 1 réfère au fluide au dessus de la zone de mélange et l'indice 2 réfère au fluide au dessous, h est la largeur de la zone de mélange, D_L est le coefficient de

dispersivité longitudinale, P_e^* est le nombre de Peclet modifié $P_e^* = \frac{nUh}{D_L}$. Un critère de stabilité critique correspond à l'apparition des digitations, défini par le couple (G_c^*, Rm_c^*) .

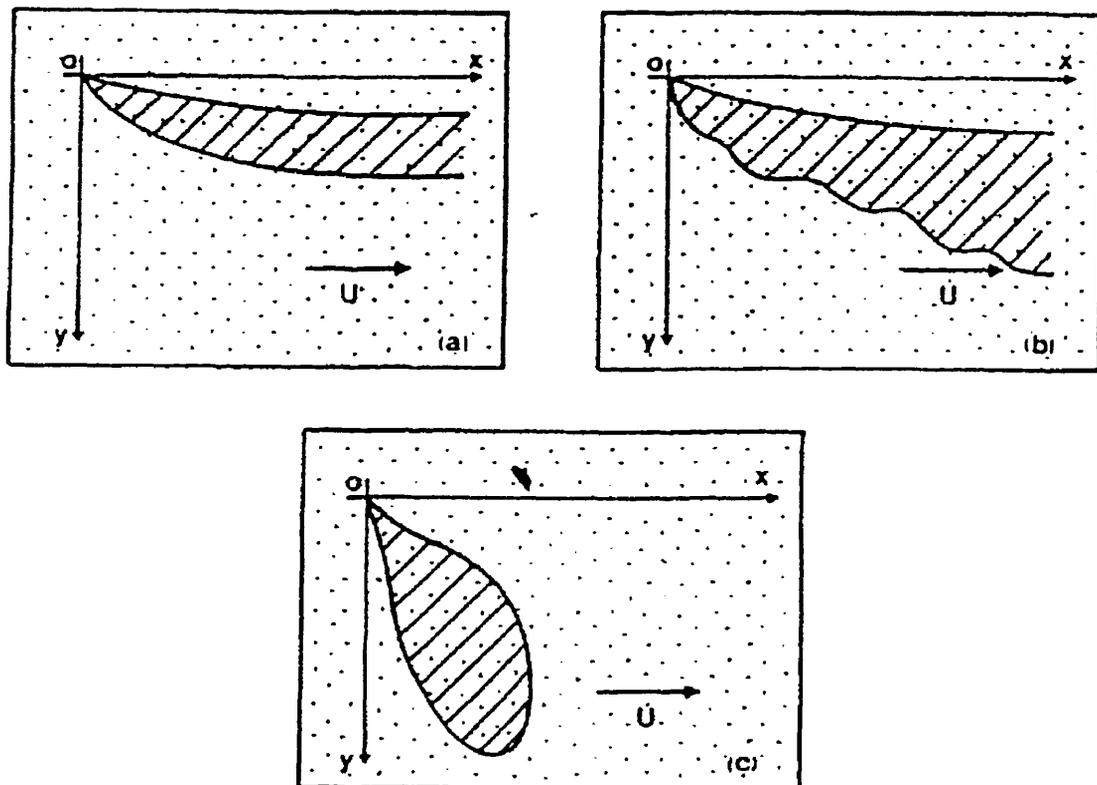


Figure 2. 4 Modes de développement de la zone de mélange (Zilliox et Muntzer., 1975)

Zilliox et Muntzer, (1975), ont étudié le cas d'une source ponctuelle d'eau saumâtre dans un écoulement uniforme. Les auteurs ont distingué trois modes de développement de la zone de mélange:

- ◆ l'entraînement stable avec prédominance du courant primaire d'eau et formation d'une zone de mélange dans le sens de l'écoulement principal horizontal (figure 2.4a);

- ◆ le régime des instabilités, caractérisé par la formation de poches à la limite inférieure de la zone de mélange et l'abaissement progressif de sa limite supérieure (figure 2.4b);
- ◆ l'enfouissement, avec prépondérance de l'infiltration verticale (figure 2.4c).

Schincariol et al., (1990), ont effectué des travaux sur un modèle de laboratoire (116.8 x 71 x 5 cm) concernant le comportement d'une solution saline dense injectée horizontalement au milieu d'un écoulement souterrain saturé. Cette expérience concernait un milieu poreux homogène, un milieu stratifié et un milieu contenant des lentilles de perméabilités différentes. Leur appareil consistait en un réservoir étroit par rapport à sa hauteur et sa longueur. Le réservoir était rempli avec des billes de verre de diamètres variés. Des réservoirs à niveaux constants étaient installés à l'entrée et à la sortie du réservoir pour permettre ainsi un bon réglage du débit. La solution dense de chlorure de sodium pouvait être introduite par une fente située au milieu du réservoir. Les résultats ont révélé que, dans un milieu homogène, l'écoulement perd son caractère stable à partir d'une certaine concentration. Les instabilités qui apparaissent se manifestent par la formation d'amplitudes significatives le long de la limite inférieure de mélange. Dans un milieu stratifié, les résultats révèlent qu'une faible variation de conductivité hydraulique peut engendrer une accumulation de la concentration entre les couches. Cette accumulation a pour effet d'augmenter la vitesse du déplacement du contaminant. Dans un milieu lenticulaire, le déplacement du polluant est plus complexe que dans le deux autres cas. La présence des zones de perméabilités différentes est le facteur prédominant qui régit la dispersion du polluant.

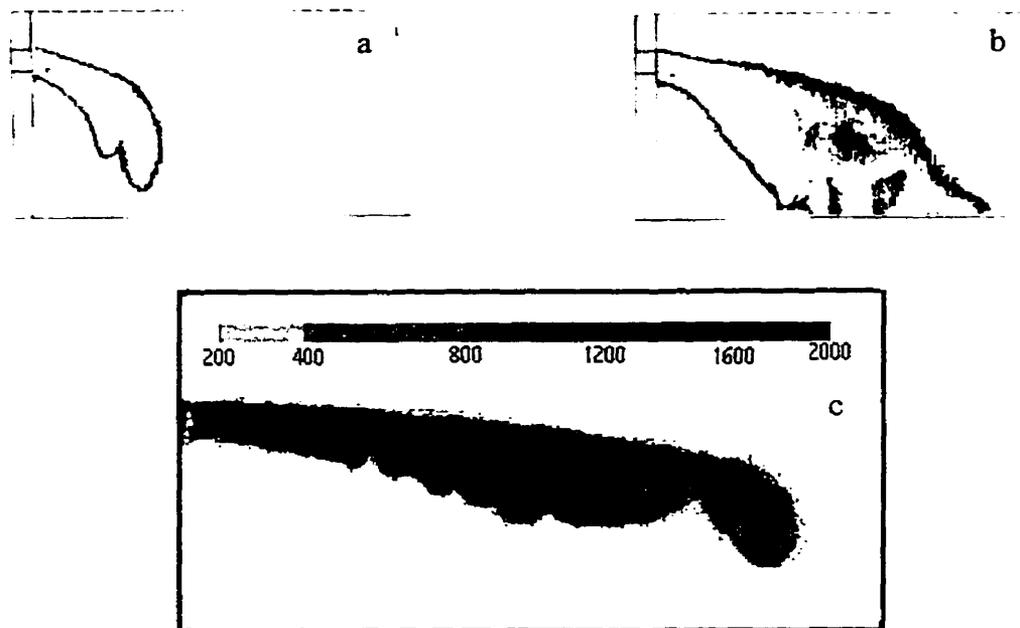


Figure 2. 5 Résultats obtenus en milieu homogène, (a) $C=5000\text{mg/l}$, $t=36\text{h}$; (b) $C=5000\text{mg/l}$, $t=54\text{h}$; (c) $C=2000\text{mg/l}$, $t=72\text{h}$; (Schincariol et al., 1990)

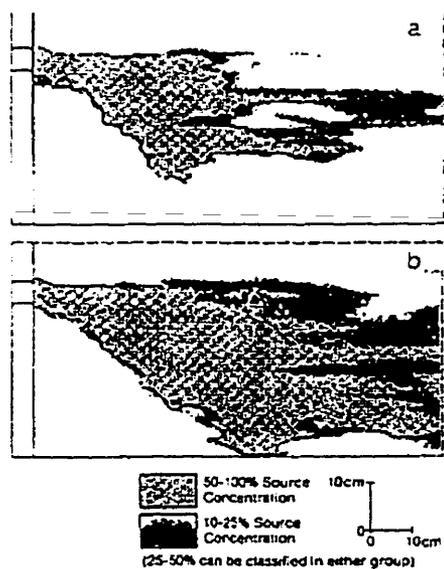


Figure 2. 6 Résultats obtenus en milieu lenticulaire (Schincariol et al., 1990)

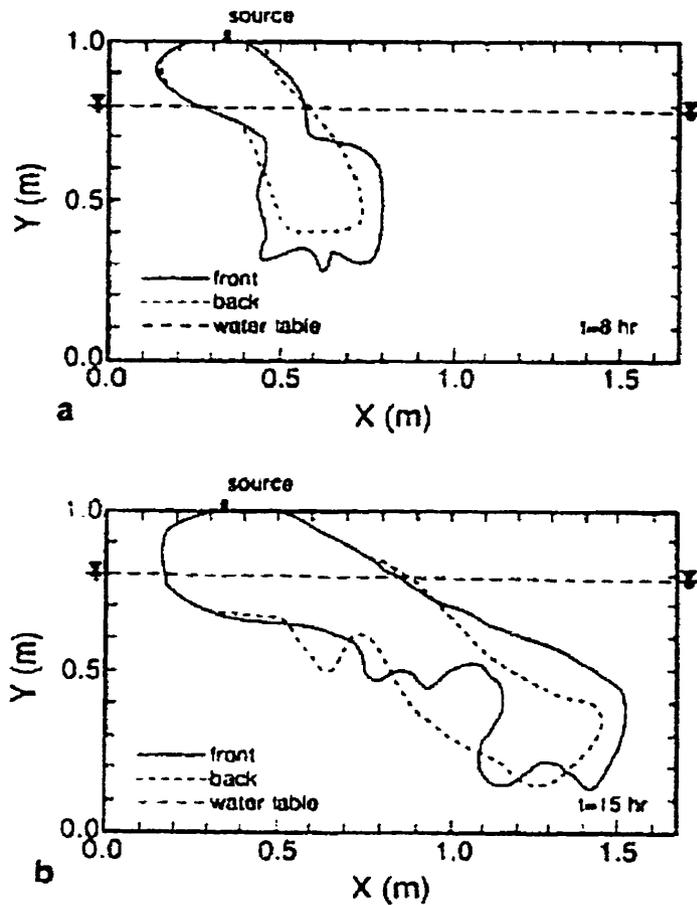


Figure 2. 7 Résultats obtenus par (Oostrom et al., 1992)

Oostrom et al., (1992), ont effectuée des travaux en laboratoire concernant le comportement d'une solution dense injecté verticalement dans un écoulement souterrain non saturé. Les auteurs ont utilisé trois domaines ou réservoirs (A, B, et C) différents. Les dimensions du réservoir A sont 80cm x 40cm x 5cm, celles du réservoir B sont 205cm x 100cm x 7.8cm et celles du réservoir C sont 167cm x 100cm x 51 cm. Les conductivités des milieux saturés sont 0.9236 cm/s, 0.0718 cm/s et 0.0417 cm/s respectivement. Les extrémités de chaque réservoir sont reliées à des réservoirs permettant d'imposer le niveau d'une nappe à surface libre du massif poreux et de faire varier ce niveau pour simuler des essais de déplacement de polluant à densité variable

dans un milieu non- saturé et saturé. Les résultats ont montré que, pour certains milieux poreux, l'écoulement à densité variable est stable, alors que pour d'autres milieux, il est instable. La formation des instabilités se manifeste par la formation des poches à la limite inférieure de la zone du mélange.

2.2.1.3 Étude sur le terrain

Freeze et Cherry, (1979), ont montré que le comportement du panache pouvait être fortement affecté lorsque la différence de densité entre le fluide et l'eau était supérieure à 0.2%. Il faut donc tenir compte de cette différence, surtout lorsqu'il existe plusieurs sources à la surface dont la différence de densité est comprise entre 0.5% et 4%.

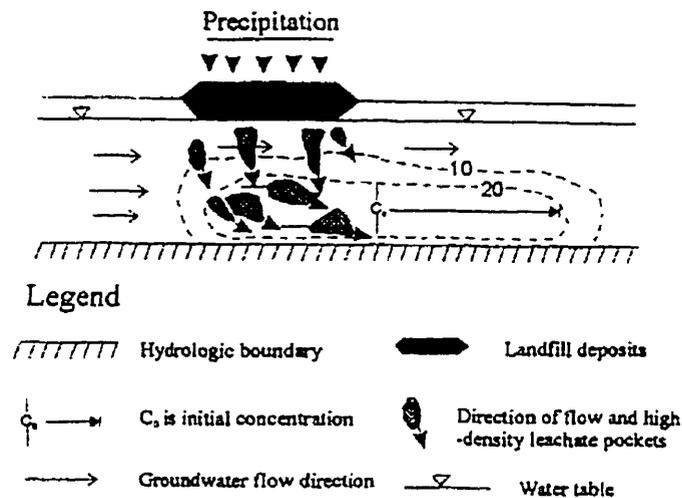


Figure 2. 8 Modèle conceptuel de déploiement d'un panache au site d'enfouissement sanitaire de Babylone à New York (Kimmel et Braids, 1980)

Kimmel et Braids ., (1980), ont étudié la migration des contaminants dans la nappe souterraine du site d'enfouissement Babylon à long Island à New York. Ce site d'enfouissement sanitaire est situé au-dessus du niveau de la nappe phréatique, il est utilisé pour l'entreposage des déchets domestiques et industriels depuis 1947. Les auteurs ont noté que le fond de la nappe phréatique (d'une épaisseur de 28 m) est

contaminé malgré que la direction de l'écoulement soit horizontale. Les auteurs attribuent l'enfouissement vertical du panache à l'infiltration importante des flux durant l'hiver et, aussi, à la différence de densité de l'eau contaminée.

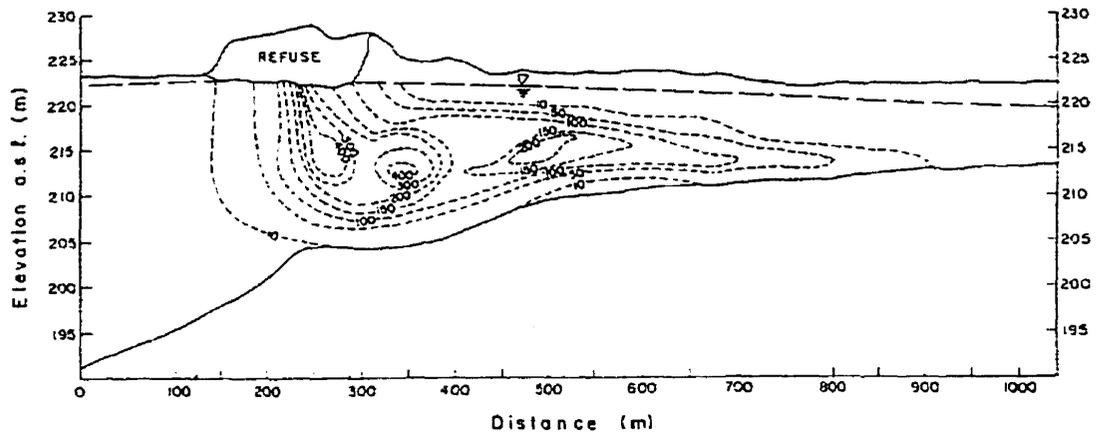


Figure 2. 9 Déploiement d'un panache au site d'enfouissement sanitaire de Borden en Ontario (Frind et al., 1985)

MacFarlane et al., (1983), ont étudié la migration des contaminants dans la nappe souterraine du site d'enfouissement Borden en l'Ontario. Ce site d'enfouissement sanitaire est situé à environ 80km de Toronto. Il est, dans sa majeure partie, situé au-dessus du niveau de la nappe phréatique. Utilisé pour l'entreposage des déchets de 1942 à 1973, on n'y pratiqua l'enfouissement sanitaire qu'à partir de 1973. Il a été finalement fermé en 1976. Pendant ces 34 ans, il a été estimé que 80% des déchets consistaient en des cendre, du bois et autres débris de construction. Le reste des dépôts était composé de déchets domestiques et industriels. La composition du sol et sa conductivité sont apparemment très variables, contenant du sable et de l'argile. Les auteurs ont noté que la direction de l'écoulement de la nappe est normalement horizontal du sud vers le nord, mais la zone contaminée s'étend au fond du l'aquifère (20m au dessous de la surface libre). L'enfouissement avec prépondérance de contaminant peut être expliqué par l'infiltration verticale d'un débit d'eau important au printemps et à l'été, après la fonte

de la neige et, aussi, par la différence de densité entre l'eau et le contaminant ($\Delta\rho=0.0012$)

2.2.1.4 Étude numérique

La modélisation numérique est devenue un important outil d'étude de physique de sol, particulièrement pour prédire le mouvement des pesticides, nitrates, métaux lourds et autres solutions à travers le sol.

Le transport de contaminants est modélisé par une équation de convection-diffusion

$$\begin{array}{ccc} \text{terme instationnaire} & \text{terme convectif} & \text{terme dispersif} \\ \frac{\partial C}{\partial t} & + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} & = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i \partial x_i} \end{array} \quad 2.5$$

où C représente la concentration, u_i la vitesse moyenne réelle de l'eau dans les pores et D le coefficient de dispersion.

2.2.1.4.1 Un seul contaminant

L'équation (2.5) considère que la densité du fluide contenu dans le panache est égale à celle du milieu ambiant. En fait, des études ont montré qu'une densité de 0.2% plus haute que celle de l'eau peut modifier considérablement le comportement du panache. Il faut donc en tenir compte car il existe, à la surface du sol, plusieurs sources qui ont une différence de densité qui varie entre 0.5% et 4%. Ces différences peuvent faire évoluer l'écoulement vers un régime instable qui se traduit par l'apparition des

instabilités (digitations) au niveau de la zone de mélange, ce qui peut rendre difficile la localisation de la zone contaminée. Une revue de littérature montre plusieurs études touchant la modélisation des écoulements à densité variable dans le milieu poreux. Cependant, la plupart de ces études sont consacrées au traitement du problème des intrusions salines près des aquifères littorales (Voss, 1984; Anderson et al., 1986; Hebert et al., 1988; Oldenburg et Pruess, 1995). Peu de travaux ont abordé la compréhension des migrations de lixiviat à partir des dépotoirs de surface (Fan, 1995; Oltean, 1995; Zhang et Schwartz, 1995; Frind et al., 1985).

La majorité des modèles de transport et des logiciels de traitements des écoulements souterrains utilisent les techniques des différences finies et des éléments finis.

Voss (1984), a développé le modèle SUTRA (Saturated- Unsaturated Transport). Le modèle a été utilisé par Souza et Voss (1987), pour la simulation des problèmes des intrusions salines.

Sanford et Konikow (1985), ont développé le modèle MOC DENSE qui est une extension du modèle MOC (Konikow et Bredehoeft, 1977). Dans ce modèle, l'équation de l'écoulement est résolue avec une méthode de différences finies implicites. L'équation de transport est résolue en deux étapes. Le terme convectif est résolu par la méthode des caractéristiques, le terme dispersif est résolu par une méthode de différences finies explicites. Le modèle a été utilisé par Koch et Zhang (1992), pour simuler la migration d'un panache dense.

Mondoza et Frind (1990a), ont développé le modèle VaporT pour la simulation du transport de vapeur dense dans un milieu non saturé. Le code de calcul a été utilisé par Zhang et Schwartz, (1995) pour la simulation de la contamination du site

d'enfouissement de déchets de Babylon, New York. Le code a été aussi utilisé par Schincariol et al., (1995) pour simuler ses expériences en laboratoire.

Fan (1995), a développé un modèle numérique pour résoudre les écoulements à densité variable ainsi que le transport de contaminants dans les milieux poreux saturés et non-saturés. Les techniques des différences finies et des volumes finis ont été utilisées. Dans cette dernière, les équations de base sont intégrées sur des volumes de géométrie arbitraire, ce qui a pour principal avantage de la rendre applicable au traitement des domaines irréguliers. Dans cette étude, la formulation en volumes finis a été implantée sur un maillage triangulaire. Dans cette formulation, le traitement numérique de l'équation de transport a été réalisé en utilisant un schéma basé sur la méthode des caractéristiques pour le transport convectif, tandis que le terme de diffusion a été évalué sur un maillage triangulaire en utilisant les volumes finis avec interpolation linéaire pour la concentration. Fan a validé son modèle avec trois études différentes. Deux de ces études sont les recherches expérimentales de Schincariol et al, (1990) et de Oostrom et al, (1992), tandis que la troisième est constituée de mesures prises autour d'un site d'enfouissement de déchets à Borden, Ontario. Afin d'obtenir une connaissance plus approfondie du mécanisme d'instabilité, une analyse linéaire de stabilité a été effectuée. Dans cette technique, une perturbation tridimensionnelle dans l'espace avec une amplification exponentielle dans le temps est superposée aux équations gouvernantes. Les résultats de cette analyse confirment qu'un panache dense est en fait instable, les deux paramètres gouvernant la stabilité étant un nombre de Rayleigh basé sur la concentration et une longueur caractéristique, cette dernière dépendant de la dispersivité transversale. Les courbes de stabilité critique ont été calculées et présentées. D'après l'auteur, le modèle reproduit fidèlement les résultats expérimentaux de Schincariol et al, (1990) et Oostrom et al., (1992).

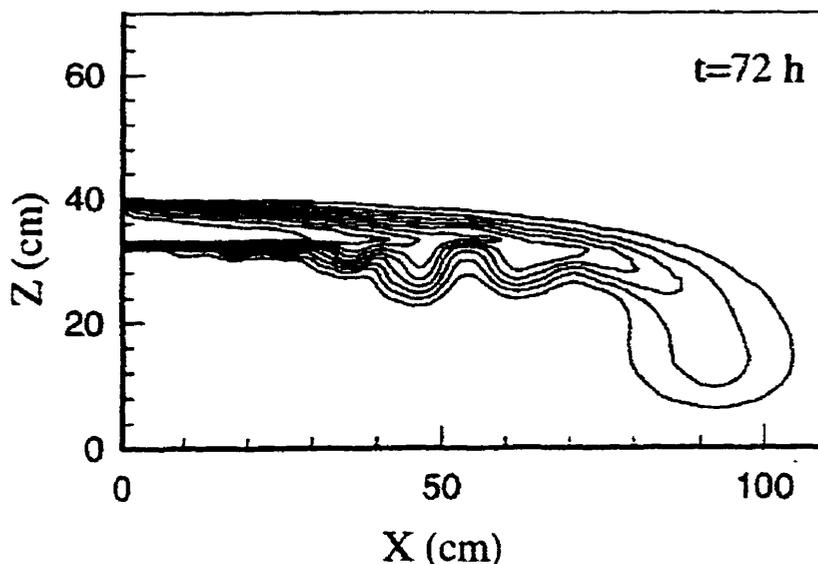


Figure 2. 10 Résultat obtenu ($C=2000\text{mg/l}$, $t=72\text{h}$) (Fan, 1995)

Oltean (1995) a étudié les mécanismes élémentaires du transport de deux fluides miscibles et non- réactifs dans un milieu poreux et saturé. Il a obtenu des observations à partir d'un programme expérimental. Un modèle physique 3D (1,63 x 0,67 x 0,40 m) a permis d'analyser et d'observer le comportement d'un polluant qui transite à travers le milieu poreux, en prenant en compte le contraste de masse volumique et de viscosité. L'analyse a porté sur l'identification des paramètres de transport, i. e. : la viscosité longitudinale apparente et le coefficient de dispersion longitudinal apparent lorsqu'il s'agit des expériences de type "déplacement", en utilisant différentes méthodes de traitement monodimensionnel.

Un modèle de simulation 3D en éléments finis a été développé et validé à l'aide du programme expérimental. Le modèle mathématique réalise le couplage entre un module hydrodynamique et un module de transport du soluté, en prenant en compte un contraste de la masse volumique et de la viscosité. Dans la zone de mélange la masse volumique et la viscosité dynamique varient linéairement en fonction de la concentration. Le module hydrodynamique a été conçu en utilisant la méthode des éléments finis mixtes hybrides, permettant de calculer simultanément le champ des

potentiels et des vitesses en régime permanent ou transitoire. La méthode des éléments finis discontinus d'ordre deux a été utilisée pour simuler l'équation du transport. Selon les auteurs, les résultats obtenus par le modèle sont bons. Pour la configuration 2D, les courbes calculées se superposent aux courbes issues du dépouillement des essais. Pour la configuration 3D, ils ont constaté, dans les sections proches du bac aval des différences d'environ 20% entre les courbes calculées et celles enregistrées. Il ont attribué ces différences aux conditions aux limites du modèle.

En se basant sur ses recherches en laboratoire et en utilisant un modèle numérique de calcul de transport en milieu à densité variable (VaporT), Schincariol et al., (1995) ont essayé de comprendre le mécanisme de développement et l'amplification des instabilités. Le code de calcul VaporT a été développé par Mendoza et Frind (1990) pour simuler le transport de vapeur à densité variable dans les milieux poreux. Il a suffi d'une légère modification pour que ce dernier soit capable de résoudre le problème des écoulements à densité variable. Le modèle utilise la méthode des éléments finis sur des maillages triangulaires. Tous les calculs ont été effectués sur un CRAY Y-MP8/864, un HP 9000/750 et un DEC 5400.

Les auteurs ont démontré que les instabilités observées au laboratoire ne peuvent être reproduites fidèlement par un modèle numérique. Les instabilités produites par le modèle numérique sont générées par des erreurs numériques dues aux dispersions artificielles ou aux oscillations numériques du modèle. Leurs résultats (figures 2.11) montrent que la formation des instabilités est directement liée aux erreurs numériques qui sont contrôlées par le nombre de Peclet. Quand le nombre de Peclet est égal à 14 et 9 (figure 2.11a), des instabilités se forment à la limite inférieure de la zone du mélange et ces instabilités sont différentes de celles observées au laboratoire. Plus la valeur du nombre de Peclet diminue plus l'erreur diminue pour disparaître quand le nombre de Peclet devient inférieur à 5 (figure 2.11b).

Afin d'obtenir une connaissance plus approfondie du mécanisme d'instabilité, une analyse de stabilité a été effectuée. Dans cette technique, une perturbation sinusoïdale avec une amplification de 2.5 mm, soit 5% de la largeur de la source est superposée aux équations. L'analyse des résultats confirme qu'un panache dense est en fait instable, le paramètre gouvernant la stabilité étant la longueur d'onde de la perturbation. Les courbes de stabilité critique ont été calculées et présentées. Les auteurs ont conclu que, parmi les facteurs influençant la formation des instabilités, on retrouve: la dispersivité, la vitesse et la perméabilité. Ils ont aussi conclu que le critère de stabilité critique basé sur le nombre de Rayleigh n'est pas approprié pour évaluer le problème du transport d'un panache dense.

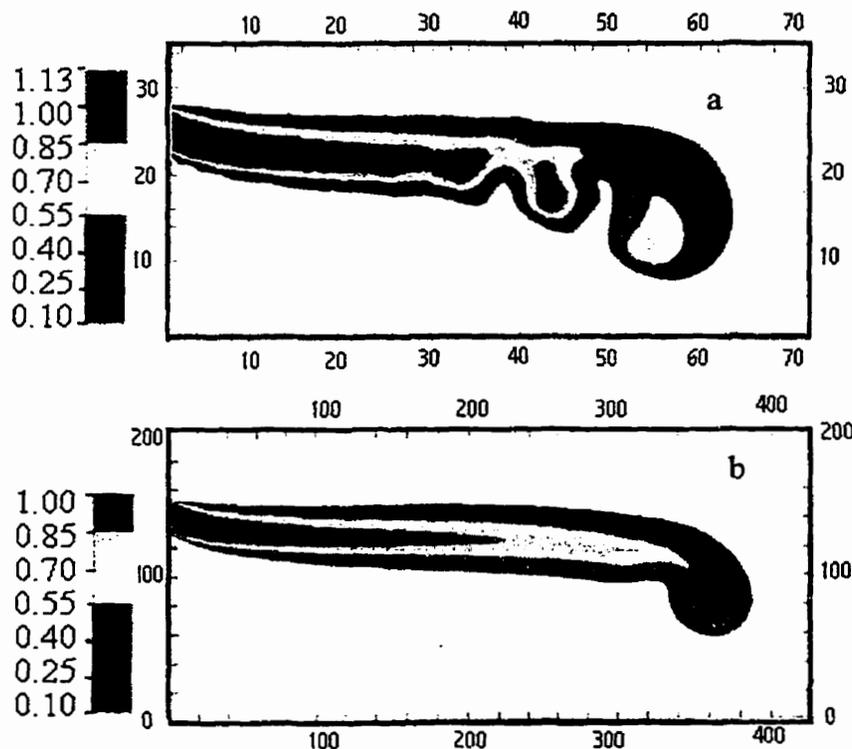


Figure 2. 11 Résultats numériques $C=2000\text{mg/l}$ (a): $\Delta x=15\text{mm}$, $\Delta y=15\text{mm}$, $P_e=14$, $C_r(x)=1$, $C_r(z)=0.5$; (b): $\Delta x=2.5\text{mm}$, $\Delta y=2.5\text{mm}$, $P_e=2.4$, $C_r(x)=1.1$, $C_r(z)=0.5$

Ces résultats contredisent tous les résultats des recherches précédentes (Fan, 1995; Oltean, 1995) qui affirment que les schémas numériques sont capables de reproduire les observations expérimentales (digitation à la limite inférieure de la zone de mélange et les résultats de recherches qui se basent sur le nombre de Rayleigh pour décrire le phénomène des instabilités dans le transport d'un panache dense (Fan, 1995; Schincariol et al., 1990; Oostrom et al., 1992)

2.2.1.4.2 Plusieurs contaminants

La plupart des études touchant les écoulements à densité variable dans le milieu poreux sont consacrées à l'étude du transport d'un seul élément polluant. Ceci ne reflète pas la réalité sur le terrain. En effet, un panache est composé de plusieurs éléments contaminants (NH_3 , NaCl, etc.)

Zhang et Schwartz. (1995) ont développé un modèle numérique pour étudier le transport de deux contaminants dans un écoulement à densité variable "*Multispecies contaminant plumes in variable density flow systems*". Les deux composantes sont le NaCl et le NH_3 . Dans le cas du transport de deux ou plusieurs polluants, la variation de la masse volumique et de la viscosité du mélange est difficile à calculer car il n'existe pas d'équation exacte. Les auteurs ont supposé que la variation de la densité du mélange ρ_m dilué est linéaire en fonction de la concentration de l'ensemble des polluants:

$$\rho_m = \rho_0 + \sum_{k=1}^n a_k C_k \quad 2.6$$

où C_k est la concentration du contaminant k, a_k est le paramètre qui décrit la dépendance de la densité à la concentration de polluant. Le paramètre a_k peut être

déterminé à partir des données expérimentales. En assumant que $a_k = (\rho_k^{ref} - \rho_0) / C_k^{ref}$, l'équation (2.6) s'écrit:

$$\rho_m = \rho_0 \left(1 - \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \right) + \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \rho_k^{ref} \quad 2.7$$

où C_k^{ref} est la concentration de référence du polluant k dont la densité est connue.

La concentration C_k^{ref} est généralement supérieure à la concentration maximale C_k pour assurer que le premier terme de l'équation (2.7) soit positif.

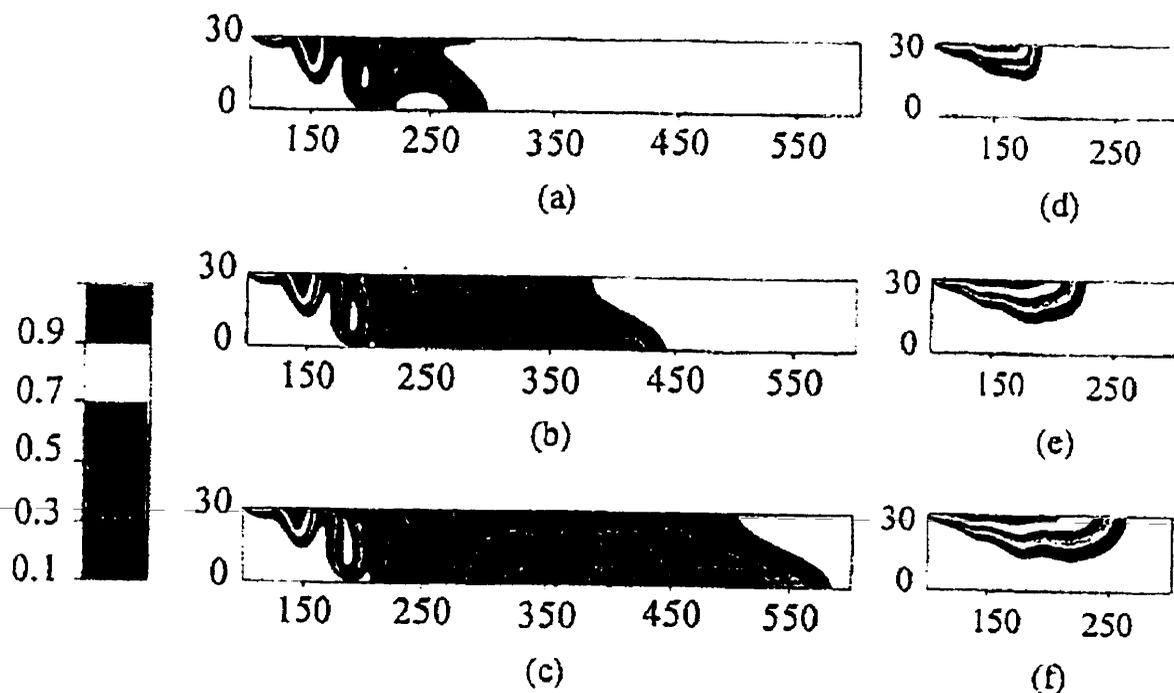


Figure 2. 12 Résultats obtenus par (Zhang et Schwartz. 1995), (a): $C_1=5000\text{mg/l}$ (NaCl), $t=420$ jours; (b) $C_1=5000\text{mg/l}$ (NaCl), $t=780$ jours; (c) $C_1=5000\text{mg/l}$ (NaCl), $t=1140$ jours; (d) $C_2=100\text{mg/l}$ (NH3), $t=420$ jours; (e) $C_2=100\text{mg/l}$ (NH3), $t=780$ jours; (f) $C_2=100\text{mg/l}$ (NH3), $t=1140$ jours

Le modèle de calcul utilise la méthode des différences finies et la résolution est obtenue sur une machine CRAY Y- MP. Pour valider leur modèle, les auteurs ont étudié la propagation de deux panaches (NaCl et NH₃) au site d'enfouissement de déchets à Babylon, New York. D'après les auteurs, le modèle reproduit fidèlement les résultats observés sur le site. Les simulations numériques ont toutefois révélé la présence d'instabilités gravitationnelles qui se forment le long de la limite inférieure du panache, avec des amplitudes verticales importantes.

2.2.2 Phénomène de sorption

Un des plus importants processus influençant la propagation d'un contaminant dans un milieu poreux est l'immobilisation par adsorption (sorption en surface des particules de sol) et absorption (sorption à l'intérieur des particules de sol) des contaminants aux sols. Plusieurs des processus majeurs de l'adsorption surviennent à la surface des argiles minérales et des matériaux humiques possédant une grande surface spécifique. La nature et l'ampleur de l'adsorption des composés organiques par les argiles et les sols dépendent largement du pH du milieu et du type de groupes fonctionnels de la surface adsorbante.

Si on considère le phénomène de sorption, un terme additionnel doit être ajouté à l'équation (2.2), ce terme représente l'interaction entre le contaminant et le milieu poreux. Si la concentration sorbée est noté par la lettre S (mg/g sol), l'équation générale de transport s'écrit:

$$\frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad 2.8$$

où ρ_b est la densité du milieu poreux "Bulk density" (g/cm³).

La solution de l'équation (2.8) peut être obtenue en spécifiant le taux d'adsorption $\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)$.

La sorption est souvent décrite par l'isotherme de Freundlich qui suppose que l'équilibre de sorption est atteint entre la concentration adsorbé et la concentration de la solution

$$S = K_d C^N \quad 2.9$$

où C est la concentration (mg/mL), S est la concentration sorbé (mg/g), K_d et N sont les constantes de Freundlich qui représentent le degré d'adsorption d'un composé par un matériau donné. Plus la valeur de K_d est élevée, plus le composé aura tendance à être adsorbé. La substitution de l'équation (2.9) dans l'équation (2.8) montre que le processus de sorption peut être présenté comme étant un facteur de retardement.

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla C) - \nabla(uC) \quad 2.10$$

où

$$R = 1 + \frac{\rho_b K_d N C^{N-1}}{\theta} \quad 2.11$$

où ρ_s est la densité des particules du sol, et R est le facteur de retard. En absence de sorption ($K_d=0$), le coefficient de retard R est égal à 1. Dans le cas contraire, la valeur de R est supérieure à 1. Ce facteur a pour effet de ralentir la migration de polluant.

$$R = \frac{\text{Vitesse moyenne de l'eau}}{\text{Vitesse moyenne de polluant}} = \frac{u_x}{u_R} \geq 1 \quad 2.12$$

Dans la plupart des modèles, la sorption de polluants est simulée par des isothermes et, notamment, l'isotherme linéaire qui suppose que l'équilibre de sorption "*local equilibrium assumption*" (LEA) est atteint instantanément immédiatement après la réception du contaminant dans un sol. Malheureusement, cette approche très simplifiée des échanges solide-liquide n'est pas adéquate pour plusieurs cas réels. Pour plusieurs substances hydrophobes organiques, l'adsorption et la desorption prennent des mois pour atteindre l'équilibre de sorption (Karickhoff et Morris, 1985; Witkowski et al., 1988; Coates and Elzerman, 1986; Wu et Gschwend, 1986). Young et Ball, (1994), ont trouvé que la sorption de trichloroethylene et tetrachlorobenzene 1, 2, 4 et 5 prend des années pour atteindre l'équilibre.

Plusieurs études ont utilisés l'approche cinétique "kinetic approach" pour d'écrire le non équilibre de sorption. Cette approche assume que le taux d'adsorption est lent par rapport au mouvement des contaminants à travers le sol. Le modèle cinétique utilise la relation suivante:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \alpha(KC - S) \quad 2.13$$

Dans le cas de non-équilibre de sorption, le taux de masse échangée pour atteindre l'équilibre influencera la propagation de la concentration dans l'espace et dans le temps, ce qui peut générer un profil de concentration non symétrique comme le prédit l'équation (2.9). Plusieurs études expérimentales ont montré que la distribution de la concentration est pratiquement non symétrique (Aylmor and Karim, 1970; Kay and Elrick; 1967; Green et al., 1972; Giddings, 1963). Certains auteurs comme Giddings, (1963); Van Genuchten and Wierenga, (1976); Gambolati et al., (1994) , ont utilisé le mot "*Tailing*" pour décrire ce phénomène de non symétrie du profil de concentration. Le phénomène de "*Tailing*" a été observé à travers plusieurs conditions expérimentales (Van Genuchten and Wierenga, 1976):

1. **Milieu non-saturé** - Nielsen et Biggar, (1961) ont noté la présence d'un "tailing" important quand on réduit la teneur en eau sous la même vitesse d'écoulement. Ils expliquent ceci par l'augmentation de la quantité d'eau immobile dans les pores. Cette eau est identifiée comme eau stagnante, morte ou immobile (Turner, 1958; Coats et Smith, 1964; Deans, 1963). La diminution de la teneur en eau a pour effet d'augmenter la quantité d'air dans les macropores, ce qui se traduit par une augmentation des pores morts "dead end pores".
2. **Milieu poreux avec agrégats** - est composé des pores conducteurs rapides et lents. Les agrégats ont plusieurs micropores dans lesquels le déplacement dépend uniquement de la diffusion puisque la convection, dans ces petits pores, est négligeable.
3. **Vitesse de l'eau dans les pores**- Plusieurs études expérimentales Biggar et Nielsen, (1962); Villermaux et Van Swaay, (1969), Skopp et Warrick, (1974) ont montré que le "Tailing" devient plus prononcé quand la vitesse dans les pores diminue

Il est clair que la solution de l'équation (2.9) ne donne pas toujours une description exacte du phénomène physique qui se développe dans un milieu poreux. Quelques travaux ont abordé la compréhension de la non uniformité de la distribution de polluant "Tailing" dans un milieu poreux avec agrégats et dans un milieu non saturé. (Deans, 1963; Gottschlich, 1963; Coats et Smith, 1964; Van Genuchten, 1976) ont utilisé le modèle de porosité double "dual porosity model" qui consiste à diviser la phase fluide en deux régions, une région mobile et une région immobile. Le transport de la solution dans la région mobile se fait par advection et par diffusion et uniquement par diffusion dans la région immobile. Le modèle utilise les équations suivantes:

$$\theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \theta_m D \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial z^2} - v_m \theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial z} \quad 2.14$$

$$\theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \alpha (\mathcal{C}_m - \mathcal{C}_{im}) \quad 2.15$$

où θ_m et θ_{im} sont les teneurs en eau dans la région mobile et immobile respectivement, \mathcal{C}_m et \mathcal{C}_{im} sont les concentrations dans la région mobile et immobile respectivement, v_m est la vitesse de l'eau dans les pores et α est le coefficient de transfert de masse.

On note que les équations (2.14) et (2.15) sont mathématiquement similaire aux équations (2.8) et (2.13). Si on tient compte du phénomène de sorption les équations (2.14) et (2.15) s'écrivent:

$$\theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} + f\rho_b \frac{\partial \mathcal{S}_m}{\partial t} + (1-f)\rho_b \frac{\partial \mathcal{S}_{im}}{\partial t} = \theta_m D \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial z^2} - v_m \theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial z} \quad 2.16$$

$$\theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} + (1-f)\rho_b \frac{\partial \mathcal{S}_{im}}{\partial t} = \alpha (\mathcal{C}_m - \mathcal{C}_{im}) \quad 2.17$$

On suppose que la sorption est décrite par l'isotherme de Freundlich, d'où on a

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = KNC^{N-1} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} \quad 2.18$$

et les équations (2.16) et (2.17) s'écrivent:

$$\left(\theta_m + f\rho_b K_d N \mathcal{C}_m^{N-1} \right) \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} + \left[\theta_{im} + (1-f)\rho_b K_d N \mathcal{C}_m^{N-1} \right] \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \theta_m D \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial z^2} - v_m \theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial z} \quad 2.19$$

$$\left[\theta_{im} + (1-f)\rho_b K_d N C_{im}^{N-1} \right] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) \quad 2.20$$

Le modèle de porosité double “*dual porosity model*” constitue une approche qui décrit mathématiquement le phénomène de transport dans la condition de non-équilibre de sorption “*non-LEA*”. Cette approche a été utilisée par quelques auteurs pour modéliser la migration de polluants dans la condition de non équilibre de sorption (Van Genuchten et Wierenga, 1976; Van Genuchten et Wierenga, 1977; Van Genuchten et al., 1977; Gaudet et al., 1977; Gambolati et al., 1994).

La compagnie canadienne Geoslope a créé un groupe de quatre logiciels interreliés qui permet de résoudre des problèmes associés à l’écoulement de l’eau dans les sols en utilisant un schéma d’éléments finis. Le logiciel de base SEEP/W permet de modéliser l’écoulement en deux dimensions dans un milieu poreux. À SEEP/W peuvent se greffer: SIGMA/W pour le calcul des contraintes, SLOPE/W pour la stabilité des pentes et CTRAN/W pour la modélisation du transport d’un contaminant.

Le logiciel CTRAN/W permet de modéliser la propagation d’un contaminant miscible à l’eau dans un milieu poreux. Il doit être utilisé conjointement avec SEEP/W dont il tire les valeurs du champ de vitesse. CTRAN/W permet la résolution des problèmes de transport avec adsorption et dégradation, mais il ne tient pas compte du contraste de la masse volumique et de la viscosité. Pour mieux contrôler la dispersion numérique créé par le modèle, un critère de discrétisation couramment utilisé est que la taille de la maille doit être plus petite que le double de la valeur de la dispersivité. Compte tenu des valeurs de dispersivité rencontrées lors de la simulation (quelques dizaines de centimètres), le nombre des noeuds dans le domaine simulé devient très élevé, ce qui a une répercussion sur le temps du calcul. Quand la dispersion devient négligeable, le modèle utilise le “particle tracking” du module TRACK pour calculer le problème d’advection pure.

2.3 Études comparatives

La simulation numérique de la contamination des nappes souterraines fait appel aux méthodes numériques utilisées pour résoudre les problèmes de convection-diffusion et les problèmes d'écoulements à densité variable. Le module de calcul doit réaliser le couplage entre un module hydrodynamique et un module de transport du soluté, en prenant en compte un contraste de la masse volumique et de la viscosité.

Les modèles de calculs ont augmenté en nombre et en sophistication durant les dernières années. Cependant, nous allons voir, à travers une étude comparative, comment les méthodes utilisées actuellement limitent les possibilités de la simulation.

2.3.1 Études comparatives: Transport

Le transport d'un contaminant, lorsqu'il est considéré comme un marqueur de l'eau, est modélisé par une équation de convection dispersion:

$$\begin{array}{ccc} \text{terme instationnaire} & \text{terme convectif} & \text{terme dispersif} \\ \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} & + u_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i} & = D \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial x_i \partial x_i} \end{array} \quad 2.21$$

où \mathcal{C} représente la concentration, u_i la vitesse moyenne réelle de l'eau dans les pores et D le coefficient de dispersion, généralement déterminé à l'aide de la relation suivante:

$$D = \alpha u \quad 2.22$$

avec α le coefficient de dispersivité et u la vitesse moyenne réelle de l'eau dans les pores.

Les équations modélisant le processus du transport en milieux poreux comportent deux termes: un terme convectif et un terme hyperbolique. La résolution numérique de l'équation du transport génère une solution discrète dans le temps et l'espace. La représentativité de ces résultats dépend des caractéristiques physiques (champ de vitesse, coefficient de dispersion) du domaine modélisé ainsi que de la façon de discrétiser ce domaine. Le choix de la méthode de résolution est dicté par la combinaison des caractéristiques du domaine et de la grille de calcul. Cette combinaison peut être caractérisé à l'aide de deux nombre adimensionnels. Il s'agit des nombres de Courant et de Péclet.

$$C_r = \frac{U \cdot \Delta t}{D} \quad \text{et} \quad P_e = \frac{U \cdot \Delta l}{D} \quad 2.23$$

où $\Delta l = \max(\Delta x, \Delta y)$ dans le cas d'un problème à deux dimension

- ◆ Le nombre de Péclet quantifie, en quelque sorte, l'importance relative des phénomènes d'advection et de dispersion, à l'échelle de la grille de calcul. Quand P_e est petit, la dispersion est dominante et l'équation est parabolique. Quand P_e est grand, la convection est dominante et l'équation commence à avoir un caractère hyperbolique.
- ◆ Le nombre de Courant mesure le nombre de mailles de la grille de calcul qu'une particule du fluide parcourt en un pas de temps.

Les méthodes numériques usuelles employées pour résoudre l'équation d'advection dispersion peuvent être séparées en deux catégories (Simon, 1990,

Mouchel et al., 1990): les schémas aux différences finies et éléments finis et les méthodes aux caractéristiques.

La plupart des schémas aux différences finies et élément finis sont limités à des problèmes où $C_r \approx 1$ pour des raisons de stabilité numérique. Ces contraintes sont particulièrement gênantes dans le cas de simulation à long terme. Face à ces difficultés, diverses méthodes implicites ont été proposées pour pallier à cette situation. Mais, pour une bonne précision, le pas de temps ne peut être relativement grand. Pour des problèmes de contaminants qui peuvent s'étendre sur des années, ceci entraîne une durée de calcul prohibitive.

De plus, aux forts nombres de Péclet, Pe , (advection prédominante sur la dispersion), les schémas aux différences finies, qui évitent une forte dispersion numérique, provoquent des instabilités: pour éviter que les fronts de concentration ne s'écrasent, ces schémas génèrent des concentrations trop fortes ou trop faibles, immédiatement à l'amont ou à l'aval du front (Mouchel et al., 1990). Le dosage entre les deux contraintes (stabilité et dispersion numérique) est très délicat, ce qui fait que ces schémas ne sont pas facilement utilisables, ni adaptables à des situations complexes comme celle de l'évolution de contaminants dans des situations géographiques étendues et hétérogènes.

Pour aider à contrôler la dispersion et les oscillations numériques, des critères de dimensionnement du maillage et de la sélection de la valeur des pas de temps ont été développés: $C_r \leq 1$, $Pe \leq 2$, ce qui revient à dire:

$$\Delta x \leq \frac{2\theta D_L}{q_x} = 2\alpha_L \quad 2.24$$

$$\Delta y \leq \frac{2\theta D_T}{q_y} = 2\alpha_T \quad 2.25$$

$$\Delta t \leq \frac{\theta \Delta x}{q_x} = \frac{\Delta x}{v_x} \quad 2.26$$

$$\Delta t \leq \frac{\theta \Delta x}{q_y} = \frac{\Delta y}{v_y} \quad 2.27$$

où:

Δx et Δy sont l'espacement entre deux noeuds selon l'axe des x et y respectivement, Δt est le pas de temps, α_L et α_T sont les coefficients de dispersivité longitudinale et transversale respectivement, q_x et q_y sont les vitesses de Darcy selon l'axe des x et y respectivement, v_x et v_y sont les vitesses dans les pores selon l'axe des x et y respectivement, θ est la teneur en eau, D_L et D_T sont les coefficients de dispersion longitudinale et transversale respectivement.

Le critère de discrétisation impose que la taille de la maille soit plus petite que le double de la valeur de la dispersivité. Compte tenu des valeurs de dispersivité de la simulation (quelques dizaines de centimètres), le nombre de mailles ou des noeuds dans le domaine simulé devient très élevé et le calcul nécessite des moyens informatiques extrêmement lourds.

Les schémas aux caractéristiques reposent sur l'approximation suivante: l'advection et la diffusion, qui sont des processus physiques simultanés, sont traitées comme si elles se produisaient successivement à l'intérieur d'un pas de temps. Ces schémas ne souffrent pas des problèmes d'instabilité mais de dispersion numérique due au lissage des concentrations causé par un grand nombre d'interpolations. Par contre, un schéma similaire aux techniques des caractéristiques a été mis au point il y a quelques années. Ce schéma combine les méthodes d'Euler et Lagrange (ELM). Une revue de la littérature sur le traitement numérique de la convection- dispersion montre une tendance croissante vers l'approche Lagrangienne (Neuman, 1981; Cassulli, 1992, Mouchel et al., 1990, Fredj et Kahawita, 1994). Elle est de maniement simple et elle évite certains des problèmes et des limitations sur les pas de temps et d'espace. La

technique lagrangienne a été considérée, pendant ces deux dernières décennies, comme la méthode la plus précise pour résoudre l'équation d'advection-dispersion.

La précision de la méthode lagrangienne dépend essentiellement de la formule et de l'ordre d'interpolation. En effet, une interpolation d'ordre supérieur à 1 réduit considérablement la diffusion numérique mais elle peut générer des oscillations numériques (Baptista et al, 1984, Baptista, 1987, Cassuli, 1992; Fredj et Kahawita, 1994). Par contre, une interpolation de premier ordre réduit les oscillations numériques mais sa capacité à réduire la diffusion numérique dépend de la taille du maillage et du pas de temps utilisé (Fredj et Kahawita, 1994; Yeh, 1992).

Ces problèmes d'interpolation engendrent une atténuation des pics ou des fronts de concentration lors de calculs purement convectifs. Ce phénomène est connu dans la littérature comme étant le "*peak clipping*". Yeh (1992) considère qu'il s'agit de la plus importante cause de dispersion numérique dans la méthode.

Pour pallier le "*peak clipping*" et les aberrations numériques qu'il génère, Yeh (1992), a proposé une nouvelle méthode de résolution à une dimension. Cette méthode est basée sur le traitement distinct des termes convectifs et diffusifs par un schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front "*An exact Peak Capturing and Oscillation-free Scheme*" (EPCOF), qui consiste à:

- ◆ découpler l'équation de convection-dispersion;
- ◆ utiliser une technique de suivi des particules arrière "*Backward tracking method*";
- ◆ utiliser une technique de suivi des noeuds avant "*Forward node tracking*"
- utiliser un raffinement adaptatif des maillages "*Adaptive local grid refinement*" (ALGR).

La technique de EPCOF est incontestablement la plus précise pour résoudre l'équation d'advection-dispersion à une dimension: elle ne génère aucune dispersion numérique ni instabilité. Cette approche peut être appliquée aux problèmes à plusieurs dimensions

en lui apportant, cependant, certaines modifications (Cheng et al., 1996, Yeh et al., 1992).

L'objectif de la thèse est de modifier la méthode de EPCOF afin que celle-ci soit capable de résoudre le phénomène de contamination des eaux souterraines en deux dimensions sur des maillages non structurés.

2.3.2 Études comparatives: Écoulement

Les méthodes numériques usuelles employées pour résoudre l'équation décrivant l'hydrodynamique dans les milieux poreux sont les différences finies et les éléments finis. Ces méthodes classiques permettent le calcul de la charge hydraulique. Les vitesses d'écoulement sont ensuite calculées à l'aide de la loi de Darcy. Ces deux méthodes donnent des résultats tout à fait comparables. Cependant, dériver des charges hydrauliques par une méthode numérique pour calculer la vitesse peut conduire à des résultats inacceptables dans des conditions de milieu hétérogène ou en présence de singularités comme des puits de pompage (Ackerer et al., 1994). La méthode des éléments finis mixtes hybrides (Chavent et Jaffré, 1987; Mosé, 1990) permet le calcul simultané des charges hydrauliques et des vitesses. Le champ des vitesses calculé par cette méthode est plus précis que celui obtenu par la méthode des éléments finis ou des différences finies (Ackerer et al., 1994).

Une revue de la littérature sur le traitement numérique de l'équation hydrodynamique montre une tendance croissante vers l'approche des volumes finis. Cette méthode permet de traiter les géométries complexes avec la même facilité que les méthodes d'éléments finis et conserve l'aspect physique du problème dans la discrétisation comme les méthodes des éléments finis. Cette méthode a été développée initialement pour des problèmes de convection- diffusion et a ensuite été appliquée à

des problèmes d'écoulements incompressibles et à des écoulements dans les milieux poreux. (Hookey, 1988a, 1988b; Prakash, 1985, 1987b, 1987c) ont attentivement examiné la méthode et les avantages sont bien escomptés: la discrétisation triangulaire permet de traiter des géométries complexes et il n'y a pratiquement pas de diffusion artificielle (Prakash, 1987c). Fan (1995) a utilisé la méthode des volumes finis pour le calcul d'un écoulement à densité variable. La formulation en volumes finis utilisée est robuste et précise et elle a démontré d'excellentes caractéristiques de stabilité numérique.

2.4 Objectifs

De la synthèse de la brève revue bibliographique, il ressort que:

☒ Parmi les facteurs influençant la dispersion des contaminants en milieu poreux il semble que les contrastes de la masse volumique, de la viscosité et de la sorption soient les plus importants.

☒ La plupart des études touchant les écoulements à densité variable dans le milieu poreux sont consacrées au traitement du problème des intrusions salines près des aquifères littorales. Très peu de travaux ont abordé la compréhension des migrations du lixiviat à partir des dépotoirs de surface.

☒ Le problème de la naissance et l'amplification des instabilités hydrodynamiques (ou digitation) n'a pas, jusqu'à présent, été résolu dans son ensemble. Plusieurs études numériques basées sur les méthodes des éléments finis, des différences finies et des volumes finis ont montré que les modèles numériques sont capables de produire fidèlement les observations expérimentales. Cependant, une publication récente de Schincariol et al., (1996) montre que les instabilités (ou digitations) hydrodynamiques

produites par un modèle numérique sont dues au caractère diffusif des schémas utilisés et au fait que le critère de stabilité critique, basé sur le nombre de Rayleigh, n'est pas approprié pour évaluer le problème du transport d'un panache dense.

☒ Le transport d'un lixiviat comportant plusieurs composantes réactives et non réactives dans un écoulement à densité variable est resté inexploré.

☒ Dans la plupart des modèles, la sorption de polluants est simulée par des isothermes et, notamment, l'isotherme linéaire, qui suppose que l'équilibre de sorption "*local equilibrium assumption*" (LEA) est atteint instantanément immédiatement après la réception du contaminant dans un sol. Malheureusement, cette approche très simplifiée des échanges solide-liquide s'est révélée inadéquate pour plusieurs cas réels.

☒ La modélisation du transport d'un polluant dans les milieux poreux (écoulement + dispersion + convection) est un problème difficile et sa résolution par des schémas numériques classiques (éléments finis, différences finies ou volumes finis) est souvent peu satisfaisante du fait du caractère diffusif de ces schémas.

A la lumière de cette synthèse, l'objectif majeur de cette thèse est l'étude numérique des écoulements à densité variable et du transport d'un lixiviat comportant plusieurs composantes polluantes réactives et non réactives dans les milieux poreux saturés et non saturés. La formulation générale du modèle doit permettre l'analyse des problèmes comprenant des processus d'advection, de diffusion, de dégradation et de sorption sous des conditions d'équilibre et de non-équilibre. Le modèle tiendra aussi compte du contraste de la masse volumique et de la viscosité. Le défi est de modifier la méthode de EPCOF afin que celle-ci soit capable de résoudre le phénomène de contamination des eaux souterraines en deux dimensions sur des maillages non structurés.

CHAPITRE III

LES ÉQUATIONS DE BASE

3.1 Introduction

Ce travail porte sur une étude numérique des écoulements à densité variable, ainsi que sur le transport des contaminants dans le milieu poreux saturés et non saturés. Le module de transport doit être utilisé conjointement avec le module de l'écoulement dont il tire les valeurs du champ de vitesse et de la teneur en eau. La formulation générale du modèle permet d'analyser des problèmes comprenant des processus d'advection, de diffusion, d'adsorption, de dégradation, de la masse volumique et de la viscosité. Les équations gouvernant ce phénomène comprennent l'équation de Darcy, l'équation de continuité pour un fluide incompressible, l'équation de transport des polluants dans des conditions d'équilibre de sorption et dans des conditions de non-équilibre de sorption, et une équation d'état qui relie la densité du fluide à sa concentration.

3.2 Équation de continuité

L'écoulement souterrain dans un milieu saturé et non saturé peut être décrit comme étant une combinaison de l'équation de continuité d'un fluide et de l'équation général de Darcy. Dans le cas d'un écoulement à densité variable, l'équation de continuité peut être exprimée par (Bear, 1972)

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho q_i) + \frac{\partial}{\partial t}(n\rho S_w) + \rho Q = 0 \quad 3.1$$

où q_i est la vitesse de Darcy dans la direction x_i [$L T^{-1}$], ρ est la densité de l'eau [$M L^{-3}$], n est la porosité du milieu poreux [L^3/L^3], S_w est la saturation volumique de l'eau (volume des pores / volume de l'eau) (sans dimension), Q est une source ou un puits [$(L^3/T)/L^3$], t est le temps, et x_i est la coordonnée spatiale.

La loi de Darcy sous la forme la plus générale, s'écrit:

$$q_i = \frac{-k_{i,j} k_r}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g e_j \right) \quad 3.2$$

où $k_{i,j}$ est le tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu saturé [L^2], k_r représente la perméabilité relative, μ est la viscosité dynamique du fluide [$M L^{-1} T^{-1}$], p est la pression du fluide [$M L^{-1} T^{-2}$], g est l'accélération de la gravitationnelle [$L T^{-2}$], x_j est la coordonnée spatiale (L), et e_j est un vecteur égal à 1 dans la direction verticale et égal à 0 dans la direction horizontale.

En substituant l'équation (3.2) dans (3.1), l'équation de continuité devient:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g e_j \right) \right] + \frac{\partial}{\partial t}(n\rho S_w) + \rho Q = 0 \quad 3.3$$

En développant

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g e_j \right) \right] + \rho S_w \frac{\partial n}{\partial t} + \rho n \frac{\partial S_w}{\partial t} + n S_w \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho Q = 0 \quad 3.4$$

La quantité totale de la masse fluide contenue dans un milieu poreux dépend de la pression, de la concentration du soluté \mathcal{C} et de la température, T , $\rho = \rho(P, \mathcal{C}, T)$, Dans le cas isothermique la relation se réduit à $\rho = \rho(P, \mathcal{C})$. La variation de la masse totale du fluide s'écrit:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{C}} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = \rho \beta \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{C}} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} \quad 3.5$$

où $\beta = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p}$ = compressibilité de l'eau

La variation total de la porosité s'écrit:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \alpha \frac{\partial p}{\partial t} \quad 3.6$$

où $\alpha = \frac{\partial n}{\partial p}$ = Compressibilité du sol

La variation total de teneur en eau s'écrit:

$$n \frac{\partial S_w}{\partial t} = n \frac{\partial S_w}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad 3.7$$

En substituant α et β dans l'équation (3.4), on obtient:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g e_j \right) \right] + \rho S_w (\alpha + n\beta) \frac{\partial p}{\partial t} + \rho n \frac{dS_w}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} + nS \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{C}} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + \rho Q = 0 \quad 3.8$$

Utilisant la pression hydrostatique

$$h = \frac{p}{\rho_0 g} \quad 3.9$$

En dérivant l'équation (3.8) on obtient

$$\frac{\partial p}{\partial x_j} = \rho_0 g \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad 3.10$$

et

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho_0 g \frac{\partial h}{\partial t} \quad 3.11$$

En substituant (3.10) et (3.11) dans (3.8), on obtient:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} \rho_0 g \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \right] + \rho_0 g (\alpha + n\beta) \rho S_w \frac{\partial h}{\partial t} + \rho n \frac{dS_w}{dh} \frac{\partial h}{\partial t} + \theta \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{C}} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} = -\rho Q \quad 3.12$$

Utilisons la définition du coefficient spécifique d'emmagasinement $[M L^{-1} T^{-1}]^{-1}$
(Bear, 1972; Freeze and Cherry, 1979).

$$S_p = \rho_0 g (\alpha + n\beta) \quad 3.13$$

on obtient

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} \rho_0 g \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \right] + \rho \left(S_w S_p + n \frac{dS_w}{dh} \right) \frac{\partial h}{\partial t} + n S_w \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \rho Q = 0 \quad 3.14$$

On pose

$$F_p = \left(S_p S_w + n \frac{dS_w}{dh} \right) \quad 3.15$$

L'équation (3.14) s'écrit:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k_{i,j} k_r}{\mu} g \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \right] + \frac{\rho}{\rho_0} F_p \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_0} Q = 0 \quad 3.16$$

La conductivité hydraulique dépend de la densité et la viscosité du fluide, ces derniers sont fonction de la concentration.

$$K = \frac{\rho g}{\mu} k_s k_r = K_s k_r \quad 3.17$$

où

μ : viscosité dynamique de l'eau avec une concentration C ;

θ : teneur en eau;

k : tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu;

k_s : tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu saturé;

k_r : conductivité relative;

K_s : conductivité hydraulique du milieu saturé;

ρ_0 : densité du fluide dont la concentration est nulle;

ρ : densité du fluide dont la concentration est C .

l'équation de continuité s'écrit

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \right] + \frac{\rho}{\rho_0} F_p \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_0} Q = 0 \quad 3.18$$

Substituons l'équation (3.10) dans l'équation (3.2), l'équation de Darcy s'écrit

$$q_i = -\frac{k_{ij} k_r}{\mu} \left(\rho_0 g \frac{\partial h}{\partial x_j} + \rho g e_j \right) \quad 3.19$$

$$q_i = -\frac{k_{ij} k_r}{\mu} \rho g \left(\frac{\rho_0}{\rho} \frac{\partial h}{\partial x_j} + e_j \right) = -K \left(\frac{\rho_0}{\rho} \frac{\partial h}{\partial x_j} + e_j \right) \quad 3.20$$

La solution de l'équation de continuité (3.18) est une fonction de $h(x, y, t)$ qui décrit la valeur de la charge hydraulique dans l'aquifère en tout temps. Elle requiert la connaissance des courbes caractéristiques $K(h)$ et $\theta(h)$.

