



**HAL**  
open science

# Représentation spatiale des risques de propagation des pollutions par hydrocarbures en milieu souterrain : application en milieu alluvial

Wolfram Anker

► **To cite this version:**

Wolfram Anker. Représentation spatiale des risques de propagation des pollutions par hydrocarbures en milieu souterrain : application en milieu alluvial. Sciences de l'environnement. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris; Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 1997. Français. NNT : 1997ENMP0810 . tel-00825624

**HAL Id: tel-00825624**

**<https://theses.hal.science/tel-00825624>**

Submitted on 24 May 2013

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE

présentée par  
**Wolfram ANKER**

pour obtenir le grade de  
**Docteur**

de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et  
de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris  
(spécialité : Hydrologie et Hydrogéologie Quantitatives)

**Représentation spatiale des risques de propagation  
des pollutions par hydrocarbures en milieu souterrain -  
application au milieu alluvial**

**Soutenue le 14 novembre 1997 devant le jury composé de :**

Prof. P. Moszkowicz	Rapporteur
Prof. A.M. Zeiliguer	Rapporteur
D. Graillot	Président du jury
J. Bourgois	Examineur
A. Mikelić	Examineur
F. Laurent	Examineur
S. Tripathi	Examineur



# THÈSE

présentée par

**Wolfram ANKER**

pour obtenir le grade de

**Docteur**

de l'École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et  
de l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris  
(spécialité : Hydrologie et Hydrogéologie Quantitatives)

**Représentation spatiale des risques de propagation  
des pollutions par hydrocarbures en milieu souterrain -  
application au milieu alluvial**

**Soutenue le 14 novembre 1997 devant le jury composé de :**

Prof. P. Moszkowicz	Rapporteur
Prof. A.M. Zeiliger	Rapporteur
D. Graillot	Président du jury
J. Bourgois	Examineur
A. Mikelić	Examineur
F. Laurent	Examineur
S. Tripathi	Examineur



*Le ciel alimente la terre ...*

Fabienne Héry



## AVANT-PROPOS

Tout d'abord, 'спасио' Anatole M. Zeilguer, Professeur à la 'Moscow State University of Environmental Engineering', pour avoir accepté d'être rapporteur de ce travail.

Je remercie également P. Moszkowicz, Professeur au Laboratoire d'Analyse Environnementale des Procédés et des Systèmes Industriels à l'INSA de Lyon, qui a bien voulu évaluer ma thèse en tant que rapporteur, sur les aspects modélisation du transfert des polluants.

... Andro Mikelic, Professeur à l'Université de Lyon 1, pour son aide précieuse sur les aspects modélisation mathématique des transferts de pollutions polyphasiques. Sharad Tripathi, Président Directeur Général de la société Transoft, pour son intérêt pour ce travail. Francois Laurent, Maître de conférence à l'Université du Mans, spécialisé en Systèmes d'Information Géographique. Jaques Bourgois, Maître de recherche à l'Ecole des Mines, pour les aspects chimiques liés à ce travail.

...Roland Déchomets, Jean-Pierre Tavernier, Michel Chatard et Florence Dujardin pour leur aide sur le plan informatique.

... Bernard Guy, pour l'intérêt qu'il a manifesté vis-à-vis de mon travail.

... Albert Mathon, pour m'avoir accepté en DEA dans son département.

... Zahia Mazer, secrétaire de Département Ingénierie de l'Environnement.

Enfin, je tiens à remercier à Didier Graillot, Directeur de recherche à l'Ecole des Mines, pour m'avoir accueilli comme thésard dans son Département et son engagement exceptionnel tout au long de mon travail ainsi que ses qualités personnelles.

... et toutes celles et ceux que j'aurais pu oublier.



## **RÉSUMÉ**

Ce travail de thèse est destiné à l'élaboration d'une méthodologie d'analyse des risques issus des pollutions accidentelles par hydrocarbures. Cette méthodologie s'appuie sur l'intégration d'outils de modélisation des phénomènes complexes de pollution des eaux souterraines par les LNAPL ("Light Non Aqueous Phase Liquids").

En zone non saturée, il s'agit de représenter un écoulement polyphasique puisque les phases air, eau et huile coexistent. La modélisation de la propagation d'une pollution polyphasique se heurte aux limites dues aux nombreuses incertitudes introduites par les phénomènes de non-linéarité. Néanmoins, les échelles spatiales et temporelles sont plus petites qu'en zone saturée. De ce fait, l'erreur introduite pour l'estimation des risques est moins importante.

En zone saturée, la propagation de la pollution se fait sous forme dissoute. Nous effectuons la simulation par approche hydrodispersive. Dans cette zone, la direction de propagation est essentiellement horizontale. Il est donc nécessaire de disposer d'un outil d'analyse spatiale pour estimer les risques de propagation. Pour obtenir une erreur homogène sur tout le trajet de propagation d'une pollution ponctuelle, il faut prendre en compte l'influence de l'échelle à laquelle les coefficients de dispersivité sont déterminés.

A l'aide d'un système d'information géographique, les paramètres d'un site d'application test sont introduits dans les modèles hydrodynamiques. L'interprétation des résultats s'effectue par analyse spatiale pour représenter l'évolution spatio-temporelle de la propagation de la pollution.

**Mots Clé :** hydrogéologie, milieu poreux, zone non saturée, zone saturée, hydrocarbures, transport en solution, écoulement polyphasique, modélisation/simulation, système d'information géographique, analyse spatiale.

## **ABSTRACT**

This PhD-thesis work is intended for the elaboration of a methodology for risk analysis of accidental hydrocarbon pollution. This methodology is based on the integration of modelling tools for complex phenomena of subsurface pollution by LNAPL (Light Non Aqueous Phase Liquids).

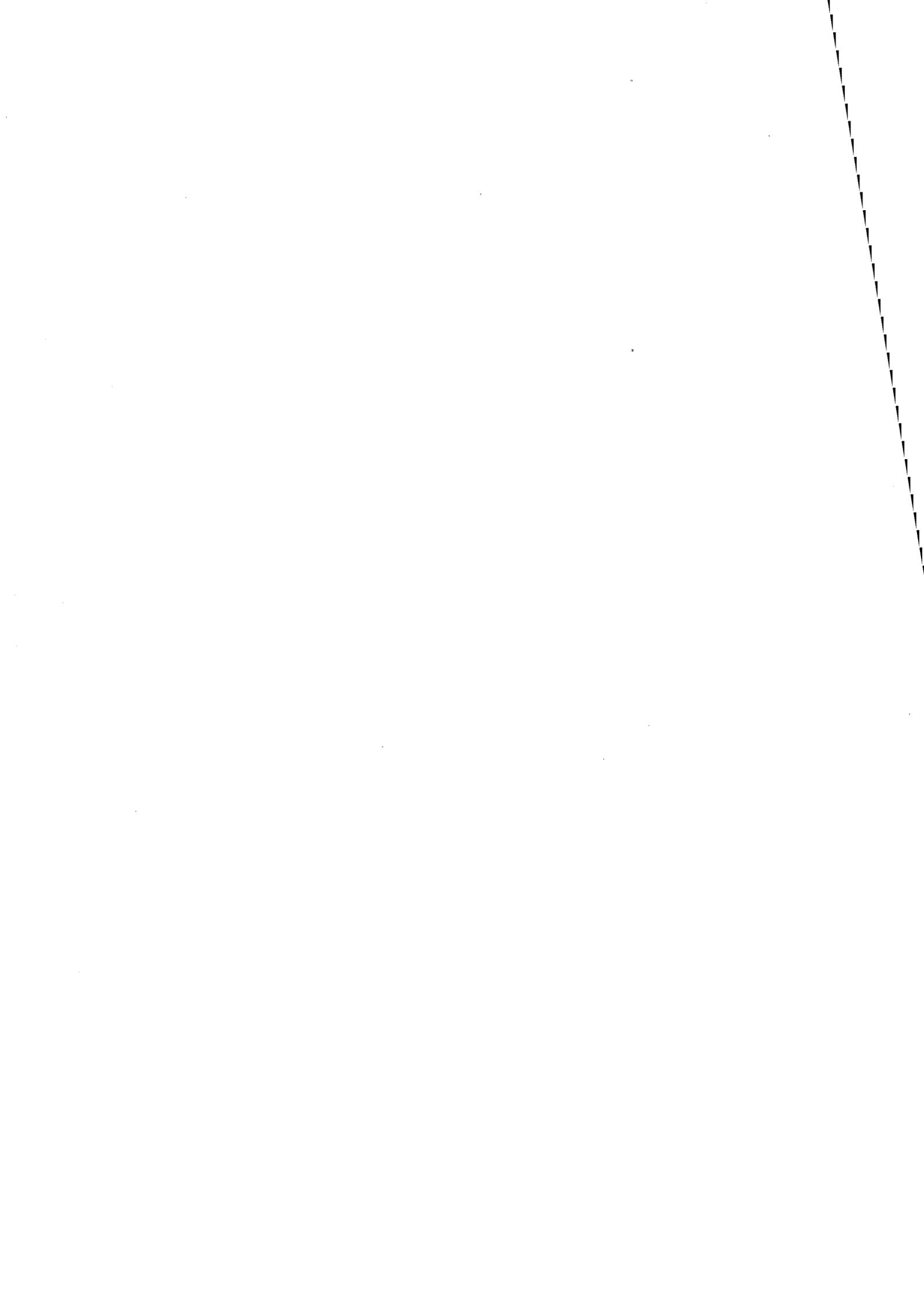
In unsaturated zone, polyphase character of hydrocarbon pollution is evident while air, water and oil phases coexist. Modelling of multiphase pollution propagation is limited by numerous uncertainties introduced by phenomena of nonlinearity. Nevertheless, spatial and temporal scale is smaller than in saturated zone. By this, the introduced error for risk estimation of this kind of model is more limited.