3.2.1 Détermination des courbes caractéristiques des sols

La conductivité hydraulique effective peut s'écrire comme le produit d'une constante non linéaire.

$$K(h) = k_r K_s \quad 3.21$$

où k_r est la conductivité relative et varie entre 0 et 1 et K_s est conductivité hydraulique du milieu saturé. La perméabilité relative varie en fonction de la teneur en eau.

La teneur en eau $\theta(h)$ dans le milieu non saturé est une fonction de la charge hydraulique. En effet, dans un sol non saturé, un changement de pression est toujours accompagné d'un changement dans la teneur en eau (θ) et de la conductivité hydraulique (K). Plus la charge est négative, plus la teneur en eau est faible. Lorsque la saturation est atteinte, la teneur en eau est égale à la porosité du sol. La courbe qui décrit la relation entre la teneur en eau et la charge hydraulique doit varier entre la teneur en eau saturé θ_s , et la teneur en eau relative θ_r .

Les courbes de la propriété, $\theta(h)$ et de $K(\theta)$ présentent des hystérésis du fait qu'elles n'obéissent pas aux mêmes relations selon que le sol s'assèche ou se humidifie. Ces relations peuvent être résolues en utilisant les propriétés hydrauliques du sol. On trouve dans la littérature plusieurs méthodes pour déterminer les courbes caractéristiques des sols.

3.2.1.1 Méthode de Gardner, 1958

La perméabilité relative et le degré de saturation s'écrivent:

$$k_r = \frac{a}{b + |h|^m}, S_w = \frac{c}{d + |h|^n}; \quad h < 0 \quad 3.22$$

$$k_r = 1, S_w = 1; \quad h \geq 0 \quad 3.23$$

où a , b ont la même unité que h^m , alors que c et d ont la même unité que h^n , m , et n sont des constantes. La figure (3.1) montre les courbes caractéristiques d'un sol de porosité 0.3 et une perméabilité $K_s=40$ cm/hr (Vauclin et al, 1975).

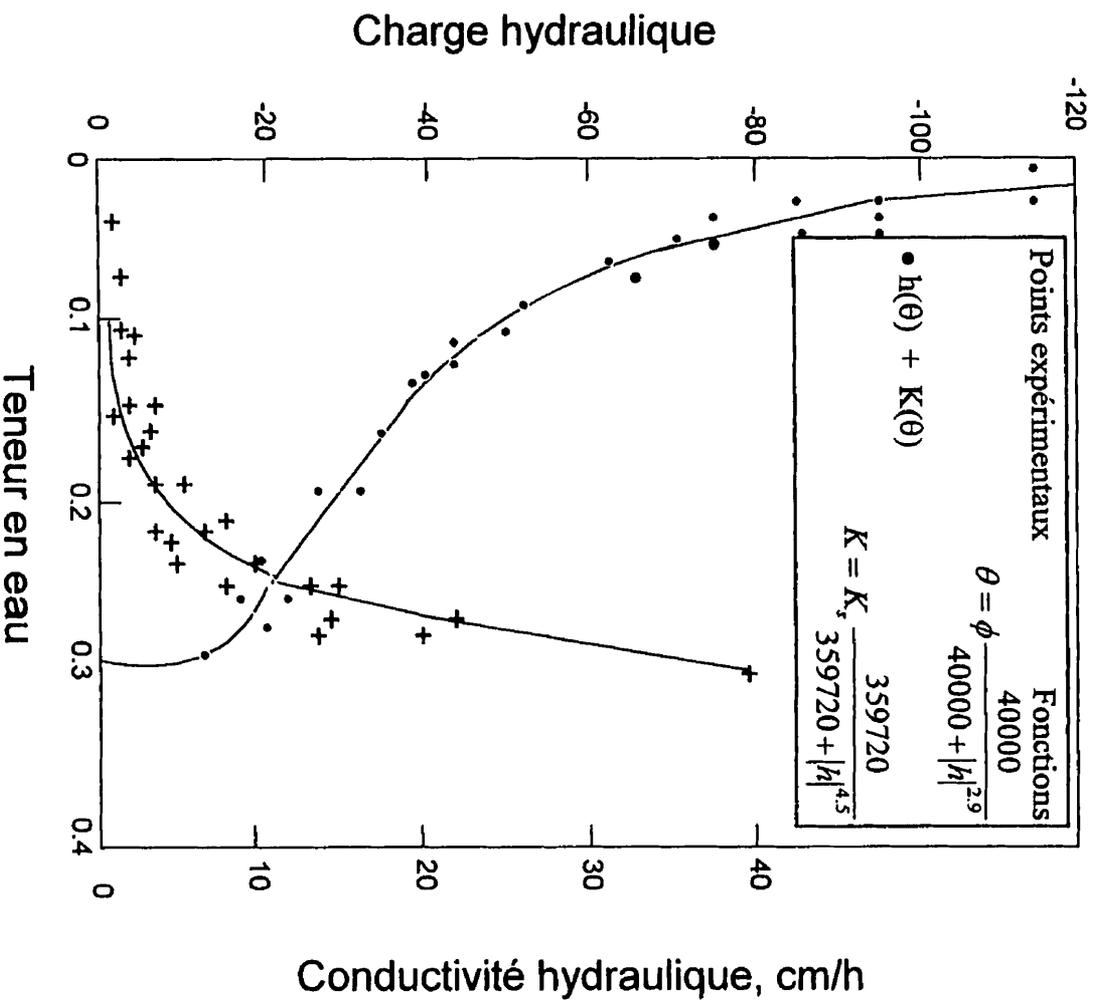


Figure 3. 1 Courbes Caractéristiques du sol ($\phi=0.3$, $K_s=40$ cm/hr) (Vauclin, 1975)

3.2.1.2 Méthode de Huyakorn et al, 1984

Le degré de saturation est exprimé par la relation suivante:

$$S_w(\varphi) = \left[1 + \varepsilon^n (\varphi_a - \varphi)^n \right]^{-\gamma}, \quad \varphi < \varphi_a$$

$$S_w = 1, \quad \varphi \geq \varphi_a \quad 3.25$$

Il y a deux possibilités d'écrire la conductivité relative:

$$k_r(\varphi) = k_r(S_w(\varphi)) = S_w^\mu \quad 3.26$$

$$k_r(\varphi) = 10^{G(S_w(\varphi))} \quad 3.27$$

où $G(S_w) = aS_w^2 + (b - 2a)S_w + a - b$, ϵ , η , γ , μ et b sont des constantes, φ est la pression et φ_a est la pression de l'air.

3.2.1.3 Méthodes de Van Genuchten, 1980.

La perméabilité relative s'écrit:

$$K_r = \theta_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{1/m} \right) \right]^2 \quad 3.28$$

où θ_e s'écrit

$$\theta_e = \left[1 + (\alpha h)^n \right]^{-m} \quad \text{pour } h < 0 \quad 3.29$$

$$\theta_e = 1 \quad \text{pour } h > 0$$

$$\theta_w = \theta_r + \theta_e (\theta_s - \theta_r) \quad 3.30$$

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad 3.31$$

- θ est la teneur en eau .
- θ_r est la teneur résiduelle en eau
- θ_s est la teneur saturé en eau.
- θ_e est le teneur effective en eau
- K_s est la conductivité hydraulique du milieu saturé.
- n et m sont des paramètres déterminés à partir des données expérimentales.
- α est un coefficient spécifique du sol

Table 3.1 représente un ensemble de valeur de θ_s , θ_r et les paramètres de Van Genuchten α et n pour différents types des sols.

Tableau 3. 1 Paramètres représentatifs de différents types de sols (Rawls et al., 1982, in Van Genuchten et al., 1991)

Type de sol	Teneur saturée en eau, θ_s	Teneur résiduelle en eau, θ_r	$\alpha [cm^{-1}]$	n	K_s cm/d
Sand	0.417	0.02	0.138	1.592	504.0
Loamy Sand	0.401	0.035	0.115	1.474	146.6
Sandy Loam	0.412	0.041	0.068	1.322	62.16
Loam	0.434	0.027	0.09	1.220	16.32
Silt Loam	0.486	0.015	0.048	1.211	31.68
Sandy Clay Loam	0.33	0.068	0.036	1.250	10.32
Clay Loam	0.39	0.075	0.039	1.194	5.52
Silty Clay Loam	0.432	0.04	0.031	1.151	3.60
Sandy Clay	0.321	0.109	0.034	1.168	2.88
Silty Clay	0.423	0.056	0.029	1.127	2.16
Clay	0.385	0.09	0.027	1.131	1.44

3.3. Équation de transport

3.3.1 Équation de transport d'un soluté sous condition

d'équilibre de sorption

L'équation décrivant le processus du transfert d'un soluté non-réactif de concentration \mathcal{C} dans un milieu poreux peut être mise sous la forme suivant: (Bear, 1979; Nielson et al., 1985; Hebert et al., 1988; Gambalati et al., 1992).

$$\frac{\partial}{\partial t}[nS_w \mathcal{C}] + \frac{\partial}{\partial x_i}[q_i \mathcal{C}] - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[nS_w D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] + Q \mathcal{C}_s = 0 \quad 3.32$$

où \mathcal{C} est la concentration du contaminant $[M/L^3]$, \mathcal{C}_s est la concentration injectée ou pompée par la source ou puits Q $[(M/L)/T]$, $D_{i,j}$ est le tenseur de dispersion hydrodynamique définie par (Bear, 1972).

$$nS_w D_{i,j} = \alpha_L |q| \delta_{i,j} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{q_i q_j}{|q|} + \tau nS_w D_0 \delta_{i,j} \quad 3.33$$

où α_L et α_T sont les dispersivités intrinsèques longitudinale et transversale du milieu $[L]$, $|q|$ est la valeur absolue de la vitesse de Darcy, q_j est la composante du champ de vitesse de Darcy dans la direction j , D_0 est le tenseur de diffusion moléculaire, $\delta_{i,j}$ est le delta Kronecker ($\delta_{i,j} = 1$ pour $i = j$ et $\delta_{i,j} = 0$ pour $i \neq j$).

Si on dérive explicitement les deux premiers termes de l'équation (3.32), on obtient:

$$\theta \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + q_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] + Q \mathcal{C}_s = - \left(\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(\theta)}{\partial t} \right) \mathcal{C} \quad 3.34$$

or d'après l'équation (3.1) on a:

$$- \left(\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(\theta)}{\partial t} \right) = Q \quad 3.35$$

En substituant (3.35) dans l'équation de transport (3.34), on obtient:

$$\theta \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + q_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] = Q(\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) \quad 3.36$$

L'équation décrivant le processus du transfert d'un soluté réactif avec adsorption de concentration \mathcal{C} dans un milieu poreux s'écrit:

$$\theta \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial S}{\partial t} + q_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] + \lambda(\theta \mathcal{C} + \rho_b S) = (\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) Q \quad 3.37$$

où ρ_b est la masse volumique sèche $[M/L^3]$, S_w est le degré de saturation, λ est la constante de dégradation $[T^{-1}]$, S est la masse du contaminant adsorbée par unité de masse du milieu poreux $[M/M]$, n est un index dans l'isotherme de Freundlich et k_d est un coefficient dans l'isotherme de Freundlich.

Si le contaminant se propage lentement ce qui permettrait à la solution d'atteindre l'équilibre de sorption, la relation entre \mathcal{C} et S peut être exprimée par l'isotherme de Freundlich $S = k_d \mathcal{C}^n$. Dans le cas d'un isotherme de sorption linéaire ($k_d=1$) l'équation (3.37) s'écrit:

$$(\theta + \rho_b k_d) \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + q_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] + \lambda (\theta \mathcal{C} + \rho_b S) = (\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) Q \quad 3.38$$

En utilisant la dérivée lagrangienne, (Neuman, 1981, 1984 ; Casulli, 1987, 1990).

$$\frac{d}{dt} [] = \frac{\partial}{\partial t} () + V_d \frac{\partial}{\partial x_i} () \quad 3.39$$

où

$$V_d = \frac{q_i}{\theta + \rho_b k_d} = u_i \frac{\theta}{\theta + \rho_b k_d} = \frac{u_i}{R_d} \quad 3.40$$

où $u_i = \frac{q_i}{\theta}$ est la vitesse du fluide dans les pores, V_d est la vitesse du contaminant et

$R_d = \theta + \frac{\rho_b k_d}{\theta}$ est le coefficient de retard.

L'équation (3.38) peut s'écrire sous la forme lagrangienne .

$$\theta R_d \frac{d_{V_d}(\mathcal{C})}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] - \lambda (\theta \mathcal{C} + \rho_b S) + (\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) Q \quad 3.41$$

ou la dérivée $\frac{d(\mathcal{C})}{dt}$ indique que le changement du \mathcal{C} pendant le pas de temps est calculé le long de la caractéristique.

3.4.2 Équation de transport d'un soluté sous condition de non-équilibre de sorption

Le transport d'un contaminant dans des conditions de non-équilibre de sorption peut être décrit mathématiquement par le modèle de porosité double "*dual porosity model*" qui subdivise le milieu poreux en cinq régions (Van Genuchten et Wierenga, 1976; Gambolati, 1994):

1. Phase d'air;
2. La région qui contient la phase d'eau mobile. L'écoulement fluide ainsi que le mécanisme d'advection dispersion d'un soluté aura lieu uniquement dans cette région. L'échange de la solution dans la région 4 se fait par sorption dans une condition d'équilibre, et avec la région 3 par diffusion;
3. La région qui contient le phase d'eau immobile. Il n'y a pas d'écoulement fluide dans cette région. L'échange de la solution se fait par diffusion dans la région 2, et avec sorption dans la condition d'équilibre dans la région 5;
4. La région dynamique du sol, située autour de la région de l'eau mobile 2. L'échange de la solution se fait par sorption dans la condition d'équilibre avec la région 2;
5. La région stagnante du sol, située autour de la région d'eau immobile 3. L'échange de la solution se fait par une sorption sous la condition d'équilibre avec la région 3.

Les équations générales qui décrivent le transport de polluant et l'échange de masse entre la région mobile et la région immobile sont:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[n_m S_{wm} D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} [q_i C_m] &= \theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} \\ &+ \rho_d F \frac{\partial S_m}{\partial t} + \rho_d (1-F) \frac{\partial S_{im}}{\partial t} \\ &+ \lambda [\theta_m C_m + \theta_{im} C_{im} + \rho_s F S_m + \rho_d (1-F) S_{im}] \\ &+ Q(C - C_s) = 0 \end{aligned} \quad 3.42$$

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \rho_d (1-F) \frac{\partial S_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) - \lambda [\theta_{im} C_{im} + \rho_d (1-F) S_{im}] \quad 3.43$$

où

$\theta_m = n_m S_{wm}$ est la teneur en eau dans la région mobile

S_{wm} est la saturation en eau dans la région mobile

n_m est la porosité de la région mobile

$$\theta_m D_{ij} = \alpha_T |q| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) q_i q_j / |q| + \theta_m D_0 \tau \delta_{ij}$$

C_m est la concentration de la solution dans la région mobile

C_{im} est la concentration de la solution dans la région immobile

$\theta_{im} = n_{im}$ est la teneur en eau dans la région immobile

n_{im} est la porosité dans la région immobile

$n = n_m + n_{im}$ est la porosité totale

F est la fraction d'adsorption dans la région mobile. Ce paramètre décrit la quantité de la solution adsorbée à l'intérieur de la région mobile du sol

S_m est la concentration adsorbée dans la région mobile du sol

S_{im} est la concentration adsorbée dans la région stagnante du sol

α est le coefficient de transfert de la masse du processus de la diffusion entre la région d'eau mobile et la région d'eau immobile

En utilisant l'isotherme linéaire de Freundlich pour simuler l'adsorption dans les conditions d'équilibre entre les régions dynamiques 2 et 4, et entre les régions stagnantes 3 et 5. Pour la région dynamique on a $S_m = k_{dm} C_m$ et pour la région stagnante on a $S_{im} = k_{dim} C_{im}$. En substituant les expressions des isotherme dans l'équations (3.42) et (3.43) on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} [q_i C_m] &= \theta_m \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} \\ &+ \rho_d F k_{dm} \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} + \rho_d (1-F) k_{dm} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} \\ &+ \lambda [\theta_m C_m + \theta_{im} C_{im} + \rho_s F k_{dm} C_m + \rho_d (1-F) k_{dm} C_{im}] \\ &+ Q(C - C_s) = 0 \end{aligned} \quad 3.44$$

$$\theta_{im} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} + \rho_d (1-F) k_{dm} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) - \lambda [\theta_{im} + \rho_d (1-F) k_{dm}] C_{im} \quad 3.45$$

où

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} [q_i C_m] &= (\theta_m + \rho_d F k_{dm}) \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} \\ &+ [\theta_{im} + \rho_d (1-F) k_{dm}] \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} \\ &+ \lambda [\theta_m + \rho_s F k_{dm}] C_m \\ &+ \lambda [\theta_{im} + \rho_d (1-F) k_{dm} C_{im}] C_{im} + Q(C - C_s) = 0 \end{aligned} \quad 3.46$$

$$[\theta_{im} + \rho_d (1-F) k_{dm}] \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) - \lambda [\theta_{im} + \rho_d (1-F) k_{dm}] C_{im} \quad 3.47$$

Définissant les coefficients de retard

$$R_{d_m} = 1 + \frac{(\rho_d F k_{d_m})}{\theta_m} \quad 3.48$$

$$R_{d_{im}} = 1 + \frac{(\rho_d (1-F) k_{d_{im}})}{\theta_{im}} \quad 3.49$$

En substituant les 'équations (3.48) et (3.49) dans les équations (3.46) et (3.47) respectivement on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} [q_i \mathcal{C}_m] &= \theta_m R_{d_m} \frac{\partial \mathcal{C}_m}{\partial t} \\ &+ \theta_{im} R_{d_{im}} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} \\ &+ \lambda [\theta_m R_{d_m} \mathcal{C}_m + \theta_{im} R_{d_{im}} \mathcal{C}_{im}] + Q(\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) \end{aligned} \quad 3.50$$

$$\theta_{im} R_{d_{im}} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \alpha(\mathcal{C}_m - \mathcal{C}_{im}) - \lambda \theta_{im} R_{d_{im}} \mathcal{C}_{im} \quad 3.51$$

l'équation (3.50) peut s'écrire sous la forme lagrangienne

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] &= \theta_m R_{d_m} \frac{d_v \mathcal{C}_m}{dt} \\ &+ \theta_{im} R_{d_{im}} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} + \lambda [\theta_m R_{d_m} \mathcal{C}_m + \theta_{im} R_{d_{im}} \mathcal{C}_{im}] + Q(\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) \end{aligned} \quad 3.52$$

$$\theta_{im} R_{d_{im}} \frac{\partial \mathcal{C}_{im}}{\partial t} = \alpha(\mathcal{C}_m - \mathcal{C}_{im}) - \lambda \theta_{im} R_{d_{im}} \mathcal{C}_{im} \quad 3.53$$

où

$$V_m = \frac{u_i}{R_{d_m}} \quad 3.54$$

où $u_i = \frac{q_i}{\theta}$ est la vitesse du fluide dans les pores, V_m est la vitesse du contaminant.

L'équation (3.53) peut être intégrée analytiquement

$$C_{im} = e^{-(\beta+\lambda)t} + \left(k + \beta \int_0^t e^{-(\beta+\lambda)\tau} C_m d\tau \right) \quad 3.55$$

$$\text{où } \beta = \frac{\alpha}{\theta_{im} R_{d_m}}$$

Supposant qu'à $t=0$, $C_{im} = 0$, la solution de l'équation (3.53) devient:

$$C_{im} = \beta e^{-(\beta+\lambda)t} \int_0^t e^{(\beta+\lambda)\tau} C_m d\tau \quad 3.56$$

Substituant l'équation 3.56 et l'équation (3.53) dans l'équation (3.52) on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] &= \theta_m R_{d_m} \frac{d_{v_m} C_m}{dt} \\ &+ (\alpha + \lambda \theta_m R_{d_m} + Q) C_m - Q C_s \\ &- \alpha \beta e^{-(\beta+\lambda)t} \int_0^t e^{(\beta+\lambda)\tau} C_m d\tau \end{aligned} \quad 3.57$$

3.4. Densité et viscosité

Les équations de l'écoulement et du transport sont couplées par l'équation d'état concernant la masse volumique, ρ , [$M L^{-3}$] et la viscosité dynamique μ [$M L^{-1} T^{-1}$]. Ces équations qui jouent un rôle essentiel sur le champ des vitesses, sont exprimées en fonction de la concentration du polluant

$$\rho = \rho_0(1 + a_1\mathcal{C} + a_2\mathcal{C}^2 + a_3\mathcal{C}^3) \quad 3.58$$

$$\mu = \mu_0(1 + b_1\mathcal{C} + b_2\mathcal{C}^2 + b_3\mathcal{C}^3) \quad 3.59$$

où \mathcal{C} est la concentration du soluté [$M L^{-3}$], et a_1, a_2, a_3, b_1, b_2 et b_3 sont des paramètres [$L^3 M^{-1}$] qui décrivent la dépendance de la densité et la viscosité dynamique de la concentration des polluant.

Dans le cas d'intrusions salines, la relation entre la densité du fluide et la concentration est considérée linéaire (Galetti et al 1992, Peter et al 1987)

$$\rho = \rho_0(1 + \varepsilon c), \quad \varepsilon = \frac{\rho_{\max} - \rho_0}{\rho_0} \quad 3.60$$

où ρ_{\max} est la densité maximale du fluide qui correspond à une concentration \mathcal{C} maximale et c est une concentration sans dimension (concentration actuelle divisée par la concentration maximale).

L'équation de viscosité dans le cas d'intrusions salines s'écrit (Voss, 1984; Hebert et al., 1988)

$$\mu = \mu_0(1 + 0.4819\mathcal{C}) \quad 3.61$$

Dans le cas du transport de deux ou plusieurs polluants les variations de la masse volumique et de la viscosité du mélange sont difficiles à calculer car il n'existe pas une équation exacte. La densité du mélange diluée ρ_m est supposée linéaire en fonction de la concentration de l'ensemble des polluants .

$$\rho_m = \rho_0 + \sum_{k=1}^n a_k C_k \quad 3.62$$

où C_k est la concentration du contaminant k, a_k est le paramètre qui décrit la dépendance de la densité à la concentration de polluant. Le paramètre a_k peut être déterminé à partir des données expérimentales. En assumant que $a_k = (\rho_k^{ref} - \rho_0) / C_k^{ref}$, l'équation (3.62) s'écrit:

$$\rho_m = \rho_0 \left(1 - \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \right) + \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \rho_k^{ref} \quad 3.63$$

où C_k^{ref} est la concentration de référence du polluant k dont la densité est connue.

La concentration C_k^{ref} est généralement supérieure à la concentration maximale C_k pour assurer que le premier terme de l'équation (3.63) soit positif.

En assumant qu'il n'existe pas de réaction chimique entre les différents polluants, la viscosité du mélange μ_m est donnée par (Green, 1984; Reid et al., 1987; Zhang et al., 1995).

$$\ln \mu_m = \sum_{k=1}^n w_k \ln \mu_k^{ref} + \left(1 - \sum_{k=1}^n w_k \right) \ln \mu_w^{ref} \quad 3.64$$

où μ_k^{ref} est la viscosité dynamique du fluide avec une concentration de référence C_k^{ref} et w_k est la masse du polluant

3.5 Les conditions de frontière

La solution des équations différentielles nécessite la spécification de conditions aux frontières du domaine. Généralement, il y a deux types de conditions frontières: celle de Dirichlet et celle de Neuman. La figure (3.2) présente un domaine de calcul, où on voit pour chaque type de frontières les conditions à imposer.

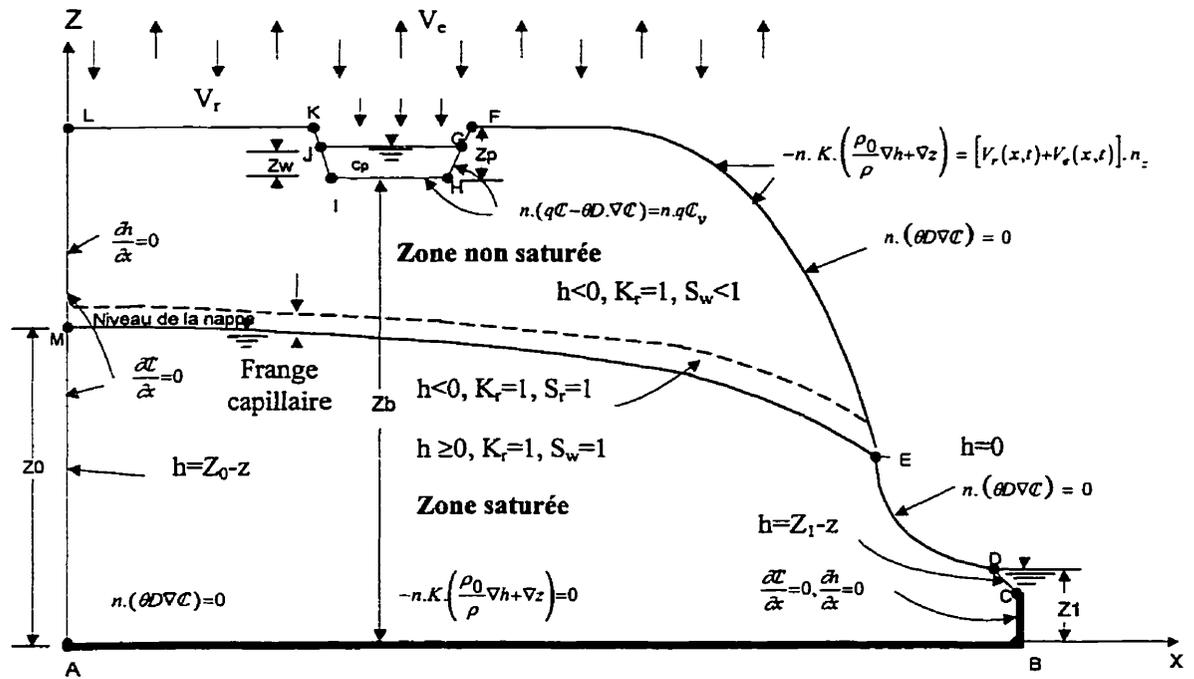


Figure 3. 2 Conditions aux limites

3.5.1 Conditions de Dirichlet

◆ Équation de continuité

$$h=0 \quad (\text{sur DE}) \quad 3.65$$

$$h=Z_0-z \quad (\text{sur AM}) \quad 3.66$$

$$h=Z_1-z \quad (\text{sur CD}) \quad 3.67$$

$$h=Z_b+Z_w-z \quad (\text{sur JHG}) \quad 3.68$$

où Z_0 et Z_1 sont les niveaux d'eau sur la frontière amont et aval respectivement.

◆ Équation de transport

La condition limite de Dirichlet de l'équation de transport s'écrit:

$$C=C_d(x_b, y_b) \quad 3.69$$

3.5.2 Condition frontière de Neuman

◆ Équation de continuité:

La condition frontière de Neuman peut s'écrire:

$$\frac{\partial h}{\partial x} = 0 \quad (\text{sur BC et LA}) \quad 3.70$$

$$-\bar{n} \cdot K \cdot \left(\frac{\rho_0}{\rho} \nabla h + \nabla z \right) = (V_r + V_e) \cdot n_z \quad (\text{sur EFG et JKL}) \quad 3.71$$

◆ **Équation de transport**

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x} = 0 \quad (\text{sur BC et AL}) \quad 3.72$$

$$\bar{n} \cdot (\theta D \nabla \mathcal{C}) = 0 \quad (\text{sur AB, DE et EF}) \quad 3.73$$

$$\bar{n} \cdot (q \mathcal{C} - \theta D \cdot \nabla \mathcal{C}) = \bar{n} \cdot q \mathcal{C}_v \quad (\text{sur KIHF}) \quad 3.74$$

où \bar{n} est le vecteur normal à la frontière, \mathcal{C} est la concentration, \mathcal{C}_v est la concentration à la frontière, θ teneur en eau, D tenseur des coefficients de diffusion et q est le tenseur de la vitesse de Darcy

3.6 Conclusion

Rappelons ici les équations à résoudre par le code de calcul

☒ **Équation de continuité (Éq.3.18)**

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \right] + \frac{\rho}{\rho_0} F_p \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial \mathcal{C}} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} + \frac{\rho}{\rho_0} Q = 0 \quad 3.75$$

☒ **Équation de Darcy (Éq. 3.20):**

$$q_i = -K \left(\frac{\rho_0}{\rho} \frac{\partial h}{\partial x_j} + e_j \right) \quad 3.76$$

☞ *Équation de transport dans des conditions d'équilibre de sorption (Éq. 3.41):*

$$\theta R_d \frac{d_v(\mathcal{C})}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] - \lambda (\theta \mathcal{C} + \rho_s S) + (\mathcal{C} - \mathcal{C}_s) Q \quad 3.77$$

☞ *Équation de transport dans des conditions de non-équilibre de sorption (Éq. 3.57):*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta_m D_{i,j} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_j} \right] &= \theta_m R_{d_m} \frac{d_v \mathcal{C}_m}{dt} \\ &+ (\alpha + \lambda \theta_m R_{d_m} - Q) \mathcal{C}_m - Q \mathcal{C}_s \\ &- \alpha \beta e^{-(\beta+\lambda)t} \int_0^t e^{(\beta+\lambda)\tau} \mathcal{C}_m d\tau \end{aligned} \quad 3.78$$

CHAPITRE IV

SOLUTION NUMÉRIQUE

4.1. Introduction

Le code de calcul sur un modèle réalise le couplage entre un module hydrodynamique et un module de transport. L'équation hydrodynamique est résolue par une méthode de volume finis sur un maillage triangulaire. L'équation de transport est simulée par une méthode de volumes finis avec un raffinement adaptatif des maillages et une évaluation exacte du front. La simulation numérique des équations se déroule en deux étapes principales:

- la discrétisation du domaine
- la discrétisation des équations de base

4.2. Discrétisation du domaine

L'un des objectifs de ce travail est de traiter les géométries complexes qui représentent la réalité industrielle. C'est pourquoi le domaine est discrétisé selon un maillage non-structuré à éléments triangulaires, car il offre la possibilité de varier la taille des éléments au gré du comportement de l'écoulement en permettant de brusques variations de la taille des éléments pour le raffinement local.

Le domaine est donc divisé en élément triangulaire à trois noeud figure (4.1). Le volume de contrôle autour de chaque noeud est un polygone construit en joignant le centroïde de chaque triangle voisin au milieu des faces correspondant.

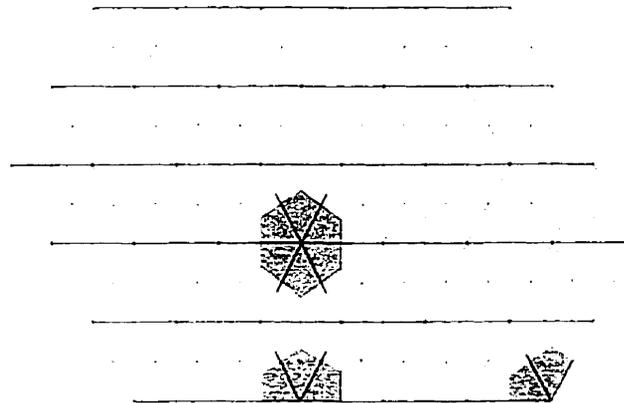


Figure 4. 1 Discretisation du domaine

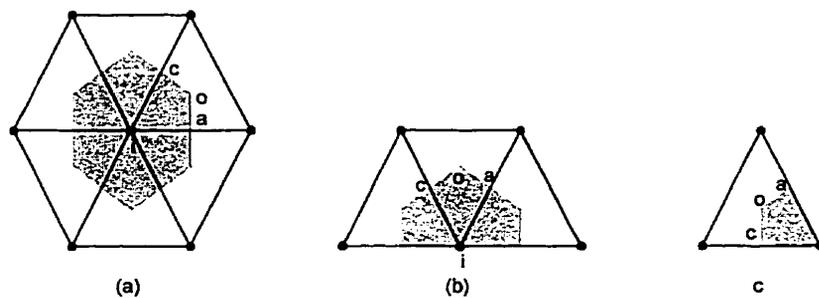


Figure 4. 2 (a) Volumes de contrôle; (b) et (c) points de calcul à la frontière

4.3. Discretisation des équations

La discrétisation des équations d'après la technique du volume de contrôle se déroule de la façon suivante:

- choix de la fonction d'interpolation
- intégration des équations sur chaque volume de contrôle , assemblage des équations élémentaires et solution du système algébrique.
- Algorithme général de calcul

4.3.1. Les fonctions d'interpolations pour, h , \mathcal{C} , D , ρ , K

4.3.1.1 Fonction d'interpolation pour h

Pour chaque élément triangulaire, la pression est interpolé linéairement

$$h = Ax + bz + C \quad 4.1$$

où les coefficients A, B et C sont déterminés à partir des pression h_1 , h_2 et h_3 des trois noeuds du triangle

$$A = \frac{[(z_2 - z_3)h_1 + (z_3 - z_1)h_2 + (z_1 - z_2)h_3]}{\det} \quad 4.2$$

$$B = \frac{[(x_3 - x_2)h_1 + (x_1 - x_3)h_2 + (x_2 - x_1)h_3]}{\det} \quad 4.3$$

$$C = \frac{[(x_2z_3 - x_3z_2)h_1 + (x_3z_1 - x_1z_3)h_2 + (x_1z_2 - x_2z_1)h_3]}{\det} \quad 4.4$$

où $\det = (x_1z_2 + x_2z_3 + x_3z_1 - z_1x_2 - z_2x_3 - z_3x_1)$ 4.5

4.3.1.2 Fonction d'interpolation pour \mathcal{C}

Pour des éléments triangulaires à trois noeuds la concentration est interpolée linéairement

$$\mathcal{C} = dx + ey + f \quad 4.6$$

Les constantes d, e et f sont déterminées en utilisant une procédure similaire à celle utilisée pour calculer les constantes A, B et C dans les équations (4.2)-(4.5).

4.3.1.3 Fonction d'interpolation pour D_{ij} , ρ et K_{ij}

On suppose que dans chaque élément la masse volumique ρ , le coefficient de diffusion D et la perméabilité K ont une valeur moyenne uniforme qui est celle calculée au centroïde.

$$D_{(i,j)m} = \frac{(D_{ij_1} + D_{ij_2} + D_{ij_3})}{3} \quad 4.7$$

$$\rho_m = \frac{(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3)}{3} \quad 4.8$$

$$K_{(i,j)m} = \frac{(K_{ij_1} + K_{ij_2} + K_{ij_3})}{3} \quad 4.9$$

4.3.2. Intégration des équations.

4.3.2.1. Intégration de l'équation de continuité

L'intégration de l'équation(3.75) sur un volume de contrôle autour du noeud de calcul (i) (figure 4.1) et les points a, c et o désignant respectivement les centres des arêtes et le centroïde des éléments voisins s'écrit:

$$\int \left[\frac{\rho}{\rho_0} F \right] \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int \left[\frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial c}{\partial \rho} \right] \frac{\partial c}{\partial t} d\Omega + \int_a^o J \cdot \vec{n} \cdot ds + \int_o^c J \cdot \vec{n} \cdot ds \quad 4.10$$

$$+ \int \left(\frac{\rho}{\rho_0} Q \right) d\Omega$$

+ (contribution des autres éléments associés au noeud i)

+ (contribution des frontières si applicable) = 0

où n est la normale extérieure à la frontière ds ; o , a et c représentent le centre de gravité de l'élément, le milieu de ce deux cotés.

avec

$$J_i = K \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\rho}{\rho_0} e_j \right) \quad 4.11$$

$$J = J_x \bar{i} + J_z \bar{j} \quad 4.12$$

où \bar{i} et \bar{j} sont les vecteurs unitaires dans le plan X, Z.

À l'aide de la fonction d'interpolation (Éq. 4.2-4.5), les composantes J_x et J_z sont facilement calculables.

$$J_x = - \left[K_{(xx)m} A + K_{(xz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right] \quad 4.13$$

$$J_z = - \left[K_{(xz)m} A + K_{(zz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right] \quad 4.14$$

L'intégrale sur chaque segment du volume de contrôle est approximée comme suit:

$$\int_a^o J \cdot \bar{n} ds = -(y_a - y_o) \left[K_{(xx)m} A + K_{(xz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right] + \quad 4.15$$

$$(x_a - x_o) \left[K_{(xz)m} A + K_{(zz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right]$$

$$\int_a^o J \cdot \vec{n} ds = -(y_c - y_a) \left[K_{(xx)m} A + K_{(xz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right] + \quad 4.16$$

$$(x_c - x_a) \left[K_{(xz)m} A + K_{(zz)m} \left(B + \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right]$$

l'intégrale des termes stationnaires $\frac{\partial h}{\partial t}$ et $\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t}$ est calculée comme suit:

$$\int \left[\frac{\rho}{\rho_0} F \right] \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int \left[\frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \rho} \right] \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} d\Omega = \left(\int \left[\frac{\rho}{\rho_0} F \right] d\Omega \right) \frac{\partial h}{\partial t} + \left(\int \left[\frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \rho} \right] d\Omega \right) \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} \quad 4.17$$

En additionnant les équations (4.15), (4.16) et (4.17), la contribution totale de l'élément 123 peut être exprimée par l'équation suivante.

$$\int \left[\frac{\rho}{\rho_0} F \right] \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int \left[\frac{\theta}{\rho_0} \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \rho} \right] \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t} d\Omega + \int_a^o J \cdot \vec{n} \cdot ds + \int_o^c J \cdot \vec{n} \cdot ds + \int \left(\frac{\rho}{\rho_0} Q \right) \cdot d\Omega \quad 4.18$$

$$= D_1 h_1 + D_2 h_2 + D_3 h_3 + D_4$$

Les processus d'intégration ci-dessus se fait pour tous les triangles voisins au point de calcul (i). En fin de compte, on aboutit à une équation du type suivant

$$c_i h_i = \sum_{\text{voisin}} c_{\text{voisin}} h_{\text{voisin}} + d_i \quad 4.19$$

4.3.2.2 Intégration de l'équation de transport avec équilibre de sorption

L'intégration de l'équation (3.41) sur un volume de contrôle autour du noeud de calcul i donne:

$$\int \theta R_d \frac{dC}{dt} d\Omega + \int_a^o J \cdot \bar{n} \cdot ds + \int_o^c J \cdot \bar{n} \cdot ds + \int S_c \cdot d\Omega \quad 4.20$$

+ (contributions des autres élément associés à i)
+ (contribution éventuelle des frontières) =0

où J représente le terme de dispersion

$$J = J_x i + J_z j = - \left(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) i - \left(D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) j \quad 4.21$$

et S_c est le terme défini par :

$$S_c = (\lambda R_d \theta - Q)C + QC_s \quad 4.22$$

À l'aide de la fonction d'interpolation, les composantes J_x et J_z sont faciles à calculer

$$J_x = -d D_{xx} - e D_{xz}, \quad J_z = -d D_{zx} - e D_{zz} \quad 4.23$$

où d et e sont donnés par les équations (4.2-4.5).

L'intégrale de l'équation (4.21), qui représente le terme diffusif de l'équation de transport est approximée comme suit. (Baliga, 1980, 1988):

$$\int_a^o J \cdot \bar{n} ds = (d D_{xx} + e D_{xz})(y_a - y_o) - (d D_{zx} + e D_{zz})(x_a - x_o) \quad 4.24$$

$$\int_o^c J \cdot \bar{n} ds = (d D_{xx} + e D_{xz})(y_c - y_o) + (d D_{zx} + e D_{zz})(x_c - x_o) \quad 4.25$$

Le terme S_c est intégré comme suit:

$$\int S_c dV = \frac{A_e}{3} [(\lambda R_d \theta - Q) \mathcal{C}_i^{n+1} + Q \mathcal{C}_s] \quad 4.26$$

Quand au terme stationnaire, il est intégré comme suit:

$$\int R_d \theta \frac{d\mathcal{C}}{dt} dV = \frac{A_e}{3} R_d \theta \frac{\mathcal{C}_i^{n+1} - \mathcal{C}_i^*}{\Delta t} \quad 4.27$$

où A_2 est l'aire du triangle 123:

$$A_e = \frac{|\det|}{2} \quad 4.28$$

où \mathcal{C}_i^* est la concentration convective.

Pour calculer la concentration \mathcal{C}^{n+1} au temps t_{n+1} , on procède en six étapes en utilisant la méthode EPCOF modifié (chapitre V):

4.3.2.3 Intégration de l'équation de transport dans la condition de non équilibre de sorption

L'intégration de l'équation (3.57) sur un volume de contrôle autour du noeud de calcul i donne:

$$\int \theta_m R_{dm} \frac{dC}{dt} d\Omega + \int_a^o J \cdot \vec{n} \cdot ds + \int_o^c J \cdot \vec{n} \cdot ds + \int S_{c_m} \cdot d\Omega + \int M \cdot d\Omega \quad 4.29$$

+ (contributions des autres élément associés à i)
+ (contribution éventuelle des frontières) =0

où J représente le terme de dispersion et S_{c_m} est le terme défini par :

$$S_{c_m} = (\alpha + \lambda R_d \theta_m - Q)C + QC_s \quad 4.30$$

le terme M est défini par

$$M = \int_0^t -\alpha \beta e^{-(\beta+\lambda)t} e^{(\beta+\lambda)\tau} C d\tau \quad 4.31$$

L'intégrale de l'équation qui représente le terme diffusif est donnée par les équations (4.24) et (4.25).

Le terme S_{c_m} est intégré comme suit:

$$\int S_c dV = \frac{A_e}{3} [(\alpha + \lambda R_d \theta_m - Q)C_i^{n+1} + QC_s] \quad 4.32$$

Le terme M est intégré comme suit:

$$\int M d\Omega = \frac{A_e}{3} (-\alpha \beta e^{-(\beta+\lambda)t_{n+1}}) S^{t_{n+1}} \quad 4.33$$

où $\mathcal{S}^{t_{n+1}}$ est défini par

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^{t_{n+1}} &= \int_0^{t_{n+1}} e^{(\beta+\lambda)\tau} \mathcal{C}_m d\tau = \int_0^{t_n} e^{(\beta+\lambda)\tau} \mathcal{C}_m d\tau + \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(\beta+\lambda)\tau} \mathcal{C}_m d\tau \\ &\equiv \mathcal{S}^{t_n} + \mathcal{S}^{t_{n+1}}\end{aligned}\quad 4.34$$

L'intégrale des termes \mathcal{S}^{t_n} et $\mathcal{S}^{t_{n+1}}$ peut être calculé par la théorème d'intégrale ou par la méthode de trapèze. Dans notre cas on a opté pour la deuxième méthode, d'ou le calcul du terme $\mathcal{S}^{t_{n+1}}$ donne:

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^{t_{n+1}} &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{(\beta+\lambda)\tau} \mathcal{C}_m d\tau \approx \frac{e^{(\beta+\lambda)t_{n+1}} \mathcal{C}_i^{n+1} + e^{(\beta+\lambda)t_n} \mathcal{C}_i^n}{2} (t^{n+1} - t^n) \\ &= \frac{\Delta t}{2} e^{(\beta+\lambda)t_{n+1}} (\mathcal{C}_i^{n+1} + e^{-(\beta+\lambda)\Delta t} \mathcal{C}_i^n)\end{aligned}\quad 4.35$$

Substituant l'équation (4.35) dans l'équation (4.33), l'intégrale de M s'écrit:

$$\int M d\Omega = \frac{A_e}{3} (-\alpha \beta) \left[\frac{\Delta t}{2} (\mathcal{C}_i^{n+1} + e^{-(\beta+\lambda)\Delta t} \mathcal{C}_i^n) \right] + \frac{A_e}{3} [(-\alpha \beta e^{-(\beta+\lambda)t})] \mathcal{S}^{t_n} \quad 4.36$$

Quand au terme stationnaire, il est intégré comme suit:

$$\int R_{d_m} \theta \frac{d\mathcal{C}}{dt} d\mathcal{V} = \frac{A_e}{3} R_{d_m} \theta \frac{\mathcal{C}_i^{n+1} - \mathcal{C}_i^*}{\Delta t} \quad 4.37$$

où \mathcal{C}_i^* est la concentration convective.

Pour calculer la concentration \mathcal{C}^{n+1} au temps t_{n+1} , on procède en six étapes en utilisant la méthode EPCOF modifié (chapitre V):

CHAPITRE V

SCHEMA NON OSCILLATOIRE AVEC EVALUATION EXACTE DU FRONT

5.1 Introduction

Les équations de l'écoulement et du transport du polluant sont couplées par les équations d'état concernant la masse volumique ρ et la viscosité dynamique μ . Le déplacement du polluant dans le milieu poreux peut modifier sensiblement les propriétés physiques des fluides dans la zone de mélange. Par conséquent, le calcul de la pression au temps $t+\Delta t$ nécessite la connaissance de l'évolution des concentrations entre les temps t et $t+\Delta t$. La méthode de résolution choisie pour ce modèle est implicite et se déroule comme suit:

- ☑ estimation des concentrations au temps $t+\Delta t$ en utilisant le méthode EPCOF $\left(\tilde{C}^{t+\Delta t}\right)$
- ☑ calcul de l'hydrodynamique
- ☑ calcul de la concentration au temps $t+\Delta t$ $\left(C^{t+\Delta t}\right)$
- ☑ vérification de l'estimation de la concentration en faisant la différence entre les concentrations estimées $\left(\tilde{C}^{t+\Delta t}\right)$ et celles calculées $\left(C^{t+\Delta t}\right)$
- ☑ si la différence maximale est supérieure à un seuil de tolérance fixé, ce processus itératif est repris en fixant $\left(\tilde{C}^{t+\Delta t}\right)=\left(C^{t+\Delta t}\right)$ jusqu'à convergence.

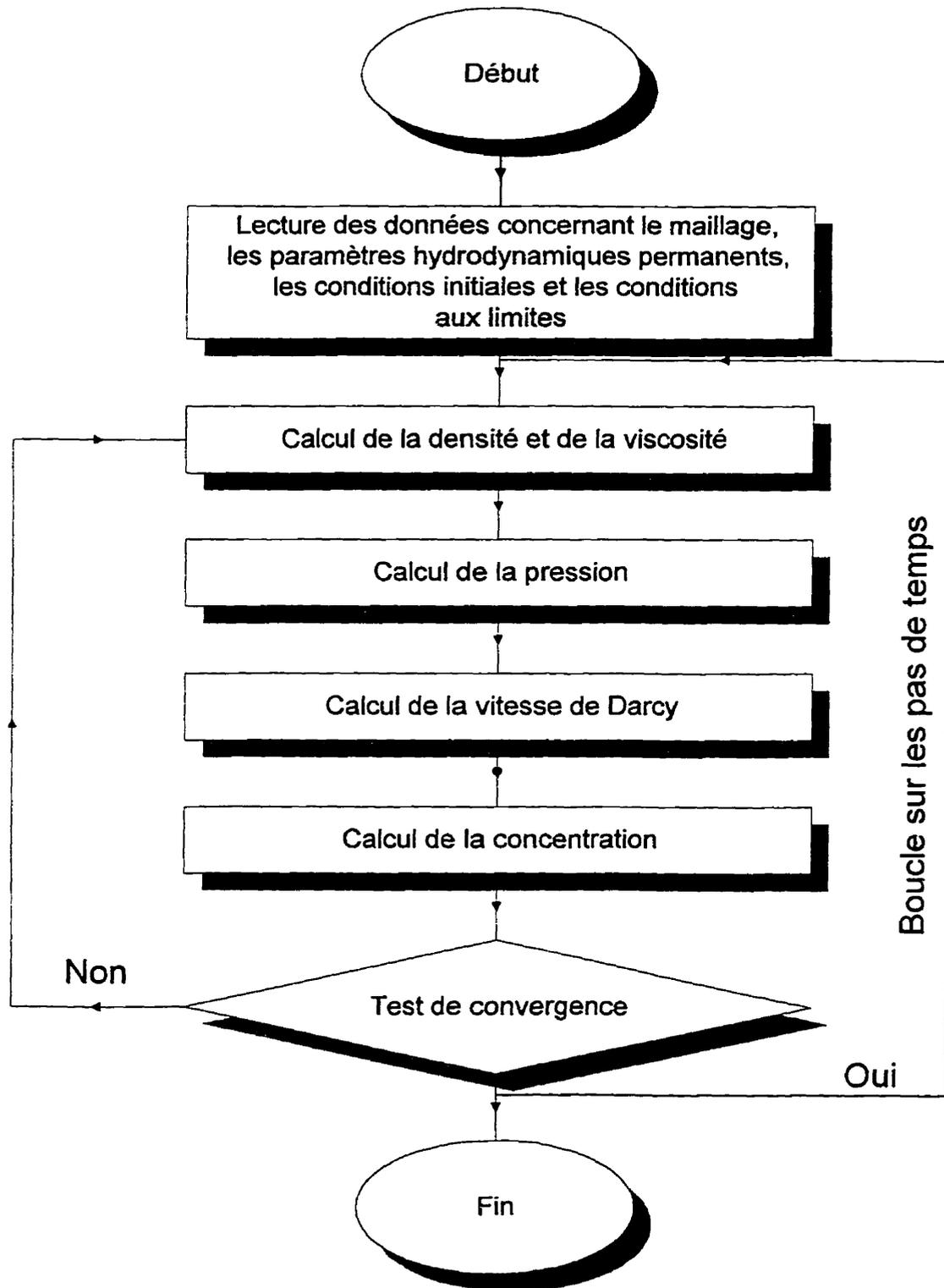


Figure 5. 1 L'organigramme du code de calcul

Étant donné que l'échelle de temps propre au transport de polluants dans le milieu des eaux souterraines peut être de l'ordre de quelques années, il est important que le schéma utilisé pour la simulation possède des qualités de dispersion numérique minimales. C'est pourquoi l'attention s'est portée aux méthodes lagrangiennes et particulièrement sur le schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front "*An exacte Peak Capturing and Oscillation-free Scheme*"(EPCOF).

L'objectif de ce chapitre est de présenter la technique EPCOF, de mettre en évidence ses avantages et ses inconvénients, et de montrer son intérêt par rapport à d'autres méthodes, pour la simulation de la contamination des eaux souterraines

5.2 Caractérisations des problèmes numériques

Le transport d'un contaminant, lorsqu'il est considéré comme un marqueur de l'eau, est modélisé par une équation de convection dispersion:

$$\overbrace{\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t}}^{\text{terme instationnaire}} + \overbrace{u_i \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_i}}^{\text{terme convectif}} = \overbrace{D \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial x_i \partial x_i}}^{\text{terme dispersif}} \quad 5.1$$

où \mathcal{C} représente la concentration, u_i la vitesse moyenne réelle de l'eau dans les pores et D le coefficient de dispersion, généralement déterminé à l'aide de la relation suivante:

$$D = \alpha u \quad 5.2$$

avec α le coefficient de dispersivité et u la vitesse moyenne réelle de l'eau dans les pores.

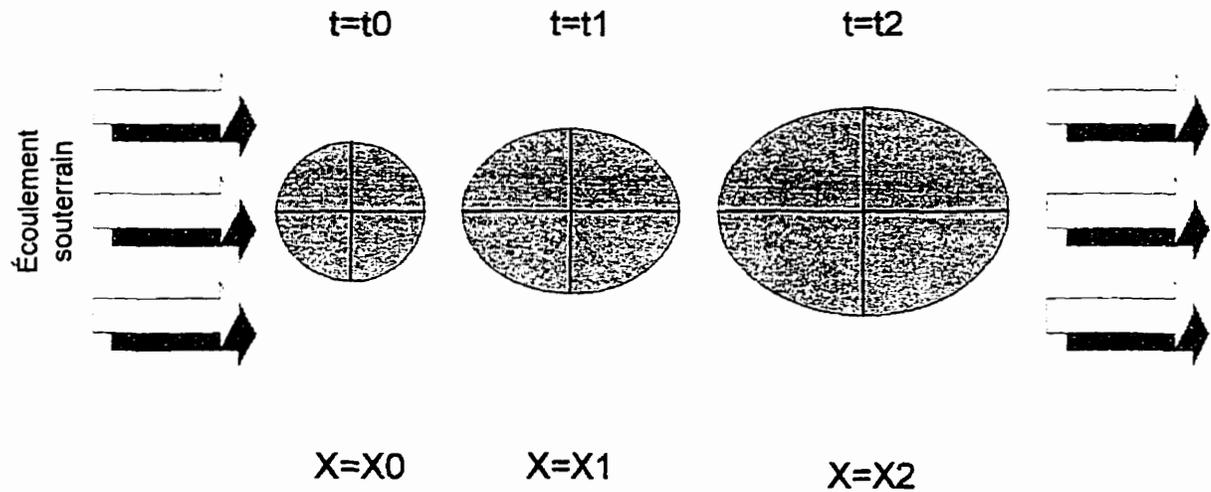


Figure 5. 2 Transport d'un contaminant à travers le milieu poreux

Le premier terme représente la variation de la concentration dans le temps en un point donné. Le second, le terme convectif, représente le déplacement du contaminant par advection, c'est à dire à la même vitesse et dans la même direction que l'eau souterraine. Le contaminant dissous est transporté par le fluide en mouvement, les particules de contaminant se comportant comme des particules d'eau (figure 5.2). Si l'advection était le seul phénomène présent, l'eau contaminée se propagerait en translation pure dans l'aquifère à une vitesse égale à celle de l'eau dans les pores. En réalité, en s'éloignant du lieu d'injection, les particules de substance (traceur) en solution dans l'eau s'éparpillent par mélange et s'étalent pour occuper un volume croissant, ce qui fait que la concentration décroît (figure 5.2). Cette dispersion du soluté résulte de l'action simultanée de deux phénomènes:

☑ La diffusion moléculaire

C'est un phénomène physico-chimique, il résulte de l'agitation thermique des molécules et prendrait place même en l'absence d'écoulement.

☑ La dispersion cinématique (ou dispersion mécanique pure)

C'est un phénomène de mélange essentiellement dû à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques. Il est dû principalement à trois facteurs (Fried et Combarous, 1971):

- ◆ dans un capillaire, le profil des vitesses est parabolique (figure 5.3a);
- ◆ les dimensions variables des pores ont pour conséquence une variation des vitesses d'un pore à l'autre, ou au sein du même pore (figure 5.3b);
- ◆ Les lignes de courant fluctuent par rapport à la direction principale de l'écoulement (figure 5.3c).

Ces deux processus agissent simultanément et tendent à séparer deux particules de fluide initialement voisines.

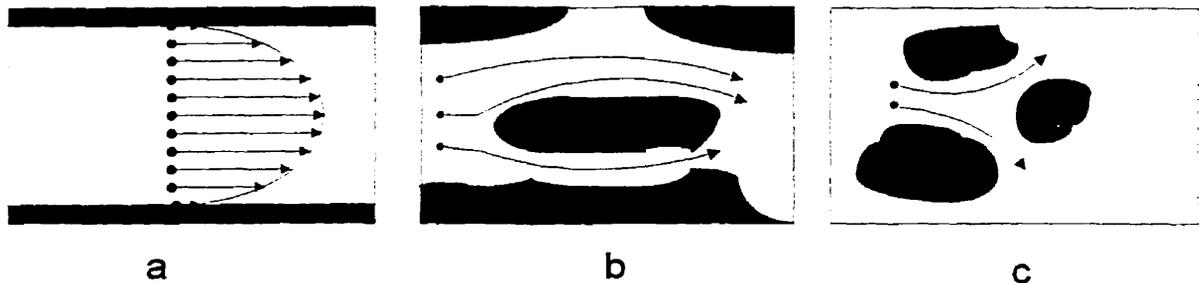


Figure 5. 3 Effets de la dispersion cinématique

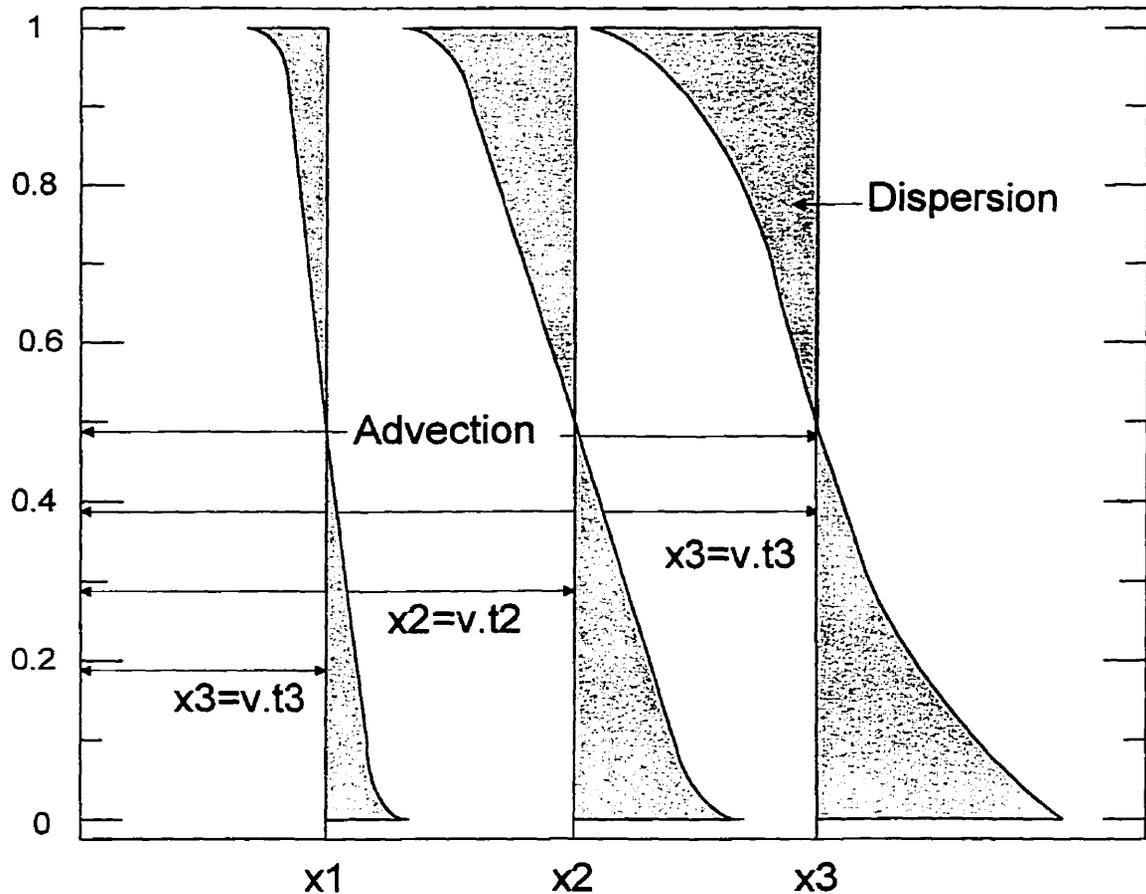


Figure 5. 4 Courbe de distribution de la concentration dérivé à partir de l'équation de convection dispersion

La résolution numérique de l'équation (5.1) génère une solution discrète dans le temps et l'espace. La représentativité de ces résultats dépend des caractéristiques physiques (champ de vitesse, coefficient de dispersion) du domaine modélisé ainsi que de la façon de discrétiser ce domaine. Le choix de la méthode de résolution est dicté par la combinaison des caractéristiques du domaine et de la grille de calcul. Cette combinaison peut être caractérisée à l'aide de deux nombre sans dimension. Il s'agit des nombres de Courant et de Péclet.

$$C_r = \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad \text{et} \quad P_e = \frac{U \cdot \Delta x}{D} \quad 5.3$$

- Le nombre de Péclet, qui quantifie en quelque sorte l'importance relative des phénomènes d'advection et de dispersion, à l'échelle de la grille de calcul. Quand P_e est petit, la dispersion est dominante l'équation est parabolique. Quand P_e est grand la convection est dominante et l'équation commence à avoir un caractère hyperbolique.
- ◆ Le nombre de Courant mesure le nombre de mailles de la grille de calcul qu'une particule du fluide parcourt en un pas de temps.

Les méthodes numériques usuelles employées pour résoudre l'équation d'advection dispersion peuvent être séparées en deux catégories (Simon, 1990, Mouchel et al., 1990): Les schémas aux différences finies et les méthodes aux caractéristiques.

5.2.1 Schémas aux différences finies

La plupart des schémas aux différences finies explicites sont limités à des problèmes où $C_r \approx 1$ pour des raisons de stabilité numérique. Ces contraintes sont particulièrement gênantes dans le cas d'une simulation à long terme. Pour faire face à ces difficultés, diverses méthodes implicites ont été proposées. Mais pour une bonne précision, le pas de temps ne peut être relativement grand. Comme la contamination par les lixiviats peut s'étendre sur des années, ceci entraîne une durée de calcul prohibitif.

De plus, aux forts nombres de Péclet (P_e), lorsque l'advection est plus importante que la dispersion, les schémas aux différences finies qui évitent une forte dispersion numérique provoquent des instabilités. Pour éviter que les fronts de concentration ne s'écrasent, ces schémas génèrent des concentrations trop fortes ou trop

faibles immédiatement à l'amont ou à l'aval du front (Mouchel et al., 1990): Le dosage entre les deux contraintes (stabilité et dispersion numérique) est très délicat ce qui fait que ces schémas ne sont pas facilement utilisables, ni adaptables à des situations complexes comme l'évolution des contaminants dans des situations géographiques étendues et hétérogènes.