In saturated zone, pollution is spreading in dissolved form: For this, we use simulation approach hydrodispersive modelling. In this zone, essential transfer direction is horizontal. By this, necessity is imposed to dispose of a spatial analysis tool for risk estimation. For homogenisation of error over the whole distance of a pointwise pollution, influence of the scale where dispersivities have been determined, has to be taken into account.

By Geographic Information System, we introduce spatial parameters into hydrodynamic models. Model results are interpreted by spatial analysis to represent spatio-temporal evolution of pollution propagation.

**Key Words** : hydrogeology, porous medium, unsaturated zone, saturated zone, hydrocarbons, dissolved substance transport, multiphase flow, modelling/simulation, geographic information system, spatial analysis.

# **TABLES**



## TABLE DES MATIERES

<b>LISTE DES FIGURES</b>	<b>9</b>
<b>LISTE DES TABLEAUX</b>	<b>11</b>
<b>LISTE DES SYMBOLES</b>	<b>13</b>
<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	<b>19</b>

### **PREMIERE PARTIE :** **CARACTERISATION DES POLLUTIONS SOUTERRAINES**

<b>I.1 Caractéristiques générales des pollutions en milieu souterrain</b>	<b>25</b>
I.1.1 Divers types de polluants	25
I.1.2 Importance du problème des sites pollués	28
I.1.3 Cadre réglementaire et normes de protection des ressources en eau	30
I.1.4 Exemples récents de pollution de sols et de nappes aquifères par les hydrocarbures	31
<b>I.2 Choix d'un accident type</b>	<b>33</b>
I.2.1 Description de l'accident	33
I.2.2 Présentation du site	39
I.2.3 Modélisation du régime hydrologique	41
<b>I.3 Elaboration d'un schéma caractérisant les pollutions accidentelles</b>	<b>49</b>
I.3.1 Proposition d'une cartographie adaptée aux pollutions accidentelles	49
I.3.2 Eléments spatio-temporels influençant le risque de pollution	51
I.3.3 Analyse des risques de pollution accidentelles	51
I.3.4 Paramètres mis en jeu	54

### **DEUXIEME PARTIE :** **METHODES D'ANALYSE DE LA PROPAGATION DES POLLUTIONS SOUTERRAINES**

<b>II.1 Phénomènes et lois d'écoulement des polluants</b>	<b>61</b>
II.1.1 Ecoulement en zone non-saturée	62
II.1.2 Ecoulement en zone saturée	63
II.1.3 Transfert des polluants miscibles à l'eau en zone non-saturée	64
II.1.4 Transfert des polluants miscibles à l'eau en zone saturée	64
II.1.5 Transfert des polluants non-miscibles à l'eau - écoulement polyphasique	67
II.1.6 Transport réactif	73
II.1.7 Caractéristiques du milieu dans lequel se propage la pollution	74
<b>II.2 Analyse quantitative des phénomènes pour la mise en oeuvre de modèles de simulation</b>	<b>77</b>
II.2.1 Modèle conceptuel	77
II.2.2 Modélisation mathématique des phénomènes d'écoulement et de transport	77