5.2.2 Schémas aux caractéristiques

Les schémas aux caractéristiques reposent sur l'approximation suivante: l'advection et la diffusion, qui sont des processus physiques simultanés, sont traitées comme si elles se produisaient successivement à l'intérieur d'un pas de temps. Ces schémas ne souffrent pas d'instabilité mais de dispersion numérique due aux lissages des concentrations causés par un grand nombre d'interpolations. Un schéma similaire aux techniques des caractéristiques a été mis au point il y a quelques années. Ce schéma combine les méthodes d'Euler et de Lagrange (ELM). Elle est d'un maniement simple et évite certains des problèmes et des limitations sur les pas de temps et d'espace. La technique lagrangienne a été considérée durant ces deux dernières décennies comme la méthode la plus précise pour résoudre l'équation d'advection dispersion. Dans cette méthode, l'équation d'advection dispersion est découplée en utilisant la dérivée lagrangienne, (Neuman, 1981)

$$\frac{d}{dt} [] = \frac{\partial}{\partial t} () + u \frac{\partial}{\partial x} () \quad 5.4$$

L'équation (5.1) peut s'écrire sous la forme lagrangienne:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad 5.5$$

La dérivée $\frac{d\mathcal{C}}{dt}$ indique que le changement de la concentration (\mathcal{C}) pendant le pas de temps est calculé le long de la caractéristique définie par:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad 5.6$$

où

$$\frac{d\mathcal{C}}{dt} = \frac{\mathcal{C}^{n+1} - \mathcal{C}^*}{\Delta t} \quad 5.7$$

Pour calculer la concentration lagrangienne \mathcal{C}^* au temps t^{n+1} au noeud (i) (point M) on procède comme suit:

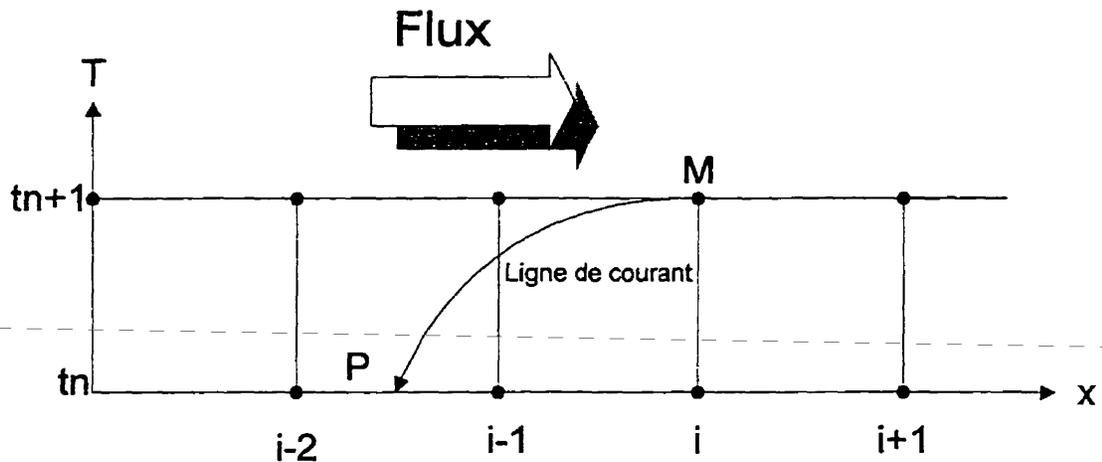


Figure 5. 5 Principe de la technique lagrangienne à 1D

- On cherche P tel que la caractéristique passant par M en t^{n+1} , passe par P en t^n . Pour cela il faut intégrer l'équation (5.6)

$$\int_P^M dx = \int_{t^n}^{t^{n+1}} u \cdot dt \quad 5.8$$

- En général le pied de la caractéristique (P) ne coïncide pas avec les noeud fixes de la grille de calcul. Par conséquent une interpolation doit être utilisée pour obtenir la valeur de concentration de Lagrange $C^*(M)=C(P, t^n)$. La figure (5.5) montre que la concentration en P est obtenue par interpolation linéaire de la concentration en i-2 et i-1.

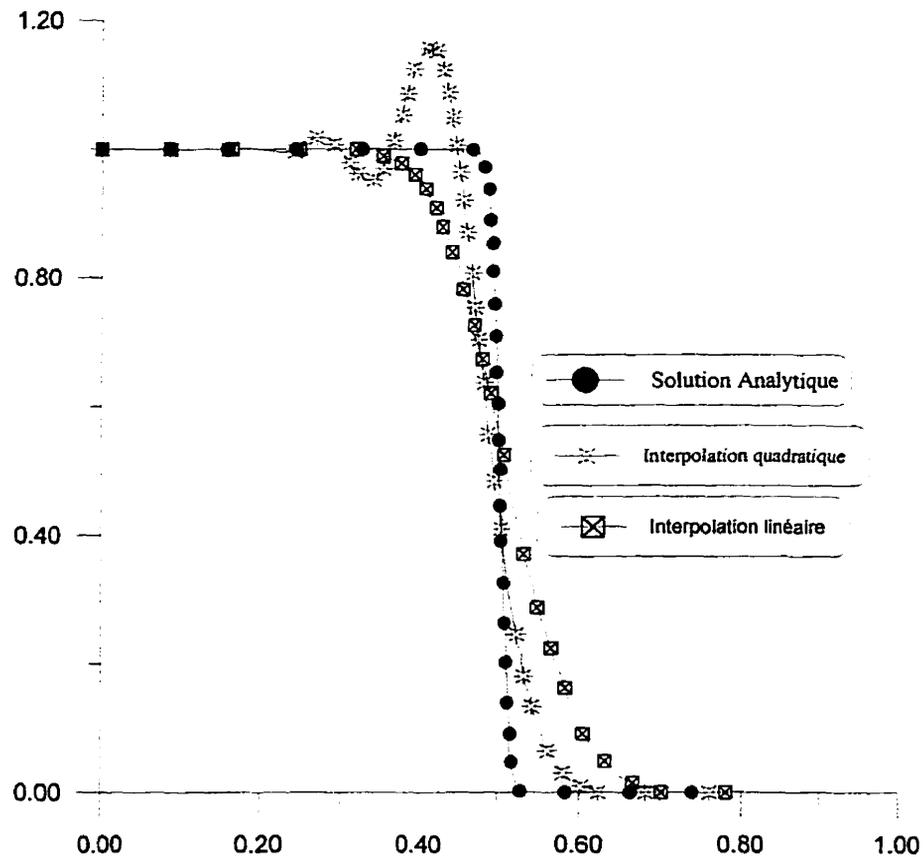


Figure 5. 6 Courbe de distribution de la concentration dérivé à partir de l'équation de convection dispersion (Fredj, 1994)

Il est donc clair que la précision du schéma dépend essentiellement de la formule et de l'ordre d'interpolation. En effet une interpolation d'ordre supérieur à un réduit considérablement la diffusion numérique mais elle peut générer des oscillations numériques, (voir figure 5.6) (Baptista et al, 1984, Baptista, 1987, Cassuli, 1992; Fredj et Kahawita, 1994). Par contre, une interpolation de premier ordre, réduit les oscillations numériques mais sa capacité de réduire la diffusion numérique dépend de la taille du maillage et du pas de temps utilisé (Fredj et Kahawita, 1994; Yeh, 1992).

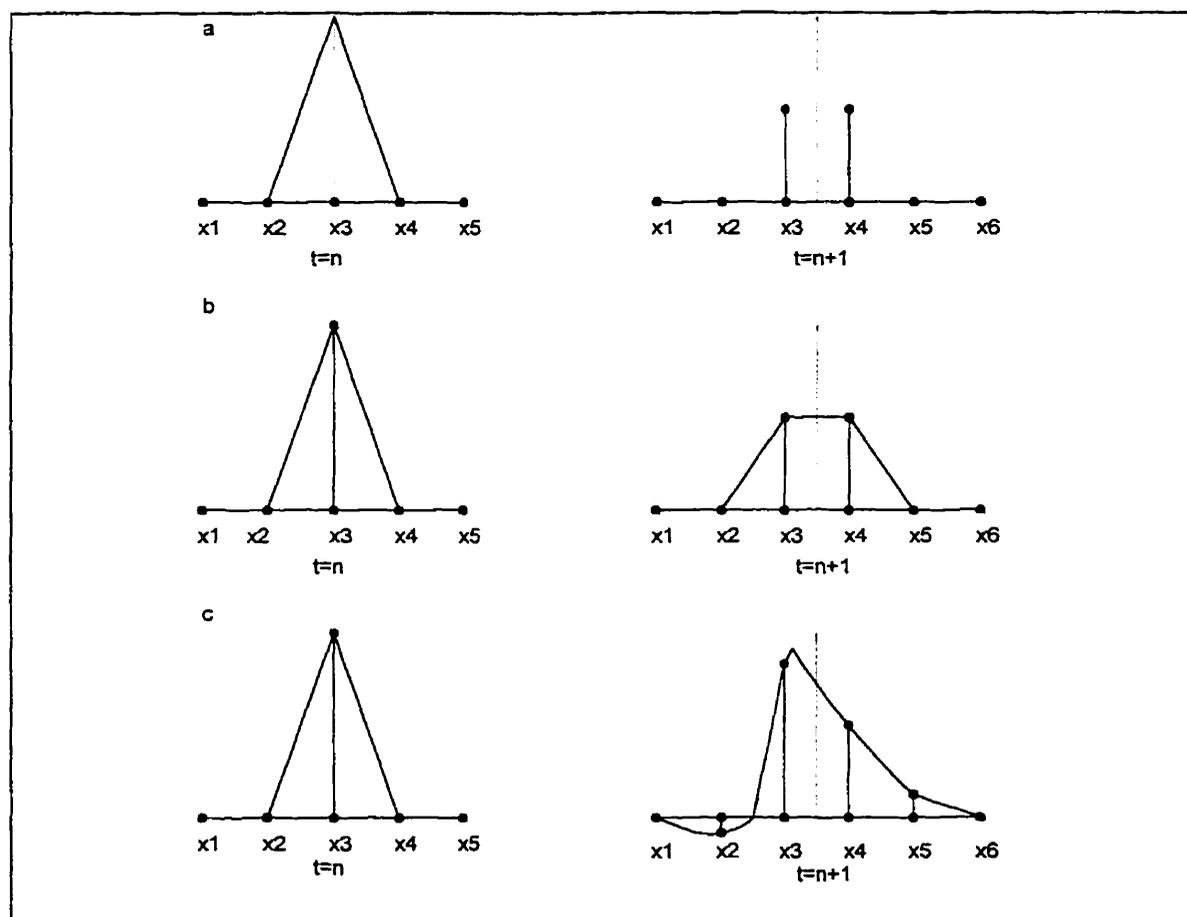


Figure 5. 7 Les problèmes numériques causé par la résolution des termes convectifs: (a) perte de front (pic), (b) diffusion numérique, (c) oscillations numériques (Yeh, 1992)

Ces problèmes d'interpolations engendrent une atténuation des pics ou des fronts de concentration lors de calcul purement convectif. Ce phénomène est connu dans la littérature comme étant le "*peack clipping*". (Yeh, 1992) considère qu'il s'agit de la plus importante cause de dispersion numérique dans la méthode. La figure (5.7) présente un exemple de concentration pour illustrer cette situation. Pendant un intervalle de temps Δt , la distribution de la concentration se déplace d'une certaine distance $V.\Delta t$, généralement $V\Delta t/\Delta x$ n'est pas un entier ce qui veut dire qu'après un pas de temps Δt un noeud projeté vers l'avant n'a pas atteint un autre noeud fixe de la grille (figure 5.7a à droite). Au temps t_n le front (pic) de concentration est localisé au noeud 3. Après le calcul des termes convectifs, le pic de concentration au temps t_{n+1} n'est plus localisé en un noeud de domaine mais il est situé entre le noeud 3 et 4 , le pic n'est alors plus observable, ce qui revient a dire que nous avons perdu le pic (figure 5.7a à droite). La perte de pic de concentration doit être compensée afin de satisfaire la conservation de la masse dans le schéma numérique. Cette compensation de la perte du pic se manifeste par le développement d'une dispersion numérique (figure 5.7b à droit) ou par des oscillations numériques (figure 5.7c à droit), cela dépend essentiellement du schéma utilisé (yeh and Chang, 1992).

Pour palier au "*peack clipping*" et aux aberrations numériques qu'il génère, (Yeh 1992) a proposé une nouvelle méthode de résolution à une dimension. Cette méthode est basée sur le traitement distinct des termes convectifs et diffusifs par un schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du *front* "*An exact Peak Capturing and Oscillation-free Scheme*"(EPCOF), qui consiste à:

- découpler l'équation de convection-dispersion;
- utiliser une technique de suivi des particules arrière "*Backward tracking method*";

- ☑ utiliser une technique de suivi des noeuds avant “Forward node tracking”
- ☑ utiliser un raffinement adaptatif des maillages “*Adaptive local grid refinement*” (ALGR).

5.3 Schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front à 1D

Pour mieux comprendre la procédure de calcul de l'algorithme de calcul, définissons tout d'abord deux termes, un élément lisse “smooth” et élément raide ou cassé “rough”.

- **Un élément lisse** est un élément dont la valeur, comme la concentration en tout point du domaine simulé peut être calculée exactement à partir de ses valeurs aux noeuds selon une fonction clairement définie sur l'ensemble du domaine.
- **Un élément raide ou cassé**, est défini comme étant un élément où il existe au moins un point où la concentration ne peut pas être directement déterminé à partir des valeurs aux noeuds.

La figure (5.8) montre un domaine de calcul composé de 3 éléments et de 4 noeuds globaux: x_1 , x_2 , x_3 et x_4 . La distribution de la concentration C_i^n au temps t_n est présentée à la figure (5.8). Il est clair qu'une interpolation linéaire de la concentration entre les 4 noeuds globaux ne peut être utilisée, pour décrire exactement la concentration initiale (C_i^n) du domaine. La concentration exacte dans les éléments 1 et 3 peut être interpolée linéairement entre les noeuds 1-2 et 3-4 respectivement, ces éléments sont considérés lisses. Par contre, l'interpolation de la concentration (C^*) dans l'élément 2 à partir de la concentration 2 et 3 produit une grande erreur car la

variation de la concentration dans l'élément 2 n'est pas linéaire, l'élément (2) est dit raide.

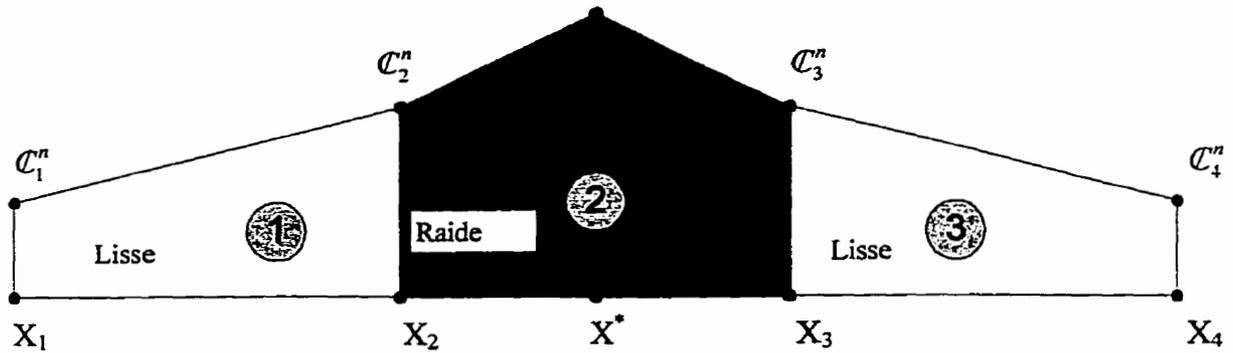


Figure 5. 8 Définition d'un élément lisse et raide

5.3.1 Intégration de l'équation de convection diffusion

L'algorithme EPCOF peut être utilisé en conjonction avec les méthodes de différences finies, d'éléments finis ou de volumes finis.

L'équation différentielle qui régit le phénomène de convection diffusion peut être écrite comme suit:

$$\frac{dC}{dt} + \nabla \cdot \bar{J} = 0 \quad 5.9$$

où J comprend le terme de diffusion.

La dérivée lagrangienne est calculée par (Neuman, 1984)

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C^{n+1} - C^*}{\Delta t} \quad 5.10$$

où \mathcal{C}^* est la concentration convective.

Pour calculer la concentration \mathcal{C}^{n+1} au temps t_{n+1} , on procède en quatre étapes (Yeh et al., 1992):

- ♦ **première étape:** On calcule la valeur de la concentration Lagrangienne (\mathcal{C}^*) des noeuds globaux en utilisant la technique de suivi de particule arrière (différenciation amont)

$$\mathcal{C}_i^* = \sum_{j=1}^{N+N^a} \mathcal{C}_j^n N_j(x_i^*) \quad 5.11$$

où

$$x_i^* = x_i - \int_{t^n}^{t^{n+1}} u dt \quad 5.12$$

Ainsi une particule de chaque noeud est projetée à partir du temps précédent vers l'arrière.

- ♦ **Deuxième étape:** On utilise une technique de suivi des noeuds avant "forward node tracking" pour obtenir la concentration lagrangienne \mathcal{C}_i^f par l'équation suivante:

$$\mathcal{C}_i^f = \mathcal{C}(x_i^f, t^{n+1}) = \mathcal{C}(x_i, t^n) = \mathcal{C}_i^n \quad 5.13$$

où

$$x_i^* = x_i + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u dt \quad 5.14$$

Ainsi une particule de chaque noeud est projetée à partir du temps précédent vers l'avant

- ♦ **Troisième étape:** On détermine si un élément est raide en se basant sur le calcul de l'erreur . L'erreur est définie comme étant la différence entre la valeur de la

concentration lagrangienne interpolée C_i^a et la valeur exacte de la concentration lagrangienne C_i^f pour tous les “forward tracked nodes”

$$C_i^a = \sum_{i=1}^N C_i^* N_i(x_i^f) \quad 5.15$$

L'élément sera considéré raide si les relations suivantes ne sont pas respectées.

$$\left| \left(C_i^a - C_i^f \right) / C_i^f \right| \leq \varepsilon_1 \quad 5.16$$

$$\left| \left(C_i^a - C_i^f \right) / C_M^f \right| \leq \varepsilon_2 \quad 5.17$$

où ε_1 et ε_2 sont les tolérances d'erreur et C_M^f est la concentration maximale de l'élément.

- ♦ **quatrième étape:** Si l'élément est lisse on supprime tous les noeuds activés dans le calcul des termes dispersifs au temps t_{n+1} et dans le calcul des termes convectifs au t_{n+2} .

Après la résolution du problème de diffusion, on obtient une équation de la forme:

$$e_i C_i = \sum_{nb} e_{nb} C_{nb} + d_i \quad i = 1, 2, \dots, N, N_a \quad 5.18$$

où N est le nombre des noeuds globaux et N_a le nombre des noeuds activés.

Pour mieux comprendre l'algorithme de calcul, nous allons l'illustrer par un exemple. On suppose que notre domaine de calcul est composé de 5 éléments et de 6 noeuds globaux: x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 et x_6 . La distribution de la concentration C_i^n au temps t_n est présentée à la figure (5.9a). On suppose que la vitesse est constante $U=0.75$ m/s, $\Delta x=1$ m, $\Delta t=1$ s et le nombre de Courant $C_r=U\Delta t/\Delta x=0.75$. Il est clair qu'une interpolation linéaire de la concentration entre les 6 noeuds globaux ne peut être utilisée, pour décrire exactement la concentration initiale (C_i^n) du domaine. La concentration exacte dans les éléments 1, 3, 4 et 5 peut être interpolée linéairement entre les noeuds 1-2; 3-4 ; 4-5 et 5-6 respectivement. Par contre, l'interpolation de la concentration (C^*) dans l'élément 2 à partir de la concentration 2 et 3 produit une grande erreur car l'élément est raide. Si on raffine l'élément 2 avec 1 noeud en x_7 (on verra plus tard que ce noeud représente un noeud projeté vers l'avant à partir du temps t_{n-1}) la concentration (C^*) dans le domaine est exactement représentée par les 6 noeuds globaux et un noeud raffiné.

La première étape de l'algorithme consiste à calculer la concentration lagrangienne des 6 noeuds globaux . Ainsi, tous les noeuds x_i sont projetés vers l'arrière. En intégrant l'équation (5.12), la position de x_i^* est de 0.75 unité à gauche de x_i (Figure 5.9a). La concentration (C_i^*) est obtenue par interpolation linéaire, par exemple (C_2^*) est obtenue par interpolation des noeuds 1 et 2. Figure (5.9b) représente la distribution de la concentration lagrangienne.

Dans la deuxième étape, on utilise une technique de suivi des noeuds avant pour obtenir la concentration lagrangienne (C_i^f) en utilisant l'équation (5.13).

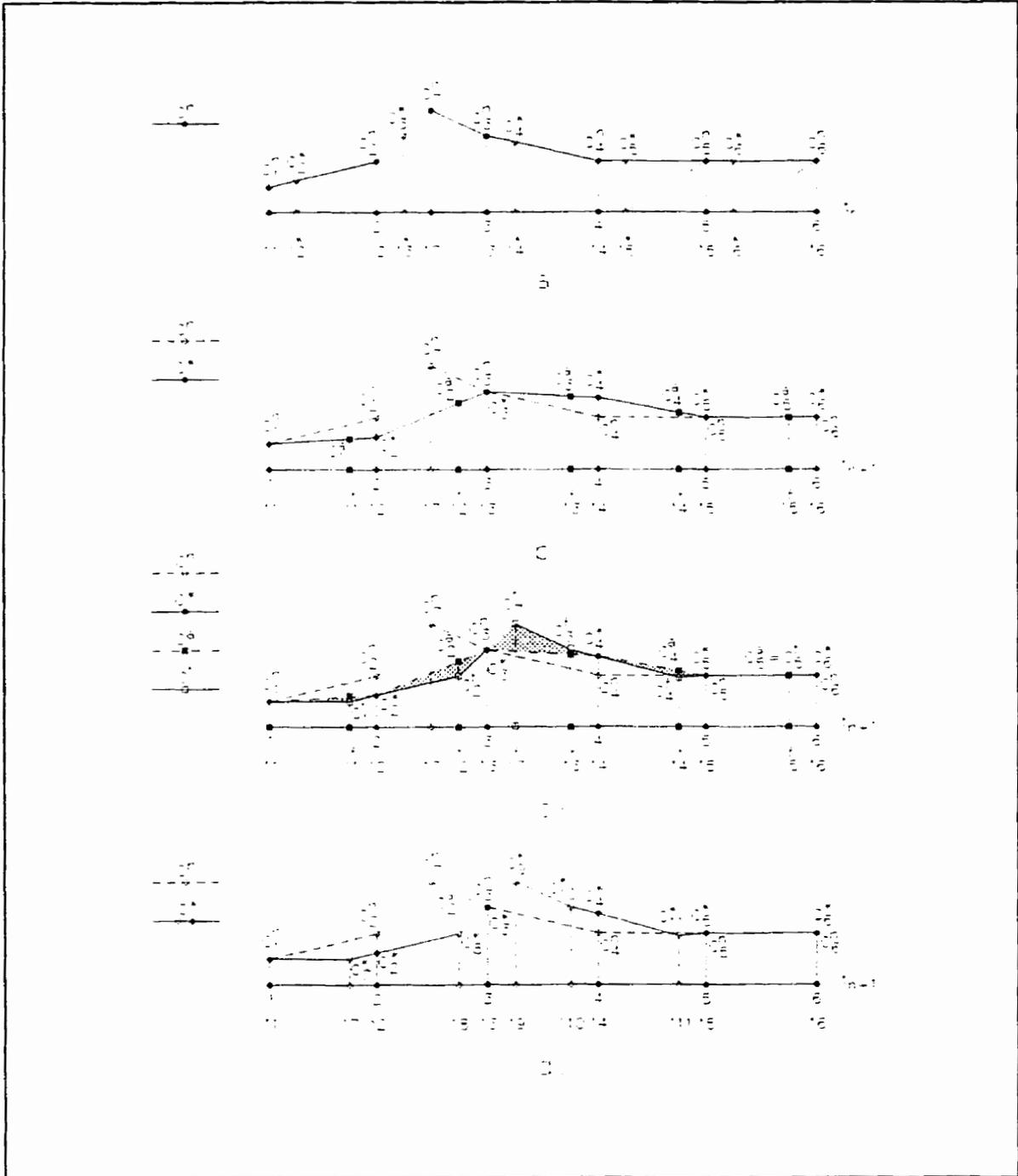


Figure 5. 9 Exemple de calcul (1D), utilisant le schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front.

Ainsi les 6 noeuds globaux et le noeud raffiné sont projetés à partir du temps précédent vers l'avant. Les concentrations $C_1^f, C_2^f, C_3^f, C_4^f, C_5^f, C_6^f$ et C_7^f aux noeuds $x_1^f, x_2^f, x_3^f, x_4^f, x_5^f, x_6^f$ et x_7^f sont égales à $C_1^n, C_2^n, C_3^n, C_4^n, C_5^n, C_6^n$ et C_7^n figure (5.9c). C_i^f est exacte si C_i^n est exacte et si l'équation (5.14) est intégrée exactement. La prochaine étape consiste à déterminer si l'élément est lisse ou raide en utilisant l'équation (5.16) et (5.17). Dans notre cas, on remarque que tous les éléments sont raides sauf l'élément 5 car C_5^f est égale à C_5^a . Le noeud x_5^f est donc supprimé. La zone hachuré (figure 5.9c) représente la différence entre la concentration lagrangienne exacte et celle interpolée. À la fin de cette étape, on se retrouve avec 6 noeuds globaux et 5 noeuds raffinés, x_7, x_8, x_9, x_{10} et x_{11} figure(5.9d) . Après la résolution du problème de diffusion, on aura 11 concentrations, $C_1^{n+1}, C_2^{n+1}, C_3^{n+1}, C_4^{n+1}, C_5^{n+1}, C_6^{n+1}, C_7^{n+1}, C_8^{n+1}, C_9^{n+1}, C_{10}^{n+1}$ et C_{11}^{n+1} . Il est à noter que le nombre de noeuds N est constant alors que le nombre de noeuds activés est variable et dépend du nombre des éléments raides présents au temps t_n .

5.3.2 Particularités: Principales difficultés

La mise en oeuvre de la méthode de résolution numérique EPCOF à 2D se heurte aux problèmes suivants (Cheng et al. 1996):

5.3.2.1 Suppression de points

Pour des raisons de vitesse de calcul et d'encombrement de la mémoire, il peut être utile de supprimer des points mobiles lorsque l'information qu'ils véhiculent a

perdu de son intérêt. La décision de suppression d'un point est fondée sur la linéarité de toutes les concentrations autour de ce point.

La suppression d'un point dans le cas d'un problème à une dimension peut être réalisé sans modifier la forme de la distribution de concentration, puisque les noeuds sont situés sur la même ligne, ce qui est extrêmement difficile dans le cas d'un problème à plusieurs dimensions.

5.3.2.2 Conservation de la forme de concentration

L'utilisation de la méthode de triangulation pour raffiner les éléments raides ne génère généralement pas une solution unique (Cheng et al. 1996).

5.3.2.3 Problème de frontières sources

Le principe du schéma consiste à suivre dans leur mouvement les points mobiles dont la concentration est connue et de déterminer tous les éléments raides afin d'évaluer exactement le front de concentration raides. L'évaluation exacte des fronts sur les frontières est impossible, lorsque le nombre de Courant est supérieur à un. Pour mieux illustrer ce dernier point, nous aborderons un exemple. Supposons que notre domaine de calcul est composé de 48 éléments et 34 noeuds globaux (figure 5.10)

La distribution de la concentration à t^n est 1 aux deux noeuds 7 et 14, et est égale à 0 aux autres noeuds. On suppose que la vitesse est constante et que le nombre de Courant est égale à 3.25 dans la direction x et est égale à 1.25 dans la direction y. Calculons les concentrations à t^{n+1} . On calcule la valeur de la concentration

lagrangienne des noeuds globaux en utilisant la technique de suivi de particule arrière (première étape).

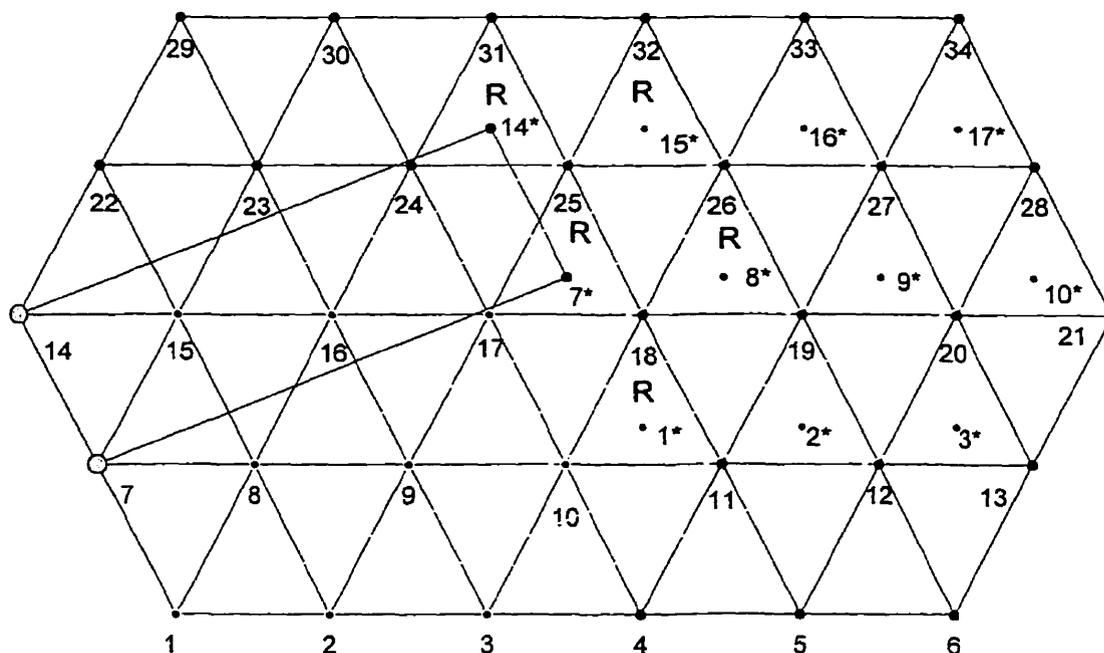


Figure 5. 10 Domaine de calcul de l'exemple de démonstration

La concentration lagrangienne est égale à 1 pour les noeuds 15, 16 et 24, entre 0 et 1 pour les noeuds 8, 9, 17, 18, 23, 25 et 0 pour tous les autres noeuds. Après la projection avant des noeuds (deuxième étape) les noeuds globaux 1, 2, 3, 7, 8, 9, 10, 14, 15, 16 et 17 sont projetés aux noeuds 1*, 2*, 3*, 7*, 8*, 9*, 10*, 14*, 15*, 16* et 17* respectivement, les autres noeuds sont projetés en dehors du domaine. Selon la démarche de l'étape 3 et les équations 5.16 et 5.17, seulement 5 éléments sont considérés raides. Ils sont marqués par un R sur la figure (5.10). Cette analyse est inexacte parce que tous les éléments autour des noeuds 15, 16, 17, 18, 24 et 25 sont des éléments raides Figure (5.11).

5.4 Schéma non oscillatoire avec évaluation exacte du front à 2D

La technique EPCOF est incontestablement la plus précise pour résoudre l'équation d'advection dispersion à une dimension, elle ne génère aucune dispersion numérique ni instabilité. Cette approche peut être appliquée aux problèmes à plusieurs dimensions en lui apportant cependant certaines modifications (Cheng et al 1996, Yeh et al 1992) afin que celle-ci soit capable de résoudre le phénomène de contamination des eaux souterraines en deux dimensions sur des maillages non structurés.

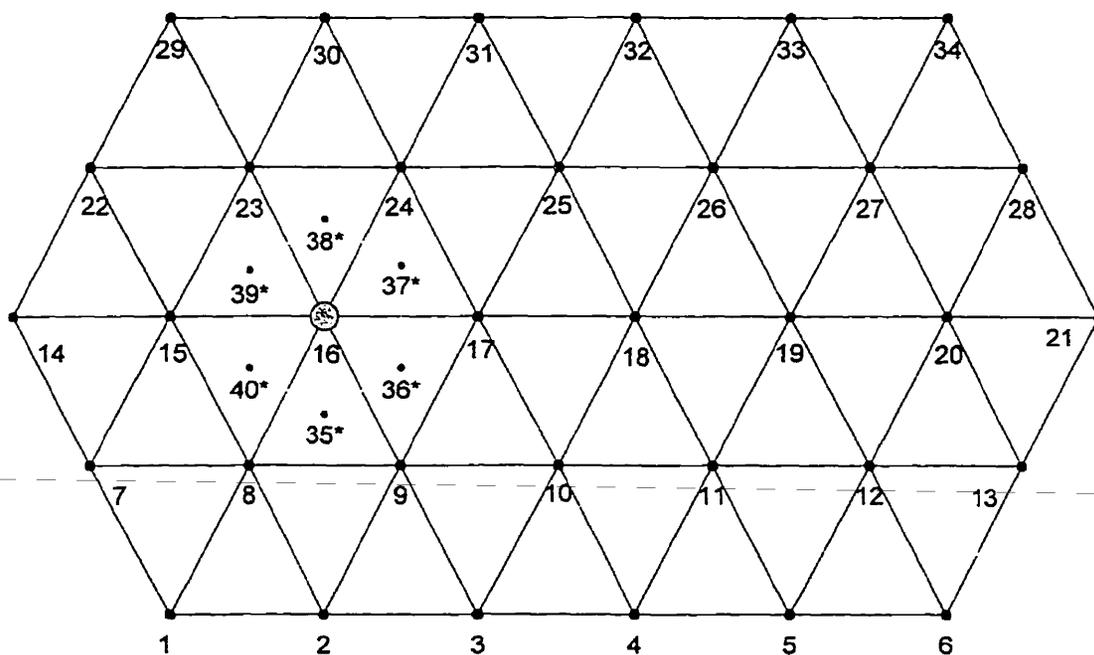


Figure 5. 12 Domaine de calcul

Pour mieux illustrer l'algorithme de calcul, nous aborderons un problème à 2D. On suppose que notre domaine de calcul est composé de 48 éléments et de 34 noeuds globaux (figure 5.12) La distribution de la concentration à t^a est 1 au noeud 16 et 0 aux autres noeuds. Les éléments autour du noeud 16 sont raffinés par un noeud au centre de

gravité (35*, 36*, 37*, 38*, 39 * et 40*) dont la concentration est nulle (figure 5.12). En suite, le domaine est discrétisé en éléments triangulaires en utilisant la technique de Delauney (figure 5.13).

Les conditions d'écoulement sont telles que le nombre de Courant est de 3.2 dans la direction x et de 0.375 dans la direction y. Ainsi sept étapes sont utilisées par le schéma EPCOF modifié pour résoudre le problème d'advection dispersion à deux dimensions.

première étape: On calcule la valeur de la concentration lagrangienne (C_i^*) des noeuds globaux en utilisant la technique de suivi de particule arrière. Ainsi, une particule de chaque noeud est projetée à partir du temps précédent vers l'arrière. Comme montré à la figure 5.13, le noeud global 19 est projeté vers l'arrière sur l'élément raide composé du noeud global 16 et des deux noeuds raffinés 40* et 35*.

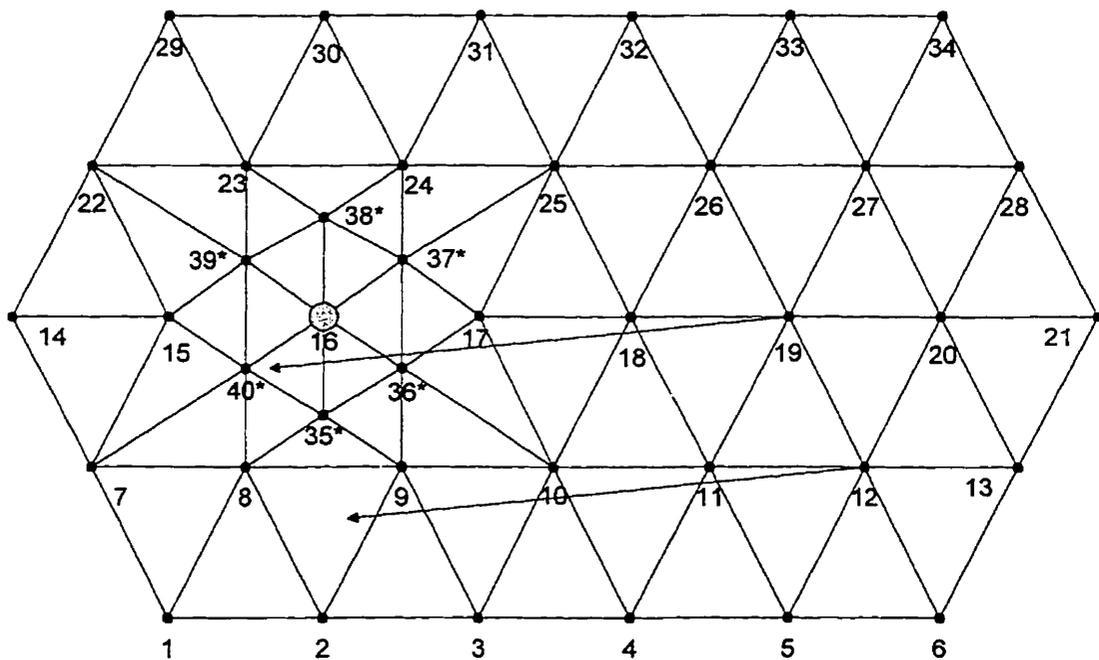


Figure 5. 13 technique de suivit de particule arriere (premiere étape)

d'erreur. Puisque C_i^f est une solution exacte sans tolérance d'erreur, elle représente donc une bonne référence pour déterminer si l'élément est lisse ou raide.

Les numéros de noeuds marqué d'une indice (') indique la position de la particule projetée vers l'avant. La concentration du noeud 7' est 0 car la concentration du noeud globale numéro 7 au temps précédent est 0. La concentration du noeud 16' est 1 puisque la concentration du noeud globale numéro 16 au temps précédent est 1. Chaque élément sur la trajectoire d'un noeud de la frontière projetée vers l'avant est marqué par la lettre B (figure 5.13)

Troisième étape: deux sous étapes sont considérées dans cette étape. La première consiste à déterminer si un élément est raide en se basant sur le calcul de l'erreur . L'erreur est définie comme étant la différence entre la valeur de la concentration lagrangienne interpolée C_i^a et la valeur exacte de la concentration lagrangienne C_i^f pour tous les noeuds mobiles (projetés vers l'avant) "forward tracked nodes".

$$C_i^a = \sum_{i=1}^N C_i^* N_i(x_i^f, y_i^f) \quad 5.22$$

L'élément sera considéré raide si les relations suivantes ne sont pas respectées.

$$\left| \left(C_i^a - C_i^f \right) / C_i^f \right| \leq \varepsilon_1 \quad 5.23$$

$$\left| \left(C_i^a - C_i^f \right) / C_M^f \right| \leq \varepsilon_2 \quad 5.24$$

où ε_1 et ε_2 sont les tolérances d'erreur et C_M^f est la concentration maximale de l'élément.

On remarque que l'équation (5.23) est inversement proportionnelle à la valeur de C_i^f .

Si C_i^f est grande elle rend l'élément lisse, si elle est petite elle rend l'élément raide.

Pour éviter ce cas, l'équation (5.24) est utilisée pour s'assurer que l'élément est lisse quand la différence $(C_i^a - C_i^f)$ est faible.

ε_1 et ε_2 sont deux erreurs relatives. Pour obtenir une solution plus juste, ε_2 doit être très faible avec une valeur 0 comme limite. Quand ε_2 est égale à 0, ε_1 seul peut déterminer si l'élément est lisse ou raide.

La deuxième sous-étape consiste à résoudre le problème des conditions frontières. On vérifie les éléments marqués par un B (figure 5.14) pour voir si un élément raide a été créé par un noeud mobile situé sur la frontière. Si c'est le cas, tous les éléments raides sont raffinés par un noeud au centre de gravité.

quatrième étape: Si l'élément est lisse, on supprime tous les noeuds activés dans le calcul des termes convectifs au t_{n+2} . Après la résolution du problème de diffusion, on obtient une équation de la forme:

$$e_i C_i = \sum_{nb} e_{nb} C_{nb} + d_i, \quad i = 1, 2, \dots, (N + N_a) \quad 5.25$$

où N: nombre des noeuds globaux

N_a nombre des noeuds raffinés

Compte tenu du nombre des éléments raides rencontrés, le nombre de points mobiles (raffinés) dans le domaine simulé devient très élevé. Pour des raisons de vitesse de calcul et d'encombrement de mémoire, il peut être nécessaire de supprimer

les noeuds raffinés (N_a) dans le calcul des termes de diffusion tout en n'affectant pas la précision des résultats. Dans ces conditions, la concentration de tous les noeuds activés à la fin du pas du temps t_{k+1} , est calculée avec l'équation suivante (Neuman, 1990; Yeh et al., 1992; Yeh et al., 1995; Cheng et al, 1996).

$$C_n^{k+1} = C_n^f + \sum_{i=1}^N (C_i^{k+1} - C_i^*) N_i(x_i^f, y_i^f) \quad 5.26$$

Sixième étape: la technique de triangulation de Delauney est de nouveau utilisée pour discrétiser le domaine formé des N noeuds globaux et des N_a noeuds mobiles dans les éléments raides (figure 5.15). Ainsi, tous les sous élément raides (figure 5.15) sont à leur tour raffinés par un noeud à leurs centre de gravité.

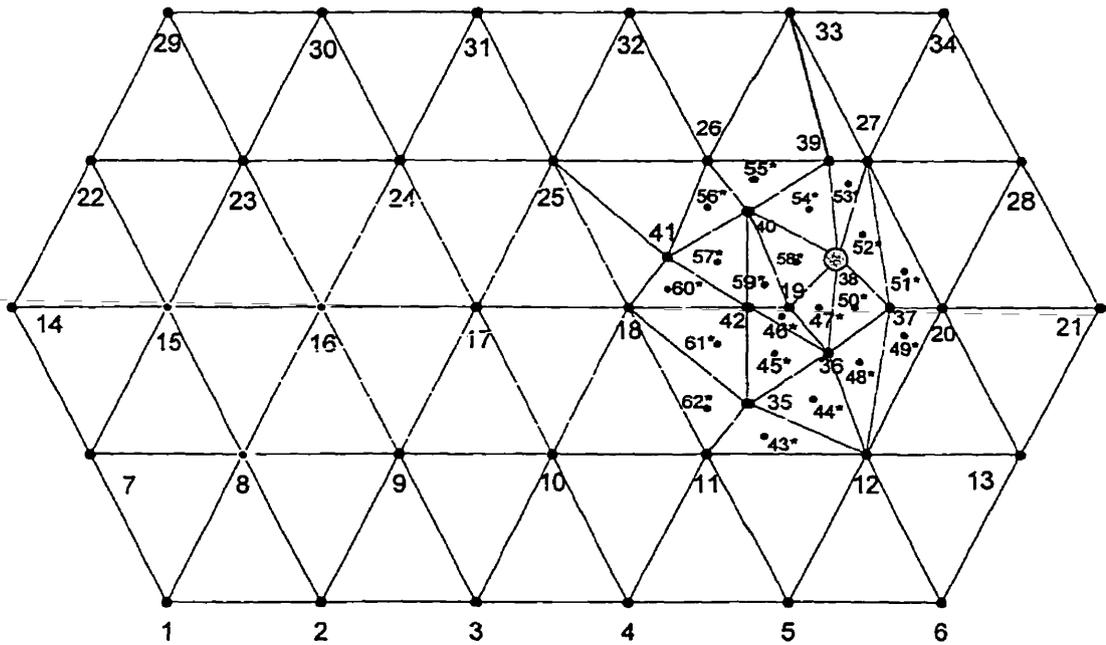


Figure 5. 15 Raffinement des éléments raides par un noeud au centre

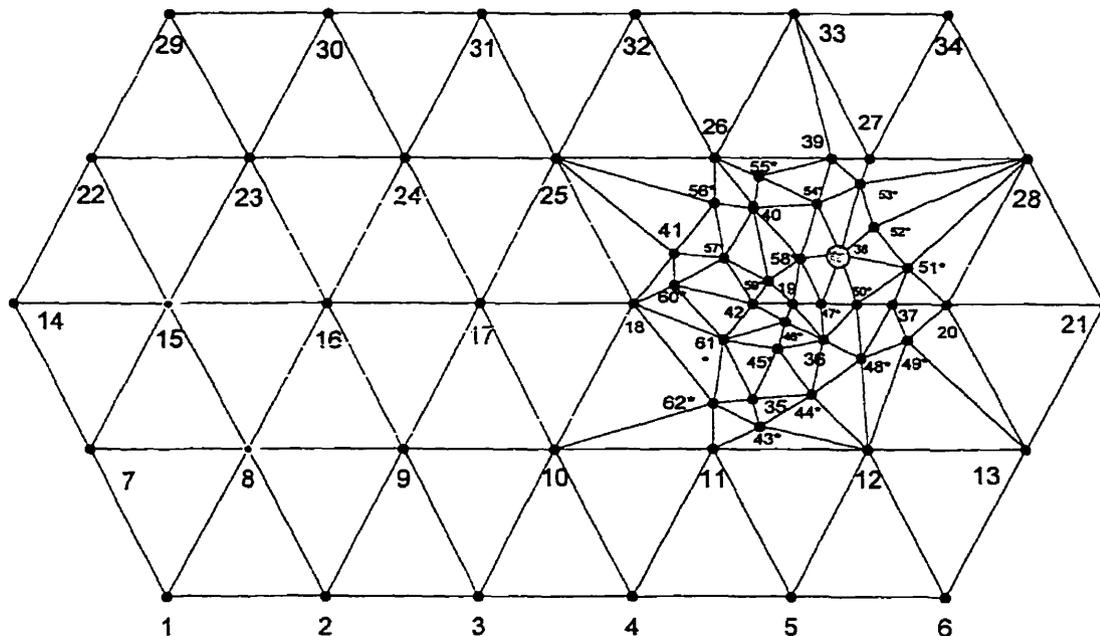


Figure 5. 16 Discretisation de domaine en utilisant la technique de Delauney

Septième étape: L'étape finale consiste à calculer la valeur de la concentration lagrangienne des nouveaux noeuds générés à l'étape 6 en utilisant la technique de suivi de particule arrière et de discrétiser le domaine de calcul raffiné comme illustré à la figure (5.16)

5.5 Technique de suivi des particules

Le principe du schéma consiste à suivre dans leurs mouvements un jeu de points mobiles dont la concentration est connue. Pour déterminer la trajectoire des particules, différentes méthodes sont disponibles. Une erreur sur la détermination de la trajectoire aura le même effet que l'ajout d'un terme de dispersion parasite. La précision peut être accrue par l'utilisation d'une des procédures d'intégration de Runge-Kutta. Des simulations numériques ont été réalisées à l'aide de l'intégration simple d'Euler et d'une méthode de Runge-Kutta à l'ordre quatre. Les résultats révèlent qu'une meilleure

précision est obtenue avec la méthode de Runge-Kutta. La performance de ce schéma d'intégration peut être illustrée à partir de l'exemple suivant:

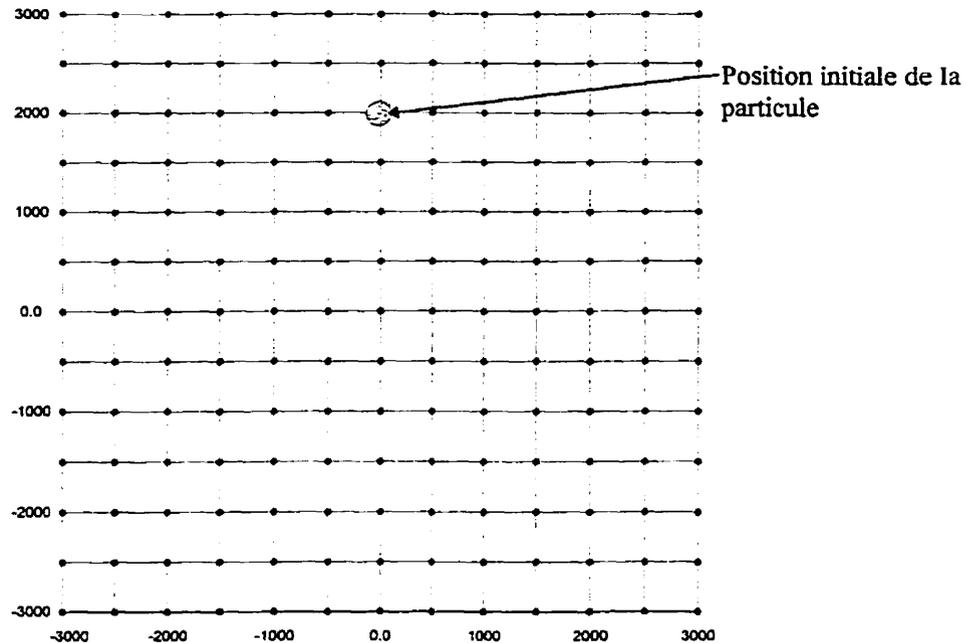


Figure 5. 17 Domaine de calcul de l'exemple de démonstration du schéma de R-Kutta

Soit un domaine de calcul $[-3000, 3000] \times [-3000, 3000]$ discrétisé en 288 éléments et 169 noeuds (figure 5.17). La distribution de vitesse est définie par l'équation suivante qui engendre une trajectoire circulaire.

$$V_x = \frac{\pi y}{500} \quad \text{et} \quad V_y = \frac{\pi x}{500} \quad 5.27$$

On suppose qu'au temps $t=0$ une particule est située au point $(0, 2000)$. Après une période de temps de 1000, la particule aura bouclé son parcours et se trouve au même point de départ $(0, 2000)$. Ceci peut être déterminé analytiquement par les relations suivantes:

$$\int_0^{x_Q} dx = \int_0^{1000} v_x dt \quad \text{et} \quad \int_0^{y_Q} dy = \int_0^{y_Q} V_y dt \quad 5.28$$

où $x_Q=0$ et $y_Q=2000$.

D'excellent résultats ont été obtenus par le schéma de Runge-Kutta en utilisant un nombre de Courant élevé ($C_r \approx 10$). La figure 5.19(a) et 5.19(b) indique la trajectoire de la particule à $t=1000$ (une période) et à $t=2000$ s respectivement. La solution obtenue coïncide avec la solution exacte. Après une période de temps de 1000, la particule aura bouclé son parcours (un cercle de rayon 2000m) et se trouver à sa position de départ (0, 2000)

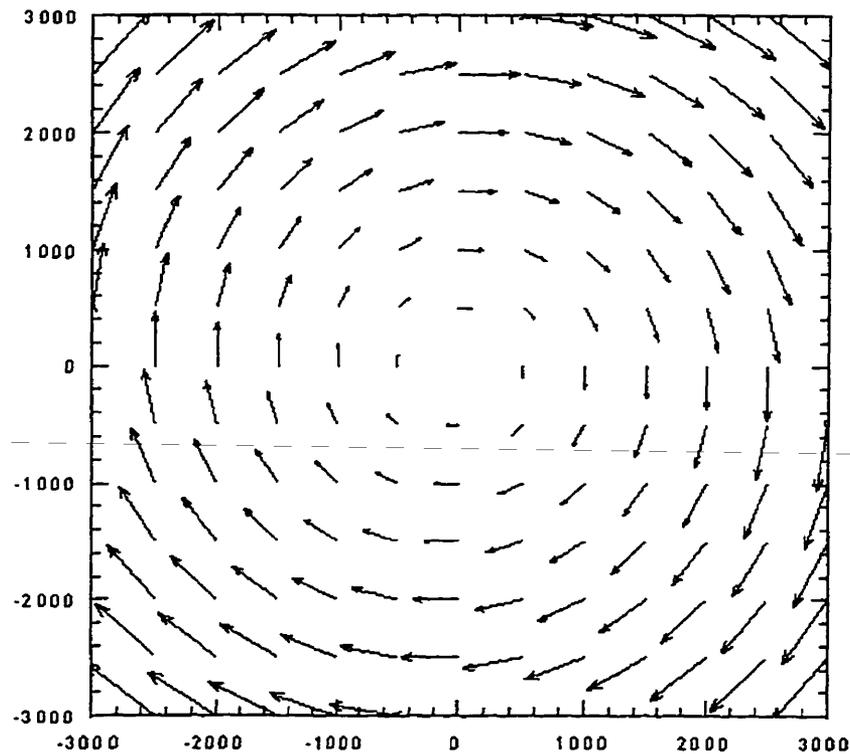


Figure 5. 18 Vecteurs vitesse

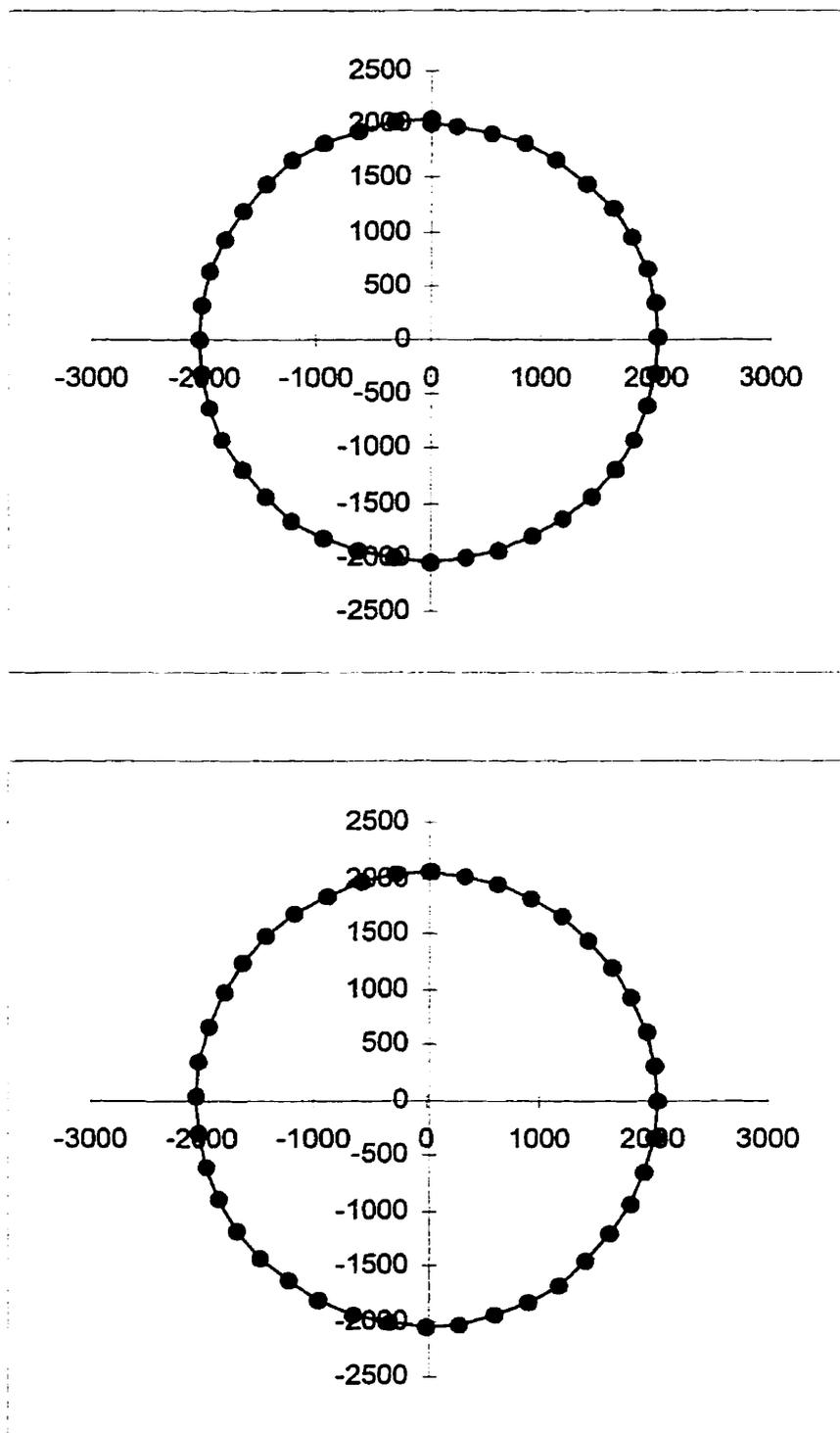


Figure 5. 19 Évolution de la position de la particule (a) $t=1000$, (b) $t=2000$

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé la méthode des volumes finis avec raffinement adaptatif des maillages et une évaluation exacte du front pour la modélisation du transport de contaminant réactif ou non réactif dans un écoulement à densité variable. Nous proposons de valider cette méthode par différents cas tests en comparant les résultats numériques obtenues avec les résultats expérimentaux ou numériques disponibles dans la littérature.

On commence par la validation du modèle d'écoulement bidimensionnels via des études numériques des transferts dans la zone non saturée, application à l'étude de recharge et/ou drainage d'une nappe. Ensuite on effectuera la simulation de contamination de la nappe souterraine.

Les cas de validation considérés sont les suivants:

1. Étude numérique des transferts bidimensionnels dans la zone non saturée, application à l'étude du drainage et de la recharge d'une nappe à surface libre (chapitre VI)
2. Modélisation de la migration d'un contaminant dense dans un milieu poreux saturé. (chapitre VII)
3. Transport d'un panache à plusieurs éléments contaminants dans un écoulement à densité variable. (chapitre VIII)
4. Modélisation de la migration des contaminants dans le site d'enfouissement Borden en Ontario (chapitre IX).

Pour chacun de ces cas, nous décrivons la géométrie, le maillage utilisé et les conditions frontières. Les résultats seront présentés sous forme de graphiques illustrant

l'évolution des paramètres les plus appropriés quand à l'interprétation des phénomènes mis en jeux. Nous serons alors en mesure d'évaluer les performances du schéma numérique utilisé et de son impact sur le phénomène physique observé.

Le code de calcul est écrit en C++, les calculs ont été effectués sur un ordinateur Compatible IBM, Pentium 133 Hz.

CHAPITRE VI

Étude numérique des transferts bidimensionnels dans la zone non saturée, application à l'étude du drainage et de la recharge d'une nappe à surface libre

6.1 Introduction

Due à la croissance de la demande d'eau pour répondre aux besoins des zones urbaines, l'habilité de prédire le taux de recharge et de drainage des nappes à surface libre est d'une importance primordiale. On doit être en mesure d'évaluer la quantité mais aussi la qualité des eaux de ces nappes. L'eau souterraine, bien quelle soit logée dans le sous-sol, n'est pas à l'abri de la pollution. Elle est de plus en plus contaminée par des polluants divers, notamment d'origine industrielle et agricole.

Ce chapitre est consacré à la validation du modèle d'écoulement via des études numériques des transferts bidimensionnels dans la zone non saturée, application à l'étude de la recharge et/ou du drainage d'une nappe à surface libre. Les équations et les modèles mathématiques utilisables pour décrire correctement ces transferts ont déjà donné lieu à des publications (Vauclin et al. 1973, Gureghian, 1983). Notons simplement que ces équations sont fortement non-linéaires à cause de la variation rapide de la perméabilité et de la succion avec teneur en eau. La mesure des transferts de masse dans la zone non-saturée est en effet très délicate suite à la présence de trois phases non-miscibles (air - eau - sol). La mesure, dans ces conditions, nécessite la mise au point de méthodes non destructives, rapides et sélectives (séparation des phases eau et air).

6.2 Recharge d'une nappe à surface libre

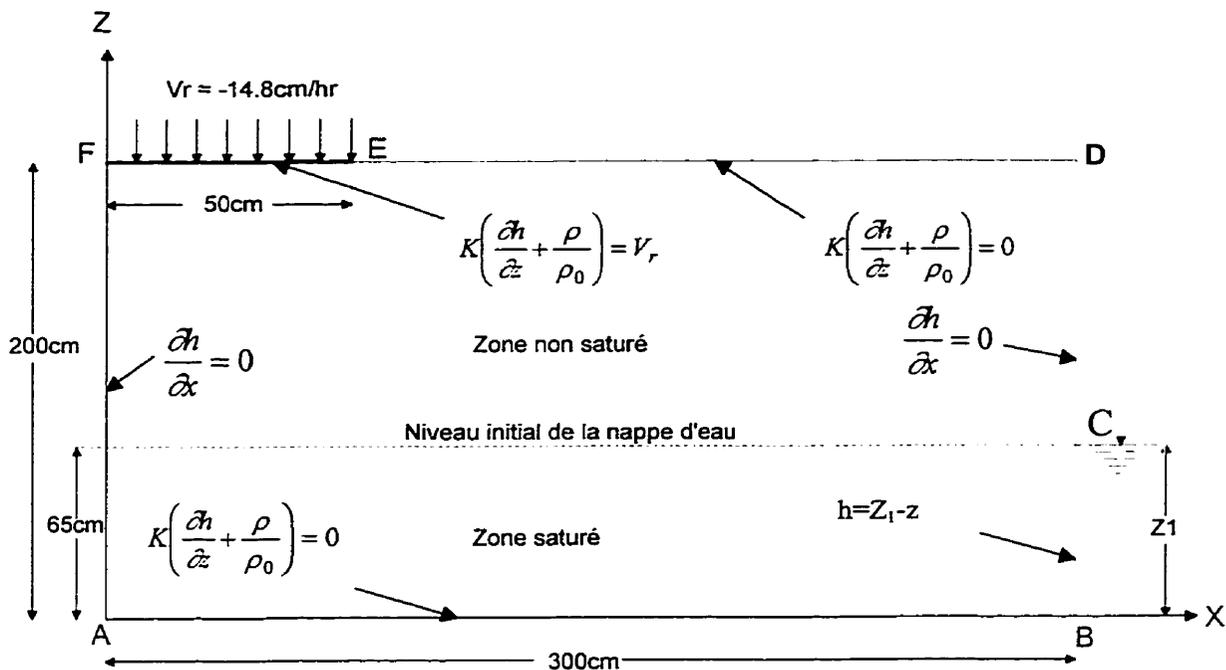


Figure 6. 1 Domaine de calcul : Application à l'étude de la recharge d'une nappe

Le premier cas étudié est la recharge d'une nappe à surface libre. Nous avons comparé nos résultats avec les résultats expérimentaux de (Vauclin et al. 1979) et les résultats numériques obtenus par (Gureghian, 1983) sous les mêmes conditions en utilisant un schéma aux éléments finis. Pour des raisons de calcul numérique, deux types de maillages ont été étudiés. Dans le premiers cas, un maillage relativement uniforme a été utilisé (figure 6.2). Dans le second (figure 6.3), le maillage a été raffiné afin obtenir plus de détails dans la région de recharge. Le domaine de calcul et les conditions frontières sont présentés à la figure (6.1). Les équations de base sont données par les équations (3.18 et 3.20), dont les conditions initiales et aux limites sont données au tableau 6.1:

Tableau 6. 1 Conditions initiales et aux limites

$h(x,z,0)$	en BC	
$K\left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0}\right) = V_r$	EF	$t \geq 0$
$K\left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0}\right) = 0$	ED et AB	$t \geq 0$
$\frac{\partial h}{\partial x} = 0$	AF et DC	$t \geq 0$
$h = Z_1 - z$	BC	$t \geq 0$

Les courbes caractéristiques du sol sont définie par la méthode de Gardner (1958) (équations 3.22 et 3.23)

$$k_r = \frac{a}{b + |h|^m}, S_w = \frac{c}{d + |h|^n}; \quad h < 0 \quad 6.1$$

$$k_r = 1, S_w = 1; \quad h \geq 0 \quad 6.2$$

où a, b (ont la même unité que h^m), c, d (ont le même unité que h^n), m, et n sont des constantes dont les valeurs sont données au tableau (6.2).

Tableau 6. 2 Paramètres de la fonction qui décrit les propriétés hydraulique du sol

a	b	c	d	m	n	K_s	ϕ (porosité)
2.99×10^6	2.99×10^6	4.0×10^4	4.0×10^4	5.0	2.9	35cm/hr	$0.3 \text{cm}^3/\text{cm}^3$

Les lignes des pressions obtenues à partir de modèle et le débit spécifique correspondant au temps 4h sont présentés aux figures (6.4 et 6.5), celles qui correspondent au temps de calcul 8h sont présentée aux figures 6.6 et 6.7. Sur ces figures, on a rapporté également la position de la surface libre.

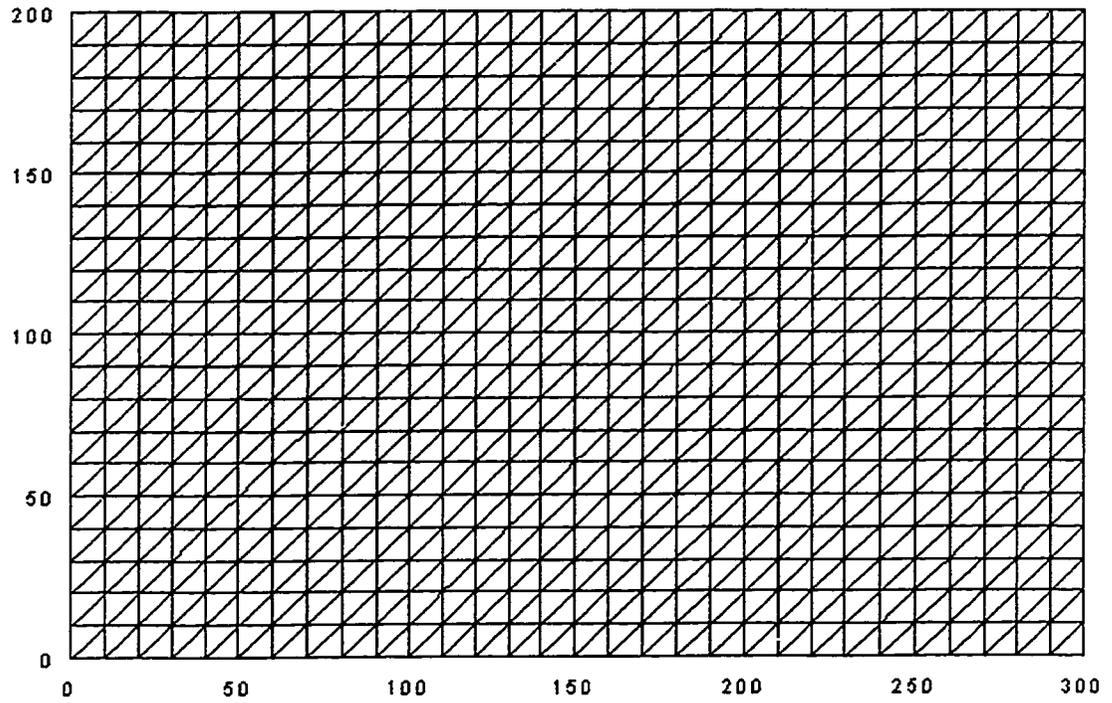


Figure 6. 2 Discrétisation du domaine (Maillage 1)

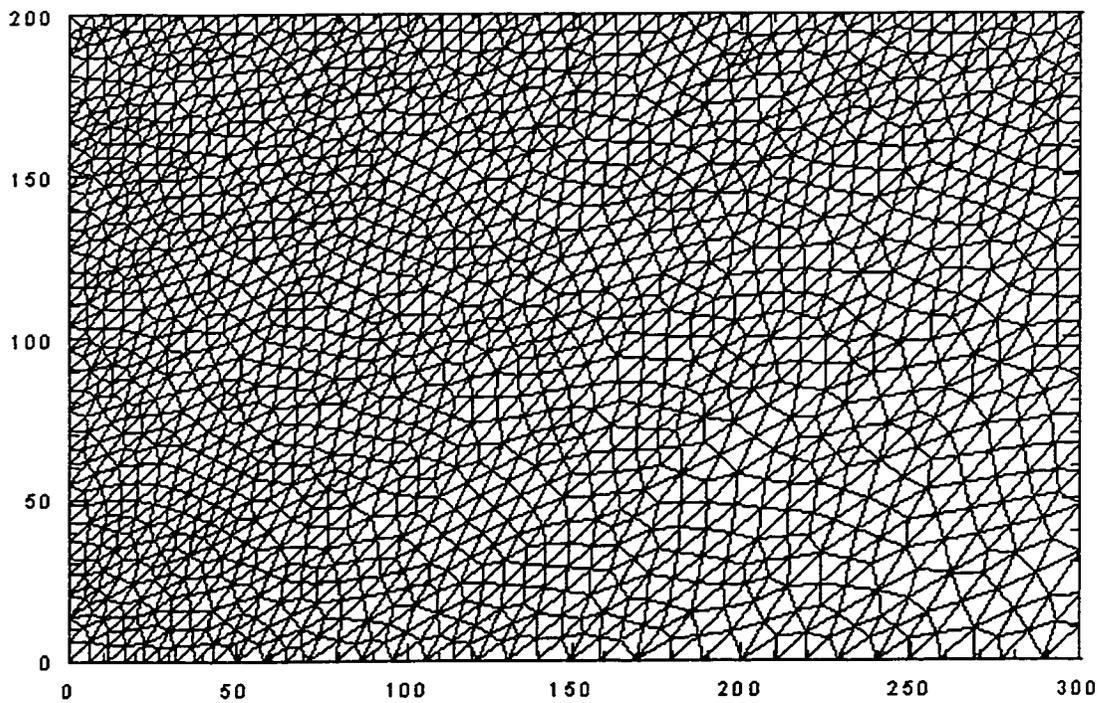


Figure 6. 3 Discrétisation du domaine (Maillage 2)

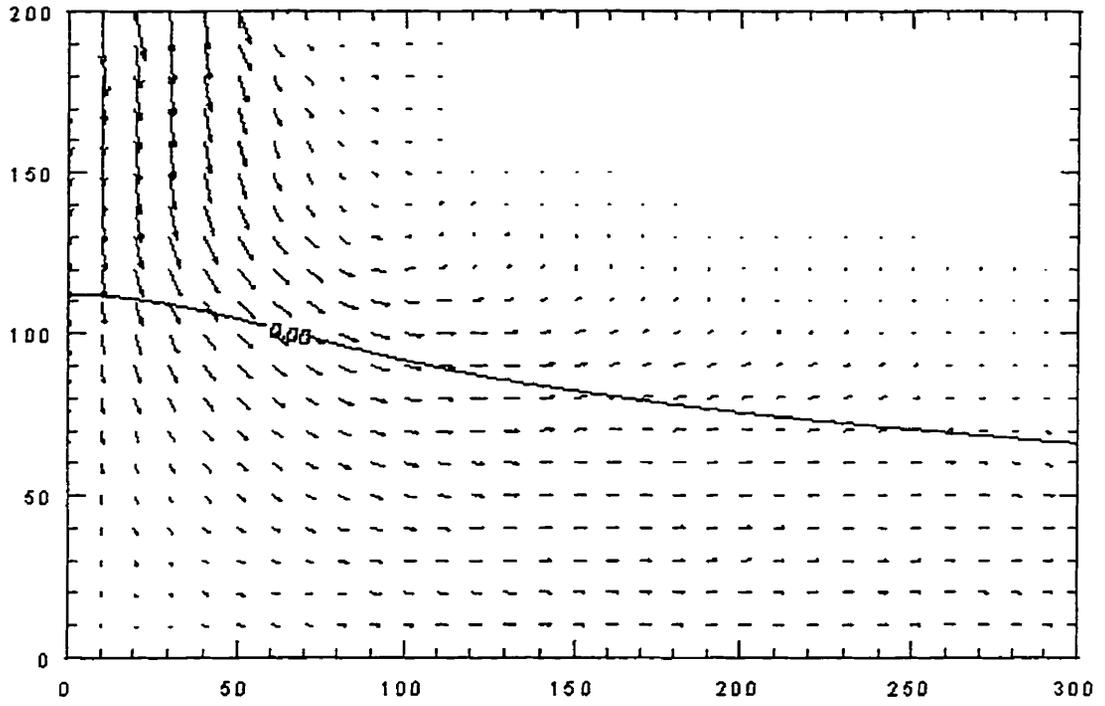


Figure 6. 4 Débit spécifique au temps t=4h (maillage 1)

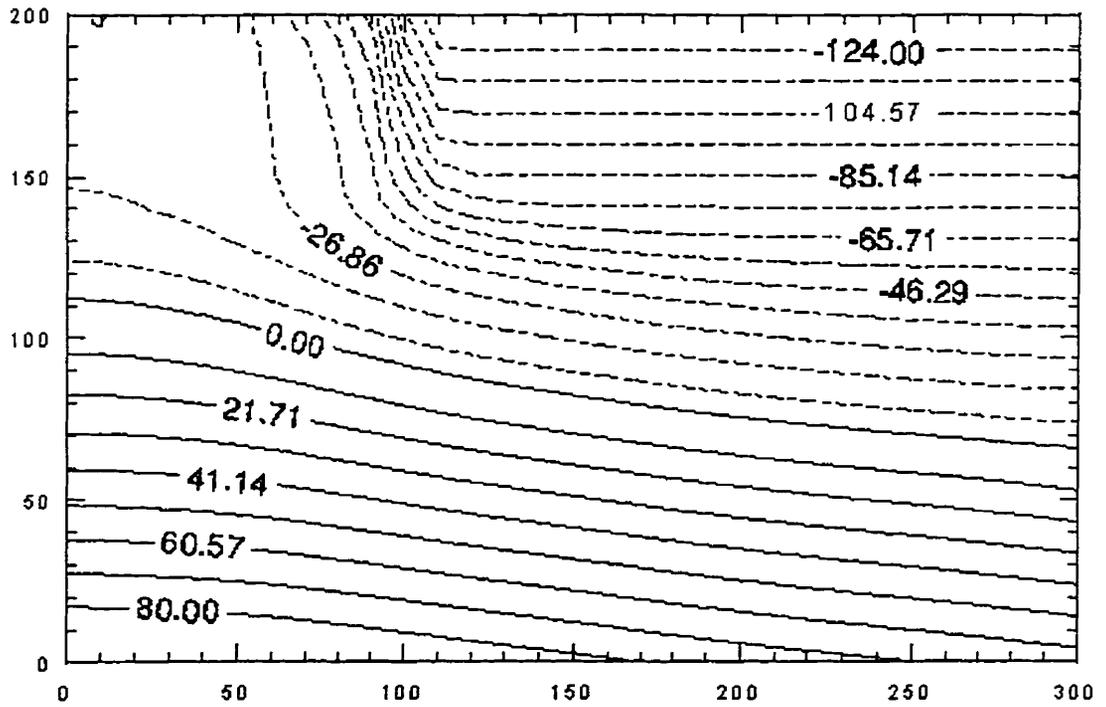


Figure 6. 5 Lignes de pressions au temps t=4h, (maillage 1)

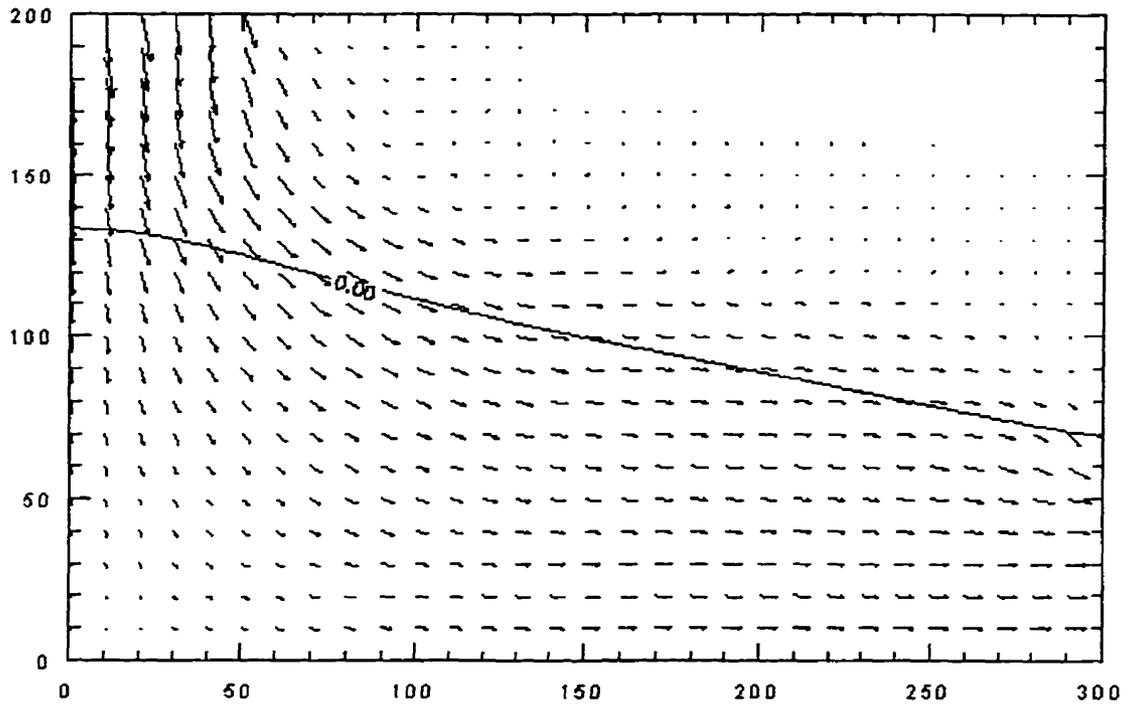


Figure 6. 6 Débit spécifique au temps $t=8h$ en utilisant le maillage 1

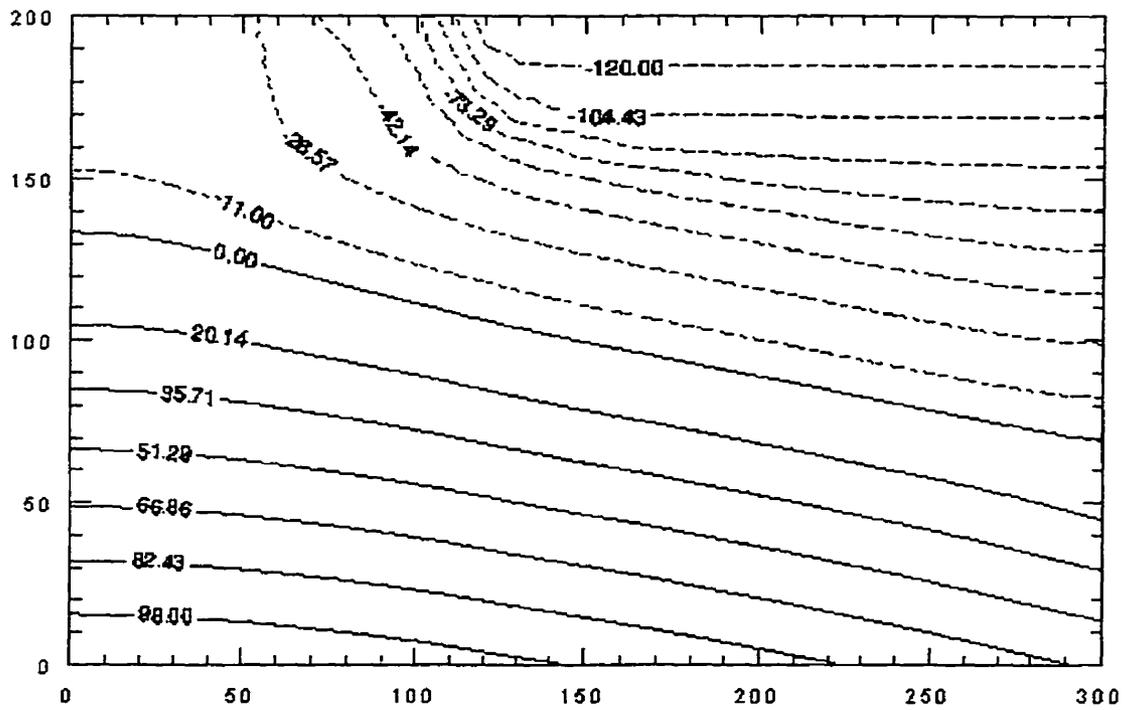


Figure 6. 7 Lignes de pressions au temps $t=8h$ (maillage 1)

La figure (6.8) montre une comparaison de l'évolution de la position de la surface libre telle qu'observée et calculée en fonction du temps ($t=3h$ et $t=4h$) en utilisant le maillage 1. La figure (6.9) montre une comparaison de l'évolution de la position de la surface libre: expérimentale, calculée et les résultats numériques obtenues par [Gureghian, 1983] en utilisant un schéma des éléments finis. On remarque qu'à tout instant la surface libre est légèrement plus haute dans le cas réel que dans le modèle numérique. Mais généralement les résultats obtenus concordent bien avec les solutions expérimentales. Les résultats montrent que la précision du schéma n'est pas affectée par le choix du type de maillage.

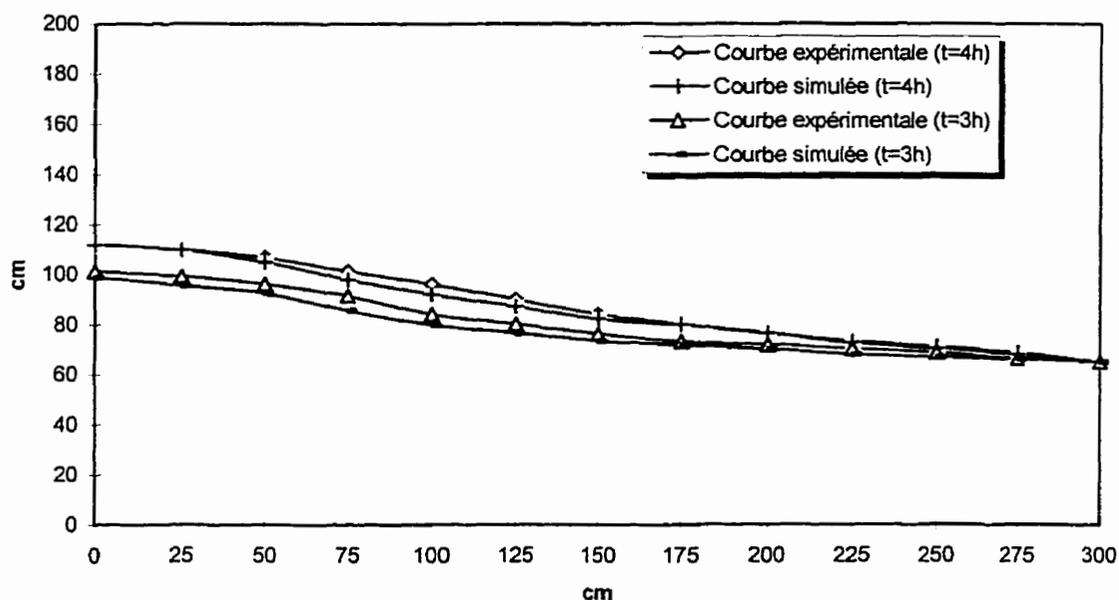


Figure 6. 8 Comparaison de l'évolution de la position de la surface libre, expérimentale, schéma des éléments finis (FEM) et calculée en utilisant le (maillage 1)

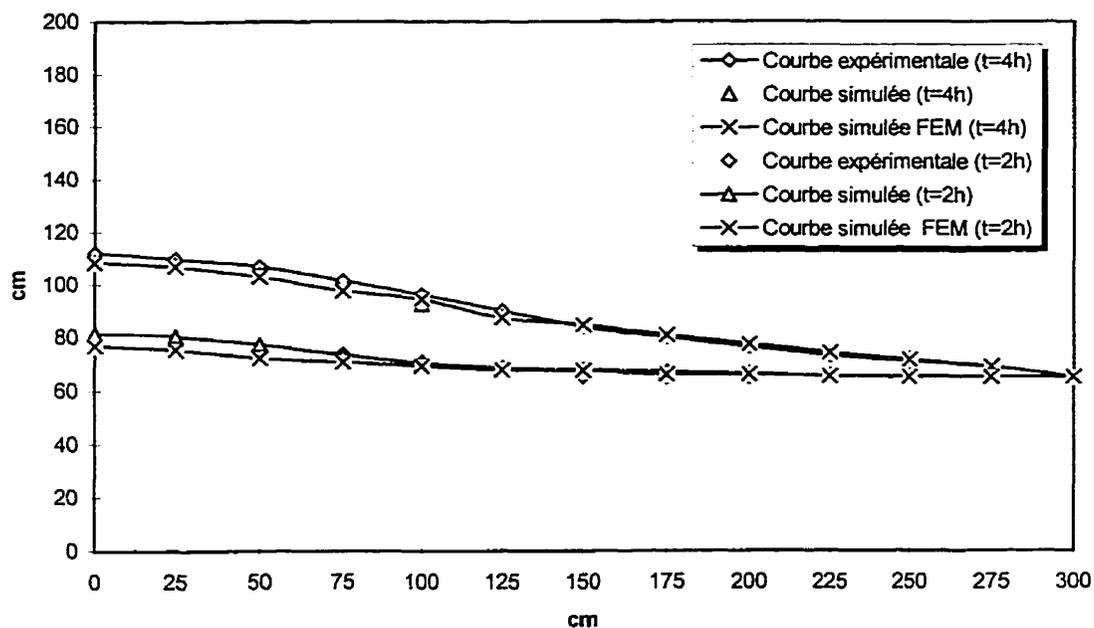


Figure 6. 9 Comparaison de l'évolution de la position du surface libre, expérimentale et calculée en utilisant le (maillage 2)

6.3 Drainage d'une nappe à surface libre

Vauclin et al. (1973). ont présenté une étude expérimentale consacrée au drainage d'une nappe à surface libre. Le domaine de mesure est une tranche de sol de 200 cm de haut, 300 cm de long et 5 cm d'épaisseur reposant sur une base horizontale imperméable et comprise entre deux parois de Plexiglas. Les deux extrémités verticales de cette tranche de sol sont reliées à des réservoirs permettant d'imposer le niveau d'une nappe à surface libre dans ce massif poreux, et de faire varier ce niveau pour simuler des essais de rabattement de nappe.

L'essai présenté est un essai de drainage par rabattement gravitaire consistant à partir d'une nappe initialement horizontale à la cote $h=143$ cm, et en équilibre hydrostatique, à laquelle on impose les conditions suivantes:

- à l'aval ($x=0$) la surface libre est brutalement abaissée au temps $t=0$ de la cote 143 cm à la cote 80 cm par l'intermédiaire d'un réservoir. Elle est en suite maintenue à cette cote pendant toute la durée de l'essai.
- à l'amont ($x=300$ cm) le niveau de la surface libre est maintenue constant (à la cote $h=143$ cm) par l'intermédiaire d'un réservoir alimenté (pour $t > 0$) par une pompe à débit contrôlé.

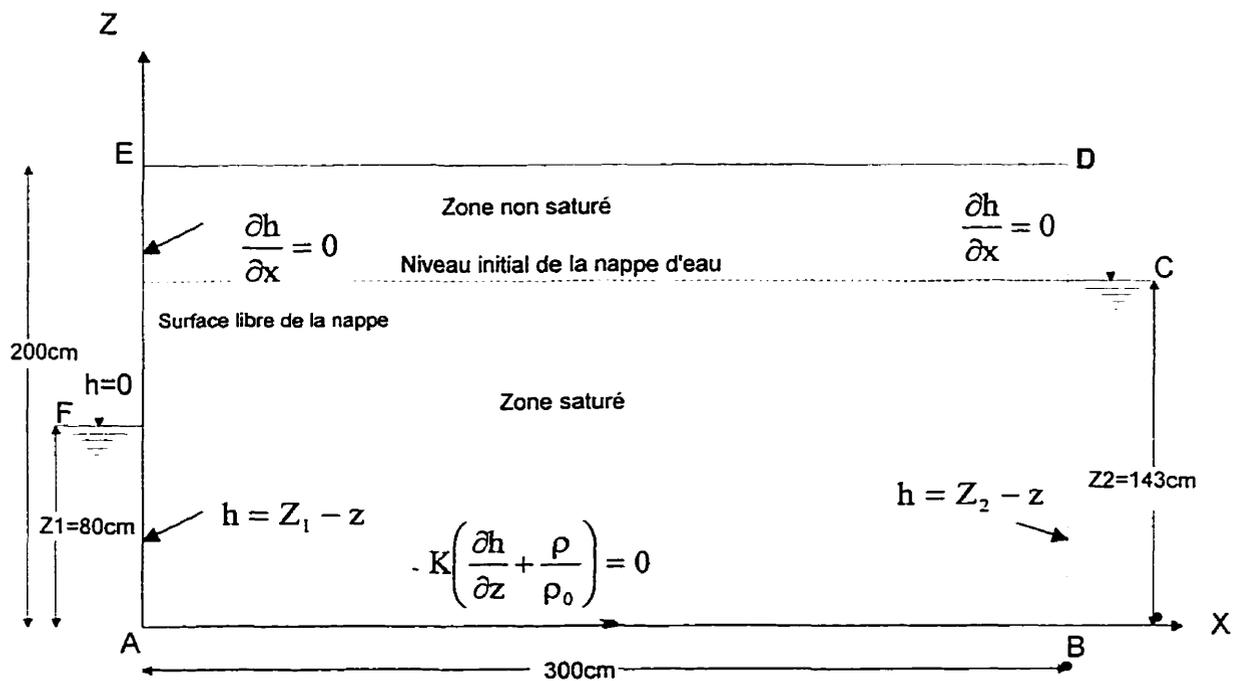


Figure 6. 10 Domaine de calcul et conditions aux limites

Le domaine de calcul et les conditions aux limites sont présentés au figure (6.10). Les conditions initiales et aux limites sont données au tableau 6.3:

Tableau 6. 3 Conditions initiales et aux limites

$h(x,z,0)$	en BC	
$K\left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0}\right) = V_r$	EF	$t \geq 0$
$K\left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0}\right) = 0$	ED et AB	$t \geq 0$
$\frac{\partial h}{\partial x} = 0$	AF et DC	$t \geq 0$
$h = Z_1 - z$	BC	$t \geq 0$

Les paramètres de la fonction qui décrivent les propriétés hydrauliques du sol sont donnés au tableau 8.4

Tableau 6. 4 Paramètres de la fonction qui décrivent les propriétés hydrauliques du sol

a	b	c	d	m	n	K_s	ϕ
2.99×10^6	2.99×10^6	4.0×10^4	4.0×10^4	5.0	2.9	35cm/hr	$0.3 \text{cm}^3/\text{cm}^3$

La figure 6.11 présente le débit spécifique et la position de la surface libre obtenus au temps 1h. La figure (6.12) présente une comparaison de la position de la surface libre expérimentale et celle obtenue par le modèle à $t=1h$. Les résultats montrent que la courbe simulée coïncide sensiblement avec la courbe expérimentale.

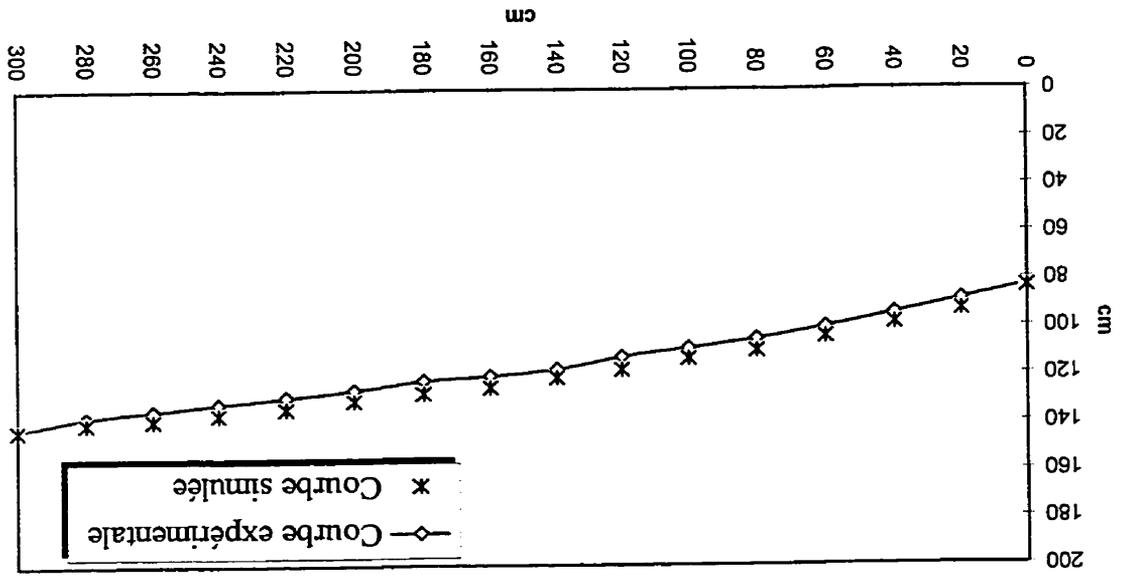


Figure 6.12 Comparaison de l'évolution de la position de la surface libre: expérimentale et calculée à $t=1h$

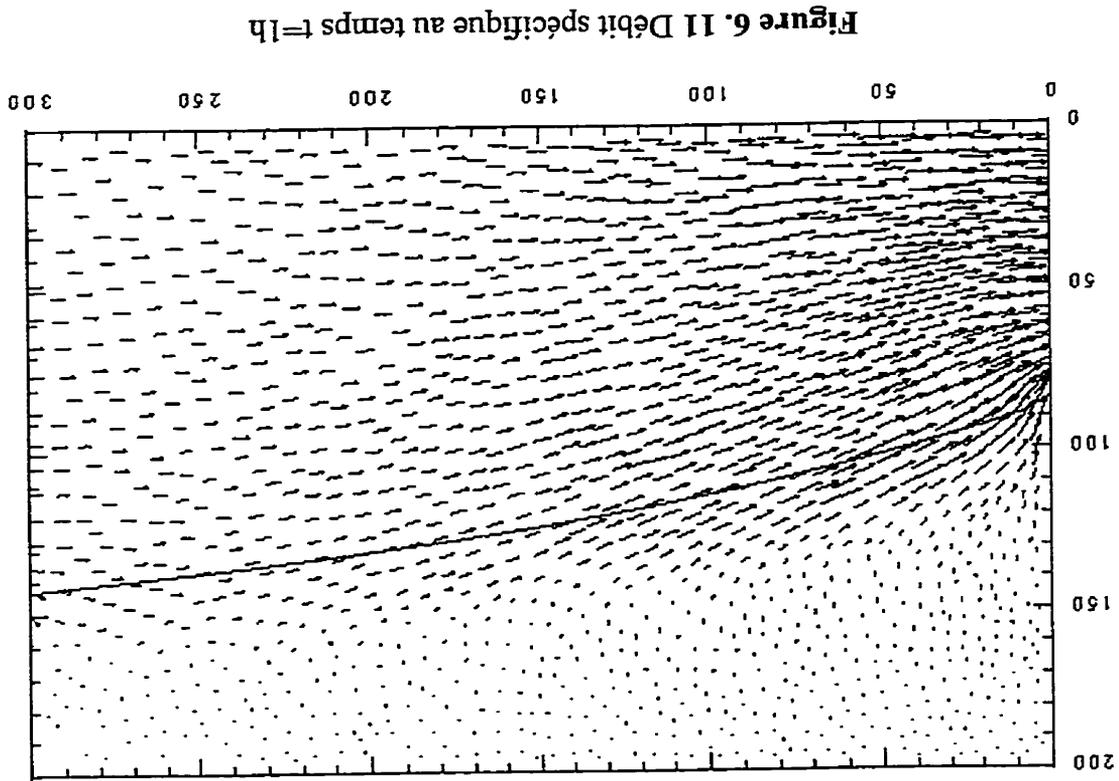


Figure 6.11 Débit spécifique au temps $t=1h$

6.4 Drainage d'une nappe à surface libre

Ce test a pour but d'apporter une validation supplémentaire en ce qui concerne la solution du drainage d'une nappe à surface libre. L'exemple de calcul est similaire à l'exemple précédent sauf que la condition aux frontières aval a changé.

- à l'aval ($x=0$) la surface libre est brutalement abaissée au temps $t=0$ de la cote 143 cm à la cote 80 cm par l'intermédiaire d'un réservoir. Elle est en suite maintenue à cette cote pendant toute la durée de l'essai.
- à l'amont ($x=300$ cm) le niveau de la surface libre est égale à 143 cm à $t=0$. À $t > 0$ la condition du Neuman est appliqué $\frac{\partial h}{\partial x} = 0$

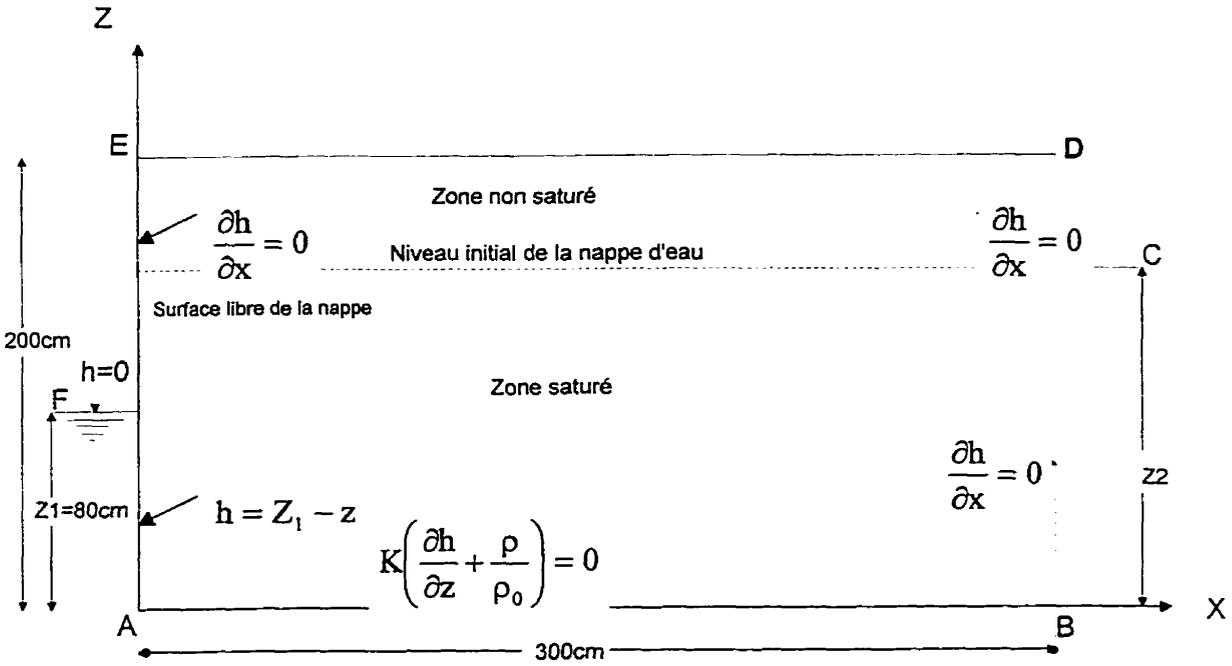


Figure 6. 13 Domaine de calcul et conditions aux limites (exemple 3)

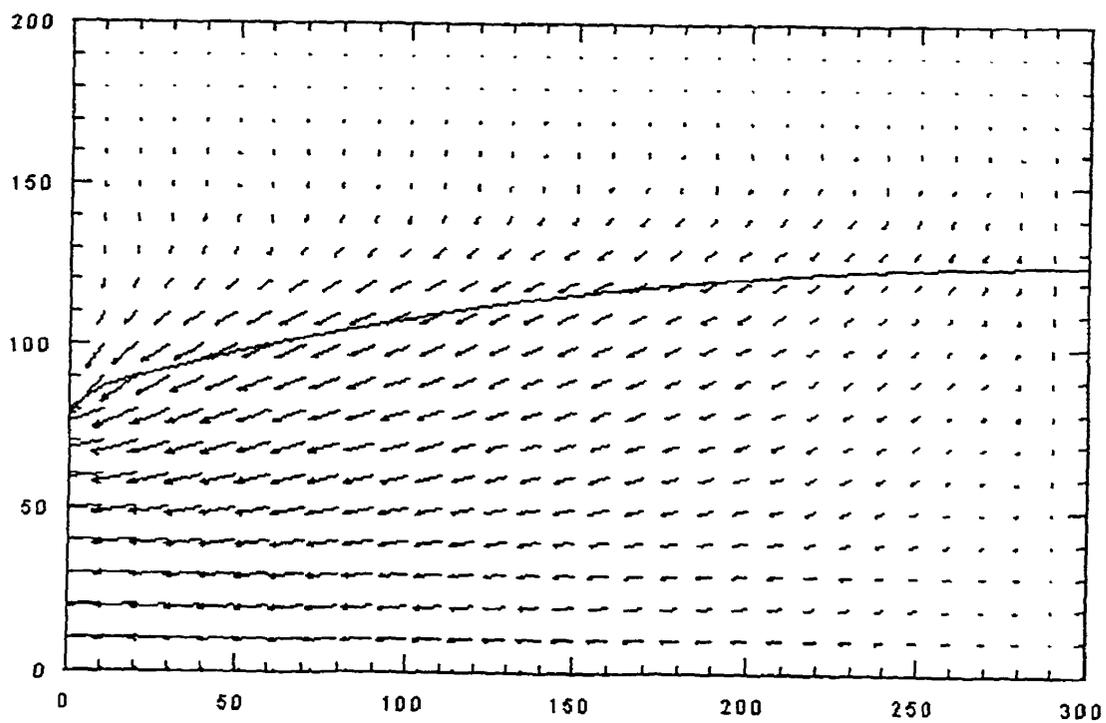


Figure 6. 14 Débit spécifique et la ligne de la surface libre à $t=1h$

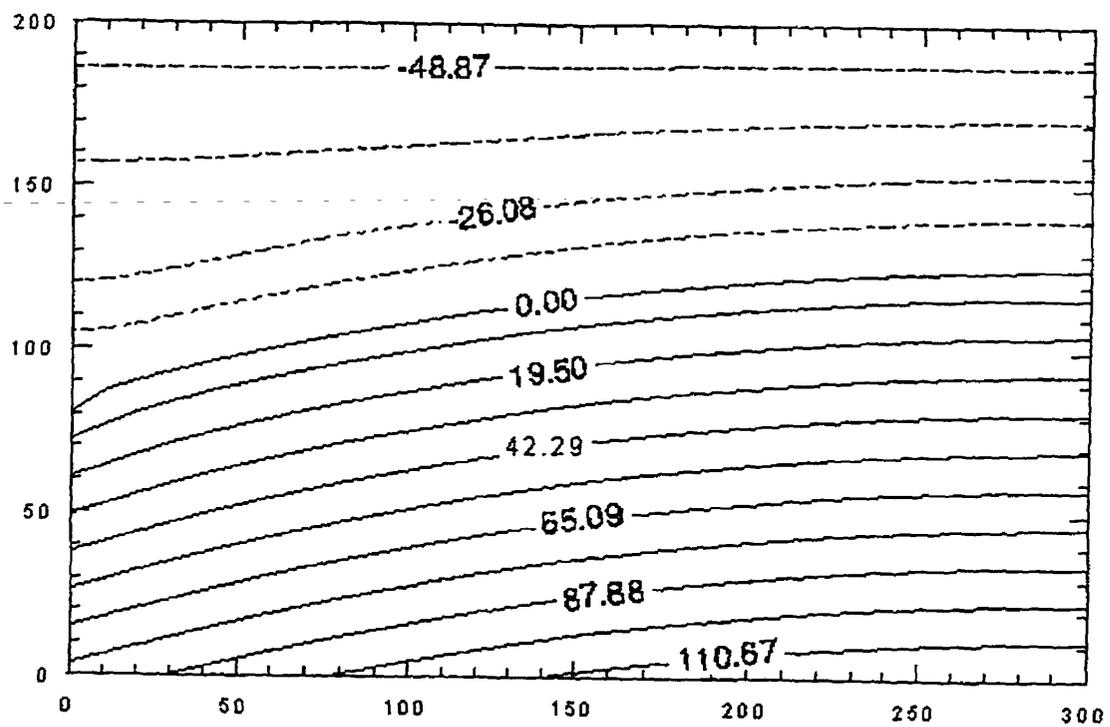


Figure 6. 15 Lignes de pression à $t=1h$

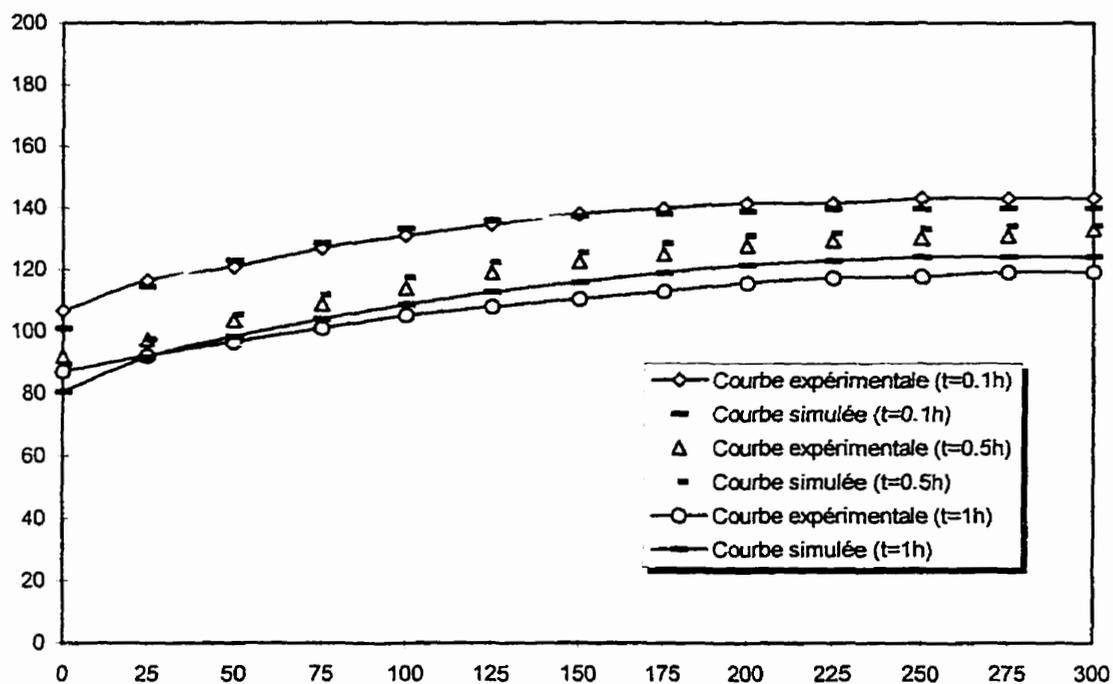


Figure 6. 16 Comparaison de l'évolution de la position du surface libre, expérimentale et calculée à $t=0.1, 0.5$ et $1h$

À la figure (6.14), on présente le débit spécifique calculé à $t=1h$. À la figure (6.16) on présente la variation du niveau de surface libre au temps ($t=0.1, 0.5$ et $1h$), on compare avec les résultats expérimentaux de (Vauclin, 1979). Ce test confirme encore la précision et la capacité du schéma à bien reproduire, le drainage d'une nappe à surface libre.

Chapitre VII

Modélisation de la migration d'un contaminant dense dans un milieu poreux saturé

7.1 Introduction

La plupart des modèles existants qui traitent de la contamination de la nappe considèrent que la densité du fluide est égale à celle de l'eau. Mais des études ont montré que le comportement du panache est fortement affecté lorsque la différence de densité entre le fluide et l'eau est supérieure à 0.2%. Il faut donc tenir compte de cette différence, surtout lorsqu'il existe plusieurs sources à la surface dont la différence de densité est comprise entre 0.5% et 4%. L'écoulement instable est souvent influencé par la force de gravité qui, sous certaines conditions, superpose des perturbations au profil de la concentration qui provoque le mélange des fluides afin d'atteindre un gradient de densité stable.

L'impact du développement des instabilités sur le transport de contaminant n'est pas bien connu. Les études expérimentales de Schincariol et al., 1990 et Oostrom et al., 1992 ont montré qu'au-delà d'une certaine concentration, l'écoulement perd son caractère stable. Les instabilités qui apparaissent se manifestent par la formation de lobes à la limite inférieure de la zone de mélange.

Le problème du développement et de l'amplification des instabilités n'a pas, jusqu'à présent, été résolu dans son ensemble. Plusieurs auteurs ont essayé de comprendre l'incidence qu'a ce phénomène sur la structure des écoulements mais ils se sont généralement contentés de définir les limites de transition entre déplacement stable et instable. Peu d'études ont essayé de comprendre l'origine et la propagation des

instabilités dans un écoulement à densité variable. Les études numériques de Schincariol, 1993, ont essayé de comprendre comment les instabilités se forment et grandissent en utilisant le modèle VaporT. Ce code de calcul se heurte à la diffusion numérique qui se traduit par la génération des instabilités. Pour pallier à cette situation, la discrétisation du domaine simulé doit être très fine ($\Delta x = \Delta y = 2.5 \text{ mm}$). Ceci génère évidemment des temps de calcul et des besoins en mémoire élevés et, aussi, on pense que la dispersion ($D = \alpha u$) est efficace à lisser ou élimine les perturbations avant qu'elles aient la chance de croître ou de se former. Pour mieux comprendre les conditions sous lesquelles les instabilités se développent et s'amplifient, un modèle numérique possédant une qualité de dispersion numérique minimale est nécessaire. Les études expérimentales constituent un point de départ et des données pour la calibration du modèle d'étude.

La première partie de ce chapitre porte sur la validation du modèle mathématique de calcul de la migration d'un contaminant dense dans un milieu poreux saturé. Nous comparons les résultats numériques obtenus avec les résultats expérimentaux et numériques de Schincariol et Schwartz, 1990, 1995.

Plusieurs analyses théoriques ont montré que la stabilité du système peut être examinée à travers la réponse du système aux variations des variables fondamentales, telles que la concentration, la vitesse et la pression. Cette théorie de variation des variables peut être utilisée par le modèle numérique pour étudier comment les instabilités se forment et quelle influence ils ont sur le champ des vitesses et la distribution de la concentration. Plus spécifiquement, la deuxième partie de ce chapitre porte sur la compréhension du mécanisme de développement et d'amplification des instabilités.

7.2 Comparaison de nos résultats avec les observations expérimentales de Schincariol et al., (1990).

Le premier cas étudié est l'intrusion d'un polluant salé (NaCl) (plus lourd que son environnement) dans un milieu isotopique et saturé. L'écoulement est orienté de gauche à droite avec une vitesse horizontale moyenne de 3.06×10^{-6} m/s. La concentration initiale est de 2000 mg/l. Les caractéristiques physiques de l'aquifère ainsi que les paramètres utilisés sont présentés au tableau (7.1). Le domaine de calcul et les conditions frontières sont présentés à la figure (7.1).

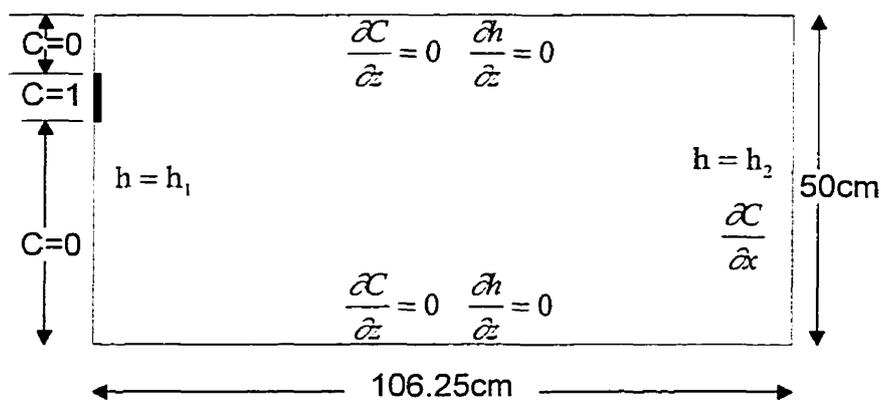


Figure 7. 1 Domaine de calcul et conditions frontières

Tableau 7. 1 Paramètres

Paramètres	Valeurs
conductivité hydraulique	$5.6 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$
perméabilité	$5.7 \times 10^{-11} \text{ m}^2$
porosité	0.38
viscosité de l'eau	$1.002 \times 10^{-2} \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$
viscosité de 2000 mg/L NaCl	$1.006 \times 10^{-2} \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$
viscosité de 5000 mg/L NaCl	$1.011 \times 10^{-2} \text{ g cm}^{-1} \text{ s}^{-1}$
densité relative de l'eau à 20°C	0.9982 g cm^{-3}
densité de 2000 mg/L NaCl	0.9997 g cm^{-3}
densité de 5000 mg/L NaCl	1.0018 g cm^{-3}
dispersivité longitudinale α_L	$3.0 \times 10^{-4} \text{ m}$
dispersivité transversale α_T	$0.1 \alpha_L$
diffusion moléculaire	$5.635 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$

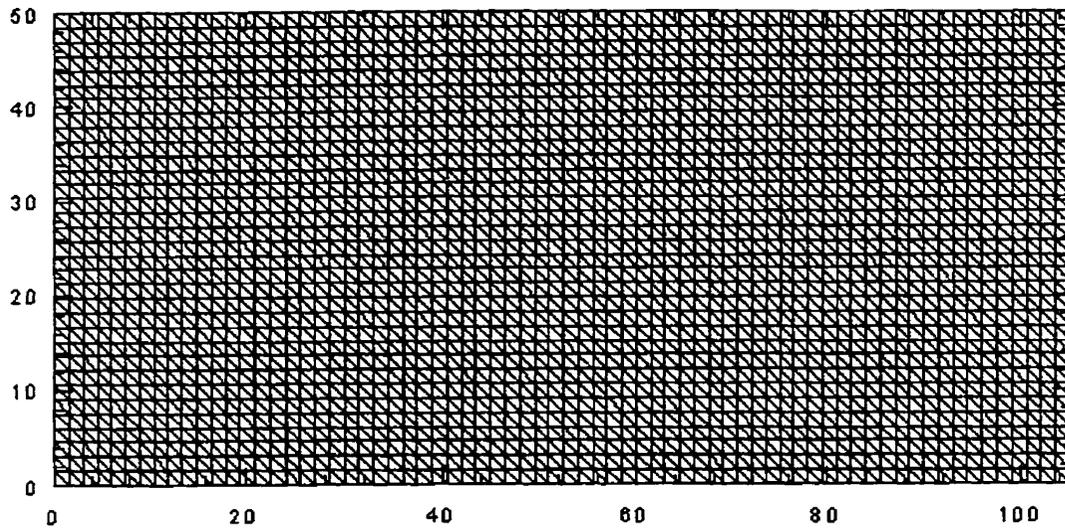


Figure 7. 2 Discrétisation du domaine de calcul en utilisant un maillage uniforme
(maillage 1)

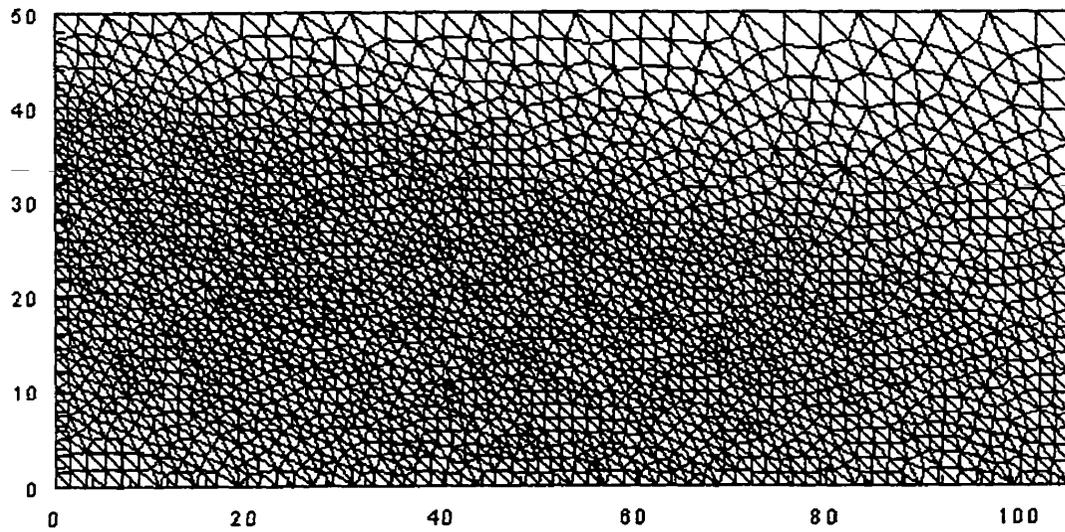


Figure 7. 3 Discrétisation du domaine de calcul en utilisant un maillage raffiné
(maillage2)

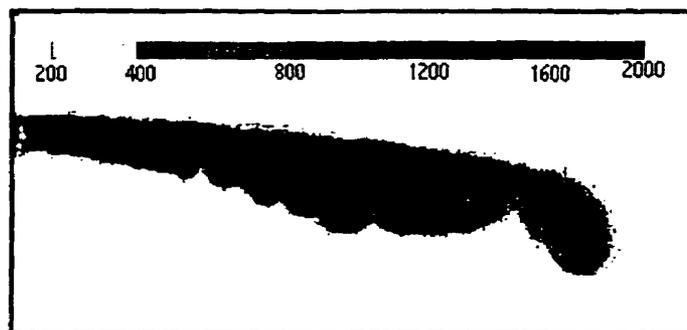


Figure 7. 4 Résultat expérimental du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l de NaCl) à $t=72$ h Schincariol et al., 1990

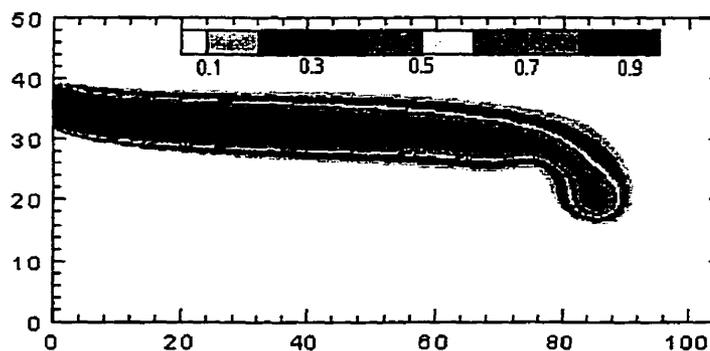


Figure 7. 5 Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.003$ cm $P_e=15.5$ et $C_T=2.95$

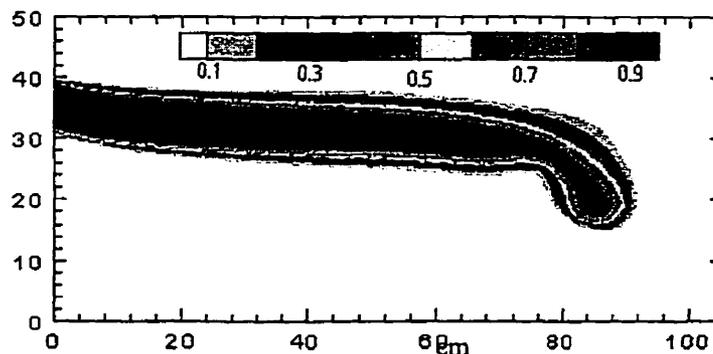


Figure 7. 6 Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.003$ cm, $P_e=15.5$ et $C_T=2.95$

Pour des raisons de calcul numérique, deux types de maillage ont été étudiés. Dans le premier cas, un maillage relativement uniforme a été utilisé (figure 7.2). Dans le second, le maillage a été raffiné afin d'obtenir des détails dans la région du panache (figure 7.3).

Les figures 7.4, 7.5 et 7.6 détaillent le déploiement du contaminant 72 h après l'injection. La figure 7.4 illustre le résultat expérimental de Schincariol et al., 1990, et les figures 7.5 et 7.6 les résultats numériques en utilisant le maillage 1 ($\Delta x = \Delta y = 7.5\text{mm}$, 9380 points ou 18348 éléments) et le maillage 2 (6221 points ou 1220 éléments). Les résultats montrent que la précision du schéma n'est pas affectée par le type de maillage utilisé. Les résultats obtenus en utilisant un nombre de Péclet et de Courant élevés ($Pe \approx 15.5$, $C_r = 2.95$) sont appréciables et concordent avec la solution expérimentale pour les deux types de maillage utilisés. En effet, on observe la formation d'une poche (lobe) à la limite inférieure de la zone de mélange. Cette instabilité a été observée dans les résultats expérimentaux. En plus, le temps de parcours obtenu par simulation est en accord avec les données expérimentales, ce qui tend à valider la technique du suivi des particules dans le temps. Par contre, on observe que les résultats obtenus par le modèle ne montrent pas les faibles oscillations observées à la limite inférieure du panache dans les résultats expérimentaux.

Les résultats présentés par les figures 7.7 et 7.8 sont obtenus en utilisant les mêmes paramètres que pour la simulation précédente sauf qu'on a augmenté la dispersivité longitudinale et transversale à 0.1 et 0.02 cm respectivement. La comparaison des figures 7.5-7.8 montre que la diminution de la dispersivité est suivie par la formation d'une poche à la limite inférieure de la zone de mélange et l'abaissement de sa limite supérieure.

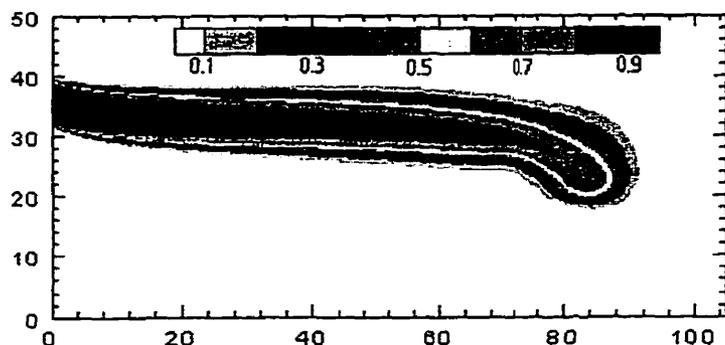


Figure 7.7 Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.02$ cm $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$

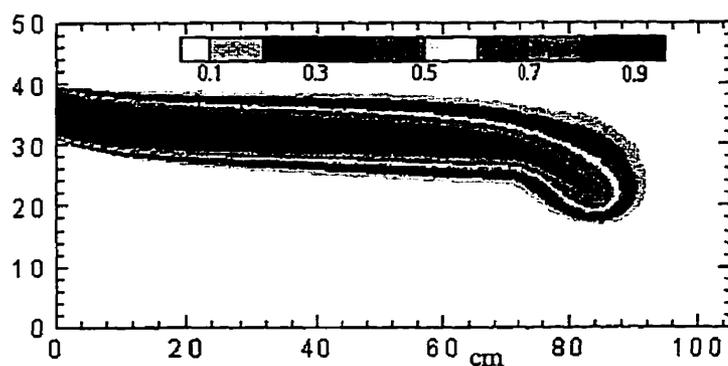


Figure 7.8 Résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=2000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 1, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.02$ cm $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$

La figure 7.9 représente un suivi de la position d'une particule injectée au milieu de la source de pollution à $t=0$. Le temps de parcours obtenu par simulation est en accord avec les données expérimentales, ce qui tend à valider la technique du suivi des particules dans le temps en utilisant la méthode d'intégration de Runge-Kutta d'ordre quatre.

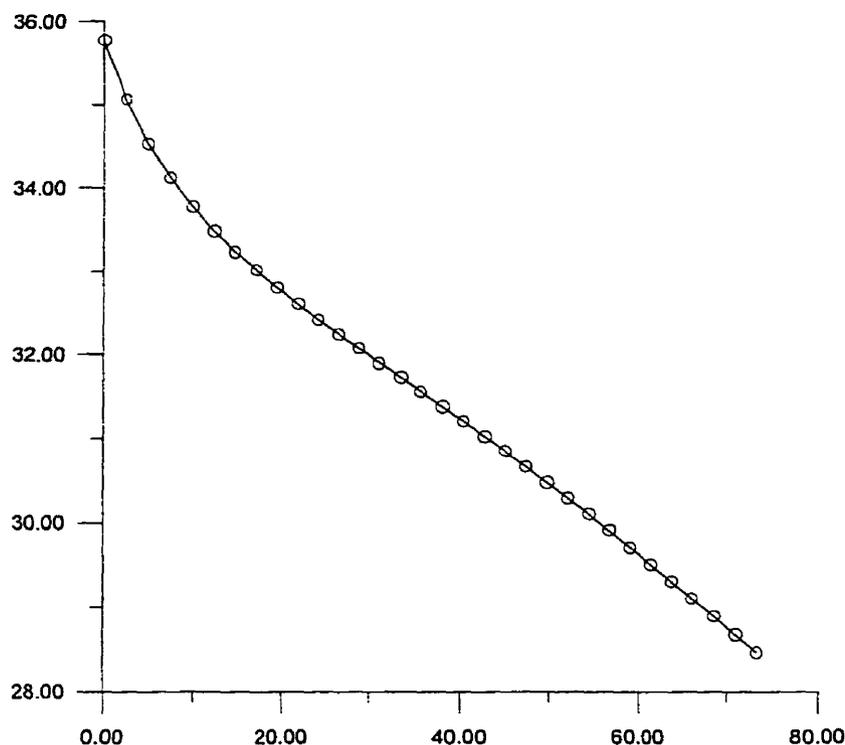


Figure 7. 9 Suivi d'une particule dans le temps ($t=72h$, $C=2000mg/l$)

Le deuxième cas étudié est l'intrusion d'un polluant salé (NaCl) de concentration 5000 mg/l et de densité 1.0018 g/cm^3 . Les figures 7.10 à 7.18 comparent les résultats numériques obtenus avec un maillage non uniforme et les résultats expérimentaux de Schincariol et al., (1990). On remarque nettement les instabilités gravitationnelles qui se manifestent sous forme de protubérances dans la partie inférieure du panache. Les figures 7.10 à 7.18 détaillent le déploiement du polluant 24h, 54h et 72h après l'injection. La comparaison de la figure 7.11 ($\alpha_L=0.1\text{cm}$, $\alpha_T=0.02\text{cm}$ et $P_e=6.33$) et de la figure 7.12 ($\alpha_L=0.03\text{cm}$, $\alpha_T=0.002\text{cm}$ et $P_e=18.17$) montre que, plus la dispersivité diminue, plus le nombre des instabilités augmente. Ces résultats sont prévisibles car List's (1965) a montré, dans son travail théorique, que l'augmentation de la dispersion réduit les gradients de concentration et, du même coup, réduit les risques que se développent des instabilités.