II.2.3 Problème direct et problème inverse	78
II.2.4 Approches Eulerienne et Lagrangienne	79
II.2.5 Modèles numériques	79
II.2.6 Modes de discrétisation	80
II.2.7 Modélisation de l'écoulement polyphasique/multi-espèce	81
II.3 Modélisation de l'information qualitative liée aux risques	83
II.3.1 Modélisation qualitative d'un phénomène	83
II.3.2 Exemples des paramètres qualitatifs induits par un phénomène de pollution	83
II.3.3 Outils pour le traitement de l'information qualitative	84
II.3.4 Application à l'analyse de texture d'un sol	86
II.3.5 Applicabilité des outils qualitatifs	87
II.4 Bases de données géographiques et outils d'analyse spatiale	89
II.4.1 Modélisation hiérarchique des données dans un système d'information géographique	89
II.4.2 Modes de représentation des données pour l'étude d'une pollution	90
II.4.3 Construction de la base de données géographique	91
II.4.4 Intérêt des fonctions d'analyse spatiale pour l'étude de la propagation des pollutions	92
II.4.5 Sources d'erreurs	93
II.4.6 Conclusion sur l'intérêt des SIG pour l'analyse des phénomènes de pollution	93
II.5 Comparaison synthétique de quelques outils dédiés à l'analyse de la propagation de pollutions en milieu souterrain	95
II.5.1 Critères pour le choix de modèles de transport en solution	95
II.5.2 Critères pour le choix de modèles d'écoulement polyphasique	96
II.5.3 Critères pour le choix de systèmes d'information géographique	97
II.5.4 Critères généraux pour l'élaboration d'outils d'aide à la décision	98
II.5.5 Proposition d'une méthodologie d'analyse spatiale des risques de propagation d'une pollution	99
II.5.6 Conclusion sur les méthodes d'analyse des phénomènes de pollution	99

**TROISIEME PARTIE :**  
**ANALYSE SPATIALE DES RISQUES DE POLLUTION PAR LES HYDROCARBURES**  
**- APPLICATION A L'ACCIDENT TYPE**