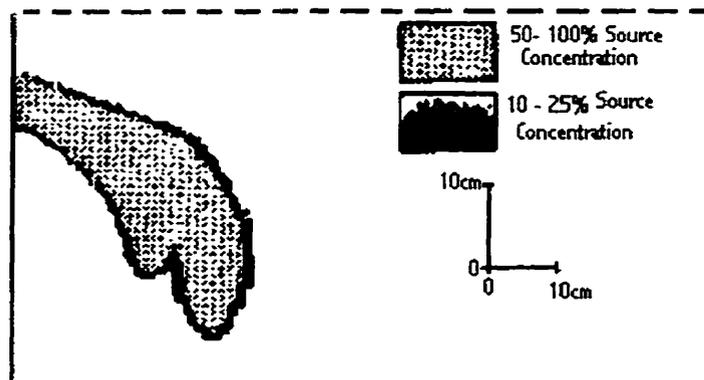


Figure 7.10 Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24$ h Schincariol et al., 1990

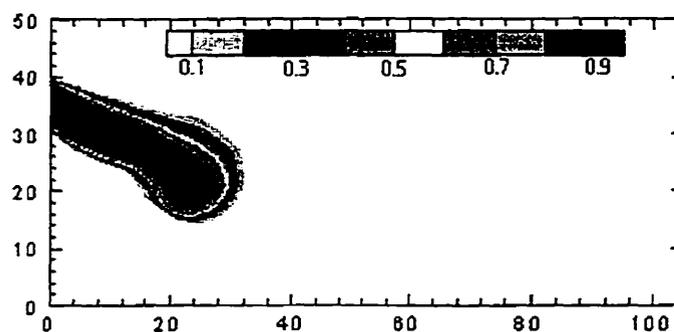


Figure 7.11 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.02$ cm $P_e=6.33$ et $C_r=2.95$

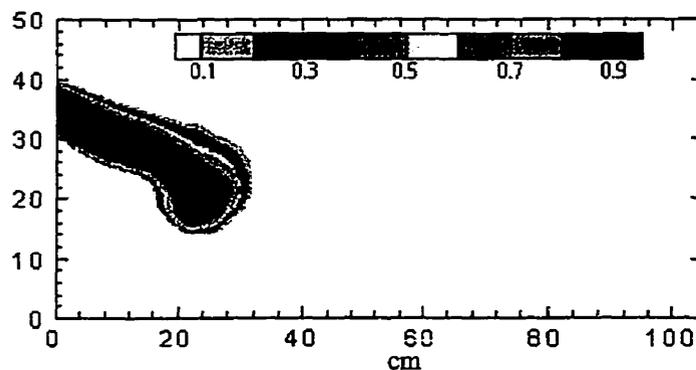


Figure 7.12 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=24$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.17$

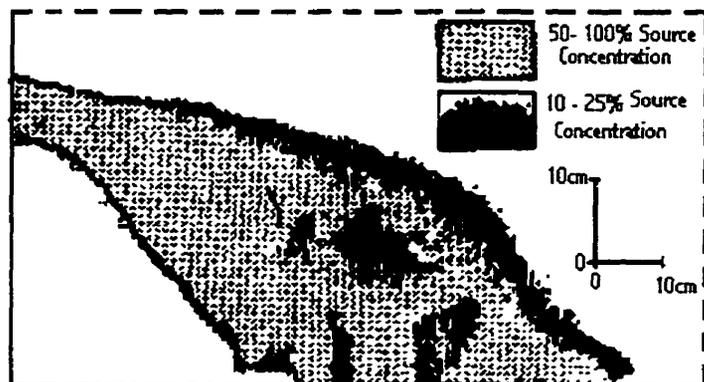


Figure 7.13 Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h Schincariol et al., 1990

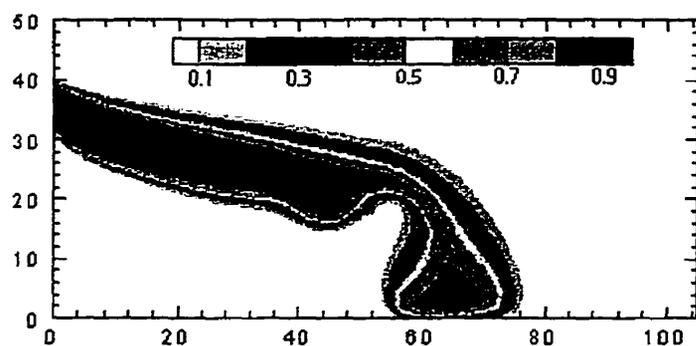


Figure 7.14 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.01$ cm $P_e=7$

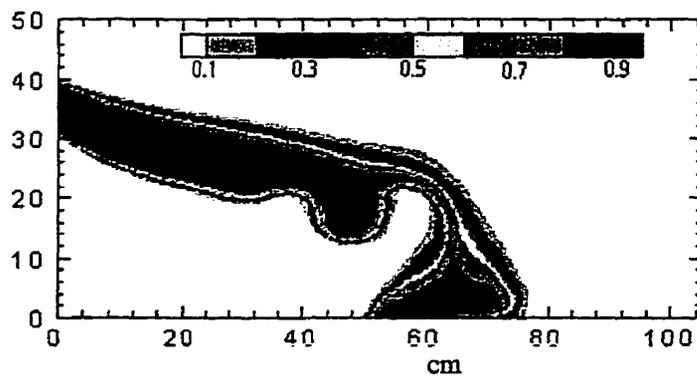


Figure 7.15 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.5$



Figure 7. 16 Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h Schincariol et al., 1990

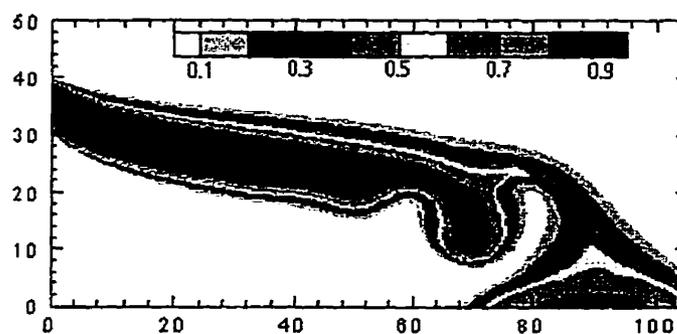


Figure 7. 17 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.1$ cm, $\alpha_T=0.01$ cm $P_e=7$

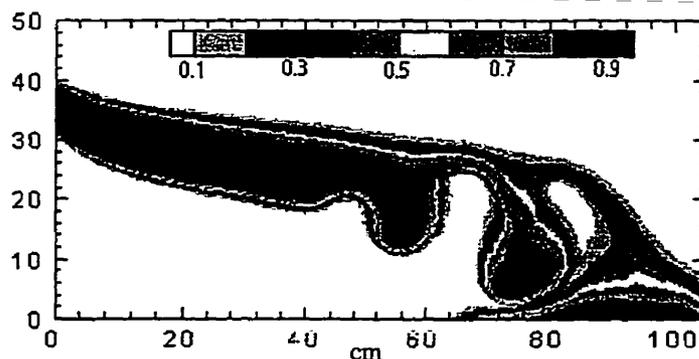


Figure 7. 18 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=5000$ mg/l) à $t=72$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=18.6$

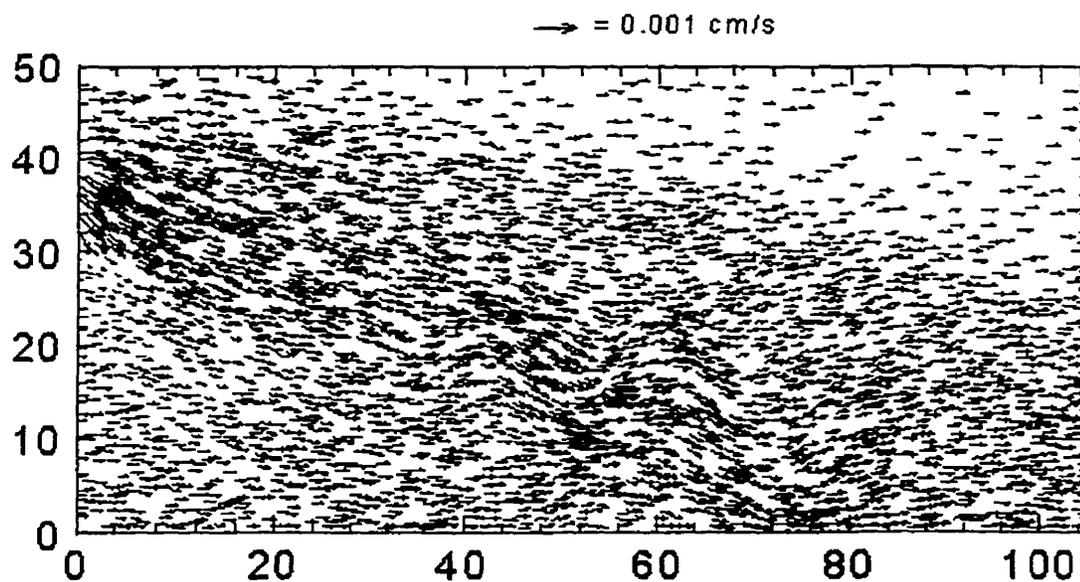


Figure 7. 19 Les champs de vitesse à $t=54h$ ($C=5000\text{mg/l}$)

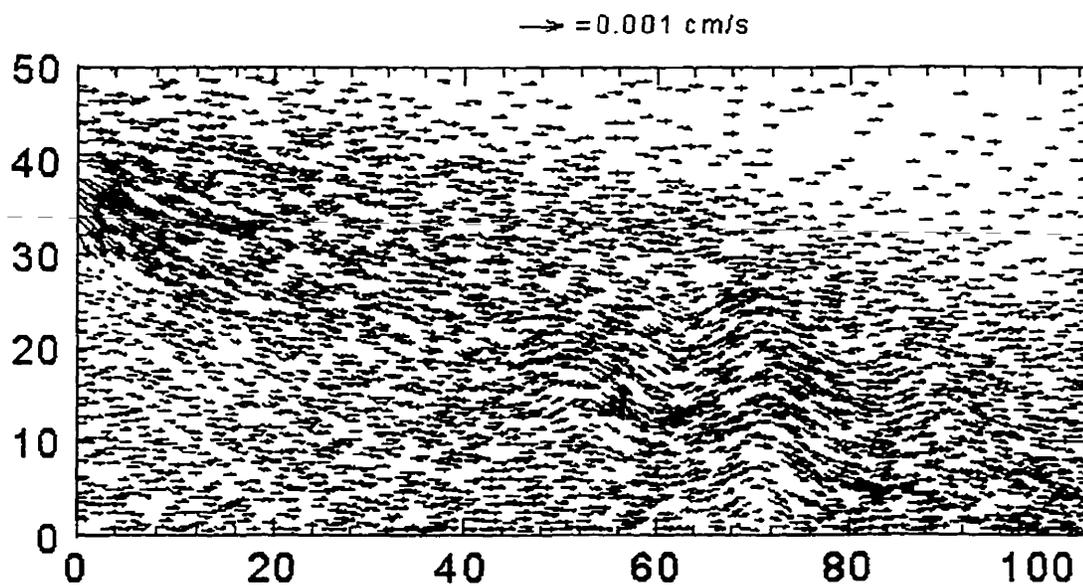


Figure 7. 20 Les champs de vitesse à $t=72h$ ($C=5000\text{mg/l}$)

Les figures 7.19 et 7.20 représentent les champs de vitesse calculés respectivement à cinquante-quatre heures et soixante-douze heures. Ces figures illustrent bien le mouvement du fluide vers le haut et vers le bas. Les temps de parcours simulés, dans les deux cas, sont en accord avec les données expérimentales, ce qui tend à valider la technique du suivi des particules dans le temps. La figure 7.21 représente le suivi d'une particule ($t=72$) injectée au milieu de la source d'injection au temps $t=0$.

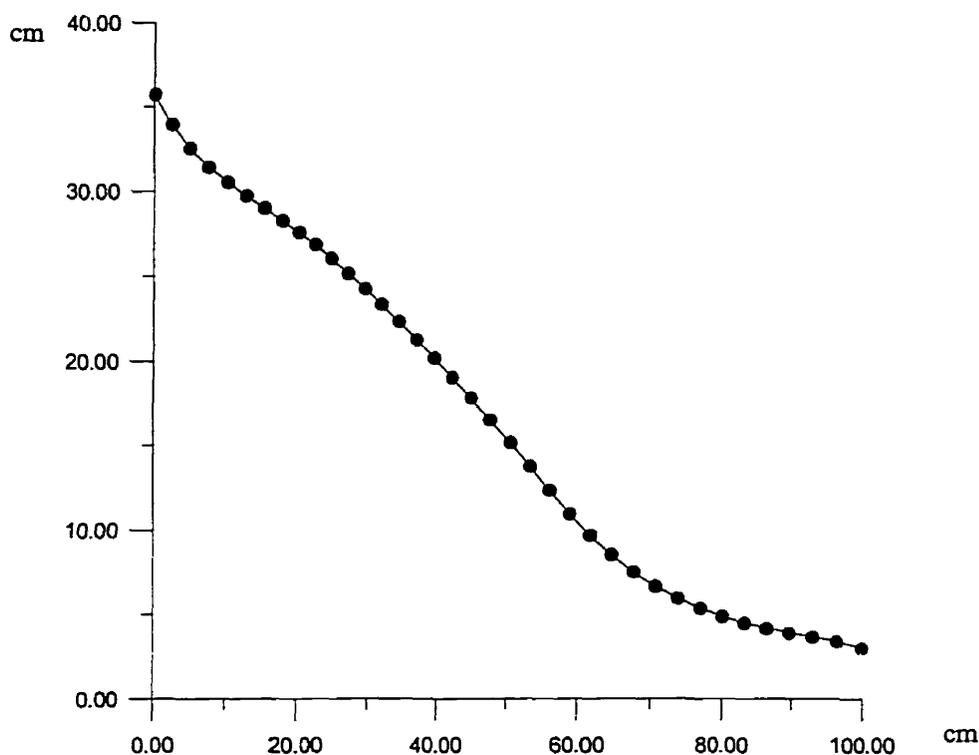


Figure 7.21 Suivi d'une particule dans le temps ($t=72$ h, $C=5000$ mg/l)

Le troisième cas étudié est l'intrusion d'un polluant salé (NaCl) de concentration 10000 mg/l et de densité 1.0053 g/cm^3 . Les figures 7.22 et 7.23 comparent les résultats numériques obtenus avec un maillage non uniforme et les résultats expérimentaux de Schincariol et al., 1990 (figure 7.22). On remarque nettement les instabilités gravitationnelles qui se manifestent sous forme de protubérances dans la partie inférieure du panache.

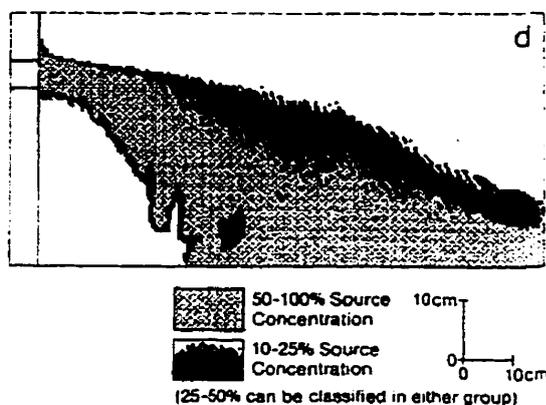


Figure 7. 22 Résultats expérimentaux du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=10000$ mg/l) à $t=54$ h Schincariol et al., 1990

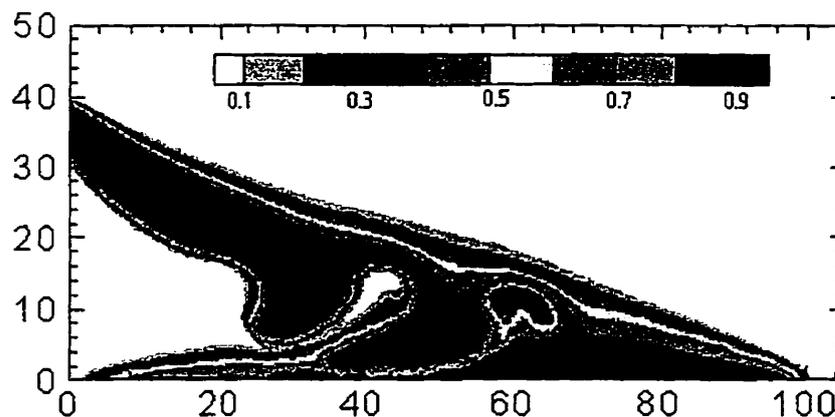


Figure 7. 23 Résultats numériques du déploiement d'un contaminant de concentration ($C=10000$ mg/l) à $t=54$ h en utilisant le maillage 2, $\alpha_L=0.03$ cm, $\alpha_T=0.002$ cm $P_e=24.4$

La figure 7.24 représente les champs de vitesse calculés à cinquante-quatre heures. On observe nettement les instabilités gravitationnelles qui se manifestent par le mouvement du fluide vers le haut et vers le bas. La figure 7.25 représente un suivi de la position d'une particule injectée au milieu de la source à $t=0$. Le test a été effectué pour différentes concentrations (2000, 5000 et 10000 mg/l). On observe, que plus la concentration du panache est élevée, plus la solution pénètre en profondeur.

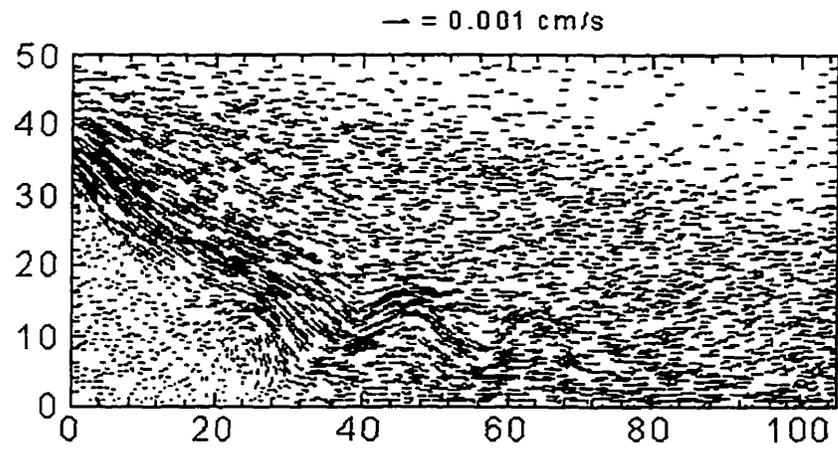


Figure 7. 24 Les champs de vitesse à $t=54\text{h}$ ($C=10000\text{mg/l}$)

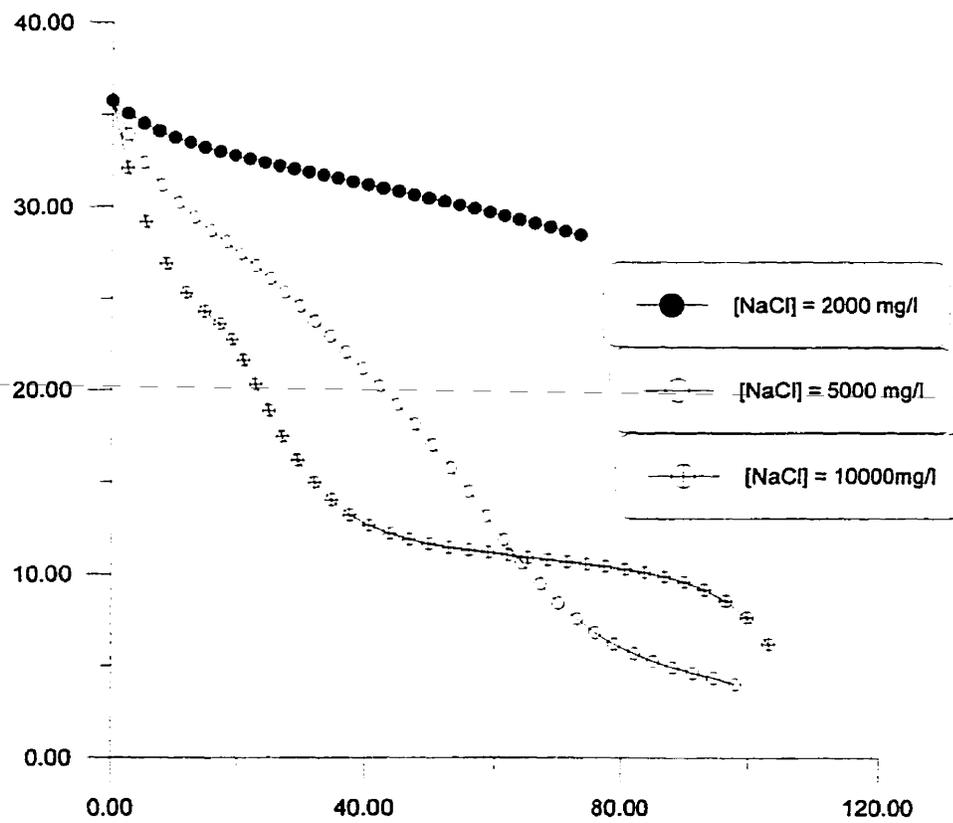


Figure 7. 25 Suivi d'une particule du panache de concentration ($C=2000, 5000$ et 10000 mg/l)

7.3 Comparaison des nos résultats avec les résultats numériques de Schincariol et al., (1995).

Les figures 7.26a, b, c et d comparent les résultats numériques obtenus par Schincariol et al., 1995, qui ont utilisé le code VaporT, et les nôtres. Schincariol et al. ont montré que les instabilités gravitationnelles très prononcées qui se développent le long de la limite inférieure du panache sont générées par des erreurs numériques dues aux dispersions artificielles ou aux oscillations numériques du modèle. Leurs résultats (figure 7.26a,b,c) montrent que la formation des instabilités est directement liée aux erreurs numériques qui sont contrôlées par le nombre de Péclet. Plus la valeur du nombre de Péclet diminue, plus l'erreur diminue. Schincariol et al., 1995 obtiennent un meilleur résultat pour un nombre de Péclet égal à 2.4 (figure 7.26c) ($\Delta x = \Delta y = 2.5 \text{ mm}$, $200 \times 425 = 85\,000$ points). Nous avons obtenu presque les mêmes résultats avec des maillages grossiers, 6 fois plus grands ($\Delta x = \Delta y = 15 \text{ mm}$, 2457 points et 4767 éléments).

La figure (7.27) montre le résultat numérique du déploiement d'un contaminant de concentration 2,000mg/l, obtenu par Schincariol, (1995), en utilisant un nombre de Péclet égal à 13. Malgré que le maillage utilisé soit fin (5mmx5mm), la solution génère des oscillations numériques et une concentration relative $\left(\frac{C}{C_0}\right) \geq 1$ près de la source d'injection. Nous avons obtenu d'excellents résultats sans oscillation numérique en utilisant un maillage 1.5 fois plus grand et un nombre de Péclet élevé ($P_e = 19.4$) (figure 7.28). Donc, le schéma est capable de simuler le transport des contaminants à densité variable, en utilisant un nombre de Péclet élevé et un grand pas de temps, tout en conservant la précision des résultats.

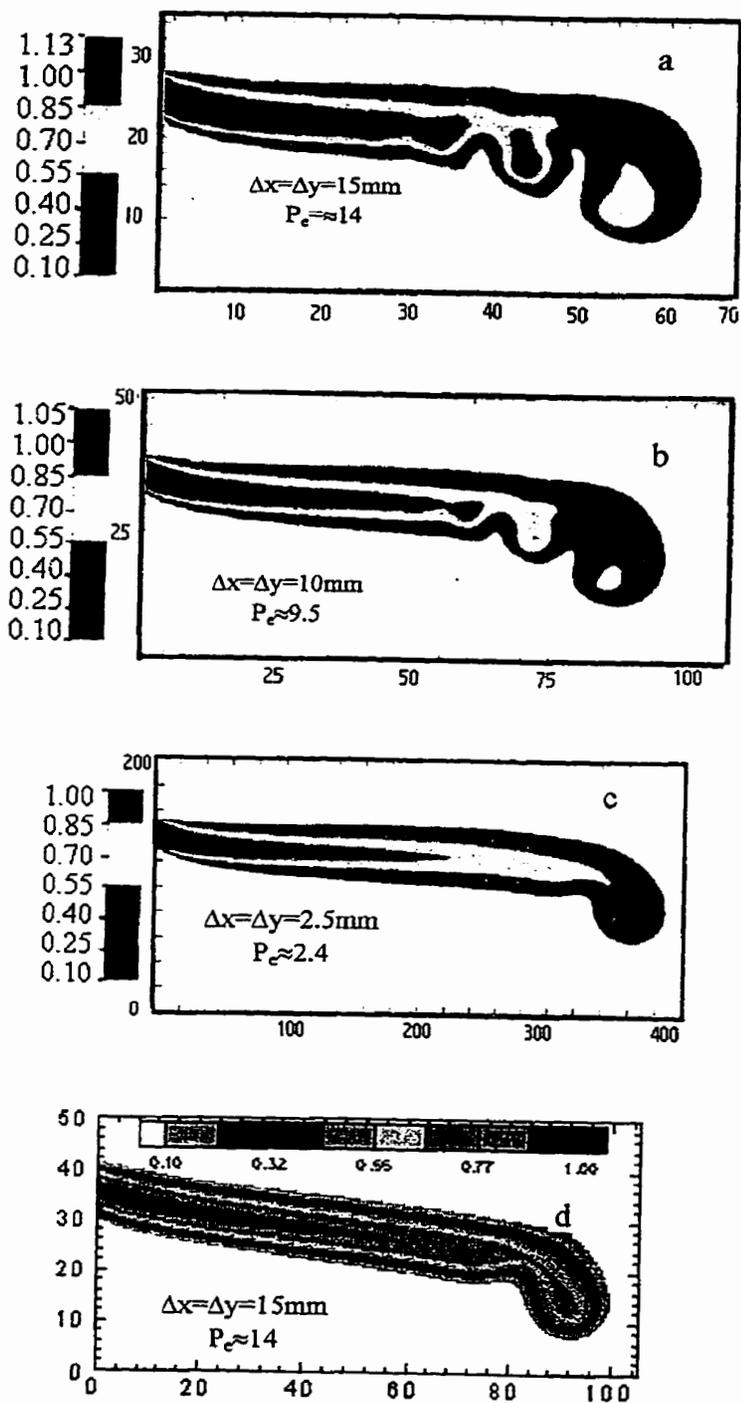


Figure 7.26 Comparaison entre le code VaporT (a), (b) et (c), Schincariol et al., 1990 et la présente étude (d), ($C=2000 \text{ mg/l}$, $t=90 \text{ h}$)

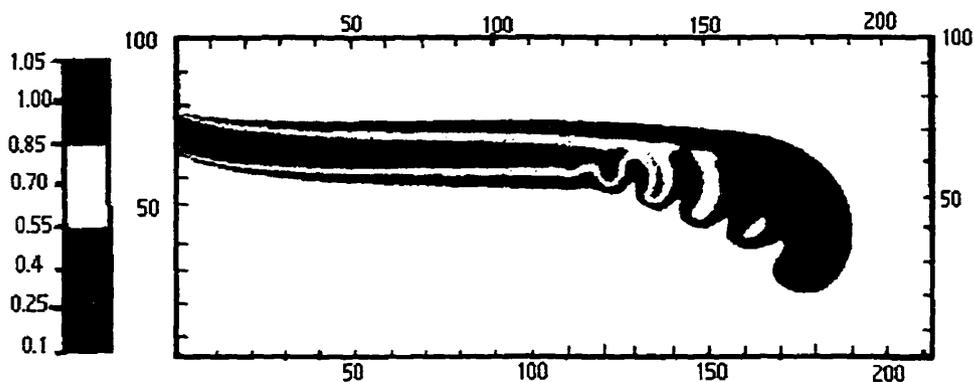


Figure 7. 27 Déploiement du contaminant ($C=2000$ mg/l) à $t=90$ h (maille 5.0mm x 5.0mm, $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=0.0$, maximum $Pe=13$. Schincariol et al., 1995

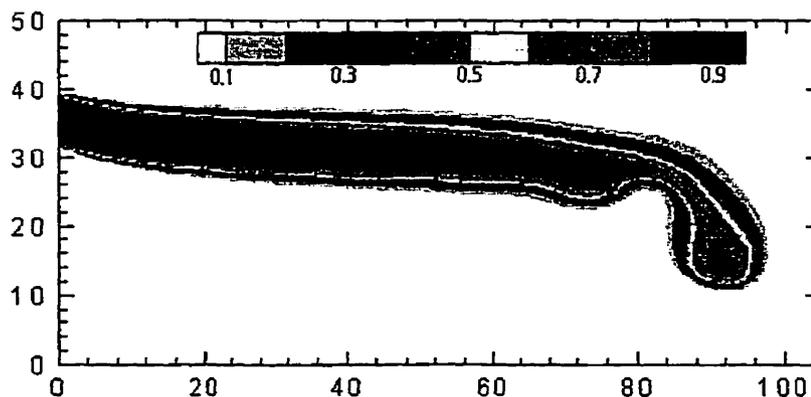


Figure 7. 28 Déploiement du contaminant ($C=2000$ mg/l) à $t=90$ h (maille 7.5mm x 7.5mm, $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=0.0$, maximum $Pe=19.4$

7. 4 Étude du mécanisme de développement et d'amplification des instabilités

Afin d'obtenir une connaissance plus approfondie du mécanisme de développement des instabilités, nous avons effectué une analyse de la sensibilité.

7.4.1 Sensibilité des instabilités à la dispersion

L'influence de la dispersivité du milieu poreux sur la croissance des instabilités a été étudiée à travers 3 exemples de calcul différents. Dans le premier exemple de base, les dispersivités longitudinale et transversale sont égales à $\alpha_L=3.0 \times 10^{-4}$ et $\alpha_T=3.0 \times 10^{-5}$ m respectivement. Dans le second, ces deux paramètres ont été majorés d'un facteur 2 soit $\alpha_L=6.0 \times 10^{-4}$ et $\alpha_T=6.0 \times 10^{-5}$ m et, dans le troisième exemple, d'un facteur 5 ($\alpha_L=1.5 \times 10^{-3}$, $\alpha_T=1.5 \times 10^{-4}$ m). Le domaine de calcul (figure 7.1) est discrétisé en maillage uniforme de 10mmx10mm. Les caractéristiques de l'aquifère ainsi que les autres paramètres de calcul utilisés sont présentés au tableau (7.1).

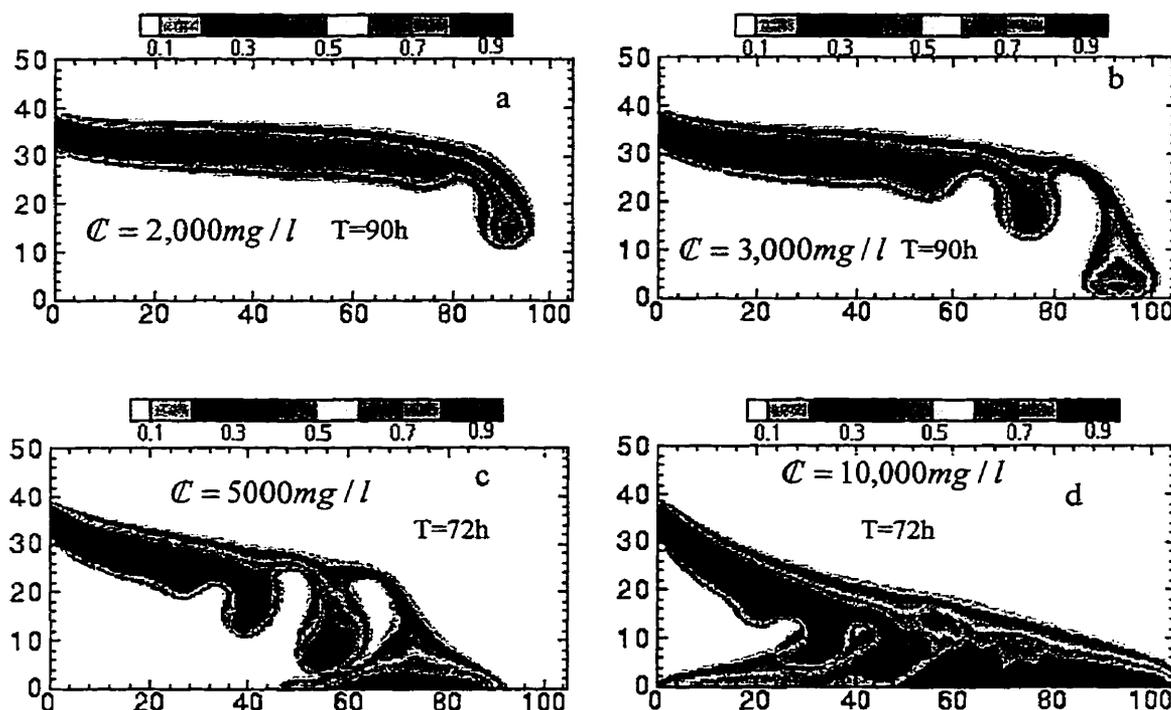


Figure 7. 29 Déploiement du contaminant (maille 10mm x 10mm, $\alpha_L= 3.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t=3.0 \times 10^{-5}$, (a) $C=2g/l$, (b) $C=3g/l$, (c) $C=5g/l$, (d) $C=10g/l$, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)

La variation de la dispersivité modifie le nombre de Péclet mais, comme le schéma utilisé est capable de résoudre l'équation de transport en utilisant un nombre de Péclet élevé sans générer aucune dispersion numérique ni instabilité, il n'est pas nécessaire d'ajuster le maillage du modèle pour chaque simulation.

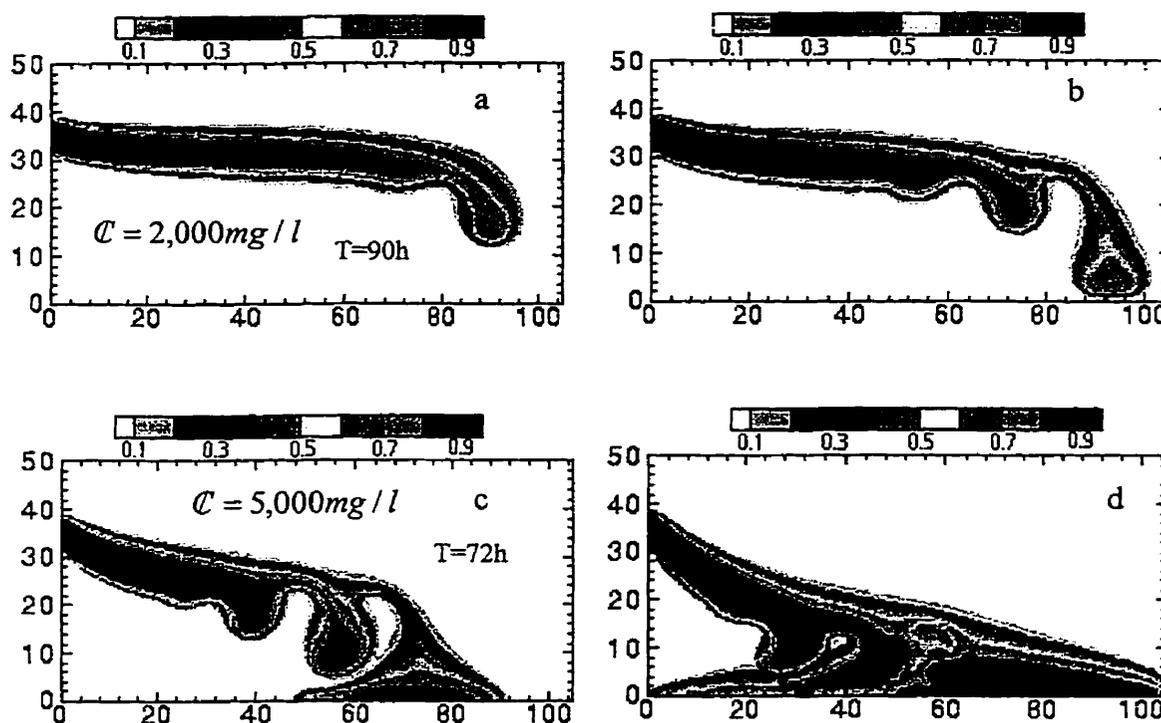


Figure 7. 30 Déploiement du contaminant (maille 10mm x 10mm, $\alpha_L = 6.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t = 6.0 \times 10^{-5}$, (a) $C = 2\text{g/l}$, (b) $C = 3\text{g/l}$, (c) $C = 5\text{g/l}$, (d) $C = 10\text{g/l}$, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)

Les figures 7.29 à 7.31 détaillent le déploiement des contaminants de concentrations 2, 3, 5 et 10g/l de NaCl. La comparaison de ces figures montrent que la diminution de la dispersivité est suivie par la formation d'une poche à la limite inférieure de panache et l'abaissement de sa limite supérieure. La figure 7.32a montre le déploiement d'un panache de concentration de 5g/l de NaCl en utilisant un coefficient

$\alpha_L=1.5 \times 10^{-3} \text{m}$, $\alpha_T=1.5 \times 10^{-5} \text{m}$ alors que la figure 7.32b représente le déploiement du même panache en utilisant un coefficient de dispersivité 5 fois plus petit ($\alpha_L=3 \times 10^{-4} \text{m}$, $\alpha_T=3 \times 10^{-5} \text{m}$). La comparaison de ces deux figures montre que la diminution de la dispersivité est suivie par une augmentation du nombre des digitations ou des instabilités. Ces résultats montrent que la croissance et la dégradation des instabilités sont très sensibles à la variation de la dispersivité du milieu et à la densité du panache. La comparaison des figures 7.30 et 7.31 montre comment un panache réagit à une augmentation de la densité (facteur de déstabilisation) et de la dispersivité (facteur stabilisant). Le panache devient instable ce qui montre que l'instabilité de panache est plus sensible à la densité qu'à la dispersivité.

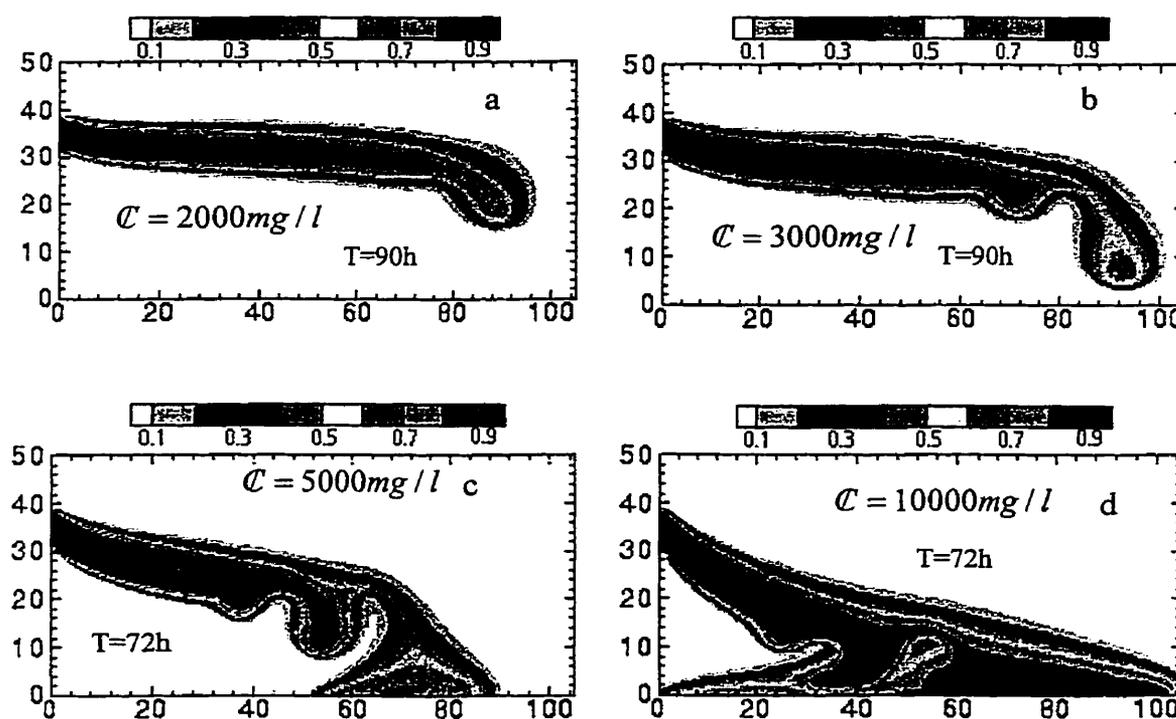


Figure 7.31 Déploiement du contaminant (maille $10 \text{mm} \times 10 \text{mm}$, $\alpha_L=1.5 \times 10^{-3} \text{m}$, $\alpha_t=1.5 \times 10^{-4} \text{m}$, (a) $C=2 \text{g/l}$, (b) $C=3 \text{g/l}$, (c) $C=5 \text{g/l}$, (d) $C=10 \text{g/l}$, les contours de concentration représentent la concentration relative (C/C_0)

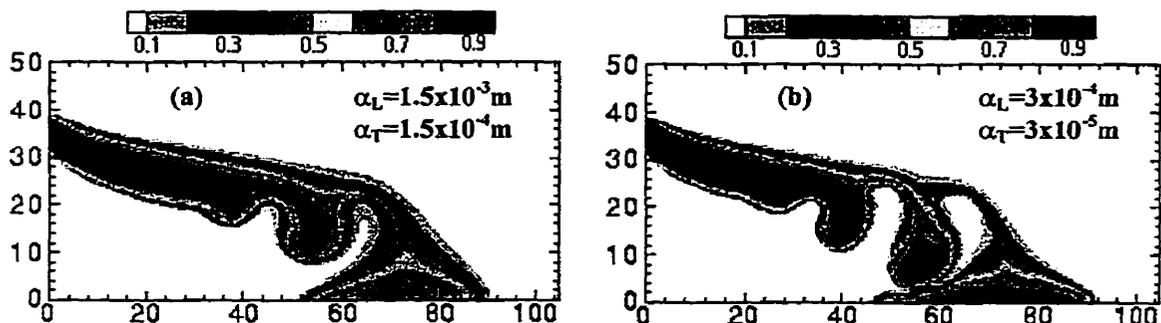


Figure 7.32 Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5000 \text{ mg/l}$) à $t=72\text{h}$,
 (a) $\alpha_L = 1.5 \times 10^{-3} \text{ m}$, $\alpha_T = 1.5 \times 10^{-5} \text{ m}$ (b) $\alpha_L = 3 \times 10^{-4} \text{ m}$, $\alpha_T = 3 \times 10^{-5} \text{ m}$

La figure 7.33 représente un suivi de la position d'une particule injectée au milieu de la source à $t=0$. Le test a été effectué pour différentes concentrations 500, 1000, 2000, 3000, 5000 et 10000 mg/l. On observe que, plus la concentration du panache est élevée, plus la solution pénètre en profondeur.

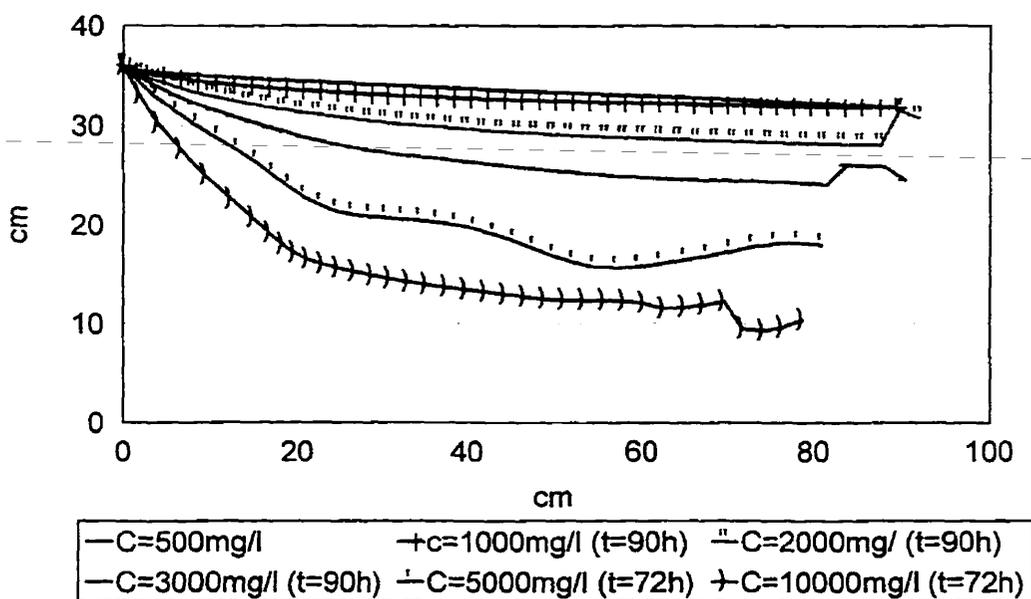


Figure 7.33 suivi d'une particule de concentration 500, 1000, 2000, 3000, 5000 et 10000 mg/l de NaCl

7.4.2 Sensibilité des instabilités à la taille du maillage du domaine modélisé.

La résolution de l'équation de dispersion-convection se heurte à la diffusion numérique qui se traduit par un étalement artificiel du nuage de polluants lorsque la discrétisation du domaine modélisé est trop grossière.

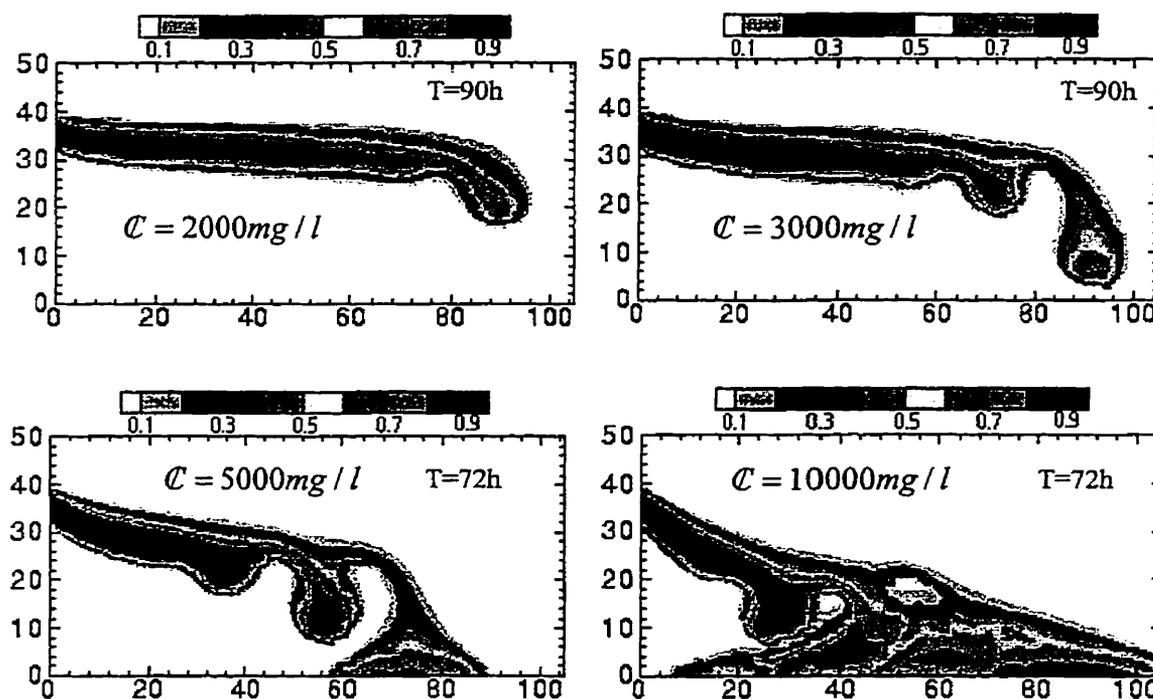


Figure 7. 34 Déploiement du contaminant (maille 15mm x 15mm, $\alpha_L = 6.0 \times 10^{-4}$, $\alpha_t = 6.0 \times 10^{-5}$, maximum $Pe = 22.4$)

Les résultats de Schincariol, 1993 ont montré que, dans un écoulement à densité variable, les instabilités peuvent être générées à travers la propagation de l'erreur numérique. Ces instabilités ne sont pas physiquement réelles, elles sont incontrôlables et difficiles à produire d'un modèle à l'autre. Un critère de discrétisation admis par Schincariol, 1993, est que le nombre de Péclet doit être inférieur ou égal à deux

$\left(\left[P_e = v \frac{\Delta l}{D} \right] \leq 2 \right)$ ce qui revient à dire que la taille de la maille doit être plus petite que

le double de la valeur de la dispersivité $\left(\Delta l \leq \frac{2D}{v} = 2\alpha \right)$. Compte tenu des valeurs de dispersivité rencontrées lors de la simulation, la discrétisation du domaine simulé doit être très fine pour éviter la dispersion et les instabilités numériques.

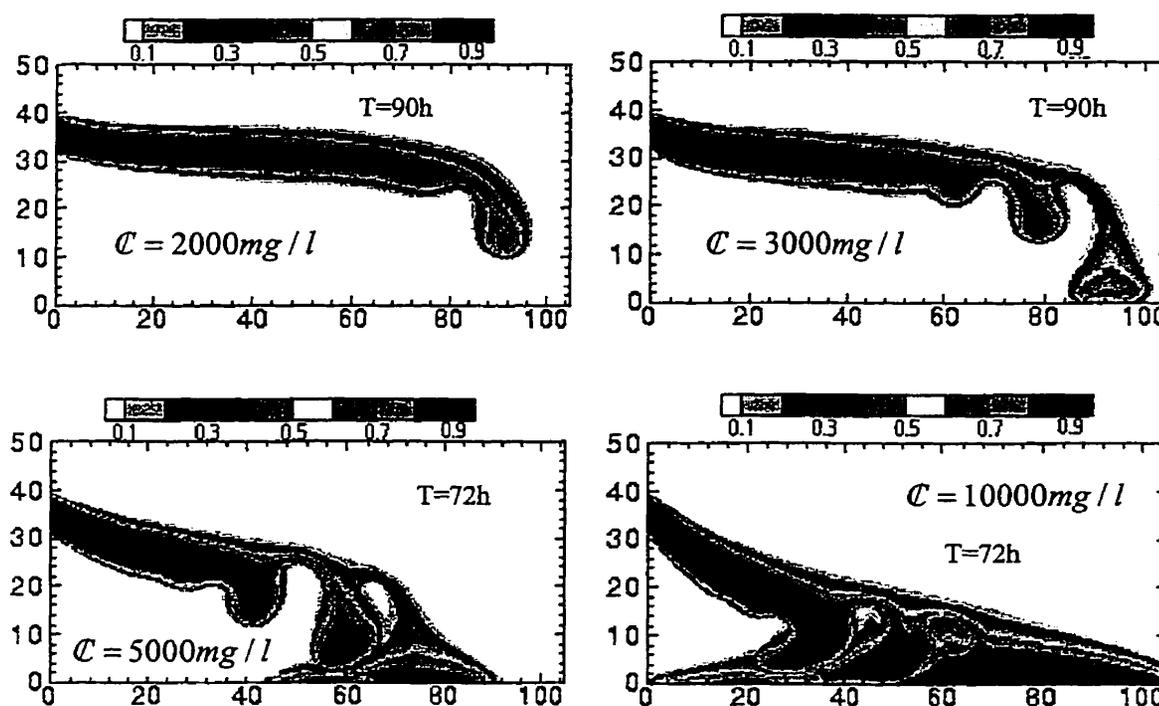


Figure 7.35 Déploiement du contaminant (maille $7.5\text{mm} \times 7.5\text{mm}$, $\alpha_L = 3.0 \times 10^{-5}$, $\alpha_t = 3.0 \times 10^{-5}$, maximum $Pe = 20$)

Si on observe le problème d'une autre façon, on peut se demander si, dans le cas d'une discrétisation fine du domaine simulé, la dispersion est plus efficace à lisser ou éliminer le doigt ou le lobe de perturbation avant que ce dernier ait la chance de croître ou de se former dans un écoulement à densité variable. Il est clair que, pour étudier l'influence de la taille de la grille de calcul sur le développement des instabilités dans un écoulement à densité variable, il est important que le schéma utilisé pour la

simulation possède des qualités de dispersion numérique minimales. La méthode EPCOF constitue un choix intéressant. En effet, comme l'ont montré les résultats précédents, le schéma est capable de résoudre le phénomène de transport sans générer de dispersion numérique ni instabilité en utilisant un nombre de Péclet élevé.

La sensibilité du développement des instabilités au changement de la taille de la grille de calcul a été testée à travers 3 exemples de simulation en utilisant un maillage de 7.5, 1.0 et 1.5 mm respectivement. Les résultats obtenus (figure 7.32) montrent que la taille de la grille de calcul n'a pas d'influence sur le développement des instabilités.

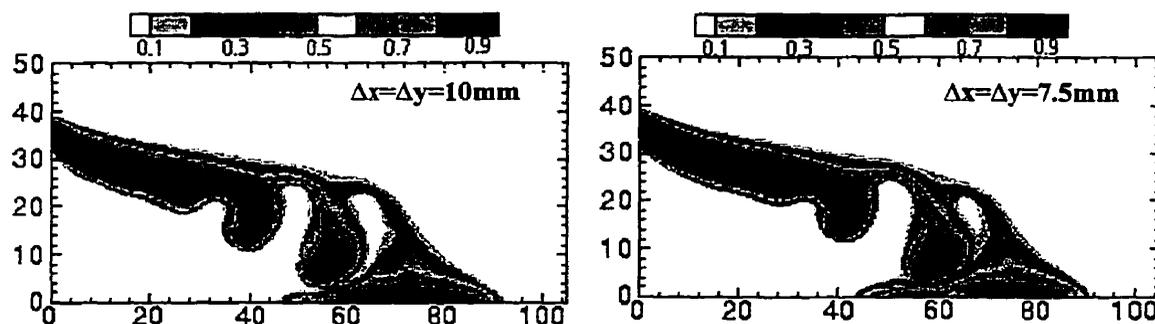


Figure 7. 36 Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5000\text{mg/l}$) à $t=72\text{h}$,
(a) $\Delta x=\Delta y=10\text{mm}$ (b) $\Delta x=\Delta y=7.5\text{mm}$

7.4.3 Sensibilité des instabilités à la vitesse de l'écoulement

La sensibilité du développement des instabilités aux variations de la vitesse de l'écoulement a été testée à travers trois séries d'exemples de trois simulations chacune avec des panaches de concentration 2000mg/l, 3000mg/l et 5000mg/l. La vitesse de l'écoulement de la première série est de $2.76 \times 10^{-6}\text{m/s}$. Dans la seconde série, elle a été réduite d'un facteur 0.75 ($v=2.07 \times 10^{-6}\text{m/s}$) et elle a été augmentée d'un facteur 1.5 ($v=4.1 \times 10^{-6}\text{m/s}$) dans la troisième série. La figure 7.37 montre clairement que les instabilités sont sensibles à la vitesse de l'écoulement. L'augmentation de la vitesse

réduit le nombre des instabilités, alors que la diminution de la vitesse augmente le nombre des instabilités.

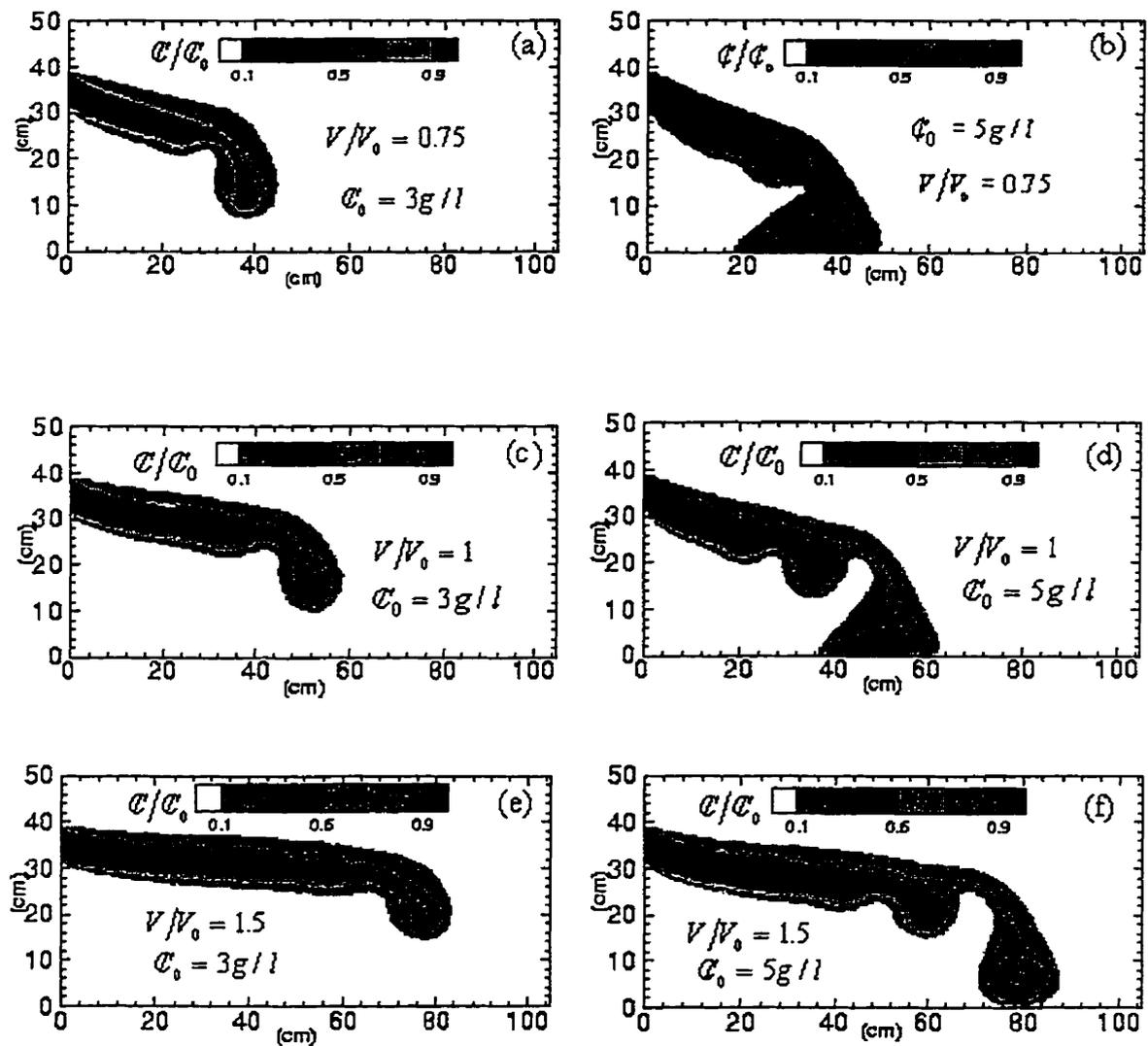


Figure 7.37 Contours des concentrations relatives (C/C_0) à $t=72h$, (a) $C_0=3g/l$, $v/v_0=0.75$ (b) $C_0=5g/l$, $v/v_0=0.75$ (c) $C_0=3g/l$, $v/v_0=1$ (d) $C_0=5g/l$, $v/v_0=1$ (e) $C_0=3g/l$, $v/v_0=1.5$ (f) $C_0=5g/l$, $v/v_0=1.5$

Puisque le coefficient de dispersion est le produit de la dispersivité et de la vitesse ($D=\alpha v$), le changement de la vitesse par une constante est similaire à un

changement de la dispersivité par la même constante. La figure 7.38 représente le déploiement des panaches pour une augmentation/réduction de la dispersivité et une augmentation/réduction de la vitesse par le même facteur. On peut voir que les déploiements des panaches sont similaires mais pas identiques. La croissance/dégradation des instabilités est plus sensible à la variation de la dispersivité qu'à celle de la vitesse. L'effet de ces deux paramètres est différent; ceci est peut-être dû à la présence des termes de dispersion (D) et de vitesse (v) considérés séparément dans l'équation de continuité et de transport.

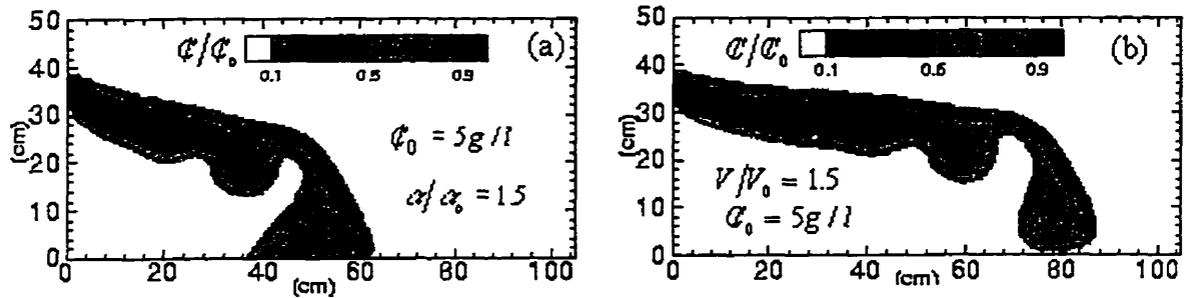


Figure 7.38 Contours des concentrations relatives (C/C_0 , $C_0 = 5g/l$) à $t=54h$, (a) $v/v_0=1$, $\alpha/\alpha_0=1.5$ (b) $v/v_0=1.5$, $\alpha/\alpha_0=1$

7.4.4 Sensibilité des instabilités à la perméabilité

L'exemple suivant examine comment la croissance/dégradation des instabilités dépend de la caractéristique de perméabilité du milieu. Nous avons fait varier la perméabilités dans cinq séries d'exemples de trois simulations chacune avec des panaches de concentration 2000mg/l, 3000mg/l et 5000mg/l. Les 3 premières séries de simulations impliquent un milieu homogène isotropique ($K_x = K_z = \text{constante}$). La valeur de la perméabilité a été modifiée d'un facteur de 0.75 et 1.5 par rapport à la valeur de base de $5.7 \times 10^{-11} m^2$. La figure 7.39 illustrant le déploiement d'un panache, montre

qu'une augmentation de la perméabilité favorise la croissance des instabilités, alors que sa réduction réduit la croissance des instabilités.

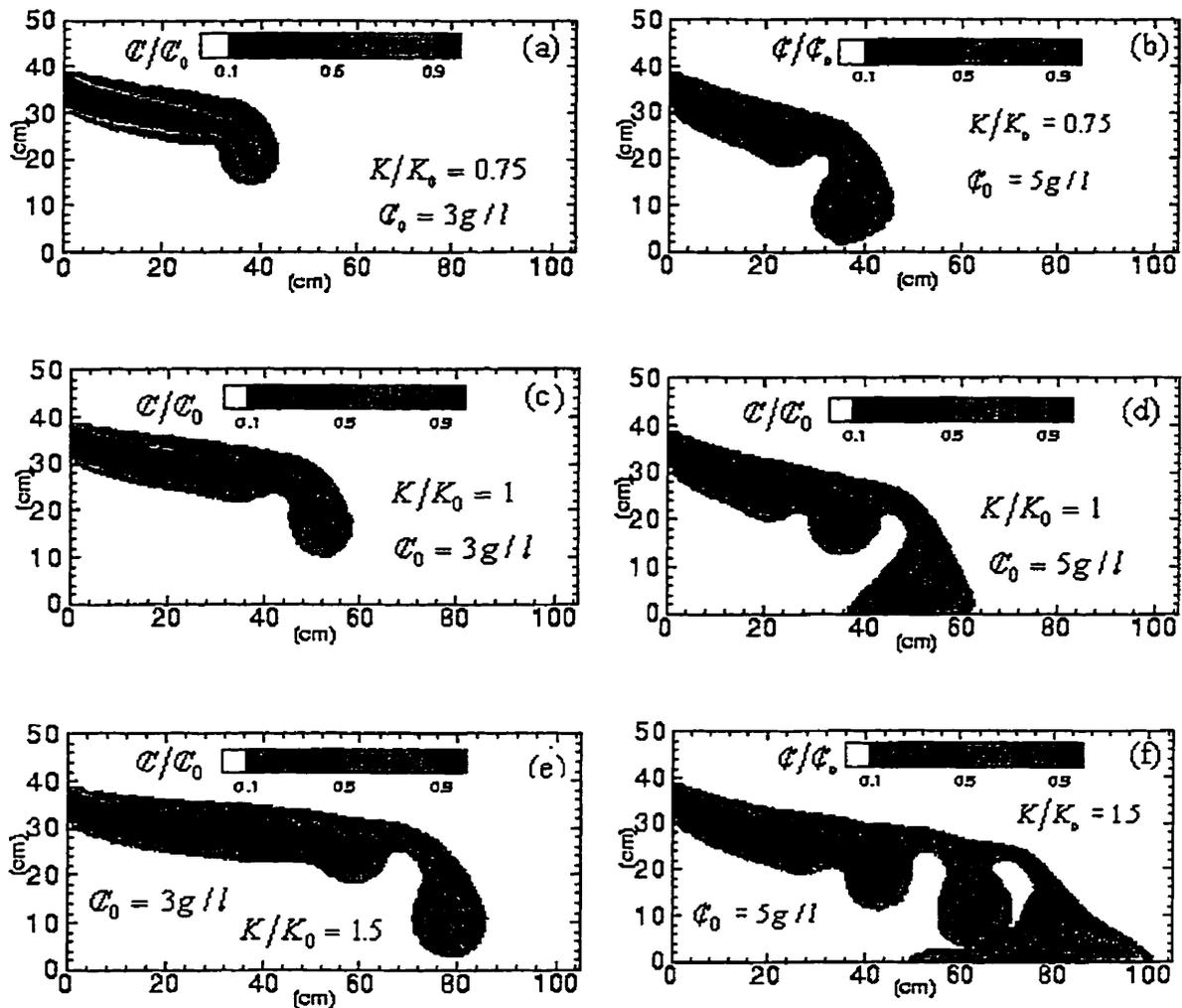


Figure 7.39 Contours des concentrations relatives (C/C_0) à $t=54h$, (a) $C_0=3g/l$, $v/v_0=0.75$ (b) $C_0=5g/l$, $K/K_0=0.75$ (c) $C_0=3g/l$, $K/K_0=1$ (d) $C_0=5g/l$, $K/K_0=1$ (e) $C_0=3g/l$, $K/K_0=1.5$ (f) $C_0=5g/l$, $K/K_0=1.5$

Puisque la valeur de la vitesse est le produit de la perméabilité et du gradient hydraulique $\left(V = \frac{K}{\theta} \frac{\partial h}{\partial z}\right)$, le changement de la perméabilité par une constante est similaire à un changement de la vitesse par la même constante. Le changement de la

vitesse par une constante produit le changement de la diffusion par la même constante ($D_L = \alpha_L v$ et $D_T = \alpha_T v$). La figure 7.40 représente le déploiement des panaches pour une augmentation/réduction de la perméabilité, une augmentation/réduction de la vitesse et une augmentation/réduction de la dispersion. On peut voir que les déploiements des panaches ne sont pas identiques. La croissance/dégradation des instabilités est plus sensible à la variation de la perméabilité qu'à celle de la dispersivité et de la vitesse.

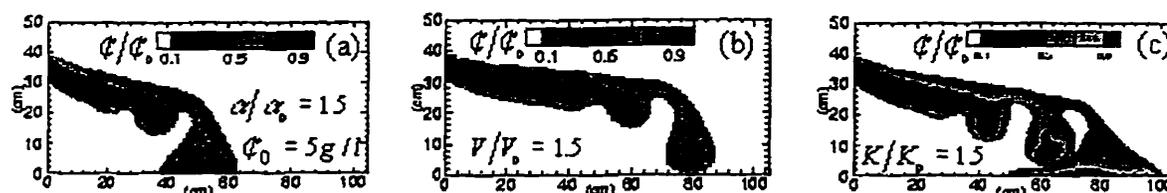


Figure 7.40 Contours des concentrations relatives ($C/C_0, C_0 = 5g/l$) à $t=54h$, (a) $v/v_0=1, K/K_0=1, \alpha/\alpha_0=1.5$ (b) $v/v_0=1.5, K/K_0=1, \alpha/\alpha_0=1$ (c) $K/K_0=1.5, \alpha/\alpha_0=1$

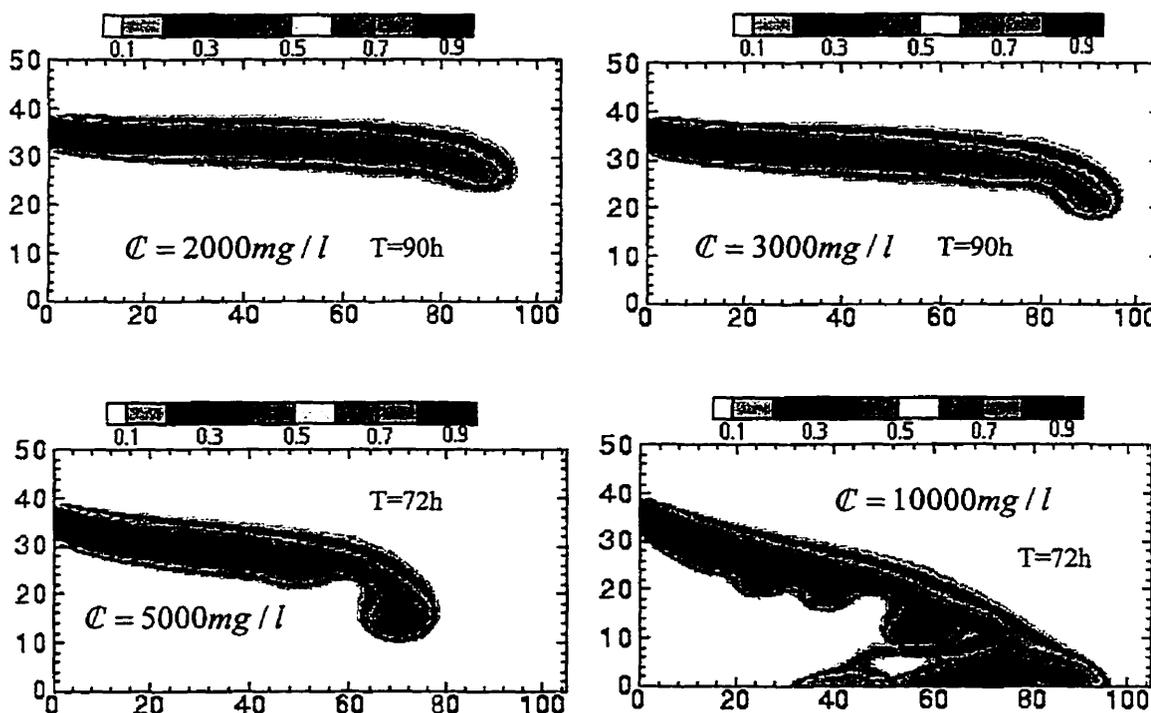


Figure 7.41 Déploiement du contaminant (maille $10mm \times 10mm, \alpha_L = 3.0 \times 10^{-4}, \alpha_T = 3.0 \times 10^{-5}, (K_x/K_z) = 2.5$

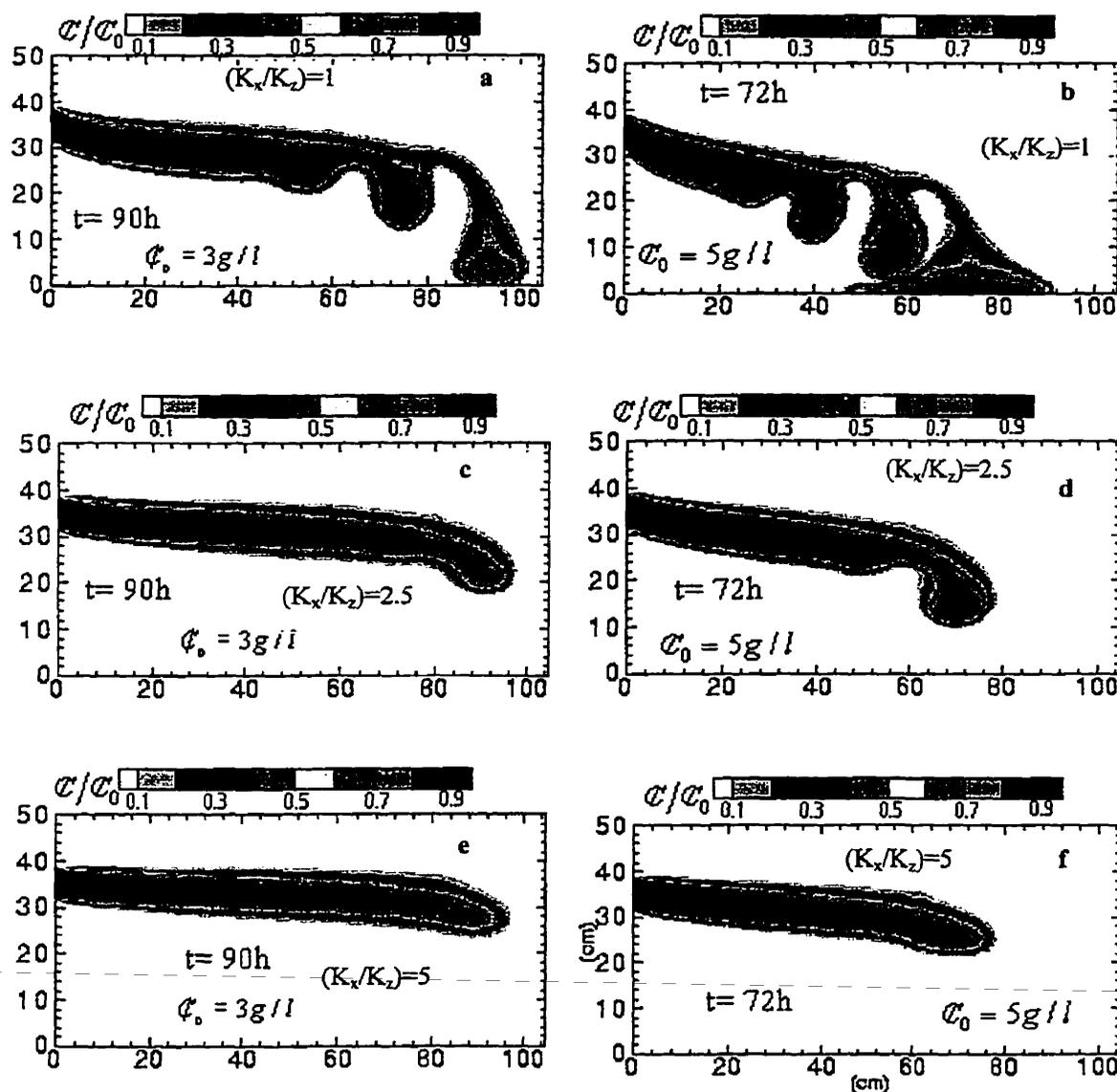


Figure 7.42 Contours des concentrations relatives (C/C_0), (a) $C_0=3\text{g/l}$, $K_x/K_z=1$, à $t=90\text{h}$ (b) $C_0=5\text{g/l}$, $K_x/K_z=1$ à $t=72\text{h}$ (c) $C_0=3\text{g/l}$, $K_x/K_z=2.5$, à $t=90\text{h}$ (d) $C_0=5\text{g/l}$, $K_x/K_z=2.5$, à $t=72\text{h}$ (e) $C_0=3\text{g/l}$, $K_x/K_z=5$ à $t=90\text{h}$ (f) $C_0=5\text{g/l}$, $K_x/K_z=5$ à $t=72\text{h}$

Les deux dernières séries ont examiné l'effet de l'anisotropie sur la propagation des instabilités. La figure 7.42 c et d reporte les simulations dans lesquelles l'anisotropie du milieu a été modifiée d'un facteur de ($k_x/k_z=2.5$) et la figure 7.42 e et f

reporte les simulations dans lesquelles l'anisotropie a été augmentée d'un facteur de ($k_x/k_z=5$). Ces figures montrent que l'anisotropie réduit la croissance des instabilités. L'augmentation de l'anisotropie d'un facteur de 2.5 rend un panache de concentration initiale 3000mg/l stable, cependant une augmentation de d'un facteur de 5 rend le panache de concentration 5000mg/l stable. La figure 7.20 de distribution de vitesse montre que, pour que les instabilités se forment, il faut que le fluide plus dense coule davantage vers le bas et le fluide moins dense se déplace vers le haut pour balancer le mouvement du fluide le plus dense. Dans un milieu anisotrope ($K_x > K_z$) homogène, le fluide à tendance à se déplacer dans la direction horizontale, ce qui réduit le mouvement vers le bas et vers le haut, réduisant ainsi la croissance des instabilités.

7.5 Conclusion

La comparaison de nos résultats numériques avec les observations expérimentales et les résultats numériques de Schincariol et al. montre que notre modèle est en mesure de traiter le transport d'un panache de polluant de masse volumique variable dans un écoulement à densité variable.

Le modèle est capable de résoudre le problème de dispersion + convection avec une grande précision en utilisant un nombre de Péclet variant entre 0 et ∞ et un nombre de Courant élevé, la taille du maillage étant limitée par la précision de calcul des termes diffusifs. Ceci permet de diminuer la durée du temps de calcul. C'est pourquoi notre modèle est avantageux pour des simulations à long terme.

Les résultats ont révélé que l'écoulement perd son caractère stable à partir d'une certaine concentration. Les instabilités qui apparaissent se manifestent par la formation de lobes d'amplitude significative le long de la limite inférieure du mélange. L'analyse de la sensibilité a montré que, parmi les facteurs influençant la formation des instabilités, on trouve essentiellement la dispersivité, la vitesse et la perméabilité.

CHAPITRE VIII

Transport d'un panache à plusieurs éléments contaminants dans un écoulement à densité variable

8.1 Introduction

Au chapitre 7, nous avons étudié l'origine et la propagation des instabilités dans un écoulement à densité variable. Cette étude, comme la plupart des autres études touchant les écoulements à densité variable dans le milieu poreux, se limite à l'analyse du transport d'un seul élément polluant. En réalité, un panache est composé de plusieurs éléments contaminants (Na^+ , Ca^+ , Mg^{2+} , Cl^- , SO_4^{2-}). De plus, l'incidence de la densité et de l'adsorption sur le transport et le devenir d'un panache à plusieurs éléments contaminant ne sont pas bien connus.

L'objectif de ce chapitre est de tester la capacité du modèle à calculer le transport de deux ou plusieurs contaminants dans un écoulement à densité variable, et de comprendre comment une simple réaction chimique dans un écoulement à densité variable peut modifier les caractéristiques de l'écoulement et la forme du panache.

8.2 Calcul de la densité et de la viscosité

Dans le cas du transport de deux ou plusieurs polluants, les variations de la masse volumique et de la viscosité du mélange sont difficile à calculer car il n'existe pas d'équation exacte. Zhang et Schwartz (1995) ont étudié le transport de deux contaminants (NH_3 , NaCl) dans un écoulement à densité variable. Les auteurs ont

supposé que la variation de la densité du mélange ρ_m dilué est linéaire en fonction de la concentration de l'ensemble des polluants .

$$\rho_m = \rho_0 + \sum_{k=1}^n a_k C_k \quad 8.1$$

où C_k est la concentration du contaminant k, a_k est le paramètre qui décrit la dépendance de la densité à la concentration de polluant. Le paramètre a_k peut être déterminé à partir des données expérimentales. En supposant que $a_k = (\rho_k^{ref} - \rho_0) / C_k^{ref}$, l'équation (8.1) s'écrit:

$$\rho_m = \rho_0 \left(1 - \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \right) + \sum_{k=1}^n \frac{C_k}{C_k^{ref}} \rho_k^{ref} \quad 8.2$$

où C_k^{ref} est la concentration de référence du polluant k dont la densité est connue.

La concentration C_k^{ref} est généralement supérieure à la concentration maximale C_k pour s'assurer que le premier terme de l'équation (8.1) soit positif.

En supposant qu'il n'existe pas de réaction chimique entre les différents polluants, la viscosité du mélange μ_m est donnée par [Green, 1984; Reid et al., 1987; Zhang et al., 1995].

$$\ln \mu_m = \sum_{k=1}^n w_k \ln \mu_k^{ref} + \left(1 - \sum_{k=1}^n w_k \right) \ln \mu_w^{ref} \quad 8.3$$

où μ_k^{ref} est la viscosité dynamique du fluide avec une concentration de référence C_k^{ref} et w_k est la masse du polluant k.

Les relations empiriques (8.2) et (8.3) ont été testées par [Zhang et al., 1995] pour deux types de polluants: NaCl et NH₃. La concentration des polluants, les valeurs expérimentales [Weast, 1989], les valeurs estimées de la densité, de la viscosité et l'erreur de calcul sont données aux tableaux 8.2 et 8.3. Alors que les valeurs utilisées dans ce calcul sont présentées au tableau 8.1.

Tableau 8.1 Paramètres de calcul de la densité et de la viscosité

Paramètres	Valeurs
densité de l'eau à 20 °C ρ_0	998.2 $kg\ m^{-3}$
densité de référence:20200 mg/L (NaCl) ρ_{NaCl}^{ref}	1012.5 $kg\ m^{-3}$
densité de référence:54400 mg/L (NH3) ρ_{NH3}^{ref}	973 $kg\ m^{-3}$
Viscosité de l'eau à 20 °C μ_0	1.002 x 10 ⁻³ $kg\ m^{-3}\ s^{-1}$
Viscosité de référence: 20200 mg/L (NaCl) μ_{NaCl}^{ref}	1.002 x 10 ⁻³ $kg\ m^{-3}\ s^{-1}$
viscosité de référence : 54400 mg/L (NH3) μ_{NH3}^{ref}	1.002x 10 ⁻³ $kg\ m^{-3}\ s^{-1}$

Tableau 8.2 Densité et viscosité de NH3 [Zhang et al., 1994]

C_{NH3} g/l	ρ_{NH3} kg/m ³	ρ_{NH3}^{est} kg/m ³	Erreur %	μ_{NH3}/μ_{eau}	$\mu_{NH3}^{est} / \mu_{eau}$	Erreur %
5	996	996.04	-0.0043	1.007	1.0067	0.0307
9.9	993.8	993.93	-0.0129	1.013	1.0133	-0.0316
14.9	991.7	991.77	-0.0071	1.02	1.0202	-0.0156
19.8	989.5	989.66	-0.0158	1.027	1.0269	0.0063
24.7	987.4	987.54	-0.0144	1.034	1.0338	0.0208
29.6	985.3	985.43	-0.0129	1.041	1.0407	0.0278
34.4	983.2	983.36	-0.0159	1.048	1.0476	0.0411
39.2	981.1	981.28	-0.0188	1.055	1.0545	0.0472
44.1	979	979.17	-0.0174	1.062	1.0617	0.0322
48.8	977	977.14	-0.0146	1.069	1.0686	0.0378
53.6	975	975.07	-0.0073	1.076	1.0758	0.0224
58.4	973	973.0	0.000	1.083	1.083	0.000

Tableau 8.3 Densité et viscosité de NaCl [Zhang et al., 1994]

C_{NaCl} g/l	ρ_{NaCl} kg/m ³	$\rho_{\text{NaCl}}^{\text{est}}$ kg/m ³	Erreur %	$\mu_{\text{NaCl}}/\mu_{\text{eau}}$	$\mu_{\text{NaCl}}^{\text{est}}/\mu_{\text{eau}}$	Erreur %
1	998.9	998.91	-0.0008	1.002	1.0017	0.032
2	999.7	999.62	0.0084	1.004	1.0034	0.0639
3	1000.4	1000.32	0.0076	1.006	1.0050	0.0956
4	1001.1	1001.03	0.0068	1.007	1.0067	0.0279
5	1001.8	1001.74	0.0060	1.009	1.0084	0.0595
6	1002.5	1002.45	0.0052	1.011	1.0101	0.0909
7	1003.2	1003.16	0.0044	1.013	1.0118	0.1221
8	1003.9	1003.86	0.0036	1.015	1.0134	0.1532
9	1004.6	1004.57	0.0029	1.016	1.0151	0.0859
10.1	1005.3	1005.35	-0.0050	1.018	1.0170	0.1003
11.1	1006	1006.06	-0.0058	1.02	1.0187	0.1312
12.1	1006.8	1006.77	0.0034	1.021	1.0203	0.0641
13.1	1007.5	1007.47	0.0026	1.023	1.0220	0.0948
14.1	1008.2	1008.18	0.0018	1.025	1.0237	0.1254
15.1	1008.9	1008.89	0.0010	1.026	1.0254	0.0585
16.2	1009.6	1009.67	-0.0068	1.028	1.0273	0.0726
17.2	1010.3	1010.38	-0.0075	1.029	1.0289	0.0058
18.2	1011	1011.08	-0.0083	1.031	1.0306	0.0363
19.2	1011.7	1011.79	-0.0091	1.032	1.0323	-0.0303
20.2	1012.5	1012.5	0.000	1.034	1.0340	0.000

8.3 Les facteurs influençant la propagation d'un panache à plusieurs éléments contaminants

Le chapitre 7 a illustré comment une variation de la densité, de la dispersivité, de la vitesse et/ou de la perméabilité peut modifier le comportement d'un panache. Dans la première partie de ce chapitre, nous allons étudier l'effet de la densité et de l'adsorption sur la propagation d'un panache à plusieurs éléments contaminants dans un milieu poreux saturé. Dans la deuxième partie, nous allons étudier l'influence de la fraction d'eau mobile, de l'adsorption et de la densité sur la propagation d'un panache à plusieurs éléments contaminants dans un milieu poreux non saturé.

8.3.1 Milieu saturé

Dans cette partie, nous allons étudier l'influence de la densité et de l'adsorption sur la migration d'un panache constitué de deux contaminants (NaCl et NH₃) dans un milieu isotopique et saturé. Les caractéristiques de l'aquifère ainsi que les paramètres utilisés sont similaires à ceux des exemples précédents (tableau 7.1 et figure 7.1). Le NaCl est considéré comme un contaminant non réactif ($R=1$) et plus dense que l'eau, alors que le NH₃ est considéré réactif ($R>1$) et moins dense que l'eau.

8.3.1.1 Effet de la variation de facteur de retard du contaminant 2 (NH₃)

L'effet de facteur de retard du contaminant 2 (NH₃) sur la distribution de la concentration relative a été examiné à travers deux séries de simulations en utilisant un coefficient de retard $R_2=4.0$ et 1.8 respectivement. La concentration initiale de chaque élément dans les deux simulations est $C_1=10000\text{mg/l}$ et $C_2=100\text{mg/l}$.

Les déploiements du contaminant 1 (NaCl) des deux simulations sont comparés à $t=72\text{h}$. Comme le montre la figure 8.1, les panaches obtenus par les deux simulations sont visiblement les mêmes. Le déploiement du contaminant 2 (NH₃), qui est présent en faible quantité, n'est pas capable de changer le comportement de l'écoulement qui est dominé par la densité et la viscosité du panache 1 (NaCl).

La mobilité du panache 2 dans les eaux souterraines est fortement affectée par le coefficient de retard. Quand $R_2=4$, le panache 2 se détache du panache 1 et suit une trajectoire différente du premier panache. Le déploiement du contaminant 2 est légèrement affecté par les instabilités de l'écoulement créés par le panache 1. Par contre, quand on réduit le coefficient de retard à 1.8 , le contaminant 2 a tendance à suivre le trajectoire du contaminant 1. Le panache 2 descend jusqu'au fond de l'aquifère comme le premier panache, et on observe la formation des instabilités sur le profil des deux panaches. La zone de mouvement de fluide vers le haut et vers le bas est visible dans la figure (8.2) de suivi des particules.

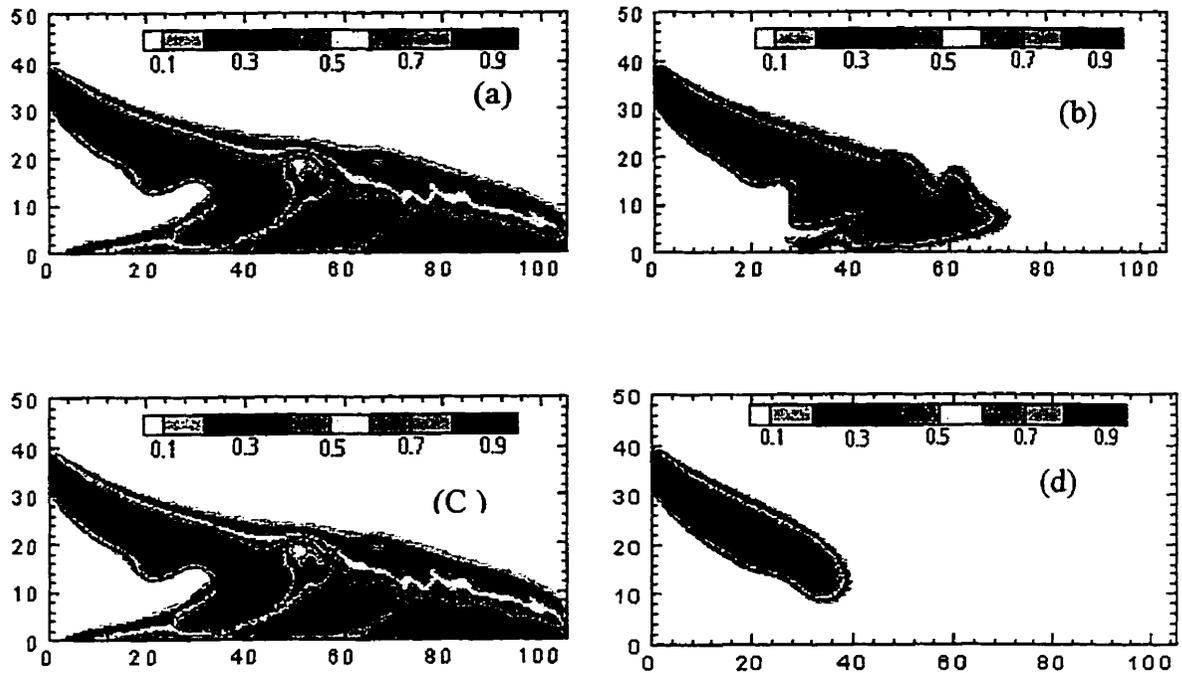


Figure 8. 1 Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1=10,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (b) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (c) $C_1=10,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (d) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=4.0$

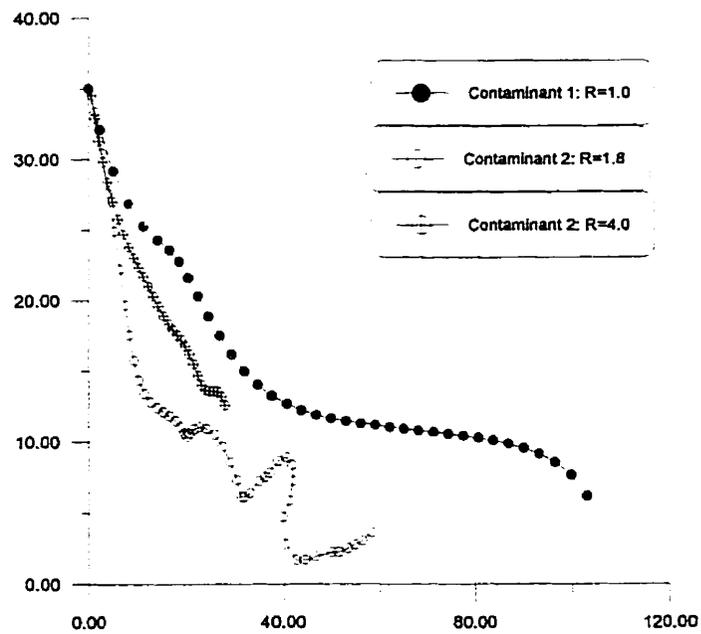


Figure 8. 2 Suivi de particules ($C_1 = 10,000\text{mg/l}$ et $C_2=100\text{mg/l}$)

8.3.1.2 Effet de la variation de la concentration du contaminant 1 (NaCl)

Afin d'étudier l'effet de la concentration du contaminant 1 sur le déploiement des contaminants 1 et 2, nous avons répété les simulations de l'exemple précédent en réduisant la concentration du contaminant 1 à $C_1=5000\text{mg/l}$.

La comparaison des figures 8.1a et 8.3a. montre que, plus le panache est dense, plus il pénètre à une grande profondeur. De plus, on observe une croissance des instabilités locales de grandes amplitudes modifiant les caractéristiques de déplacement des deux panaches.

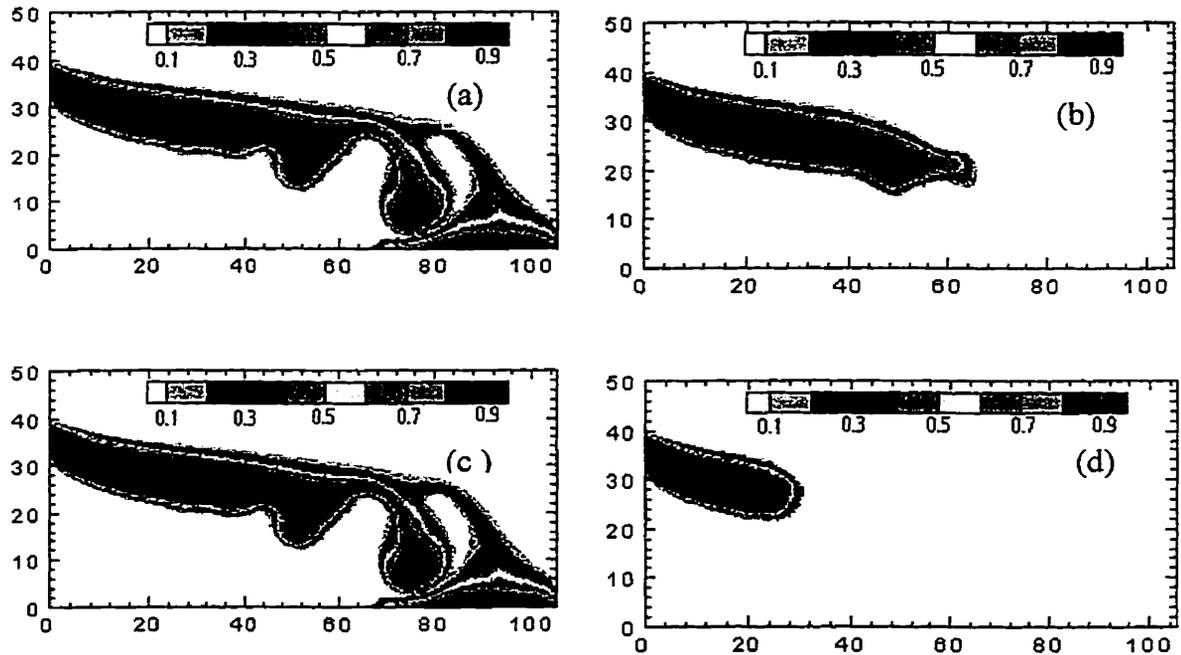


Figure 8. 3 Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (b) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (c) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (d) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=4.0$

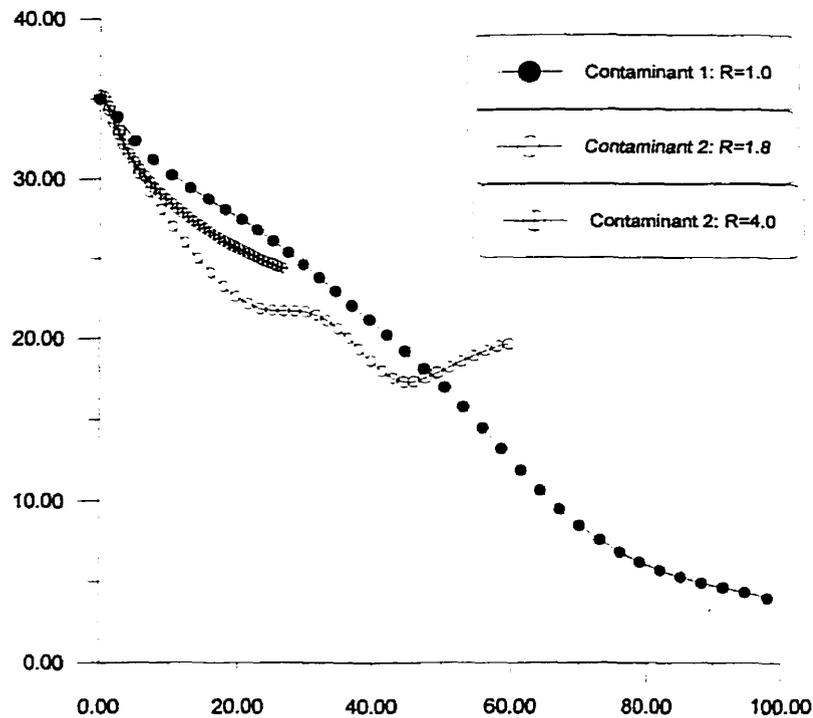


Figure 8. 4 Suivi de particules ($C_1 = 5,000\text{mg/l}$ et $C_2 = 100\text{mg/l}$)

8.3.1.3 Effet de la variation de la concentration du contaminant 2 (NH_3).

Les 3 simulations suivantes étudient l'effet de variation de la concentration du contaminant 2. Dans ces simulations, la concentration $C_1 = 5,000\text{mg/l}$ alors que la concentration et le coefficient de retard (R) du panache 2 ont été variés dans les 3 simulations. Dans la première simulation, $C_2 = 100\text{mg/l}$. et $R_2 = 1.8$, dans la seconde $C_2 = 3,000\text{mg/l}$. et $R_2 = 1.8$ et, dans la troisième, $C_2 = 3,000\text{mg/l}$ et $R_2 = 1.2$.

La figure (8.5) montre le déploiement des deux contaminants à $t = 72\text{h}$. L'analyse de cette figure montre que l'influence du panache 2 sur la densité est visible. En effet, on observe que, plus la concentration du contaminant 2 (moins dense que l'eau) est importante, plus les instabilités locales du panache 1 perdent de l'amplitude.

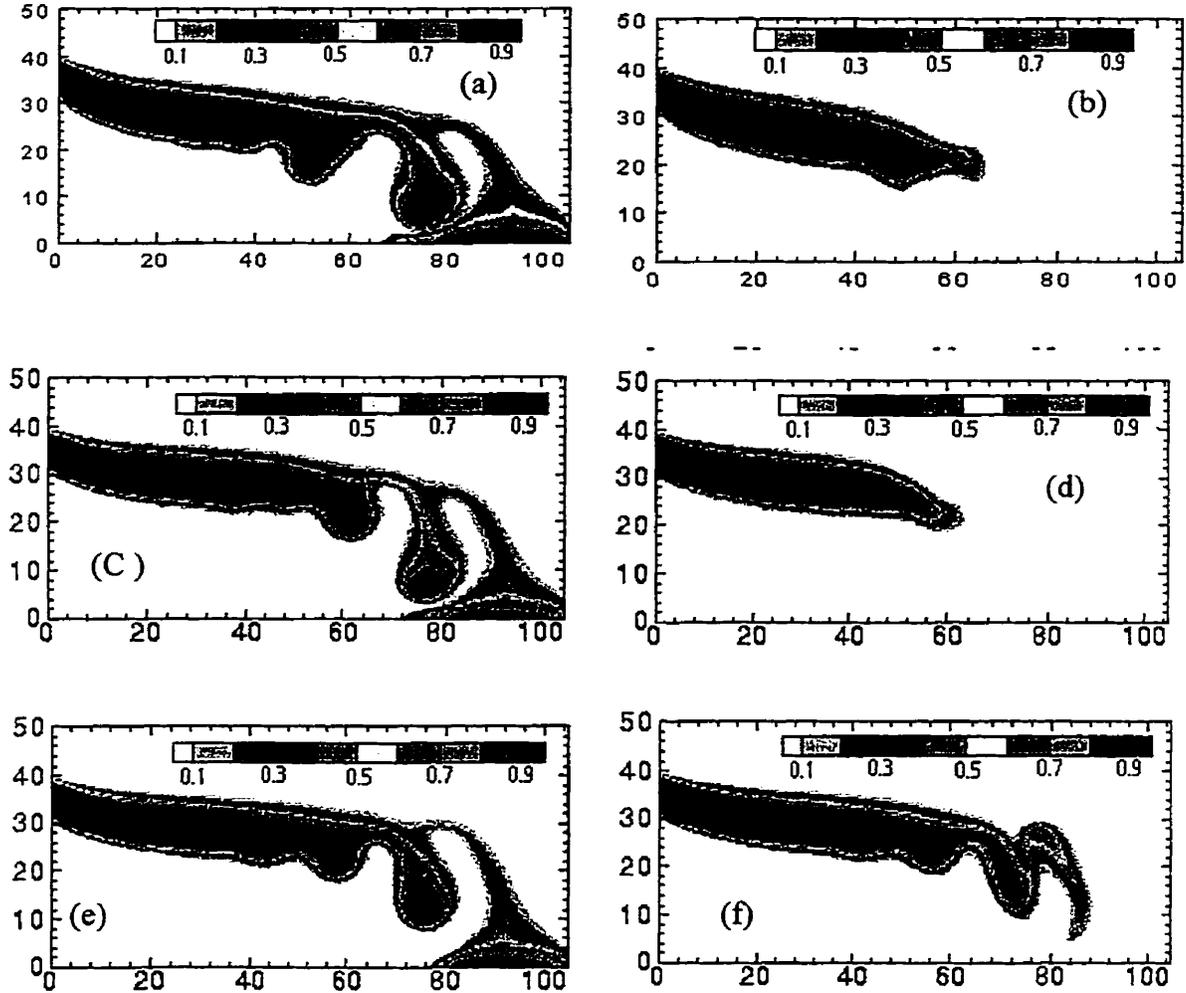


Figure 8. 5 Déploiement des contaminants 1 et 2: (a) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (b) $C_2=100\text{mg/l}$, $R_2=1.8$; (c) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (d) $C_2=3,000\text{mg/l}$, $R_2=1.8.0$; (e) $C_1=5,000\text{mg/l}$, $R_1=1.0$; (f) $C_2=3,000\text{mg/l}$, $R_2=1.2$

8.3.2 Milieu non saturé

Avant d'étudier l'influence de la fraction mobile, de la densité et de l'adsorption sur la migration d'un panache constitué de plusieurs contaminants dans un milieu non-saturés, nous proposons tout d'abord de valider le modèle de transport dans un milieu

non saturé en comparant les résultats numériques obtenus avec les résultats numériques de Gambaliti, 1996.

8.3.2.1 Test de validation

Ce test de validation est adopté à partir des études numériques de Gureghian, 1983 et Gambaliti, 1996. Il concerne l'écoulement et le transport dans une nappe drainée avec infiltration à la surface. La figure 8.6 montre le domaine de calcul. La surface du sol (ligne FC) est sujette à une infiltration de la pluie de l'ordre de $V_2=0.1 K_s$, où K_s est la conductivité hydraulique saturée ($K_s=1 \text{ cm/j}$) qui est considérée homogène et isotropique. La portion de surface du sol (ED) correspond à un bassin de rétention, qui constitue une source supplémentaire d'infiltration de l'ordre de $0.05 K_s$. Ce bassin a été utilisé pour une période de 15 jours comme un site de déversement de deux déchets liquides: le premier contaminant est non réactif alors que le second est réactif.

Le domaine de calcul et les conditions frontières sont présentés à la figure (8.6). Les équations de base sont données par les équations (3.18 et 3.20), dont les conditions initiales et frontières du problème d'écoulement sont données au tableau 8.4: et celles du problème de transport sont données au tableau 8.6

Tableau 8.4 Conditions initiales et frontières du problème d'écoulement

$h(x,z,0)$	en AG
$v_1 = K \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) = 0$	en FG et BC
$v_2 = K \left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0} \right) = 0$	en AB
$v_2 = K \left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0} \right) = V_r = 0.1 K_s$	EF et CD
$v_2 = K \left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho}{\rho_0} \right) = V_r + V_s = 0.15 K_s$	ED et AB

Les courbes caractéristiques du sol sont définies par la méthode de Gardner (1958).

$$k_r = \frac{a}{b + |h|^m}, S_w = \frac{c}{d + |h|^n}; \quad h < h_{cf} \quad 8.4$$

$$k_r = 1, S_w = 1; \quad h \geq h_{cf} \quad 8.5$$

où a, b (ont les mêmes unités que h^m), c, d (ont les mêmes unités que h^n), m, et n sont des constantes dont les valeurs sont données au tableau (8.5).

Tableau 8.5 Paramètres de la fonction qui décrit les propriétés hydraulique du sol

a	b	c	d	m	n	K_s	ϕ (porosité)
3.6×10^5	3.6×10^5	4.0×10^4	4.0×10^4	4.5	2.9	1 cm/j	$0.3 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3$

avec $h_{cf} = -10$ cm, la teneur en eau relative $\theta_r = 0.165$, la compressibilité de l'eau $\beta = 10^{-8}$, la compressibilité du sol $\alpha = 10^{-4}$ et la densité du sol $\gamma_s = 2.0 \text{ gm/cm}^3$.

Tableau 8.6 Conditions initiales et frontières du problème de transport

$C = 0$	à $t = 0$
$C = 1$	à $t \leq 15$ jours sur ED
$C = 0$	à $t > 15$ jours sur ED
$\partial C / \partial z = 0$	sur AB, EF et CD
$\partial C / \partial x = 0$	sur AF et BC

Les propriétés des deux contaminants simulés sont:

Tableau 8.7 Propriétés des deux contaminants simulés

contaminants	α_L cm	α_T cm	D_0 cm^2/j	F	α j^{-1}	k_{dm}	k_{dim}	n_m	n_{im}
non réactif	0.5	0.1	10^{-5}	0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.0
réactif	0.5	0.1	10^{-5}	0.4	0.1	0.5	0.5	0.3	0.14

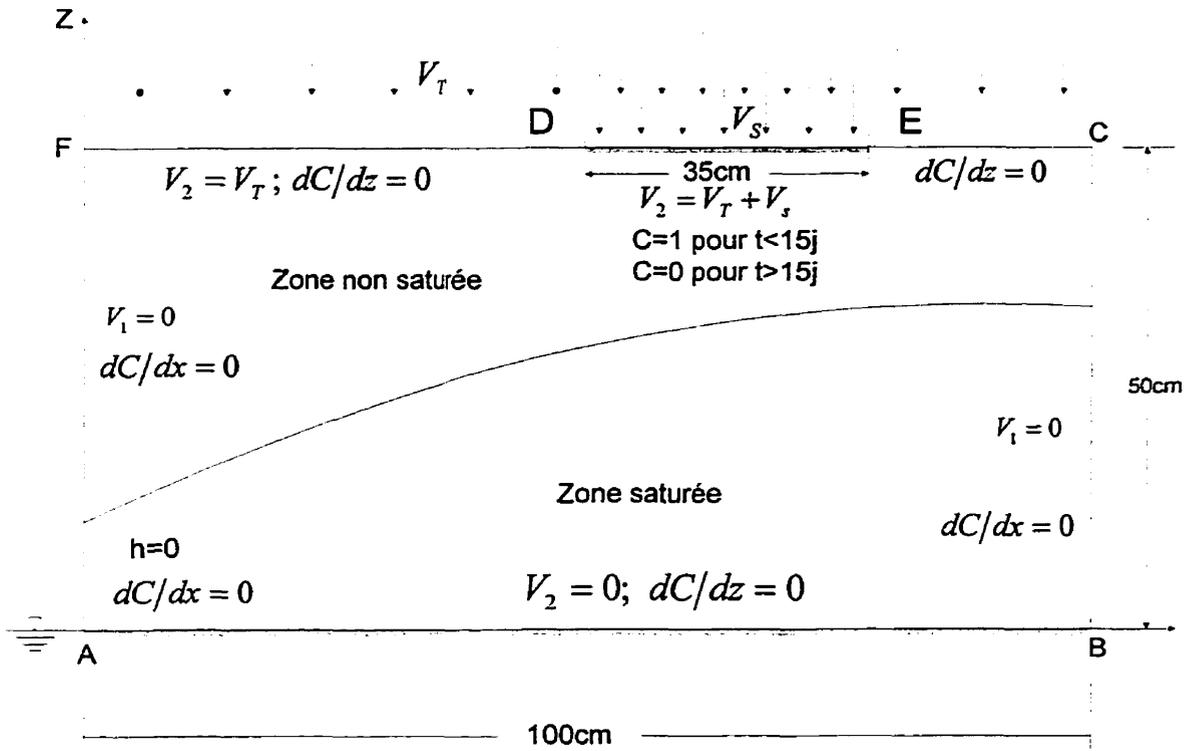


Figure 8. 6 Domaine de calcul et conditions initiales et frontières

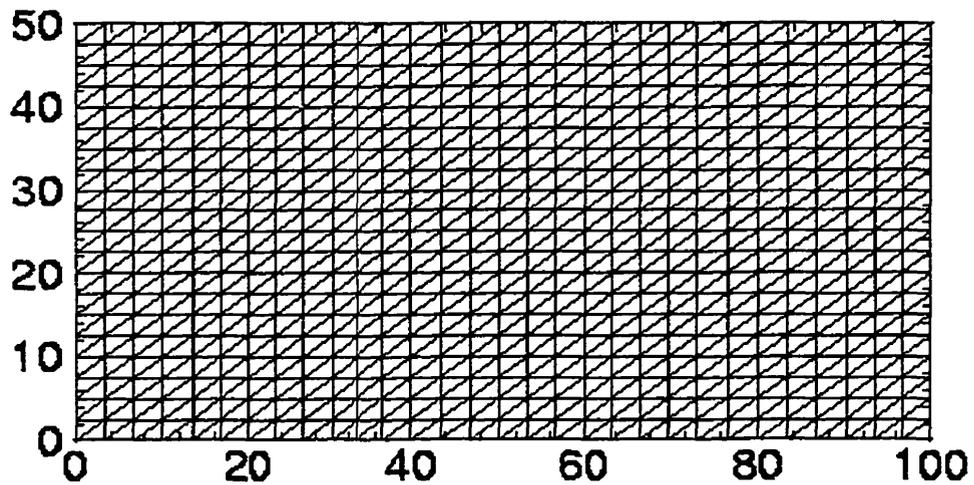


Figure 8. 7 Domaine de calcul en utilisant un maillage uniforme

a

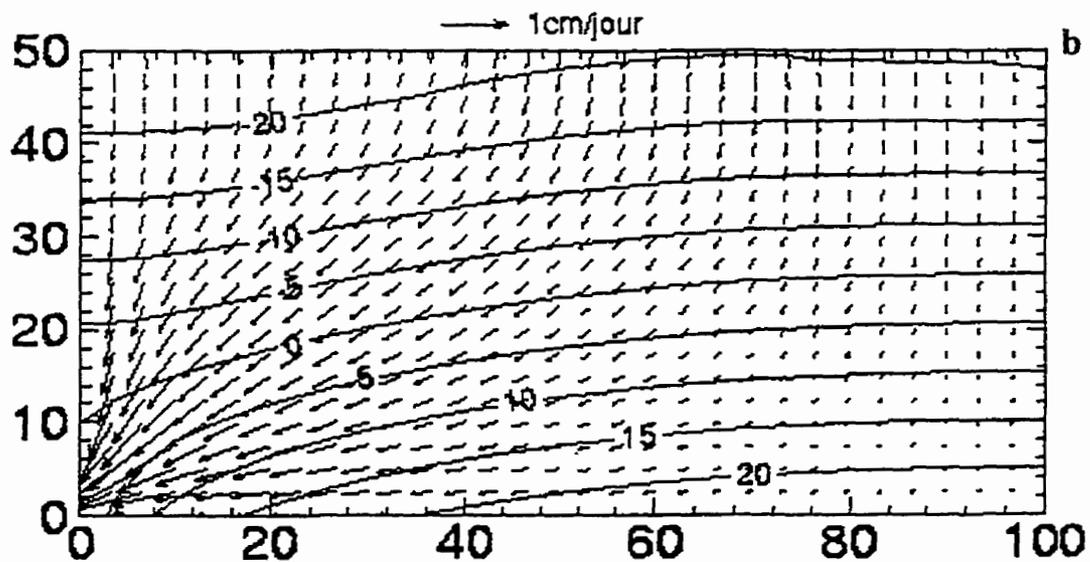
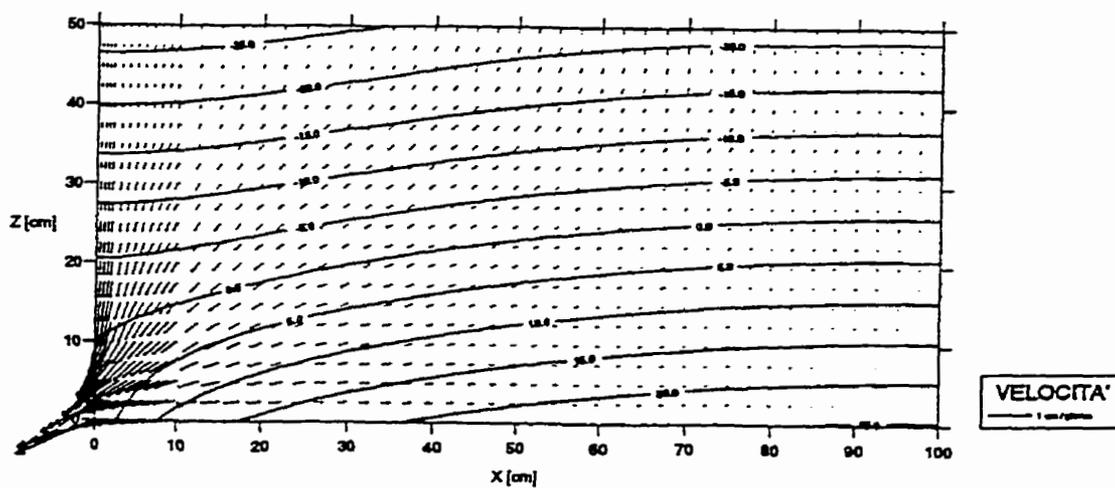


Figure 8. 8 Lignes de pression et vecteurs de vitesse de l'écoulement permanent:
 (a) Gambaloti et al., 1996; (b) la présente étude

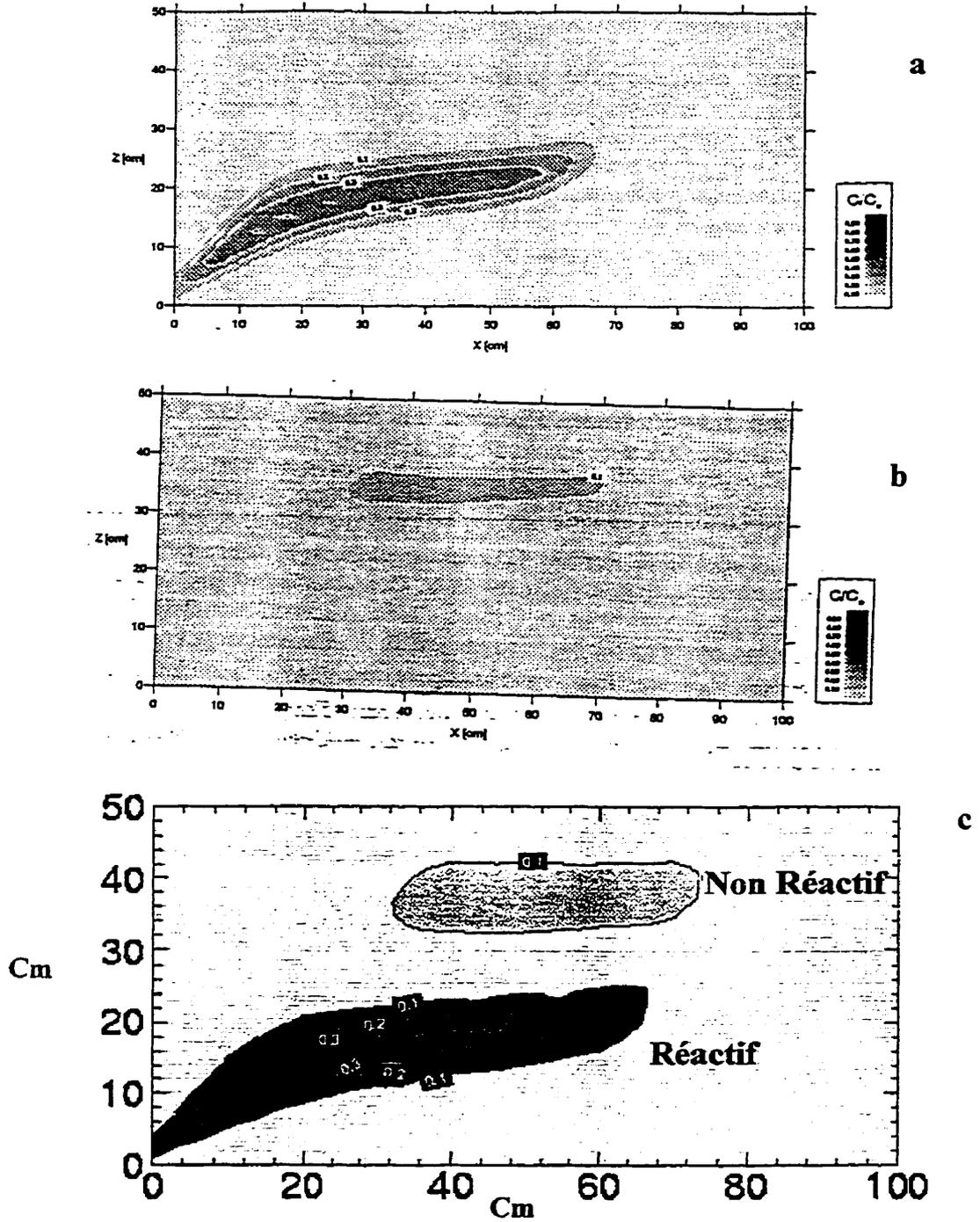


Figure 8.9 Contours de concentrations relatives (C/C_0), à $t=90.775$ jours, des deux contaminants: réactif et non-réactif (a) et (b) Gambaloti et al., 1996, (c) présente étude

Le problème de l'écoulement a été résolu jusqu'à ce que l'état permanent de l'écoulement ait été atteint. Ensuite, la vitesse de Darcy, ainsi que les valeurs de teneurs en eau, ont été utilisées pour simuler le problème de transport pour une période de 90 jours. Les résultats des simulation de l'écoulement et du transport sont présentés aux figures 8.8 et 8.9.

Nous avons comparé nos résultats avec les résultats numériques obtenus par Gambaloti et al., 1996, sous les mêmes conditions en utilisant un schéma des éléments finis. La figure 8.8 représente une comparaison entre les lignes des pressions obtenues à partir des deux modèles.

La figure 8.9 compare le déploiement d'un panache non réactif et d'un panache réactif qui a subi une sorption dans les régions mobile et immobile. La comparaison de nos résultats avec ceux de Gambaloti et al., 1996 montre une bonne concordance entre les deux modèles, aussi bien pour le transport des polluants réactifs que pour les polluants non-réactifs.

8.3.2.2 Influence de la fraction d'eau mobile

Ce test considère le problème de l'exemple précédent, mais évalue, cette fois ci, l'influence de la fraction de l'eau mobile $\left(\phi = \frac{\theta_m}{\theta = \theta_m + \theta_{im}}\right)$ sur la forme du panache simulé.

La figure 8.10 montre l'influence de la fraction de l'eau mobile sur la forme de la distribution de la concentration. Quand le taux d'eau immobile augmente (ϕ décroît), le transfert par advection dans la région mobile augmente en raison de l'augmentation de la vitesse du soluté dans cette région ($V_m = q/\theta_m, \theta = \theta_m + \theta_{im}$).

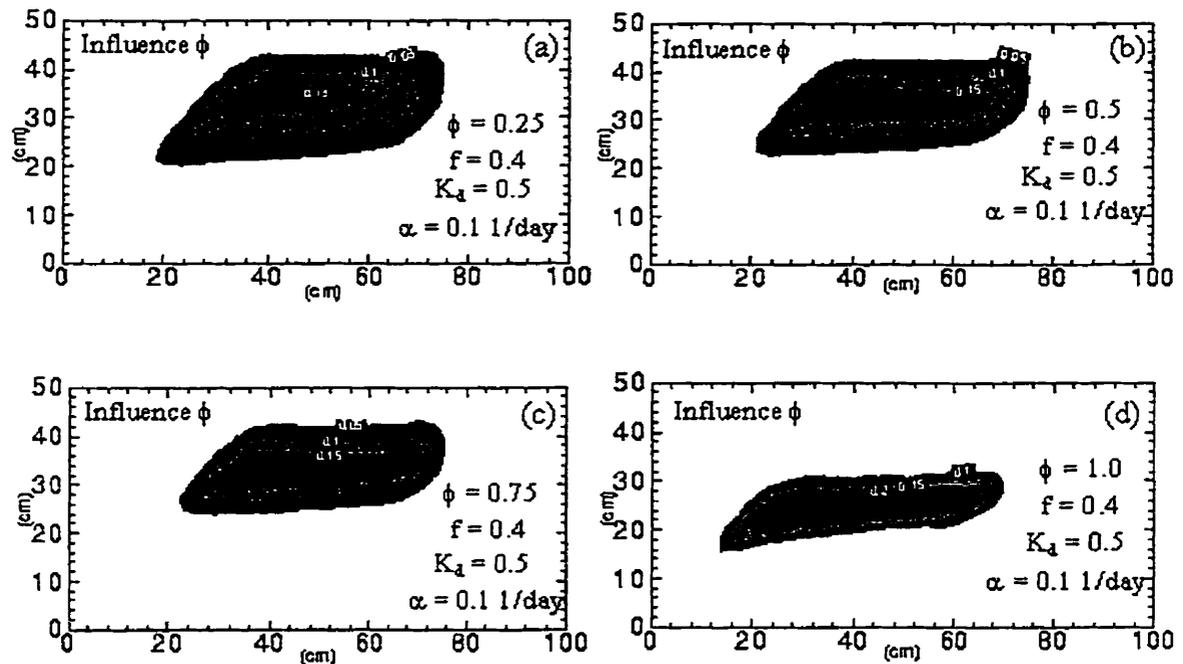


Figure 8. 10 Influence de la fraction de liquide mobile (ϕ) sur la migration d'un polluant (a) $\phi = 0.25$, (b) $\phi = 0.5$, (c) $\phi = 0.75$, (d) $\phi = 1.0$

La figure 8.10d montre le déploiement du panache pour $\phi = 1$, c'est à dire pas d'eau immobile dans le milieu poreux. Dans ce, cas le transfert de la solution se fait par advection dispersion et par adsorption dans les conditions d'équilibre, uniquement dans la région mobile. L'adsorption est simulée par un isotherme linéaire, qui suppose que l'équilibre de sorption est atteint instantanément après la réception du contaminant dans le sol. Dans ces conditions, le processus de sorption peut être présenté, dans l'équation de transport, comme étant un facteur de retardement

$$R = 1 + k_d \frac{\rho_b}{\theta}$$

où k_d est le coefficient de distribution (L^3M^{-1}), ρ_b est la densité du sol "bulk density" et θ est la teneur en eau.

La comparaison de la figure 8.10a et de la figure 8.10d illustre bien l'influence de la fraction de teneur d'eau mobile tant qu'il existe une partie d'eau immobile dans le milieu poreux ($\phi=0.999$ ou <1), le phénomène de "tailing" sera aussi présent. Quand $\phi=1$, le panache de la concentration devient plus ou moins symétrique.

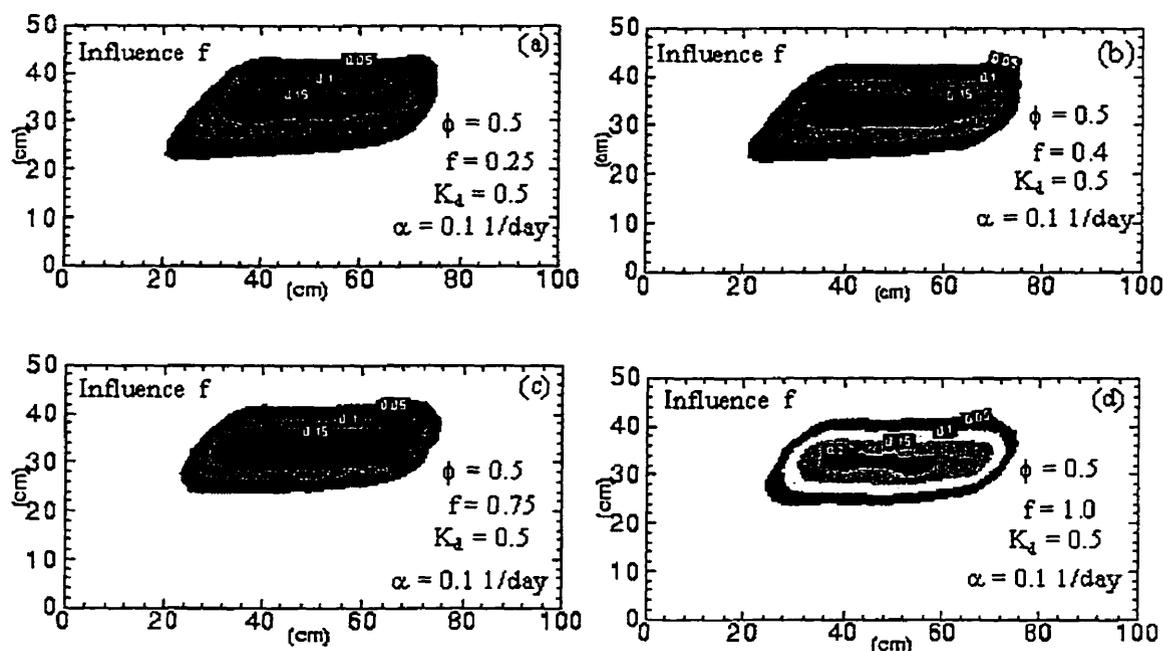


Figure 8.11 Influence de la fraction d'adsorption dans la région mobile (f) sur la migration d'un polluant (a) $f = 0.25$, (b) $f = 0.4$, (c) $f = 0.75$, (d) $f = 1.0$

La figure 8.11 montre l'influence du taux d'adsorption totale (f). Ce paramètre décrit la quantité d'adsorption qui prend place dans la région mobile du sol. La figure 8.11a montre le déploiement d'un panache où approximativement 60% de sorption a eu lieu dans la région immobile ($f=0.4$). Quand $f=1$, l'adsorption a lieu uniquement dans la région mobile, et un transfert de la solution par diffusion se produit entre la région mobile et immobile. La figure 8.11 montre que la croissance de taux d'adsorption dans la région mobile (adsorption relativement plus importante dans la région mobile et relativement moins importante dans la région immobile, sachant que l'adsorption totale est constante) réduit la mobilité du soluté dans le milieu poreux.

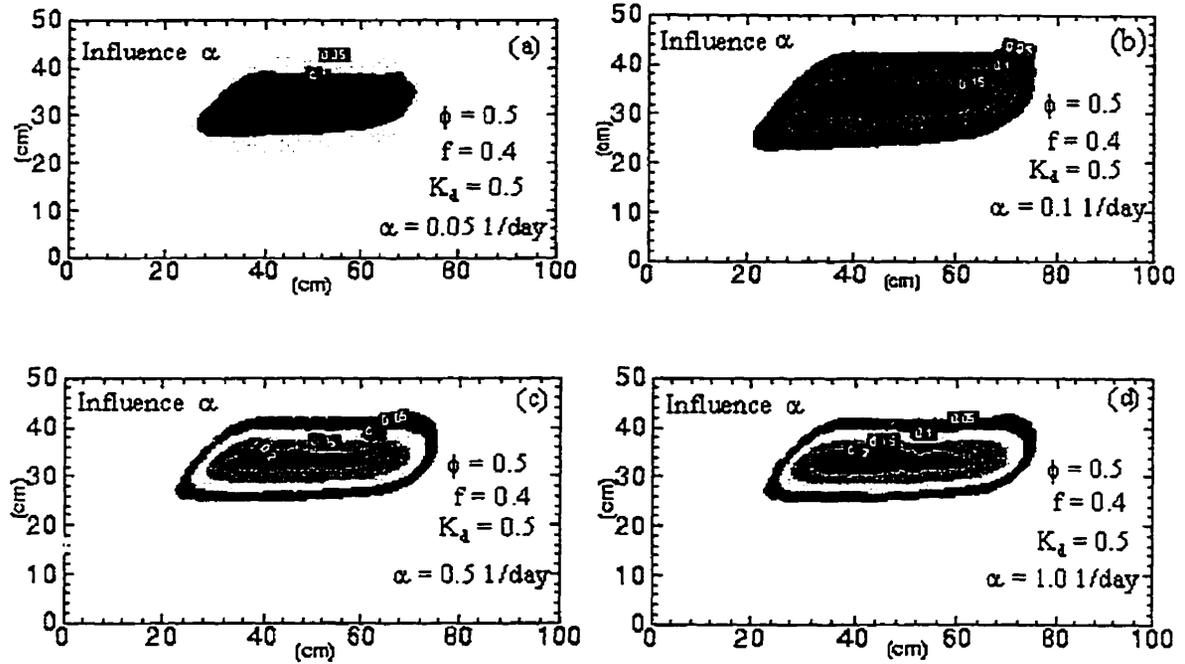


Figure 8.12 Influence du coefficient de transfert de masse (α) entre les régions mobile et immobile sur la migration d'un polluant (a) $\alpha = 0.0$, (b) $\alpha = 0.1$, (c) $\alpha = 0.5$, (d) $\alpha = 1.0$

La figure 8.12 montre l'influence du coefficient de transfert de masse entre les régions mobile et immobile (α). Quand $\alpha = 0$, il n'y a pas de diffusion de masse dans la région immobile. Quand la valeur de α est petite, un échange lent entre la région mobile et la région immobile prend place, causant la diminution du pic de concentration et un "tailing" considérable. En augmentant la valeur du coefficient de transfert (α), le taux d'échange entre les deux régions augmente, conduisant éventuellement à un nouvel équilibre, dans lequel les concentrations dans les régions mobile et immobile sont égales ($C_m = C_{im}$). Le modèle de transport (équations 3.56 et 3.57) se réduit donc à une seule équation ($\alpha \rightarrow \infty$):

$$(\theta + \rho_b k_d) \frac{\partial C}{\partial t} + q_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\theta D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] + \lambda (\theta C + \rho_b S) = (C - C_s) Q$$

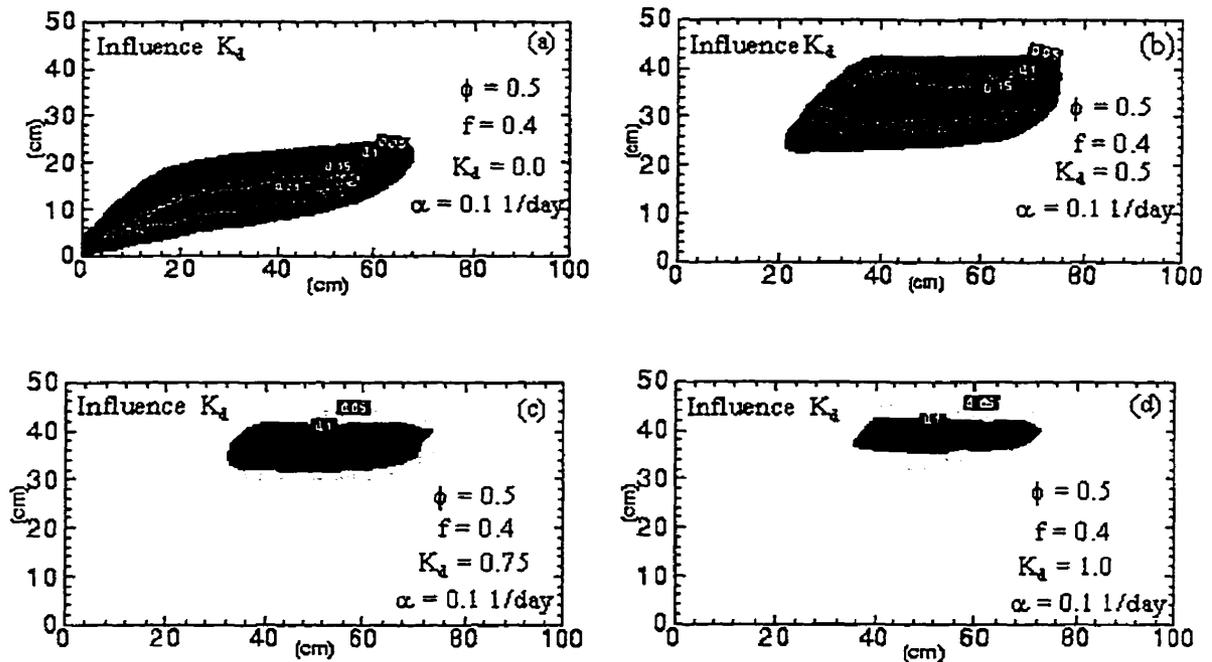


Figure 8.13 Influence du coefficient d'adsorption (K_d) sur la migration d'un polluant (a) $K_d = 0.0$, (b) $K_d = 0.5$, (c) $K_d = 1.0$, (d) $K_d = 2.0$

La figure 8.13 montre l'influence du coefficient d'adsorption (K_d) sur la forme et la position du panache. Le panache $K_d = 0$ ($R=1$) représente la solution pour un milieu non adsorbant. On note Notant que la forme du panache est aussi asymétrique pour un milieu non adsorbant. Quand la valeur de K_d augmente, le coefficient de retard (R) augmente aussi, ce qui se traduit par un ralentissement de la migration du panache ainsi qu'une diminution du pic de concentration. Aussi, le phénomène de "tailing" devient plus prononcé avec l'augmentation de la valeur de K_d . Ceci était prévisible puisque, au départ avec l'augmentation de K_d , le soluté a plus tendance à diffuser et à être adsorbé dans la région stagnante du sol. Ensuite, le soluté diffuse lentement en sens inverse c'est à dire dans la région mobile, causant ainsi un phénomène de "tailing" plus prononcé.

8.3.2.3 Effet de la densité et de la sorption

La simulation d'un écoulement à densité variable avec le transport d'une solution réactive et non réactive a été testée à travers deux séries d'exemples: dans la première série d'exemples, on considère la simulation du bromure (Br^-), un contaminant non réactif, et du lithium (Li^+), un contaminant réactif. Les concentrations utilisées dans la simulation de Br^- et de Li^+ sont 640 et 80 mg/l respectivement. La solution des deux contaminants est considérée plus dense que l'eau. La concentration de référence de Br^- est de 20200 mg/l avec une densité de 1012.5 g/l et une viscosité de 1.036×10^{-3} kg/(ms). La concentration de référence de Li^+ est de 500mg/l, avec une densité de 10001g/l et une viscosité de 1.029×10^{-3} kg/(ms). La densité de l'eau souterraine est de 998.2 g/l et sa viscosité est de 1.002×10^{-3} kg/(ms).

Dans la deuxième série d'exemples, on considère la simulation du NaCl, un contaminant non réactif, et du NH_3 , un contaminant réactif. La concentration initiale de NaCl est de 2000mg/l, alors que la concentration initiale de NH_3 est de 100 mg/l. La solution de NaCl est considérée plus dense que l'eau. La concentration de référence de NaCl est de 20200 mg/l avec une densité de 1012.5 g/l et une viscosité de 1.036×10^{-3} kg/(ms). La solution de NH_3 est considérée plus légère que l'eau. La concentration de référence du NH_3 est de 19,800mg/l, avec une densité de référence de 989.5.g/l et une viscosité de référence de 1.021×10^{-3} kg/(ms).

Dans le cas du transport de deux ou plusieurs polluants, les variations de la masse volumique et de la viscosité du mélange sont calculées par les relations (8.2) et (8.3). Les valeurs des concentrations et des viscosités de référence de NaCl, NH_3 , Br^- et Li^+ sont données au tableau 8.8.

Tableau 8.8 Paramètres de calcul de la densité et de la viscosité

Paramètres	Valeurs
densité de l'eau à 20 °C ρ_0	998.2 $kg m^{-3}$
densité de référence: 20200 mg/L (NaCl) ρ_{NaCl}^{ref}	1012.5 $kg m^{-3}$
densité de référence: 54400 mg/L (NH ₃) ρ_{NH3}^{ref}	973 $kg m^{-3}$
densité de référence: 20200 mg/l (Br ⁻) $\rho_{Br^-}^{ref}$	1012.5 $kg m^{-3}$
densité de référence: 5000 mg/l (Li ⁺) $\rho_{Li^+}^{ref}$	1001.1 $kg m^{-3}$
Viscosité de l'eau à 20 °C μ_0	1.002 x 10 ⁻³ $kg m^{-3} s^{-1}$
Viscosité de référence: 20200 mg/L (NaCl) μ_{NaCl}^{ref}	1.002x 10 ⁻³ $kg m^{-3} s^{-1}$
viscosité de référence : 54400 mg/L (NH ₃) μ_{NH3}^{ref}	1.036x 10 ⁻³ $kg m^{-3} s^{-1}$
Viscosité de référence: 20200 mg/L (Br ⁻) $\mu_{Br^-}^{ref}$	1.029x 10 ⁻³ $kg m^{-3} s^{-1}$
viscosité de référence : 54400 mg/L (Li ⁺) $\mu_{Li^+}^{ref}$	

Les propriétés des contaminants simulés sont:

Tableau 8.9 Propriétés des contaminants simulés

contaminants	α_L cm	α_T cm	D_0 cm ² /j	F	α j ⁻¹	k_{dm}	k_{dim}	n_m	n_i m
Br ⁻	0.5	0.1	10 ⁻⁵	1.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.
Li ⁺	0.5	0.1	10 ⁻⁵	0.515	0.48	0.17	0.17	0.3	0.
NaCl	0.5	0.1	10 ⁻⁵	1.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.
NH ₃	0.5	0.1	10 ⁻⁵	0.4	0.1	0.5	0.5	0.3	0.

14

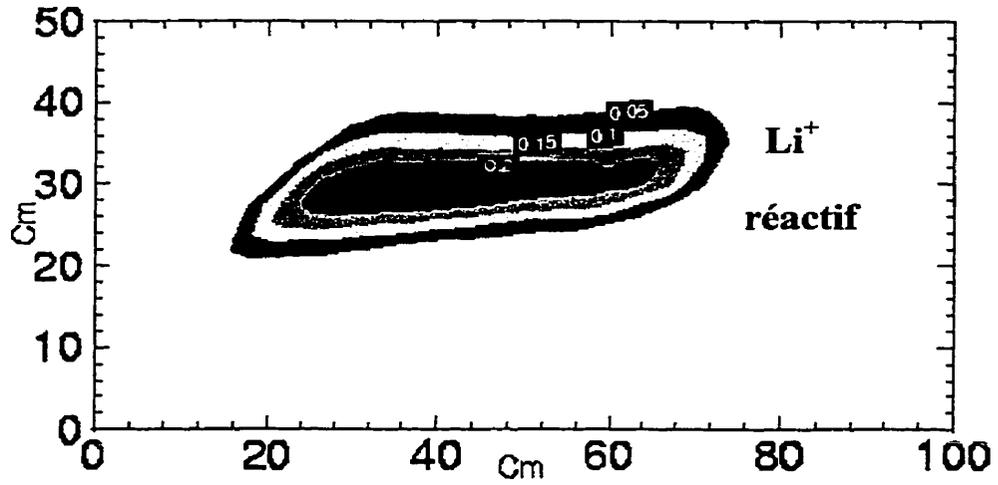


Figure 8. 14 Contours des concentrations relatives (C/C_0) du contaminant réactif (Li^+ , $C_0=680\text{mg/l}$) dans la région mobile à $t=90.775$ jours

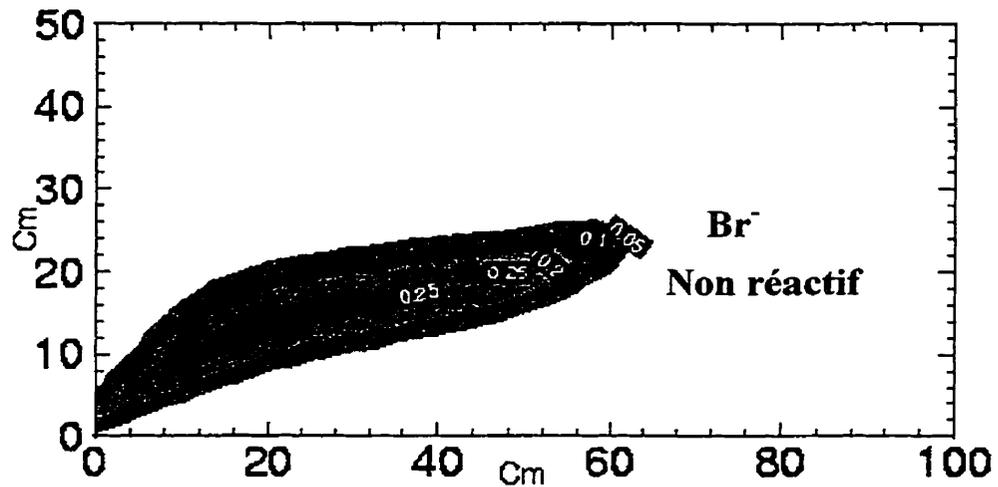


Figure 8. 15 Contours des concentrations relatives (C/C_0) du contaminant non réactif (Br^- , $C_0=100\text{mg/l}$) à $t=90.775$

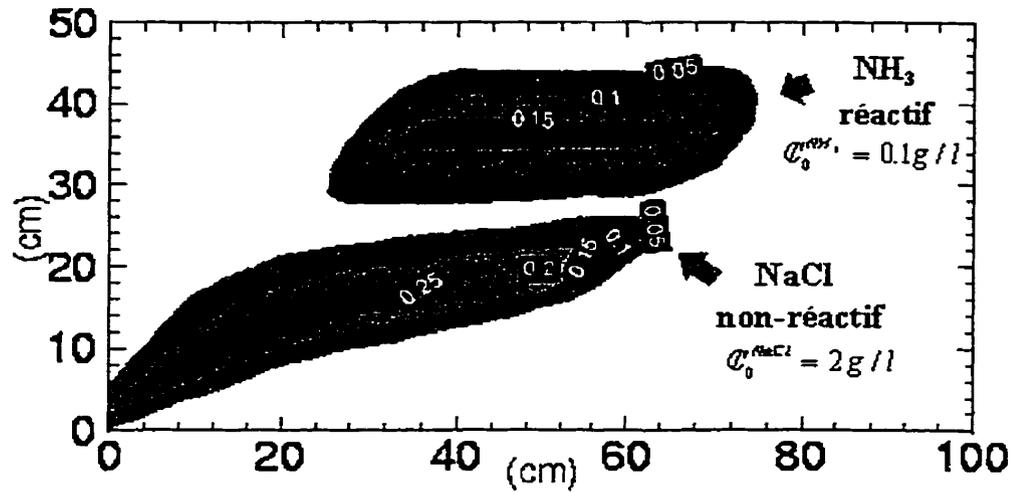


Figure 8. 16 Contours des concentrations relatives (C/C_0) de deux contaminants: réactif (NH_3 , $C_0=100\text{mg/l}$) et non-réactif (NaCl , $C_0=5000\text{mg/l}$) à $t=90.775$ jours

8.4 Conclusion

Les résultats montrent que les facteurs qui influencent le comportement de l'écoulement sont la densité et la sorption. Notre étude a montré que, dans le cas d'un panache à plusieurs éléments, la concentration du contaminant le plus dense fait évoluer l'écoulement vers un régime instable qui se traduit par l'apparition de digitations au niveau de la zone du mélange. L'amplitude et le nombre de ces instabilités dépendent de la concentration de chaque contaminant du panache. En effet, plus la concentration des contaminants les plus denses est élevée et la concentration des contaminants les moins denses est faible, plus les contaminants du panache pénètrent à une grande profondeur et des instabilités locales de grande amplitude peuvent apparaître. En raison de l'adsorption de certains contaminants, la réduction de la vitesse de transport de ces derniers cause la séparation des divers contaminants qui empruntent des trajectoires différents.

Il est clair que la naissance et l'amplification des instabilités hydrodynamiques ainsi que la réaction chimique dans un écoulement à densité variable peuvent modifier les caractéristiques de l'écoulement. Ceci peut nuire, éventuellement, au pilotage précis d'une opération industrielle, telle la récupération des hydrocarbures, ou rendre difficile la localisation d'un domaine contaminé en cas de pollution d'une nappe aquifère.

CHAPITRE IX

Modélisation de la migration de contaminant dans le site d'enfouissement Borden en Ontario

9.1 Introduction

Les études expérimentales sur des sites bien équipés ont joué un rôle très important dans les efforts pour mieux comprendre le phénomène de migration et le devenir des contaminants dans un milieu poreux (Zheng et Bennett, 1995). En particulier, plusieurs études expérimentales ont été menées sur des sites bien connus comme **Borden** (e.g, MacFarlane et al., 1983; Mackay et al., 1986), **Twin Lake** (e.g., Killey et Moltyaner., 1988; Moltyaner et Killy, 1988a, b), **Mobile** (e.g., Moltz et al., 1986), **Cape Cod** (e.g., Garabedian, 1987; LeBlanc et al., 1991) et **Columbus** (e.g., Boggs, 1991; Boggs et al., 1993). Ces études ont permis de rassembler plusieurs données très importantes qui constituent une base pour développer et tester la théorie de transport ainsi que les modèles numériques.

Dans la province de l'Ontario, à 80 km de la ville de Toronto, il existe une zone de pollution de l'eau souterraine juste au-dessous d'un ancien dépotoir de déchets (Borden). La nappe a été contaminée essentiellement par des contaminants solubles tels que le chlorure, le sulfate et le potassium. L'étendue de la contamination de l'eau souterraine a été délimitée à partir des données recueillies au cours des campagnes d'échantillonnage.

Ce chapitre est consacré à la modélisation de la migration de contaminants au site d'enfouissement Borden en Ontario, ce site étant probablement l'un des sites expérimentaux les mieux équipés et les mieux étudiés au monde.

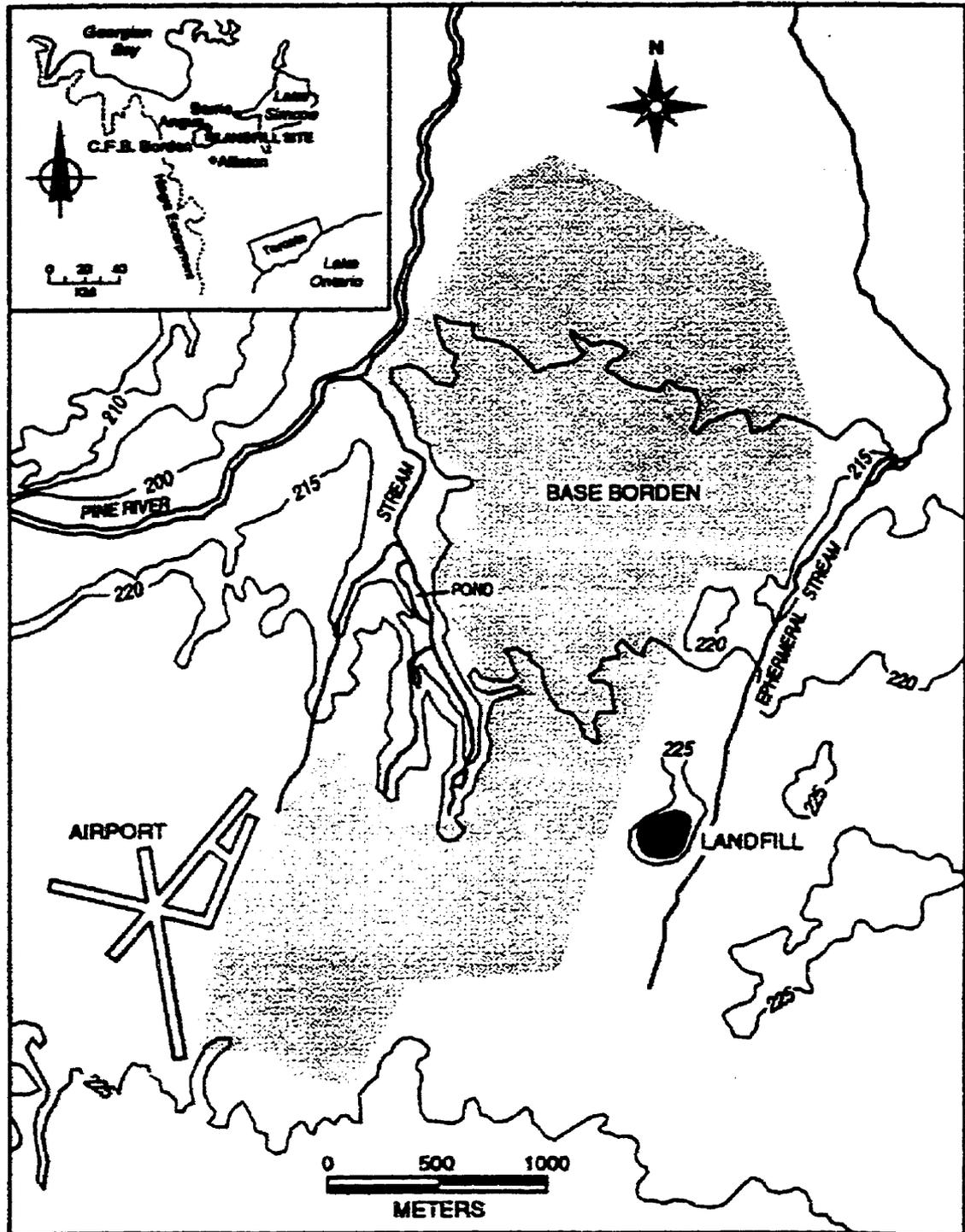


Figure 9. 1 Localisation du site d'enfouissement sanitaire de Borden (Vue en plan)
(d'après MacFarlane et al., 1983)

9.2 Description du site

MacFarlane et al., 1983, ont étudié la migration des contaminants dans la nappe souterraine du site d'enfouissement Borden en Ontario. Ce site d'enfouissement sanitaire est situé à environ 80km de Toronto. Il est, dans sa majeure partie, situé au-dessus du niveau de la nappe phréatique. Utilisé pour l'entreposage des déchets de 1942 à 1973, on n'y pratiqua l'enfouissement sanitaire qu'à partir de 1973. Il a été finalement fermé en 1976. Pendant ces 34 ans d'opération, il a été estimé que 80% des déchets consistaient en des cendre, du bois et autres débris de construction. Le reste des dépôts était composé de déchets domestiques et industriels.

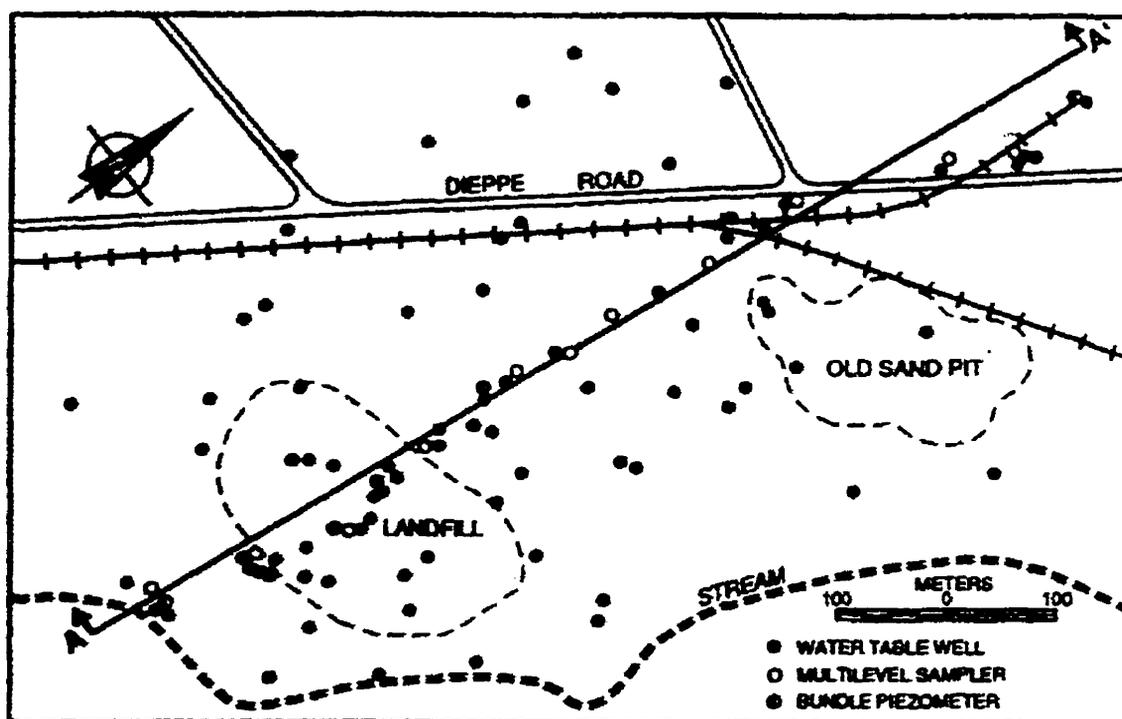


Figure 9. 2 Localisation du site d'enfouissement sanitaire de Borden. La section A-A' est une coupe longitudinale selon l'axe du panache (d'après Frind et Hokkanen, 1987)

La nappe a été contaminée par les eaux s'écoulant du dépotoir (lixiviât), contenant essentiellement des contaminants solubles tels que le chlorure, le sulfate et le potassium (Figures 9.3-9.5). Le site a été décrit en détail par Sykes et al. (1982).

La composition du sol et sa conductivité sont apparemment très variables, contenant du sable et de l'argile. La conductivité hydraulique horizontale de l'aquifère a été estimée à 1×10^{-3} à 2.2×10^{-2} cm/s, avec une anisotropie verticale de l'ordre de 1 à 2. La porosité du milieu a été estimée à 0.38. Les auteurs ont noté que la direction de l'écoulement de la nappe est normalement horizontale du sud vers le nord, mais la zone contaminée s'étend jusqu'au fond de l'aquifère (20m au dessous de la surface libre). La migration en profondeur des contaminants peut être expliquée par l'infiltration verticale d'un débit d'eau important au printemps et à l'été, après la fonte de la neige et, aussi, par la différence de densité entre l'eau et les contaminants ($\Delta\rho=0.0012$). L'infiltration moyenne de l'eau près du dépotoir est de l'ordre de 10 à 20 cm/an mais la recharge au niveau de la zone de dépotoir (une dépression) est plus importante (Frind et Hokkanen, 1987).

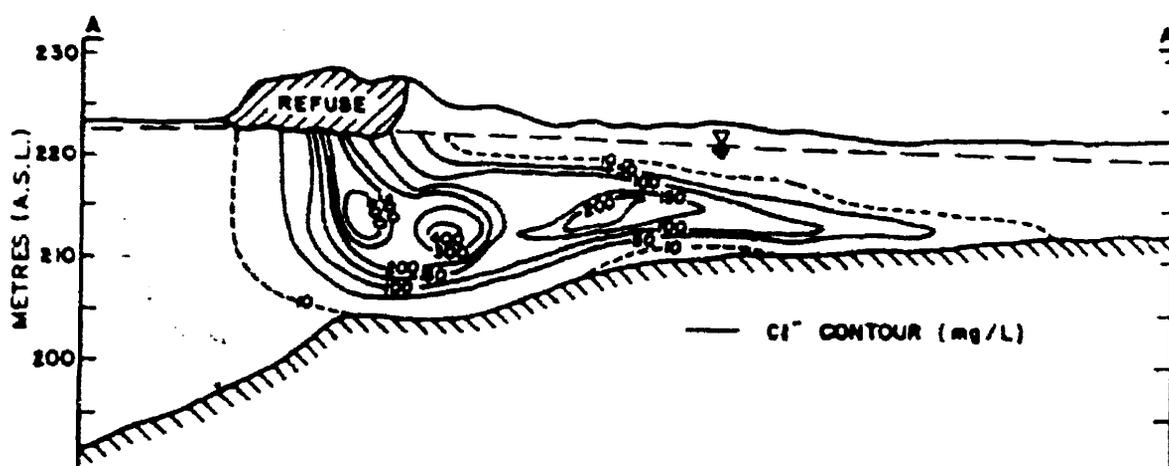


Figure 9. 3 Panache du chlorure selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1979; les contours sont en mg/l (d'après Frind et Hokkanen, 1987)

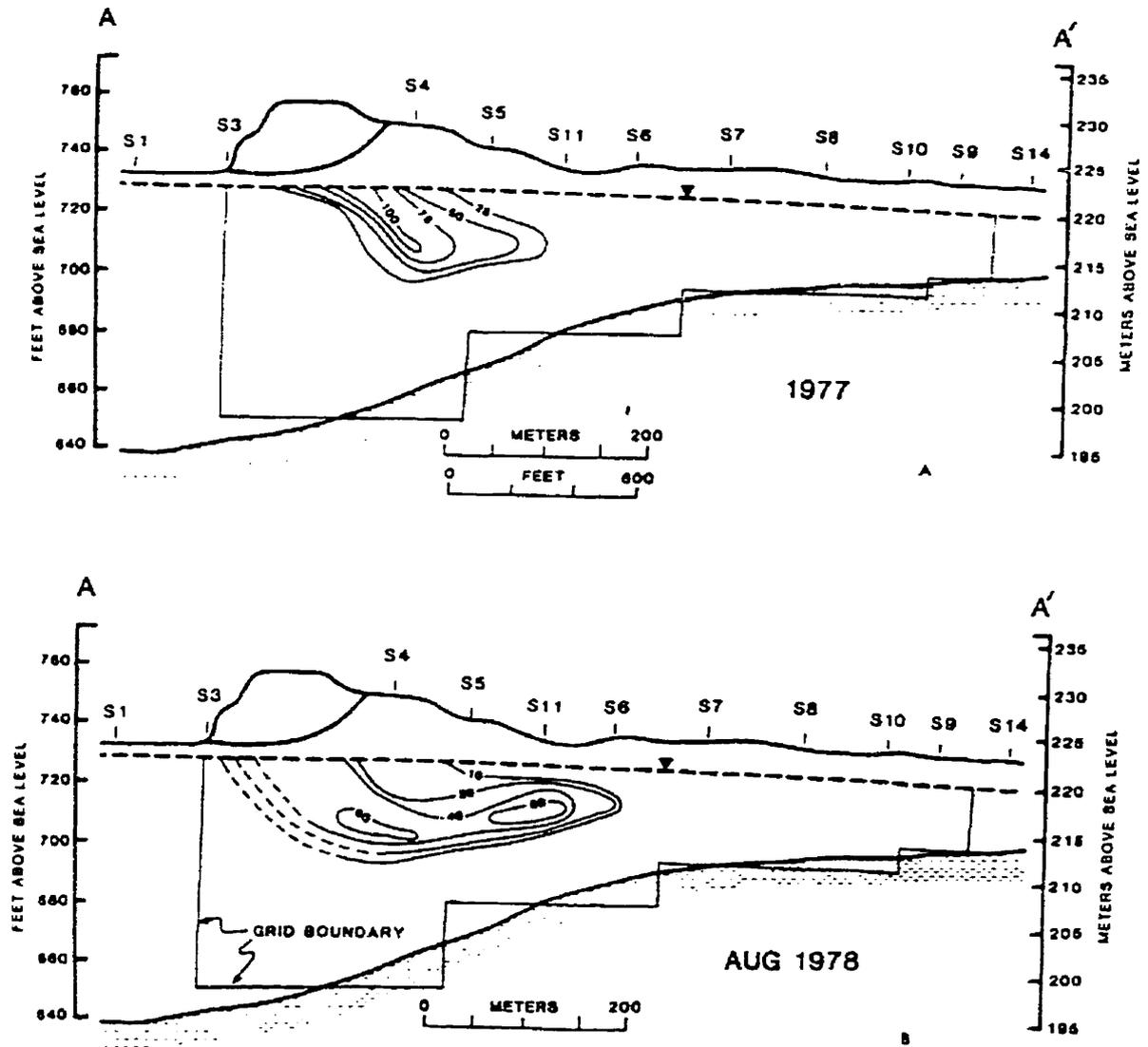


Figure 9. 4 Panache du potassium selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1977 et 1978; les contours sont en mg/l [d'après Sykes et al, 1987]

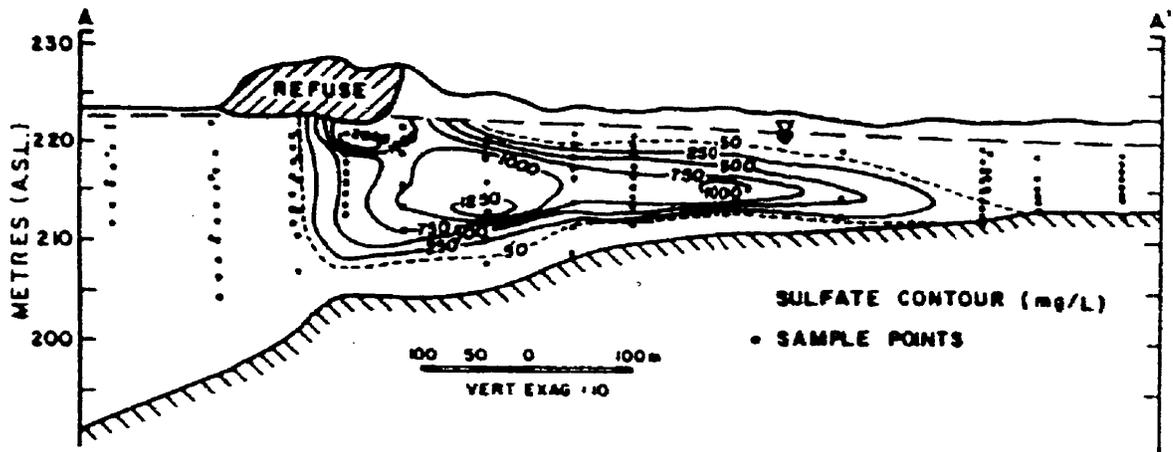


Figure 9. 5 Panache du sulfate selon la section A-A', basé sur les données de mesure de 1979; les contours sont en mg/l [d'après Sykes et al, 1982]

9.3 Modélisation de la migration d'un panache constitué de trois éléments contaminants: chlorure, sulfate et potassium

Le domaine de calcul (figure 9-6) utilisé représente une coupe longitudinale A-A' selon l'axe du panache (figure 9-2). Les conditions frontières du module d'écoulement sont présentées à la figure 9-6, la frontière inférieure, constituée d'argile, a été considérée comme étant imperméable. Le niveau de la nappe a été obtenu par calibration en comparant les niveaux d'eau calculé et observé sur le site. La fonction finale de recharge utilisée par le modèle est montrée à la figure 9.8. Les propriétés du sol reproduites sont essentiellement celles estimées par Frind et Hokkanen (1987), des conductivités hydrauliques horizontale et verticale sont égales à 1.16×10^{-2} cm/s et 0.58×10^{-3} cm/s respectivement et une porosité de 0.38.

Les conditions frontières du module de transport sont présentées à la figure 9.7, la figure 9.9 représente la discrétisation du domaine de calcul en éléments triangulaires selon la technique de Delauney.

La migration des trois contaminants (chlorure, sulfate et Potassium) est gouvernée par l'advection, dispersion, la sorption et la variation de la densité. La différence de densité entre l'eau et la solution utilisée par le modèle est celle enregistrée sur le site soit $\Delta\rho=0.0012$. Pour la modélisation du potassium, un isotherme linéaire d'adsorption est donné par l'expression suivante

$$S = 3.90 \times 10^{-4} C \quad 9.1$$

a été utilisé, où S (en milligramme par gramme) est la masse totale de la solution adsorbée par unité de masse du sol et C est la concentration de la solution (en mg/L). L'isotherme représenté par l'équation 9.1 représente une linéarisation de l'isotherme de Freundlich pour calculer la concentration exacte de potassium adsorbé à partir de la concentration du panache de potassium qui est égale à 183 mg/L. En utilisant l'isotherme de sorption de l'équation 9.1, le coefficient de retard de potassium a été estimé à 2.71 en fonction de l'équation $R = 1 + \rho_b K_d / \theta$. Les coefficients de retard de chlorure et du potassium sont égaux à 1.0, puisqu'ils sont considérés comme des contaminants non réactifs.

L'influence de la sorption, de la dispersivité et de la densité sur la migration des trois contaminants a été étudié à l'aide d'une étude de sensibilité.

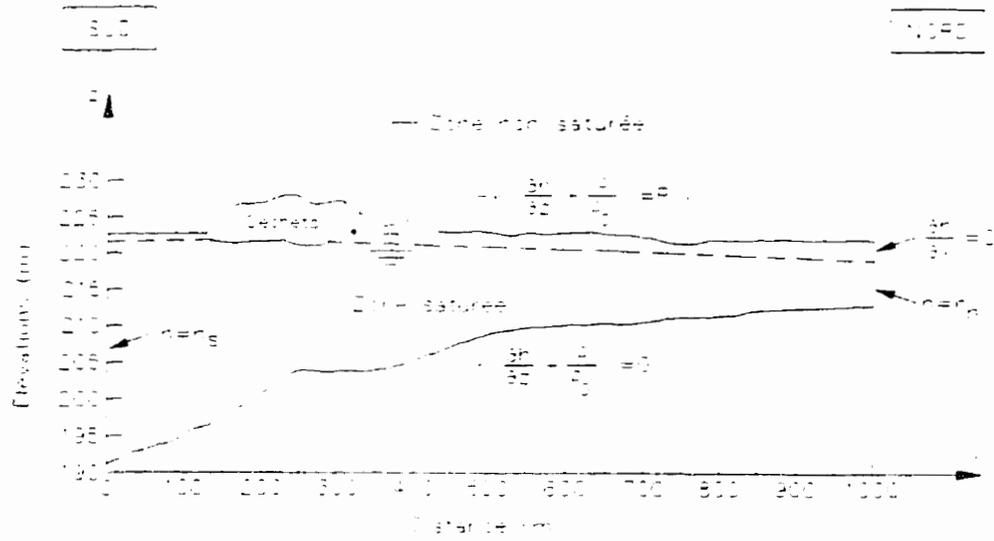


Figure 9.6 Conditions frontières du modèle de l'écoulement

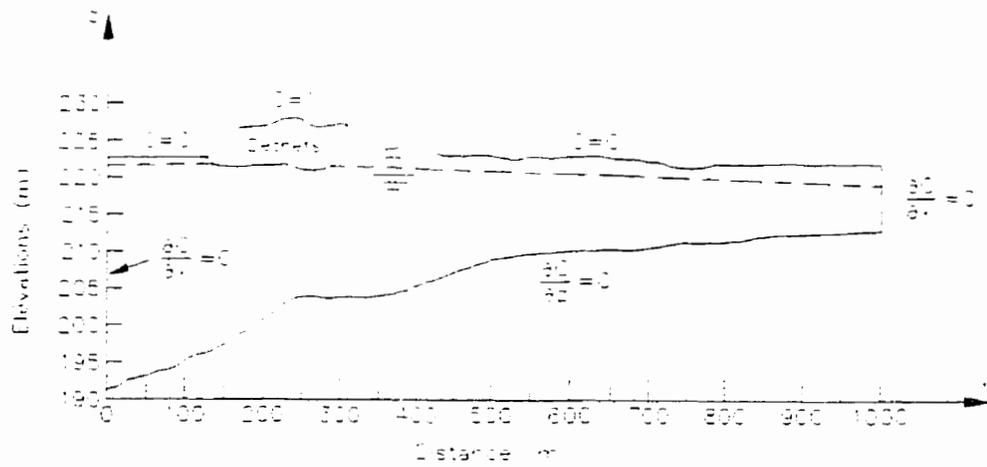


Figure 9.7 Conditions frontières du modèle de transport

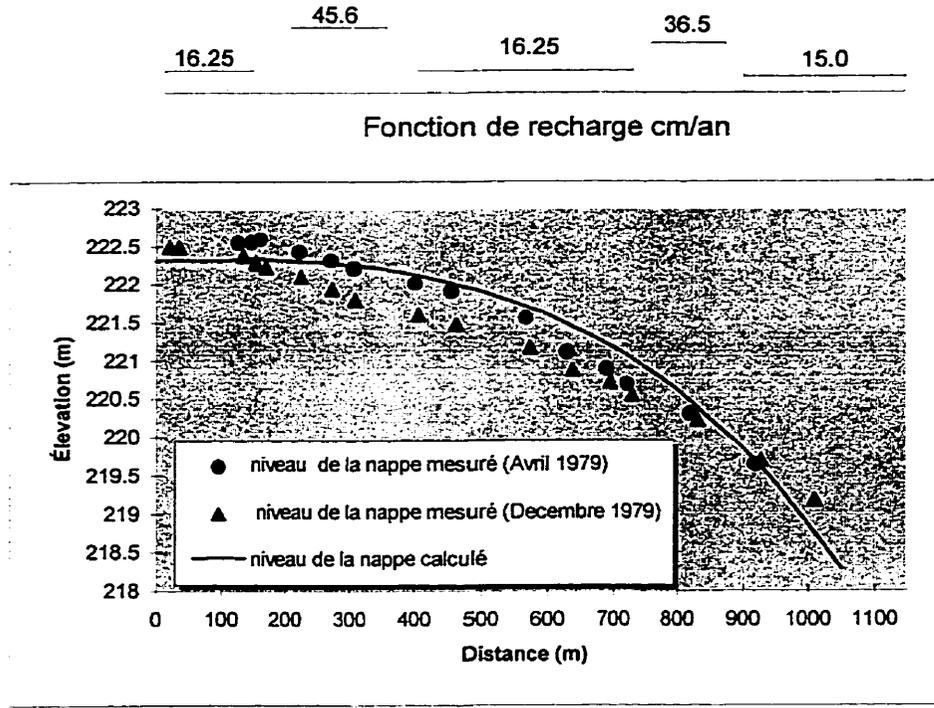


Figure 9. 8 Fonction de recharge et le niveau de la nappe calibré

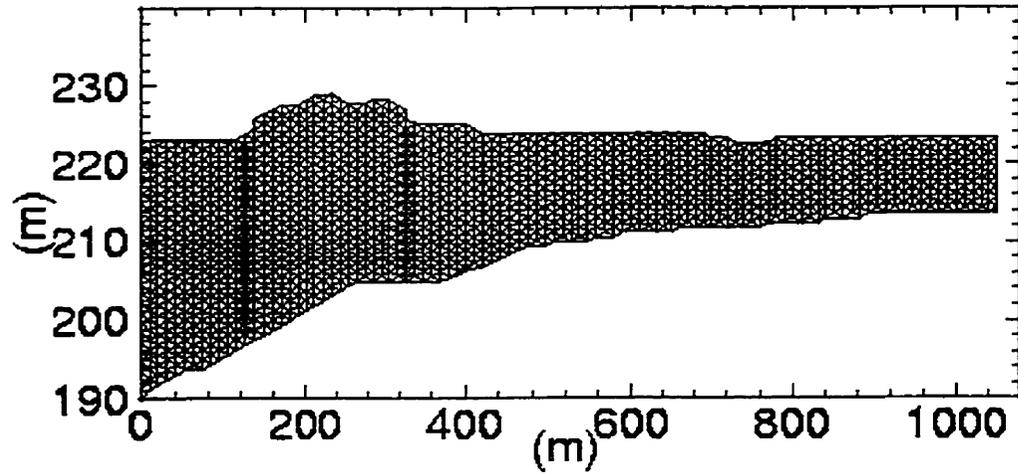


Figure 9. 9 Discretisation du domaine de calcul

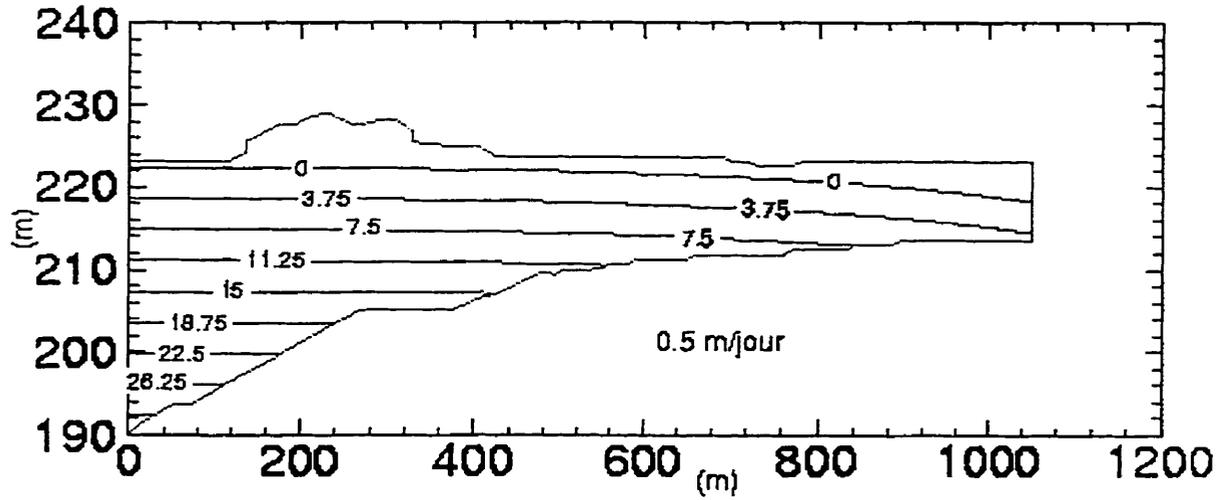


Figure 9. 10 Lignes d'isopressions à l'état permanent

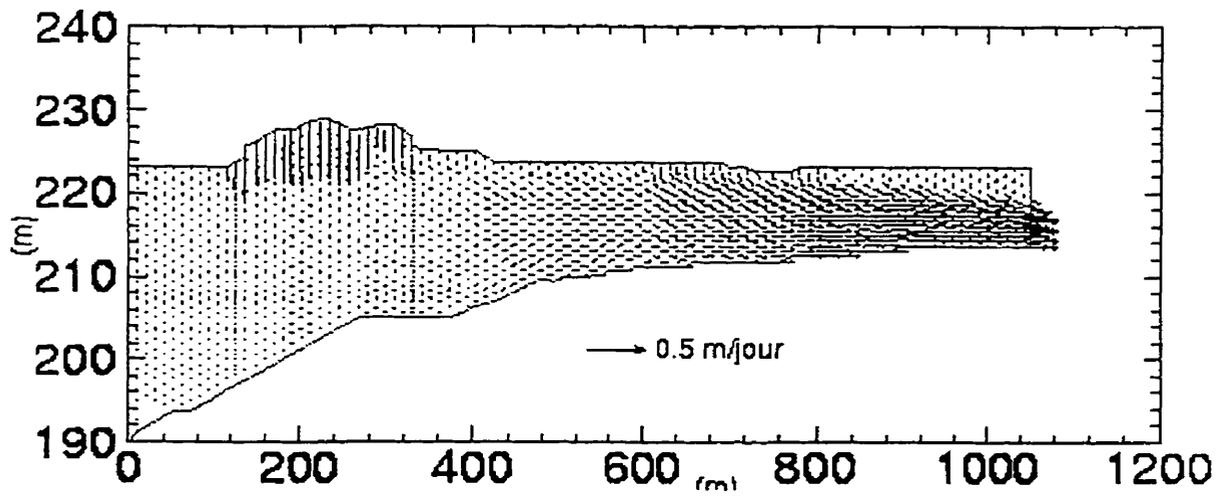


Figure 9. 11 Vecteurs vitesse à l'état permanent

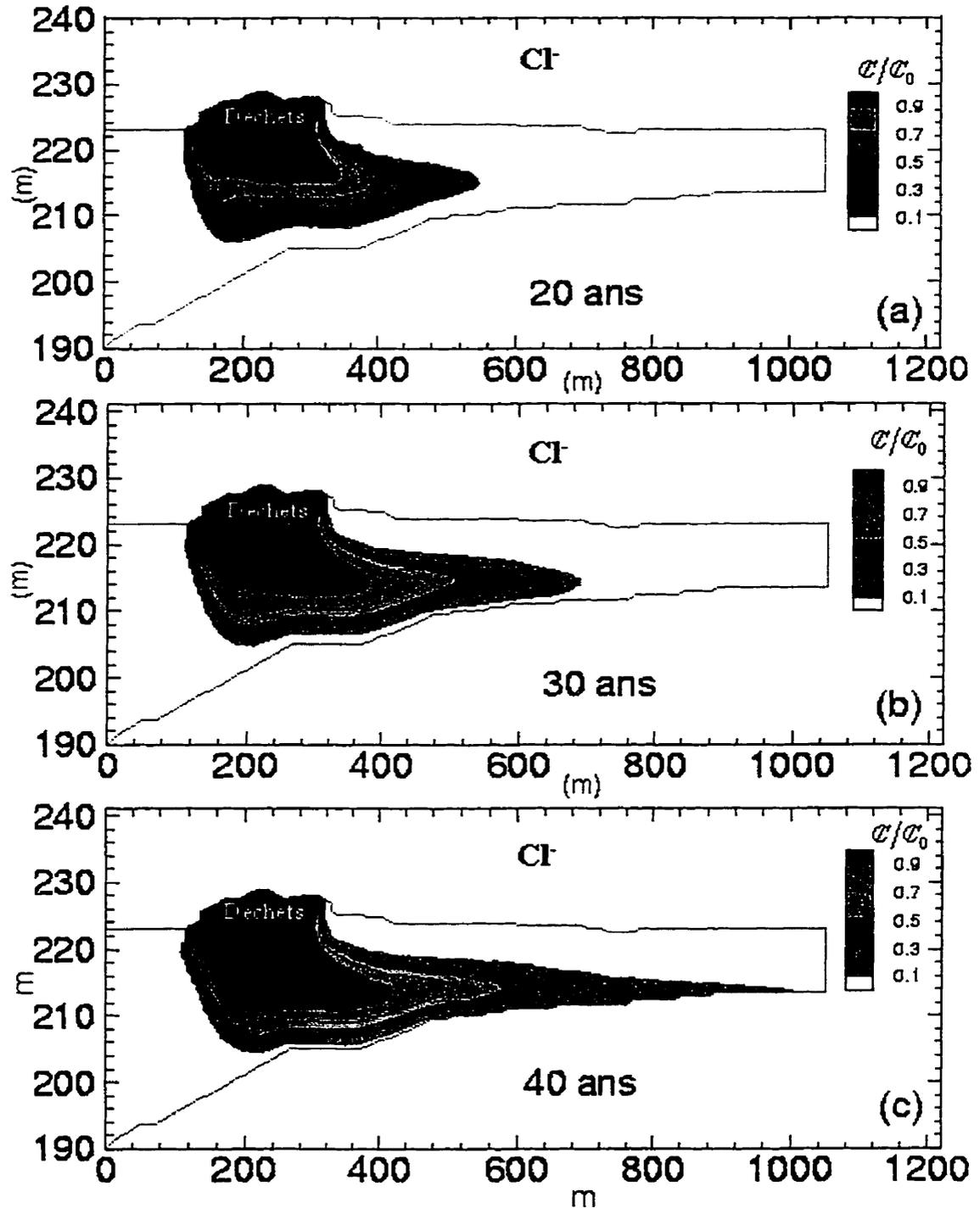


Figure 9. 12 Évolution du panache du chlorure dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) avec un intervalle de 0.2

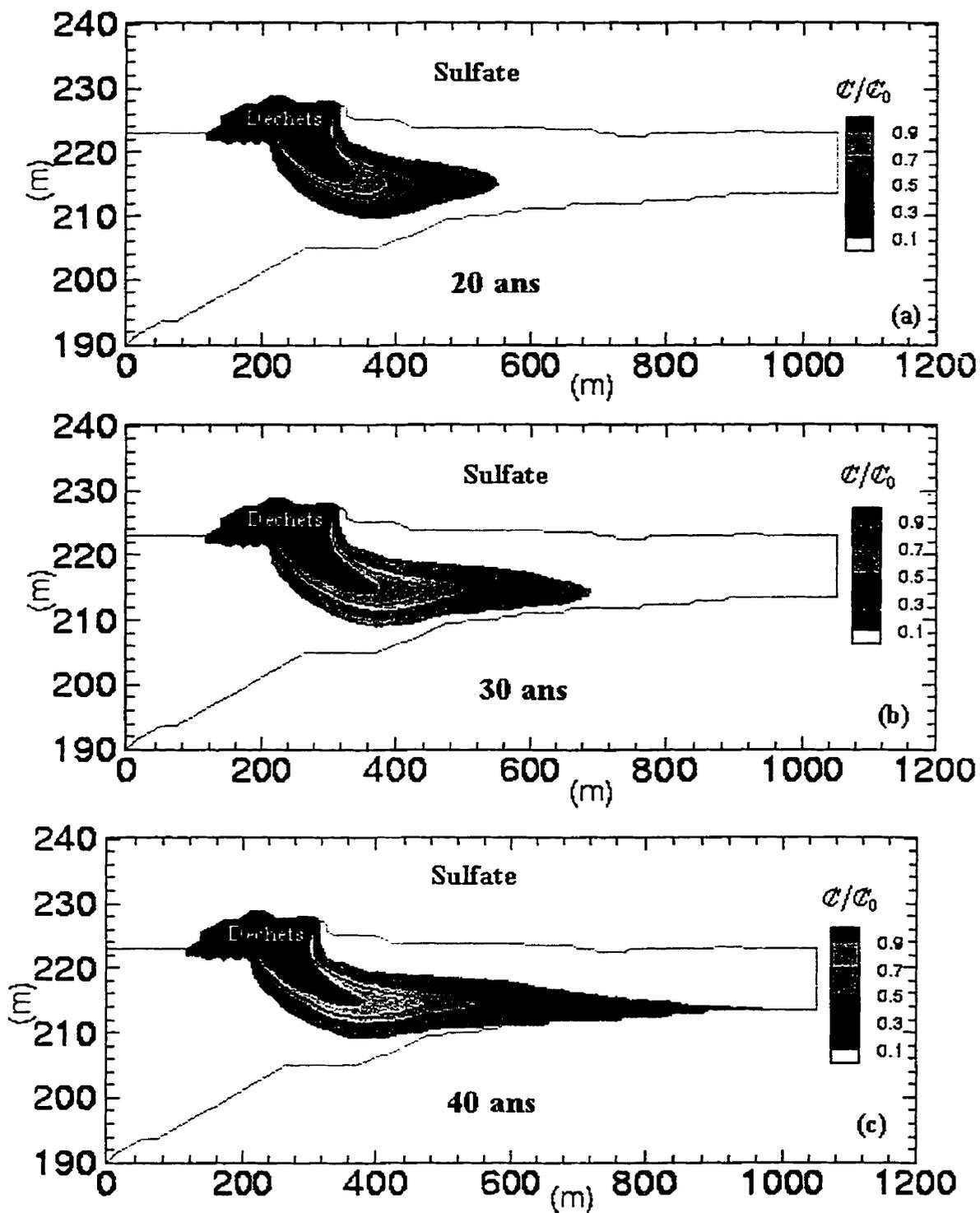


Figure 9. 13 Évolution du panache du sulfate dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) avec un intervalle de 0.2

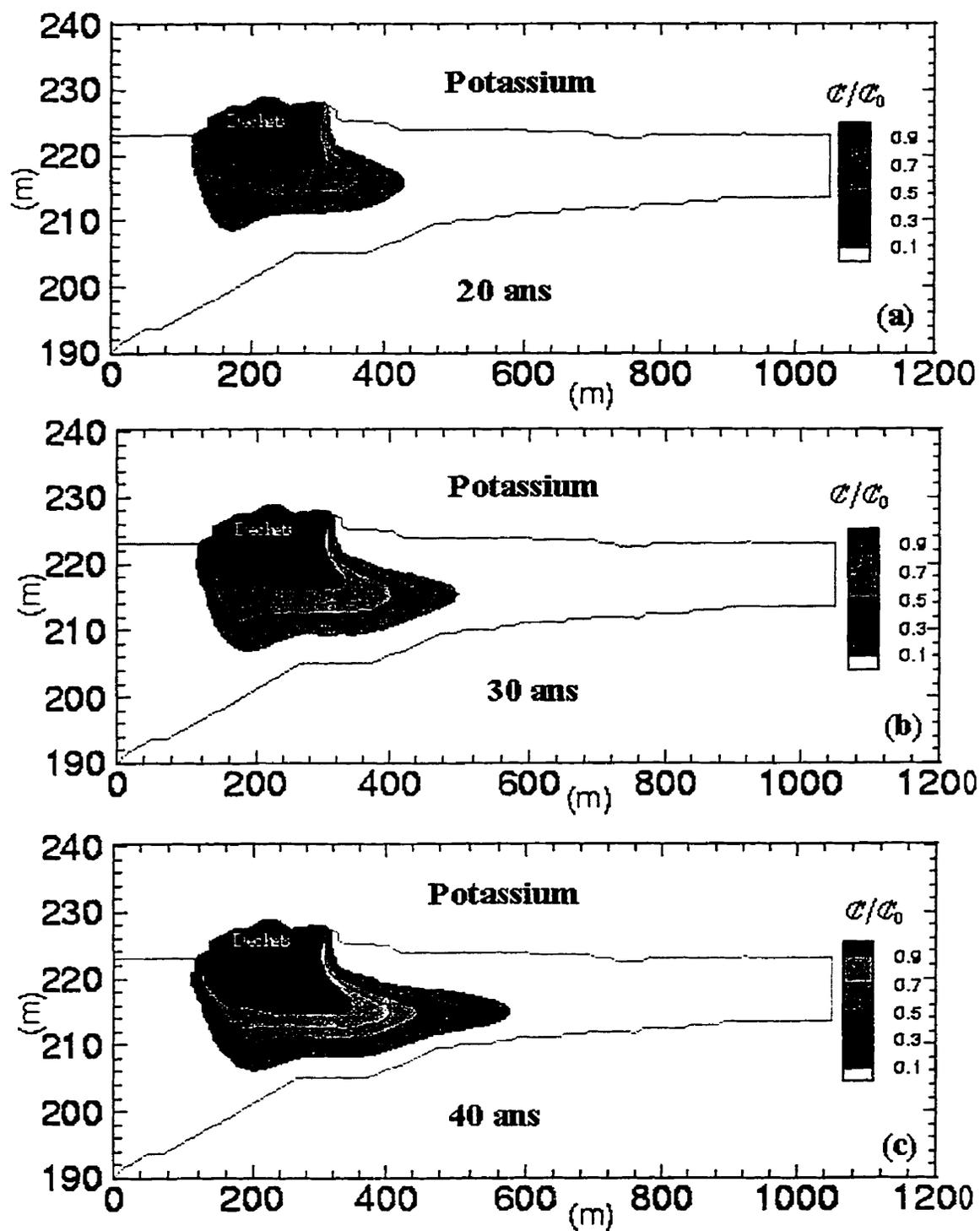


Figure 9. 14 Évolution du panache du Potassium dans le cas: $\alpha_L=10$ m, $\alpha_T=0.01$ m, et $R=1.8$, les contours représentent la concentration relative (C/C_0)

9.4 Analyse de sensibilité

9.4.1. Dispersivités

Les figures 9.12 à 9.14 montrent l'évolution des fronts de chlorure, de sulfate et du potassium simulés pendant une période de 40 ans, pour le cas de base avec $\alpha_L=10m$, $\alpha_{TV}=0.01m$ et $R_{potassium}=1.8$, avec une condition frontière de Cauchy à la surface de la nappe, et une source de contamination constante.

Les figures 9.12 à 9.14 montrent les contours de la concentration relative (C/C_0) avec un intervalle de 0.2. La forme générale des panaches de chlorure, de potassium et de sulfate simulés après une période de 40 ans, (figure 9.12d, 9.13d et 9.14d) se compare favorablement avec celle des panaches observés (figure 9.3, 9.4 et 9.5).

Avant d'obtenir ces résultats nous avons tout d'abord étudié la sensibilité du panache constitué des 3 contaminants (chlorure, sulfate et potassium) pour des variations de la dispersivité, de l'adsorption et de la densité.

Le cas de base montré aux figures 9.12 à 9.14- incorpore une dispersivité transversale $\alpha_{TV}=0.01m$. Une dispersivité transversale de 0.01m et une vitesse d'écoulement de l'ordre de 10^{-3} m/jour donne une dispersion verticale ($D_v = v \cdot \alpha_{TV}$) de l'ordre de la diffusion moléculaire soit 10^{-5} m²/jour. Les figures 9.15 et 9.16 montrent l'effet de la dispersivité transversale sur le déploiement du panache de chlorure et de sulfate. Il est clair, qu'une dispersivité verticale de l'ordre de 0.1 à 1m donne des résultats moins proches des résultats observés. La valeur de 0.01m est déjà suffisamment faible, sa réduction à 0.005 n'a aucun effet sur la forme du panache simulé.

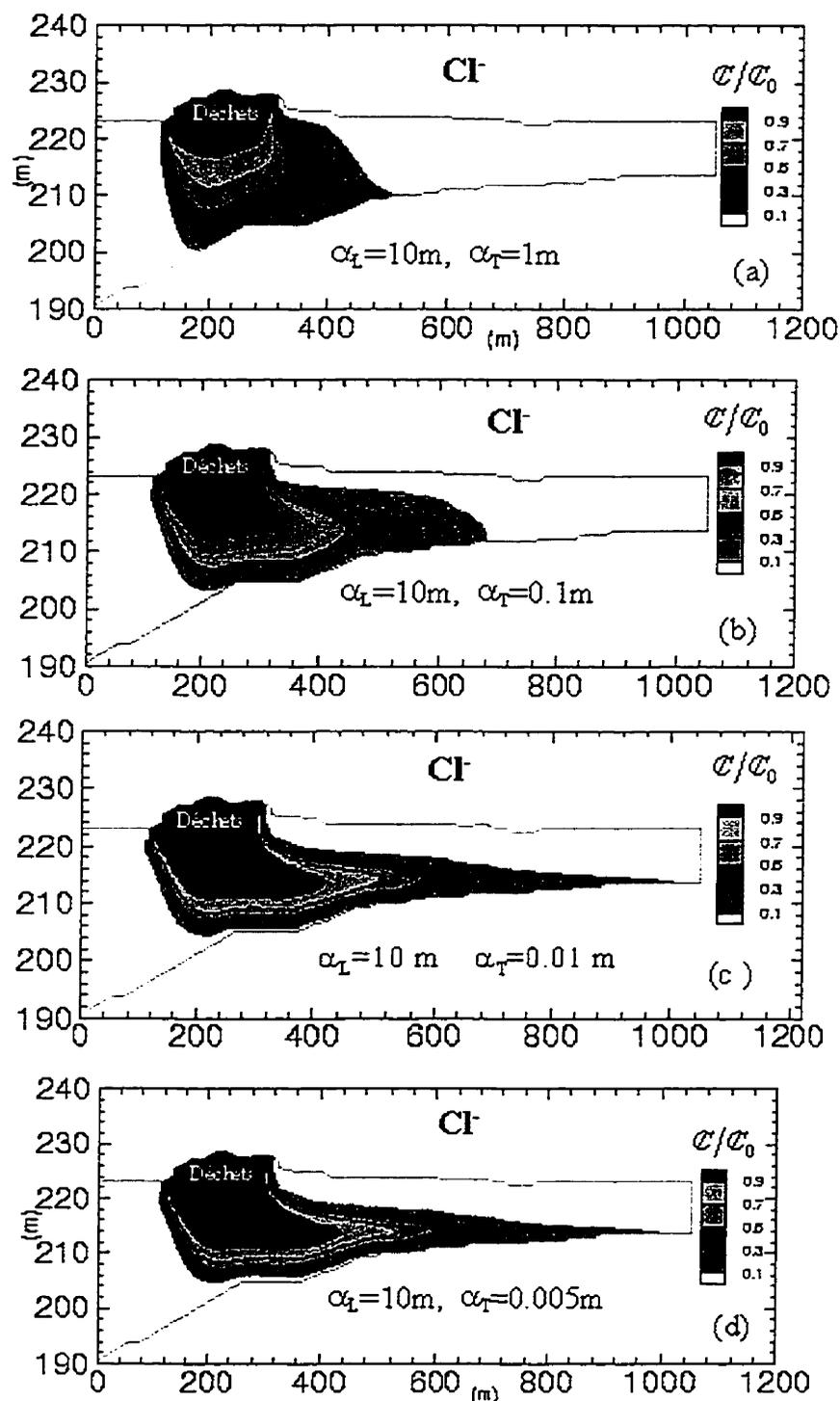


Figure 9. 15 Effet de la dispersivité transversale avec $\alpha_L=10$ m; (a) $\alpha_T=1.0$ m (b) $\alpha_T=0.1$ m (c) $\alpha_T=0.01$ m (d) $\alpha_T=0.005$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2

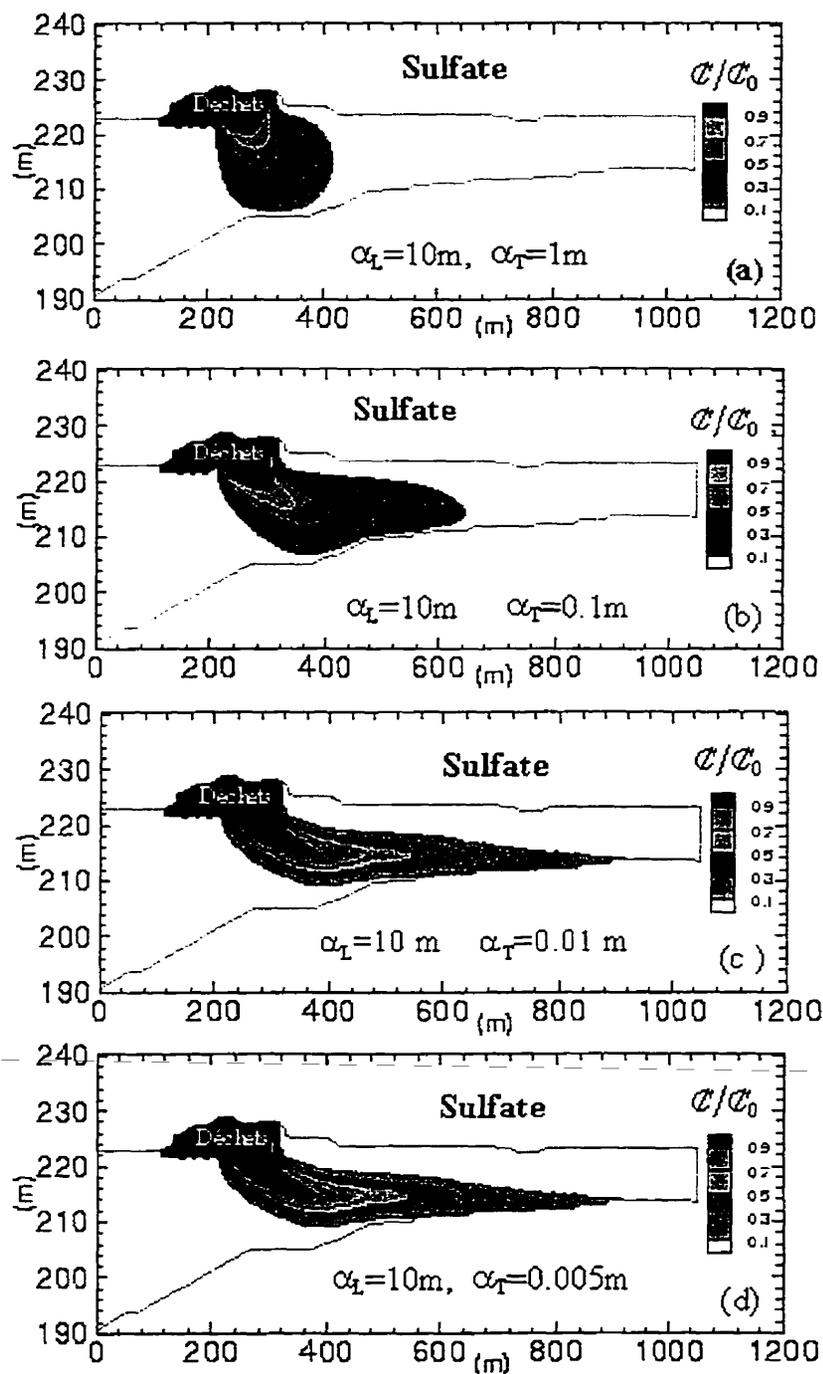


Figure 9. 16 Effet de la dispersivité transversale avec $\alpha_L=10$ m; (a) $\alpha_T=1.0$ m (b) $\alpha_T=0.1$ m (c) $\alpha_T=0.01$ m (d) $\alpha_T=0.005$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2

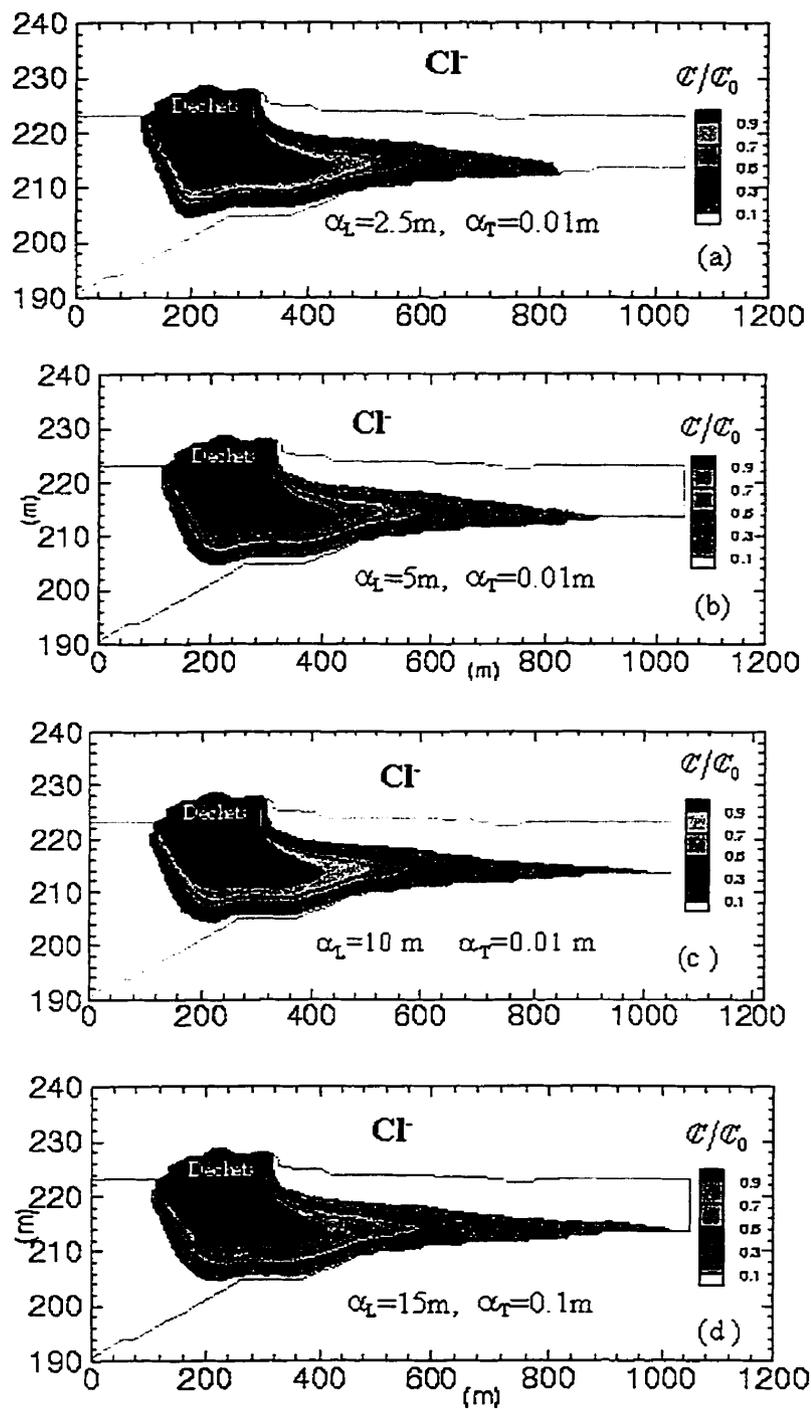


Figure 9. 17 Effet de la dispersivité longitudinale avec $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\alpha_L=2.5$ m (b) $\alpha_L=5$ m (c) $\alpha_L=10.0$ m (d) $\alpha_L=20.0$ m, les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2

La figure 9.17 montre l'effet de la variation de la dispersivité longitudinale sur la forme du panache simulé. La dispersivité transversale utilisée dans ces simulations est de 0.01m, alors que les valeurs de la dispersivité longitudinale utilisées sont 2.5, 0.5, 10.0 et 15.0 m. Plus la dispersivité longitudinale augmente, et plus le déploiement longitudinal du panache augmente. Cependant, on observe que la forme du panache simulé est moins sensible à la dispersivité longitudinale qu'à la dispersivité transversale.

9.4.2 Effet de la sorption

Pour étudier la sensibilité de l'adsorption sur la prévision du panache de potassium, la valeur du coefficient de retard R a été modifiée pour 3 valeurs: $R=1.8$, 2.7 et 3.0. Les résultats de ces modifications sont présentés à la figure 9.18. Dans cette analyse, tous les autres paramètres sont égaux à ceux du cas de base. L'effet de la variation de la valeur de l'isotherme se traduit par une variation de la mobilité du soluté du potassium mais n'a aucun effet sur la migration du chlorure et du sulfate. On observe que la valeur de $R=1.8$ donne des résultats les plus proches des résultats observés (figure 9.4)

9.4.3 Effet de la densité

La sensibilité du déploiement du panache constitué de la chlorure, du sulfate et du potassium aux variations de la densité a été testée à l'aide de 4 séries d'exemples. La variation relative de la densité du panache de la première série est de $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$. Dans la seconde série, elle est égale à $\Delta\rho/\rho_0=0.0022$, dans la troisième, elle est égale à $\Delta\rho/\rho_0=0.0035$ et elle est égale à $\Delta\rho/\rho_0=0.005$ dans la quatrième. Les figures 9.19 montrent clairement que le déploiement du panache est sensible à la variation de la densité. Ces figures 9-19 montrent que la migration du chlorure est la plus affectée par la variation de la densité, car plus elle augmente et plus le panache de chlorure touche le

fond de la nappe et a tendance à se déplacer dans le sens contraire de l'écoulement. Cependant, on observe que la forme du panache de sulfate est moins sensible à la variation de la densité. Il est clair qu'une variation de la densité relative de l'ordre de 0.0015 donne des résultats plus proches des résultats observés. D'ailleurs, cette valeur de $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$ a été enregistrée sur le site.

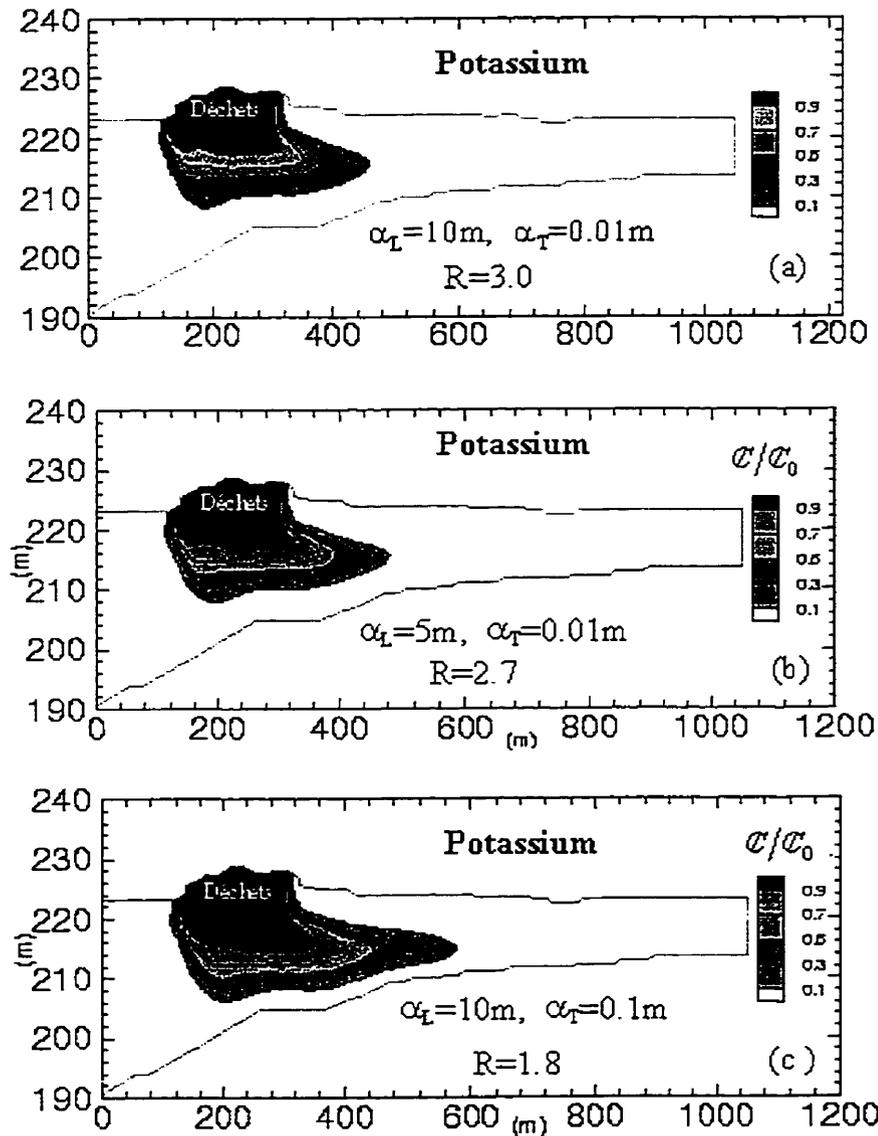


Figure 9. 18 Effet de l'adsorption sur le déploiement du panache de Potassium avec $\alpha_L=10\text{ m}$; $\alpha_T=0.01\text{ m}$; (a) $R=3.0$ (b) $R=2.7$; (c) $R=1.8$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans avec un intervalle de 0.2

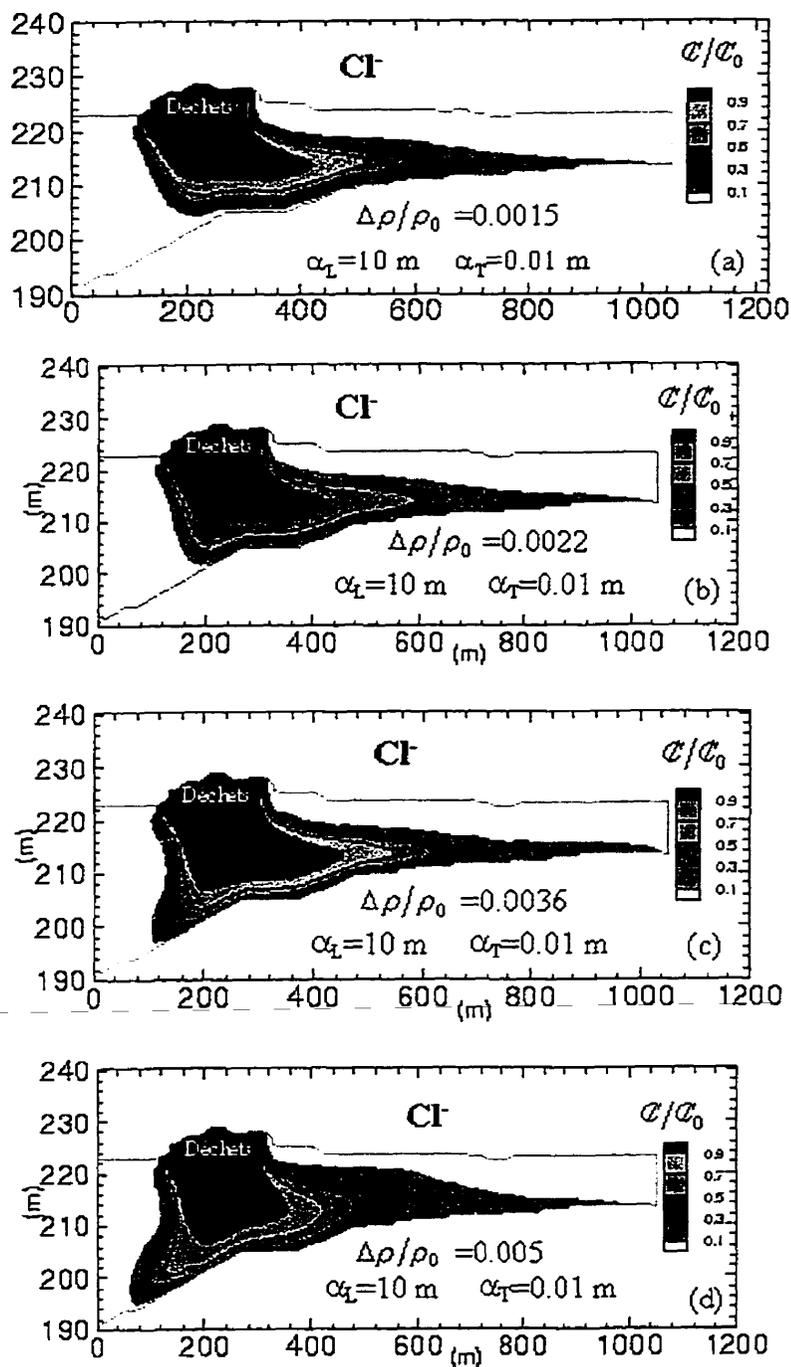


Figure 9. 19 Effet de la densité sur le déploiement du panache de chlorure avec $\alpha_L=10$ m; $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$ (b) $\Delta\rho/\rho_0=0.0022$; (c) $\Delta\rho/\rho_0=0.0036$, (d) $\Delta\rho/\rho_0=0.005$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans

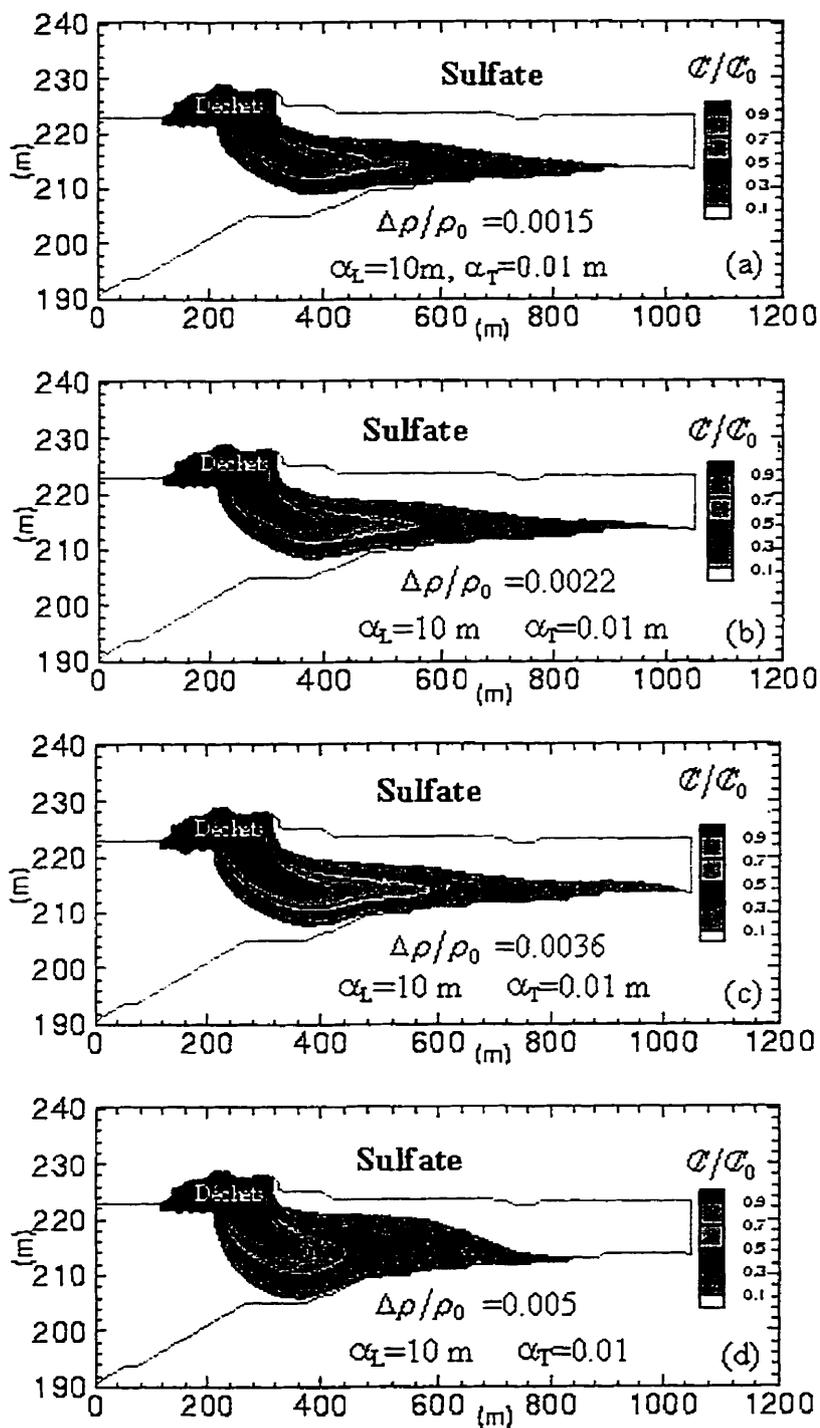


Figure 9. 20 Effet de la densité sur le déploiement du panache de sulfate avec $\alpha_L=10$ m; $\alpha_T=0.01$ m; (a) $\Delta\rho/\rho_0=0.0015$ (b) $\Delta\rho/\rho_0=0.0022$; (c) $\Delta\rho/\rho_0=0.0036$, (d) $\Delta\rho/\rho_0=0.0071$; les contours représentent la concentration relative (C/C_0) à $t=40$ ans

9.5 Conclusion

Les simulations de propagation de polluants dans les eaux souterraines de Borden illustrent bien la capacité d'application du modèle sur des cas réels. Les concentrations de chlorure, de potassium et de sulfate mesurées dans l'aquifère de Borden ont pu être simulées de manière très satisfaisante. La qualité des simulations dépend étroitement des connaissances que l'on a des processus et des paramètres nécessaires à la mise en oeuvre du modèle numérique.

CHAPITRE X

Champs d'application de la méthode EPCOF

10.1 INTRODUCTION

L'évaluation de la méthode EPCOF pour la modélisation numérique de l'équation de transport a démontré que la méthode est capable de résoudre le problème de dispersion + convection avec une grande précision en utilisant un nombre de Péclet variant entre 0 et ∞ et un nombre de Courant élevé, la taille du maillage étant limitée par la précision de calcul des termes diffusifs. Ce qui revient à dire que la méthode limite le temps de calcul au strict nécessaire et qu'elle n'impose aucune contrainte sur le pas du temps et d'espace. C'est pour cette particularité qu'elle est particulièrement adaptée aux simulations à long terme. Elle constitue alors un outil de choix pour la simulation du phénomène de transport dans le milieu poreux, de transport de sédiments, de pollution et autres en raison de sa souplesse d'utilisation et des faibles contraintes numériques qu'elle impose. Nous pensons que la souplesse de cette méthode peut être appréciable dans la discrétisation des équations des écoulements à surface libre (Saint-venant) et des équations de Navier-Stokes. La méthode EPCOF évite certains problèmes et limitations sur le pas de temps et d'espace, en l'occurrence, le critère de Courant Friedrichs-Lewy. La résolution des équations de Saint-Venant basée sur le traitement séparé des termes convectifs, en utilisant la méthode (EPCOF) permet de prendre en compte le caractère hyperbolique de la convection et, par conséquent, d'obtenir des résultats pour des nombres de Courant élevés, indépendamment de la célérité \sqrt{gh} .

L'objectif de ce chapitre est d'évaluer la méthode EPCOF pour la modélisation des écoulements à surface libre.

10.2 Les équations de Saint-Venant

Les équations de Saint-Venant "d'onde longue", qui traduisent le bilan de la quantité de mouvement et la conservation de la masse, s'écrivent de la façon suivante:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -g \frac{\partial z}{\partial x} - \gamma u + \tau_x + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad 10.1$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -g \frac{\partial z}{\partial y} - \gamma v + \tau_y + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad 10.2$$

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial [(z+h)u]}{\partial x} + \frac{\partial [(z+h)v]}{\partial y} = 0 \quad 10.3$$

où

u et v sont les composantes de la vitesse suivant les axes ox et oy , z est la cote de la surface libre, h est la profondeur d'eau, g est l'accélération de la pesanteur, τ est le coefficient du frottement de l'air sur la surface libre, ε est le coefficient de viscosité et γ est le coefficient de frottement de l'écoulement sur le lit, souvent exprimé par la relation de Manning,

$$\gamma = \frac{gn^2 \sqrt{u^2 + v^2}}{H^{1.33}} \quad 10.4$$

où $H=h+z$ est la hauteur d'eau totale et n est le coefficient de Manning qui dépend de la rugosité.

Les équations 10.1-10.2 peuvent s'écrire sous la forme lagrangienne:

$$\frac{du}{dt} = -g \frac{\partial z}{\partial x} - \gamma u + \tau_x + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad 10.5$$

$$\frac{dv}{dt} = -g \frac{\partial z}{\partial y} - \gamma v + \tau_y + \varepsilon \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad 10.6$$

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial [(z+h)u]}{\partial x} + \frac{\partial [(z+h)v]}{\partial y} = 0 \quad 10.7$$

ou les dérivées $\frac{du}{dt}$ et $\frac{dv}{dt}$ indiquent le changement de u et v pendant le pas de temps et sont calculées le long de la caractéristique.

Pour calculer les valeurs des vitesses u , v et z au temps t_{n+1} , on utilise l'algorithme EPCOF.

10.3 Simulation d'une brèche de barrage

La simulation d'une brèche partielle d'un barrage a été testée pour évaluer le comportement du modèle dans un cas où l'écoulement est critique. Le domaine de calcul est défini par un canal de 200m de longueur sur 200m de largeur. La brèche, d'une largeur de 75m, est symétrique et la profondeur d'eau dans le réservoir est de 10m. La figure 10.1 montre le profil de surface libre en trois dimensions obtenu à $t=7.1$ secondes en utilisant un nombre de Courant égal à 5.

L'écoulement critique en aval de la brèche provoque l'instabilité de plusieurs schémas numériques. Le schéma de MacCormack échoue si le rapport entre le niveau d'eau amont et aval est inférieur à 0.25. Celui de Gabbuti échoue si le rapport est inférieur à 0.2. Par contre, ce schéma est capable de calculer l'écoulement critique pour un rapport inférieur à 0.001.

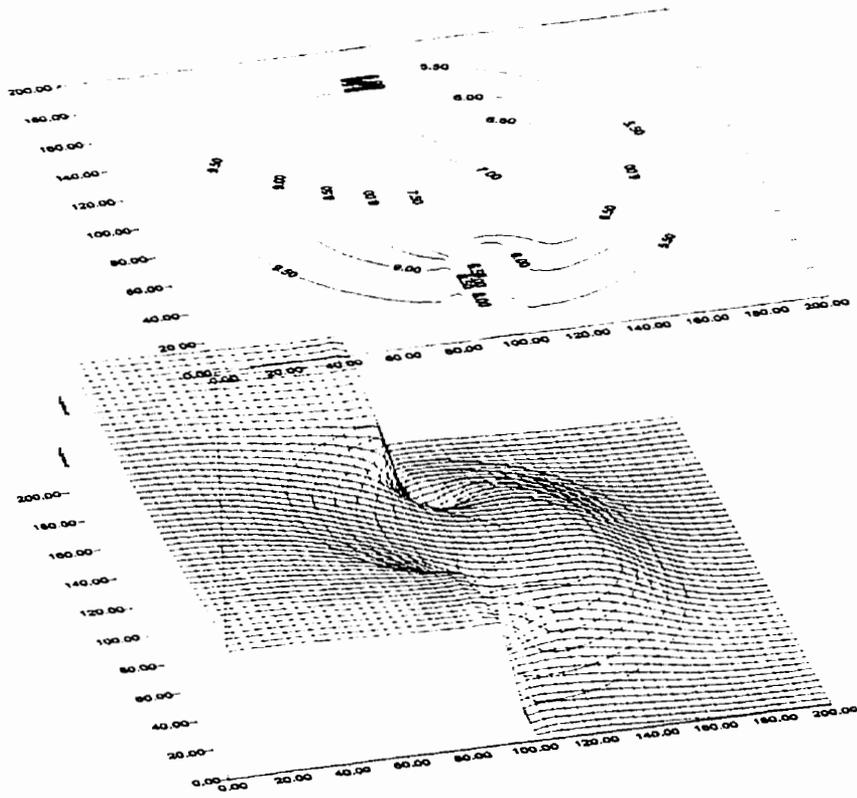
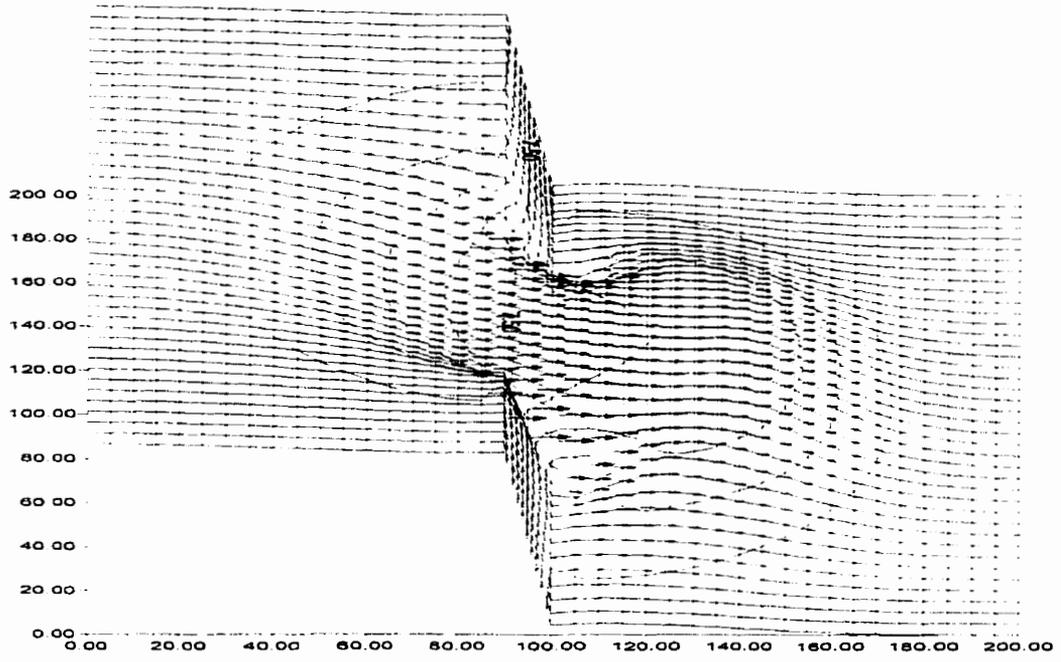


Figure 10. 1 Rupture de barrage: $t=7.1$ secondes, $C_r=5$

10.4 Conclusion

L'évaluation de la méthode EPCOF a démontré que la méthode constitue un outil de choix pour la simulation du phénomène de transport ainsi que la simulation des écoulements à surface libre en raison de sa souplesse d'utilisation et des faibles contraintes numériques qu'elle impose.

CHAPITRE XI

CONCLUSIONS

L'objectif principal de cette étude consistait à développer un nouveau schéma numérique pour la modélisation des caractéristiques de transport et de dispersion d'un lixiviat comportant plusieurs composantes polluantes dans un milieu poreux sur des maillages non structurés. Le modèle considère les processus les plus importants influençant la migration et le devenir des contaminants dans le sol et l'eau souterraine. Ainsi, le nouveau modèle numérique peut tenir compte de la variation, dans le temps et l'espace, de la masse volumique, de la viscosité et de la sorption. Le code de calcul réalise le couplage entre le module hydrodynamique et le module de transport par les équations d'état. Le module hydrodynamique a été conçu en utilisant la méthode des volumes finis, permettant de calculer simultanément le champ des potentiels et des vitesses. Le module de transport applique le schéma non-oscillatoire avec une évaluation exacte du front "*an exact peak capturing and oscillation-free scheme*" (EPCOF). Le schéma a été utilisé en conjonction avec la méthode des volumes finis, basée sur des éléments triangulaires. Les termes convectifs de l'équation de transport sont évalués en utilisant la technique de suivi des particules avec un raffinement adaptatif des maillages. Les termes de diffusion de l'équation de transport sont évalués par leur intégration sur un volume de contrôle.

Il a été démontré que la méthode est capable de résoudre le problème de dispersion + convection avec une grande précision en utilisant un nombre de Péclet variant entre 0 et ∞ et un nombre de Courant élevé, la taille du maillage étant limitée par la précision de calcul des termes diffusifs. Ceci permet de diminuer la durée du

temps de calcul. C'est pourquoi notre modèle est avantageux pour des simulations à long terme.

Le développement du code de calcul a été réalisé dans un premier temps pour la simulation d'un panache de polluant de masse volumique variable afin de comprendre le problème de la naissance et de l'amplification des instabilités hydrodynamiques. À cette étape, le code a été testé sur des exemples trouvés dans la littérature. Une bonne concordance avec ces résultats a été observée. Les résultats ont révélé que l'écoulement perd son caractère stable à partir d'une certaine concentration. Les instabilités qui apparaissent se manifestent par la formation de lobes d'amplitudes significatives le long de la limite inférieure du mélange. L'analyse de la sensibilité a montré que, parmi les facteurs influençant la formation des instabilités, on trouve essentiellement la dispersivité, la vitesse, la perméabilité, la densité et la viscosité.

La bonne concordance entre les résultats numériques et les résultats existants dans la littérature nous a permis de passer à l'étape finale de l'étude, soit le développement du code pour le calcul de plusieurs polluants réactifs et non-réactifs. Les résultats ont montré que le problème de la naissance et de l'amplification des instabilités hydrodynamiques et la réaction chimique dans un écoulement à densité variable peuvent modifier les caractéristiques de l'écoulement. Ceci peut nuire éventuellement au pilotage précis d'une opération industrielle, telle la récupération des hydrocarbures, ou rendre difficile la localisation d'un domaine contaminé en cas de pollution d'une nappe aquifère.

La capacité d'application du modèle sur le plan industrielle est mise à l'épreuve par la modélisation de la migration d'un panache constitué des trois contaminants (chlorite, sulfate et potassium) sur le site d'enfouissement de Borden, en Ontario. Une

bonne concordance entre les résultats numériques et les résultats observés sur le terrain a été observée.

Dans la perspective de ce travail, plusieurs axes de recherche complémentaires se présentent:

- ☞ La modélisation du transport du contaminant en milieux fissurés ou karstique;
- ☞ la contamination du sol et du sous-sol par les hydrocarbures;
- ☞ la protection des sols et la restauration des lieux contaminés.

L'ambition de ce type de modélisation est, d'une part, de reproduire les observations obtenues sur les sites contaminés et, d'autre part, d'effectuer des prévisions pour éviter les problèmes futurs. Quand la nappe est polluée, il est généralement difficile de corriger la situation. Les méthodes de décontamination de l'eau souterrain ont la réputation d'être coûteuses, longues à donner des résultats et pas toujours efficaces. La prévention est donc l'option à privilégier et demeure la moins onéreuse des mesures de protection de la qualité de l'eau souterrain

RÉFÉRENCES

AACHIB, M., (1987). Déplacement isotherme de deux fluides miscible en milieu poreux saturé: effets de densité et de viscosité, critère de stabilité. Thèse de docteur de l'univ. Louis Pasteur, Strasbourg, France, 121p.

ACKEER, PH., MAGNICO, P., MOSE, R., (1994). Réflexion sur la modélisation de la propagation des polluants dans les hydrosystèmes. Revue des Sciences de l'eau, N⁰7, 201-212.

ALYMORE, L.A. G., AND M. KARIM, (1970). Leaching of fertilizer ions in soil columns. Int. Congr. Soil Sci., Trans. 9th (Adelaide, Aust.)

ANDERSON, M.P. (1984). Movement of contaminants in Groundwater: Groundwater transport-Advection and dispersion. In Groundwater Contamination. National Academy press, Washington, DC, pp. 37-45.

ANDERSON, M.P. , AND W.W. WOESSNER, (1992A). Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press, San Diego, 381 pp.

AYLMORE, L. A. G. , AND M. KARIM, (1970). Leaching of fertilizer ions in soil columns. Int. Congr. Soil Sci, Trans. 9th (Adelaide, Aust.) I:143-153.

BACHMAT, Y.M AND D.E. ELRICK, (1970). Hydrodynamic instability of miscible fluids in vertical porous column, Water Resour. Res., 6(1), 156-171.

BALIGA, B. R. AND PATANKAR, S. V., (1980), A new finite element formulation for convection diffusion problems, Numerical Heat Transfer, Vol. 3, pp. 393-409.

BALIGA, B. R. AND PATANKAR, S. V., (1983), A control volume finite element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer, Numerical Heat Transfer, Vol. 6, 245-261.

BALL, W.P., AND ROBERTS, P.V., (1991). Environ. Sci. Technol., 25, 1223

BALL, W.P., AND ROBERTS, P.V., (1991). Environ. Sci. Technol., 25, 1237

BAPTISTA, A. M., ADAMS, E., AND STOLZENBACH, K., (1984), Eulerian - Lagrangian analysis of pollutant transport in shallow water, Report N° 296. R. M. Parsons Lab. For Water Resour and hydrodynamics, MIT, June (1984)

BAPTISTA, A. M., (1987), "Solution Of Advection-Dominated Transport By Eulerian-Lagrangian Methods Using The Backward Methods Of Characteristics", Ph.D Thesis, Department of Civil Engineering, MIT, 1987.

BEAR, J., (1972). Dynamics of Fluids in Porous Media. American Elsevier, New-York, 764p.

BEAR, J., AND VERRUIJT, A., (1987), Modelling Groundwater Flow and pollution Reidel, Dordrecht.

BIGGAR, J. W., AND D. R. NIELSEN, (1967). Miscible displacement and leaching phenomena. In R. M. Hagen (ed.), Irrigation of agricultural lands. Agronomy 11:254-274. Am.Soc. of Agron., Madison, Wis.

BOGGS, J.M. (1991). Database for the first Macrodispersion Experiment (MADE-1). EPRI Report EN-7363, Electric Power Research Institute, Palo Alto, Ca.

BUES, M. A., AACHIB, M.,(1991). Influence of the Heterogeneity of the Solution on the parameters of miscible Displacement in saturated Porous Medium. Part 1: Stable Displacement with density and viscosity Contrasts. Experiments in Fluids, N°11, 25-32.

CASULLI. V., (1987), "Eulerian-Lagrangian methods for Hyperbolic and Convection Dominated Parabolic Problems", in Computational Methods For Non Linear problems, edited by C. Taylor, D. R. Owen and E. Hinton (Pineridge Press, Swansea), p. 239-268.

CASULLI. V., (1990), "Semi-Implicit Finite Difference Methods For The Two-Dimensional Shallow Water Equations, J. Computational physics , 86, 56-74.

CELIA, M. A., RUSSELL, T. F, HERRERA, I AND EWING, R. E, (1990) " An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint method for the Advection-Diffusion Equation" Adv. Water Resour., 13, 187-206.

CELIA , M. A, AND S. ZISMAN, (1990) "A Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for reactive transport in groundwater, in Computational Methods in Hydrology, edited by G. Gambolati, A. Rinaldo, C. A Brebbia, W. G. Gray, and G. F. Pinder, pp. 383-392, Computational Mechanics Publications, Springer-Verlag, New York.

CHAVENT G., JAFFRE J., (1987). Mathematical models and numerical methods for oil reservoir simulation. North Holland.

CHENG, J. R; CHENG, H. P AND YEH; G. T.(1996) "A Lagrangian-Eulerian Method With Adaptively Local Zooming And Peak/Valley Capturing Approach To Solve Two-Dimensional Advection-Diffusion Transport Equations", Water Resour. Res., 39, 987-1016.

CHENG, H. P., CHENG, J. R. AND YEH T. G, (1996)., " A particle Tracking Technique For The Lagrangian-Eulerian Finite Element Methods In Multi-Dimensions", International Journal For numerical Methods in Engineering, Vol. 39, 1115-1136.

COATS, K. H, AND B. D. SMITH, (1964). Dead end pore volume and dispersion in porous media. Soc. Pet. Eng. J. 4:73-84.

CRANE, F. E., GARDNER, G. H. F., (1961). Measurements of Transverse Dispersion in Granular Media. Journal of Chem. Eng. Data.

DEANS, H. H., (1963). A mathematical model for dispersion in the direction of flow in porous media. Soc. Pet. Eng. J. 3:49-52.

DOMBRE, T., HAKIM, V., (1986). Qu'elle est la largeur des "doigts" de Sffman et Taylor , Rev. la Recherche, N°181, 1260-1262.

ELKAIM. D (1994)., Simulation Numérique d'écoulements turbulents avec réaction chimiques, Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique de Montréal, 1990.

FAN, Y. AND KAHAWITA, R., (1994), A numerical study of variable density flow and mixing in porous media, Water Resources Research, Vol. 30, N°10, pp. 2707-2716.

FAN, Y. AND KAHAWITA, R., (1994), Numerical study of the effects of variable density contaminant in an unconfined aquifer, Computer techniques in environmental studies V. Vol.: Pollution modelling, pp. 165-172, Computational Mechanics Publications.

FAN, Y., (1995), Density effects on contaminant migration in saturated-unsaturated porous media. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique de Montréal.

FREDJ, A., (1994), Évaluation d'une méthode d'Euler-Lagrange pour la modélisation des écoulement à surface libre et de l'équation de transport, Thèse de maîtrise, Ecole Polytechnique de Montréal.

FREDJ, A., AND KAHAWITA, R., (1994), " Evaluation of a Hybrid Eulerian-Lagrangian Method for Free Surface Flows with Material Transport", Envirosoft/94, Proceedings edited by P. Zannetti, San Francisco, USA, November .

FREDJ, A., AND KAHAWITA, R., (1997), "Control Volume Finite Element Solution Of Multispecies Contaminant Plumes In Variable Density Flow Systems", ASCE. XXVII IAHR Congress, San Francisco, USA, August 1997.

FREDJ, A., AND KAHAWITA, R., (1997), "Schéma de volume finis pour la simulation numérique d'écoulement à densité variable en milieu poreux", The Fifth Annual Conerence of the Computational Fluid Dynamics Society of Canada, May 25 - 27, 1997

FREEZE, R. A. AND CHERRY. J. A., (1979), Groundwater, Prentice_Hall, Englewood Cliffs, N. J.

FRED, J.J., AND COMBARNOUS M.A. (1971). Dispersion in porous media. In V.T. Chow, advances in hydrosceince, Academic Press, New York, pp. 169-282.

FRIND, E. O., (1982a), Seawater intrusion in continuous coastal aquifer-aquitar system, Advanced in Water Resources, 5, pp. 89-97.

FRIND, E. O., (1982b). Simulation of Long Term Transient Density-Dependent Transport in Groundwater. Adv. Water. Res., Vol 5, 89-97.

FRIND, E. O., MATSNGAG, G. O., AND CHERRY, J. A, (1985). The Dual Formulation Of Flow for Contaminant Transport Modeling. 1. Review of Theory and Accuracy Aspects. Water Resources Res., Vol. 21, N°2, 159-169.

FRIND, E. O., AND HOKKANEN, (1987), "Simulation of the Borden Plume Using the Alternating Direction Galerkin Technique, "Water Resources Research, Vol. 15, pp.1387-1397.

GALETI, G., GAMBOLATI, G. AND NEUMAN, S. P., JANUARY (1992), Coupled and Partially Coupled Eulerian-Lagrangian Model of freshwater-Seawater Mixing, Water resources Research, Vol. 28, N°1, pp.149-165.

GAMBOLATI, G., C. PANICONI AND M. PUTTI, (1984), Numerical modeling of contaminant transport in groundwater, In: Bear, J. and Y. Corapcioglu (eds.) Fundamental of transport phnomena in porous media. NATO-ASI Series, Applied Sciences 82, Martinus Nijoff B. V., The hague, pp 953-984, 1984.

GAMBOLATI, G., M. PUTTI C. PANICONI, (1994), Finite element modeling of transport of reactive contaminant en variably saturated soils with LEA and non-LEA sorption. Environmental Modeling, Vol II.

GARABEDIAN, S.P. (1987). Large-Scale Dispersive Transport in Aquifers: Field Experiments and reactive Transport Theory. Ph. D. Thesis, MIT, Cambridge, MA, 290 pp.

GARDNER, W. R. (1958). Some Steady-State Solutions of the unsaturated Moisture Flow Equation with Application to evaporation From a Water Table, Soil Science, Vol. 85, pp. 228-232.

GARTNER LEE ASSOCIATES LTD., (1977), Leachate migration study, CFB Borden. Final Report Prepared for Environent Canada, Toronto, Ont., Gartner les associates, Toronto, Ont., May 1977, pp.24 and appendices.

GILHAM, R. W. AND J. A. CHERRY, (1982). "Contaminant Migration in Saturated Unconsolidated Geologic Deposits". In: Recent Trends in Hydrogeology, T. N. Narasimhan, Editor. Geoloical Society of America Special Paper 189, pp. 31-62.

GIDDINGS, J. C, (1963), Kinetic origin of tailing in chromatography, anal. Chem. 35, 1999-2002, 1963.

GOTTSCHLICH, C. F., (1963). Axial dispersion in a packed bed. A. I. Ch. E. j. 9:88-92.

GREEN, R. E., P. S. C. RAO, AND J. C. COREY, (1972). Solute transport in aggregated soils: tracer zone shape in relation to pore-velocity distribution and sorption. Proc. 2nd Symp. Fundamentals of transport phenomena in porous media. IAHR-ISSS. Guelph. 7-11 August, 1972. Vol. 2: 732-752.

GREEN, D. W., PERRY'S, (1984), Chemical Engineers' Handbook, 6th ed., McGraw-Hill, new York, 1984.

GUREGHIAN. A. BERGE., (1983). A Two Dimensional Finite Element Model for the Simultaneous Transport of Water and Reacting Solutes Through Saturated and Unsaturated Porous Media. Technical Report, Office of Nuclear Waste Isolation Battelle Memorial Institute, Columbus, OH 43201.

HARLEMANN, D. R. F., RUMER, R. R., (1963). Longitudinal and Lateral Dispersion in Isotropic Porous Medium. Journal of Fluid Mech, Vol. 16, 385-394.

HEBERT, A., W., JACKSON, C. P., LEVER, D. A., (1988). Coupled Groundwater flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly Dependent Upon Concentration. Water Resources Res., Vol. 24, N^o10, 1781-1795.

HENRY, H. R., (1964). Effects of dispersion on salt water encroachment in coastal aquifers, In: Sea Water in Coastal Aquifers, U.S. Geological Survey Water-Supply Paper 1613-c, pp. c71-c84.

HOOKEY N. A AND BALIGA B. R, (1988a), Evaluation and Enhancement of some Control Volume Finite Element Method -Part I. Convection-Diffusion Problems. Numerical Heat Transfer, Vol. 14, pp. 225-272.

HORTON, C. W., AND F.T. ROGERS (1945), Convection in porous medium, J. Appl. Phys., 16, 367-370, 1945.

HUYAKORN, P. S., (1977). Solution of Sready-State Convective Transport Equation Using an Upwind Finite Element Scheme, Applied Mathematical Modeling, vol. 1, pp. 187-195.

HUYAKORN, P. S., AND K. NILKUHA, (1979). Solution of Transient Transport Equation Using an Upstream Finite Element Scheme, Applied Mathematical Modeling, vol. 3, pp. 7-17.

HSIN-CHI J. ET AL., (1996) "Femwater: A three-Dimensional Finite Element Computer Model For Simulating Density Dependent Flow and Transport" Technical Report HL-96

KAY, B. D., AND D. E. ELRICK, (1967), Adsorption and movement of lindane in soils. Soil Sci. 104:314-322.

KARICKHOF, S.W., D.S BROWN, AND T.A SCOTT. (1979). Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. Water Resour. Res., vol. 13, pp. 241-248.

KILLEY, R.W.D., AND G.L. MOLTYANER. (1988). Twin Lake tracer tests: methods and permeabilities. Water Resour. Res., vol. 24, no. 10, pp. 1585-1613.

KIMMEL, G. E. AND BRAIDS, O. C., (1980), Leachate Plumes in Ground water from Babylon and Islip Landfills, lon Island, New York, geological Survey Professinal paper 1085, U.S. Government Printing Office, washinton, D.C.

KOCH, M., ZHANG, G., (1992). Numerical Simulation of the Effects of Variable Density in a Contaminant Plume. Ground Water, Vol. 30, N°5, 731-742.

KONIKOW, L. F. AND BREDHOEFT, J. D., (1977), Computer model for two dimensional solute transport and dispersion in groundwater. U.S. Geological Survey Waater Resource Investigation Repport, 77-19.

LAPWOOD, E.R., (1948). Convection of a fluid in a porous medium, Proc. Gamb. Phil. Soc., 44, 508-521.

LEBLANC, D.R., S.P. GARABEDIAN, K.M. HESS, L.W. GELHAR, R.D., QUADRI, K.G. STOLLENWERK, AND W.W. WOOD. (1991). Large-Scale naturel gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts, 1: experimental design and observed tracer movement . Water Resour. Res., vol. 27, no 5, pp. 895-910

LIST, E., J.,(1965). The stability and mixing of a density-stratified horizontal flow in a saturated porous medium, Rep. KH-R-11, Calif. Inst. Technol., Pasadena.

MACFARLANE, D. S., CHERRY, J. A., GILLHAM, R. W. AND SUDICKY, E. A., (1983), Migration of contaminants in Groundwater at landfill: A case study. 1. Groundwater flow and plume delineation, Journal of Hydrology, 63, pp. 1-29.

MACKAY, D., W. Y. SHIU, AND K.C. MA. (1992). Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate of Organic Chemicals. Lewis Publishers, Boca Raton.

MACKAY, D.M., D.L. FREYBERG, P.V. ROBERTS, AND J.A. CHERRY. (1986). A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer, 1: approach and overview of plume movement. Water Resour. Res., vol. 22, no. 13, pp. 2017-2029.

MENDOZA, C. A. AND FRIND, E. O, (1990a). Advective-dispersive transport of dense organic vapors in the unsaturated zone. 1 Model development, water Resour. Res., 26(3), 397-387.

MENDOZA, C. A. AND FRIND, E. O, (1990b). Advective-dispersive transport of dense organic vapors in the unsaturated zone. 2 . Senitivity analysist, Water Resour. Res., 26(3), 388-398.

MOLTYANER, G.I., AND R.W.D. KILLEY. (1988a). Twin Lake tracer tests: longitudinal dispersion. Water Resour. Res., vol. 24, no. 10, pp. 1613-1627.

MOLTYANER, G.I., AND R.W.D. KILLEY. (1988b). Twin Lake tracer tests: transverse dispersion. Water Resour. Res., vol. 24, no. 10, pp. 1628-1637.

MOLTYANER, G.I., AND M.H. KLUKAS, C.A. WILLS AND R.W.D. KILLEY. (1993). Numerical simulation of Twin Lake natural gradient tracer tests: a comparison of methods. Water Resour. Res., vol. 29, no. 10, pp. 3433-3452.

MOLZ, F.J., O. GÜVEN, J.G. MELVILLE, R.D. CROKER, AND K.T. MATTESON. (1986). Performance, analysis, and simulation of two-well tracer test at the Mobile site. An examination of scale-dependent dispersion coefficients. Water Resour. Res., vol 22, no. 7, pp. 1031-1037.

MOUCHEL. J. M., ZHANG. M. Z, BOURRAIN. X ET ANDRÉ. B (1990), "Un modèle lagrangien de qualité. Application à l'Arc à l'aval d'Aix- en Provence", La Houille Blanche, N° 3-4, 1990.

MOSÉ R., (1990). Application de la méthode des éléments finis mixtes hybrides et de la marche au hasard à la modélisation de l'écoulement et du transport de masse en milieu poreux. Thèse de l'université Louis Pasteur d Strasbourg, Institut de la Mécanique des fluides, 153p.

MUALEM, Y., (1976), A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, Water Resources Research, Vol. 12, pp. 513-522.

NEUMAN, S. P, (1981), "A Lagrangian numerical scheme for the dispersion-convection equation using conjugate space time grids. Journal of Computational Physics, Vol.41, pp. 270-294.

NEUMAN, S. P, (1984), "Adaptive Eulerian-Lagrangian Finite Element Method For Advection-Dispersion", Int. J. Numer. Methods Eng., 20, 321-337, 1984.

NEUMAN, S. P, (1990), Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geological media, Water Resources Research, Vol.26, pp. 1749-1758.

NIELSEN, D. R., AND J. W. BIGGAR, (1961). Miscible displacement in soils. I. Experimental information. Soil Sci. Soc. Am. Proc. 25:1-5.

OFFERINGA, L., VAN DER POEL, C., (1954). Displacement of Oil from Porous Media by Miscible Liquids. Petroleum Transaction of the A.I.M.E., J.P.T., Vol. 201, 310-316.

OLDENBURG, C. M. AND PRUESS, K., (1995), Dispersive transport dynamics in strongly coupled groundwater-brine flow system, Water Resources Research, Vol. 31, N°2, pp 289-302.

OLTEAN, C., (1991). Comportement du déplacement d'un front d'eau douce/eau salée en milieu poreux saturé: Modélisation physique et numérique. Thèse de docteur de l'univ. Louis Pasteur, Strasbourg, France, 198p.

OOSTROM, M., (1991). Behavior of dense leachate plumes in unconfined aquifer models, Ph.D. dissertation, Department of Agronomy and Soils, Auburn University, Auburn, Alabama.

OOSTROM, M., HAYWORTH, J. S., DANE, J. H., AND GUVEN, O., (1992). Behavior of dense aqueous phase leachate plumes in homogeneous porous media, Water Resour. Res., 28(8), 2123-2134.

OOSTROM, M. AND DANE, J. H., (1992). Experimental Investigation of dense Solute Plumes in an Unconfined Aquifer Model, Water Resour. Res., 28(9), 2315-2326.

Paschke, N. W., and Hoopes, J. A., (1984), Buoyant contaminant plumes in groundwater, Water Resources Research, 20 (9), 1183-1192.

PRAKASH C. AND PATANKAR S. V. (1985). A Control Volume-Based Finite Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation. Numerical Heat Transfer, Vol. 8, pp. 259-280.

PERKINS, T. K AND O. C. JOHNSTON, (1963). "A Review of Diffusion and dispersion in Porous Media. Journal of the Society of Petroleum Engineers, Vol. 17, pp. 70-83.

PRAKASH C. AND PATANKAR S. V. (1987a). A Control Volume Finite Element Method for predicting Flow and Heat Transfert in Ducts of Arbitrary Cross Section- Part I: Description of the method, Numerical Heat Transfer, Vol. 12, pp. 389-412.

PRAKASH C. AND PATANKAR S. V. (1987c). Examination of the Upwind (Donor-Cell) Methods for Fluid Flow and Heat Transfer. Numerical Heat Transfer, Vol. 11, pp. 401-416.

PATANKAR, S.V., (1980), Numerical Heat Transfert and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Co.

RAYLEIGH, LORD, (1916). On convection currents in horizontal layer of fluid when the higher temperature is under side, Phil. Mag., Ser. 6, 32, 529-546. 1916.

REID, R. C., J. M. PRAUSNITZ, AND T. K. SHERWOOD, (1987), The Properties of Gases and Liquids, 4th ed., McGraw-Hill, New York, 1987.

RIDA. S. (1993)., " Schéma de volumes finis pour la simulation numérique d'écoulement turbulents sur des maillages non structurés", Mémoire de Maitrise, Ecole Polytechnique de Montréal, 1993.

SANFORD, W. E. AND KONIKOW L. F., (1985), A two-constituent solution-transport model for groundwater having variable density. U. S. Geology Survey Water Resource Investigation Report, 85-4279.

SCHINCARIOL, R. A., AND F. W. SCHWARTZ, (1990), An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media, Water Resour. Res., 26, 2317-2329, 1990

SCHINCARIOL, R. A., (1993). Dispersion in variable density flow, Ph. D. thesis, Dep. Of Geol.Sci., Ohio State Univ., Columbus, 1993.

SCHINCARIOL, R. A., AND F. W. SCHWARTZ, AND C. A. MENDOZA (1994), On the generation of instabilities in variable density flow, Water Resour. Res., 30, 913-927.

SCHINCARIOL, R. A., AND F. W. SCHWARTZ, AND C. A. MENDOZA (1997), On Instabilities in the variable density flows: Stability and sensitivity analyses for homogenous media, Water Resour. Res., 33, 31-41.

SCHNOOR, J.L., MOSMANN, D.J., BORZILOV, N.A., NOVOTSKY, M.A., VOSZHENNIKOV, O.I., AND GERASIMENKO, A.K.,(1992). In Fate of Pesticides and Chemicals in the Environment, J.L. Schnoor, Ed., Wiley-Interscience, New York.

SCHNOOR, J.L.,(1996). Environment Modeling: Fate and Transport Of Polluants in Water, Air And Soil, J.L. Schnoor, Ed., Wiley-Interscience, New York.

SKOPP, J., AND A. W. WARRICK, (1974). A two-phase model for the miscible displacement of reactive solutes in soils. Soil Sci. Soc. Am. Proc. 38:545-550.

SIMON. L. (1990), "Evaluation de schémas numériques pour la modélisation de l'advection-dispersion", La Houille Blanche, N° 3-4, 1990

SIMPSON, E. S., (1962). Transverse Dispersion in Liquid Flow Through Porous Media. U. S. Geol. Surv. Prof. Pap., 411-C.

SOUZA, W. R. AND VOSS. C. I., (1987), Analysis of an anisotropic coastal aquifer system using variable density flow and solute transport simulation, Journal of Hydrology, 92, pp. 17-41.

SUDICKY, E. A., (1986). A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer: Spatial Variability Of Hydraulic Conductivity and Its Role in the Dispersion Process. Water Resources Res., Vol. 2, N^o13, 2069-2082.

SYKES, J. F., PAHWA, S. B., LANTZ, R. B., AND WARD, D. S., (1982), Numerical Simulation of Flow and Contaminant Migration at Extensively Monitored Landfill. Water Resources research, Vol. 18, N^o6, pp. 1687-1704.

TURNER, G. A., (1958). The flow-structure in packed beds. Chem. Eng. Sci. 7:56-165.

S.ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, (1977), The report to congress: water disposal practice and their effects on ground water, USPEA Office of water Supply, Office of solid waste Management programs

VAN GENUCHTEN, M. TH., J. M. DAVIDSON, AND P. J. WIERENGA, (1974). An evaluation of kinetic and equilibrium equations for the prediction of pesticide movement in porous media. Soil Sci. Soc. Am. Proc. 38:29-35.

VAN GENUCHTEN, M. TH., AND P. J. WIERENGA, (1976). Mass transfer studies in sorbing porous media. II. Experimental evaluation with tritium (³H₂O). Soil. Sci. Soc. Am. Proc.

VAN GENUCHTEN, M. TH., AND P. J. WIERENGA, (1976). Mass transfer studies in sorbing porous media:1. Analytical solutions, Soil Sci. Soc. Amer. J.: 40(4), 473-480.

VAN GENUCHTEN, M. TH., (1980), A close-form equation for prediction the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America Journal, 44, pp. 892-898.

VAN GENUCHTEN, M. TH., AND NELSEN, D. R., (1985), On describing the hydraulic properties of unsaturated soils, Annales Geophysica, 3, 5, pp. 515-628.

VAUCLIN, M., G. VACHAUD, AND D. KHANJI, (1975). Two-dimensional Numerical Analysis of Transient Water Transfer in saturated-Unsaturated Soils, Modeling and Simulation of Water Resources Systems, G. C. Vansteenkiste, ed., North Holland Publishing Co., Amsterdam, pp. 299-323.

VAUCLIN, M., D. KHANJI AND G. VACHAUD, (1979). Experimental and Numerical study of a Transient, Two-Dimension Unsaturated-Saturated Water Table Recharge Problem, Water resources Research, Vol. 15(5), pp. 1089-1101.

VILLERMAUX, J., AND W. P. M. VAN SWAAY, (1969). Modèle représentatif de la distribution des temps de sejour dans un reacteur semi-infini a dispersion axiale avec zones stagnantes. Chem. Eng. Sci. 24:1097-1111.

VOSS, C. I., (1984). SUTRA: A Finite Element Simulation Model For Saturated-Unsaturated, Fluid Density Dependent Groundwater Flow with Energy Transport or Chemically Reactive Single Species Solutes Transport. U. S. Geol. Surv. Water-Resour. Invest.Rep., 84-4369, 409p.

VOSS, C. I. AND SOUZA, W. R., (1987). Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone, Water Resour. Res., 23(10), 1851-1866.

WOODING, R. A., (1959). The stability of viscous liquid in a vertical tube containing porous material, Proc. R. Soc. London, Ser. A., 252, 120-134.

WOODING, R. A., (1969), Growth of fingers at an unstable Diffusing interface in a porous medium or Hele-Shaw Cell, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 15, pp. 527-544.

YEH; G. T, (1990);“ A Lagrangian_Eulerian method with Zoomable hidden fine-mesh approach to solving advection-dispersion equation”, Water Resour. Res., 26, 1133-1144, 1990

YEH; G. T; CHANG, J.R AND SHORT, T. E, (1992). “ An exact peak Capturing and Oscillation-free scheme to solve advection-dispersion transport equation”, Water Resour. Res., 28, 2937-2951, 1992

YEH; G. T; CHANG, J.R; CHENG, H. P. AND SUNG, C. H.(1995) “ An Adaptive Local Grid Refinement Based On the Exact peak Capturing and Oscillation-Free Scheme To Solve Advection-Dispersion Transport Equation”, Computers & Fluids, No. 3, pp. 293-332, 1995.

YOUNG, D.F., AND BALL, W.P., (1994) Environ. Prog., 13:1, 9.

ZHANG, H., AND SCHWARTZ, F. W., (1995), Multispecies contaminant plumes in variable density flow systems, Water Resources Research, Vol. 31, N^o4, pp. 837-847.

ZHANG, H., AND SCHWARTZ, F. W., AND AL., (1998), Simulation of variable flow and transport of reactive and non reactive solutes during a tracer test at Cape Cod, Massachusetts. Water Resources Research, Vol. 34, N^o1, pp. 67-82.

ZHENG, C., M.P. ANDERSON, AND K.R. BRADBURY. (1989). Effectiveness of hydraulic methods for controlling groundwater pollution. In Groundwater Contamination L.M. Abriola, ed., IAHS Publication No. 185, pp. 173-179.

ZHENG, C., G.D. BENNETT, AND C.B. ANDREWS. (1991). Analysis of groundwater remedial alternatives at a superfund site. Ground Water, vol. 29, no. 6, pp. 838-848.

ZHENG, C., G.D. BENNETT (1995). Applied contaminant transport modeling: Theory and practice. Van Nostrand Einhold pp432.

ZILLIOX, L., MUNTZER, P., (1971). Étude sur Modèles Physiques du mécanisme de la Pollution des eaux Souterraines par Liquides Miscibles (Saumures) et non Miscibles (Hydrocarbures). La houille Blanche, N^o 8, 723-730.