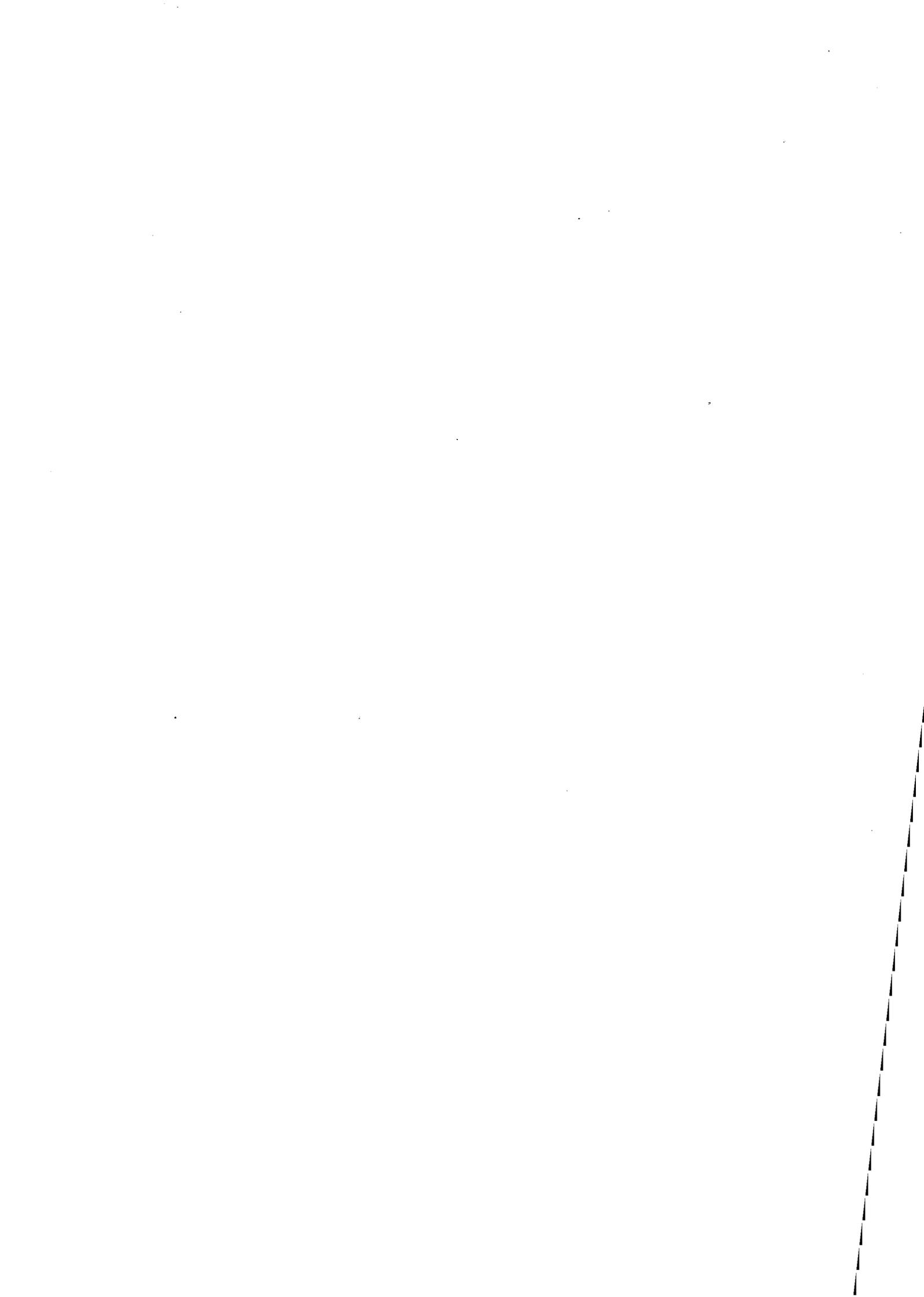
III.1 Pollution non-soluble en zone non-saturée	103
III.1.1 Préalable à la modélisation des pollutions en zone non saturée (ZNS) et hypothèses de travail	103
III.1.2 Choix d'un modèle de propagation des pollutions en zone non-saturée	105
III.2 Pollution dissoute en zone saturée	109
III.2.1 Rappel de mécanismes mis en jeu dans la zone saturée (ZS)	109
III.2.2 Simulation de la propagation de la pollution dissoute dans la zone saturée	109
III.3 Prise en compte des échelles des dispersivités en zone saturée	115
III.3.1 Aspects théoriques	115
III.3.2 Analyse spatiale du transport dispersif	117
III.4 Intégration des modèles de simulation en ZS et ZNS dans un Système d'Information Géographique (SIG)	125
III.4.1 Couplage entre la zone non saturée et la zone saturée	126
III.4.2 Introduction des données spatiales dans les modèles de simulation et interprétation des résultats	128

III.4.3 Analyse spatiale des résultats de simulation	130
<b><u>QUATRIEME PARTIE :</u></b> <b><u>LIMITES DE MODELISATION ET PERSPECTIVES D'AMÉLIORATION</u></b>	
IV.1 <i>Appréciation critique de la méthode proposée</i>	135
IV.1.1 <i>Facteurs d'incertitudes liées à la modélisation en zone non saturée et zone saturée</i>	135
IV.1.2 <i>Conditions d'utilisation de la méthode</i>	136
IV.2 <i>Améliorations pour modéliser les transferts de polluant</i>	139
IV.2.1 <i>Prise en compte de l'échelle d'observation des coefficients de la dispersivité en modélisation hydrodispersive</i>	139
IV.2.2 <i>Réflexion sur une approche simplifiée : 'Sharp interface model'</i>	141
<b><u>CONCLUSIONS</u></b>	145
<b><u>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES</u></b>	149
<b><u>ANNEXES</u></b>	
A <i>Phénomènes et lois d'écoulement des polluants</i>	163
B <i>Propriétés physico-chimiques des hydrocarbures</i>	189
C <i>Traitement quantitatif des phénomènes et lois dans les modèles de simulation</i>	193
D <i>Schémas numériques utilisés</i>	207
E <i>Comparaison des modèles les plus courants pour le transport hydrodispersif et l'écoulement polyphasique</i>	219
F <i>Réalisation du couplage entre SIG et modèle hydrodispersif</i>	231
G <i>Données analysées pour la validation des modèles</i>	233
<b>LEXIQUE</b>	245
<b>INDEX</b>	251
<b>INDEX DES AUTEURS</b>	255



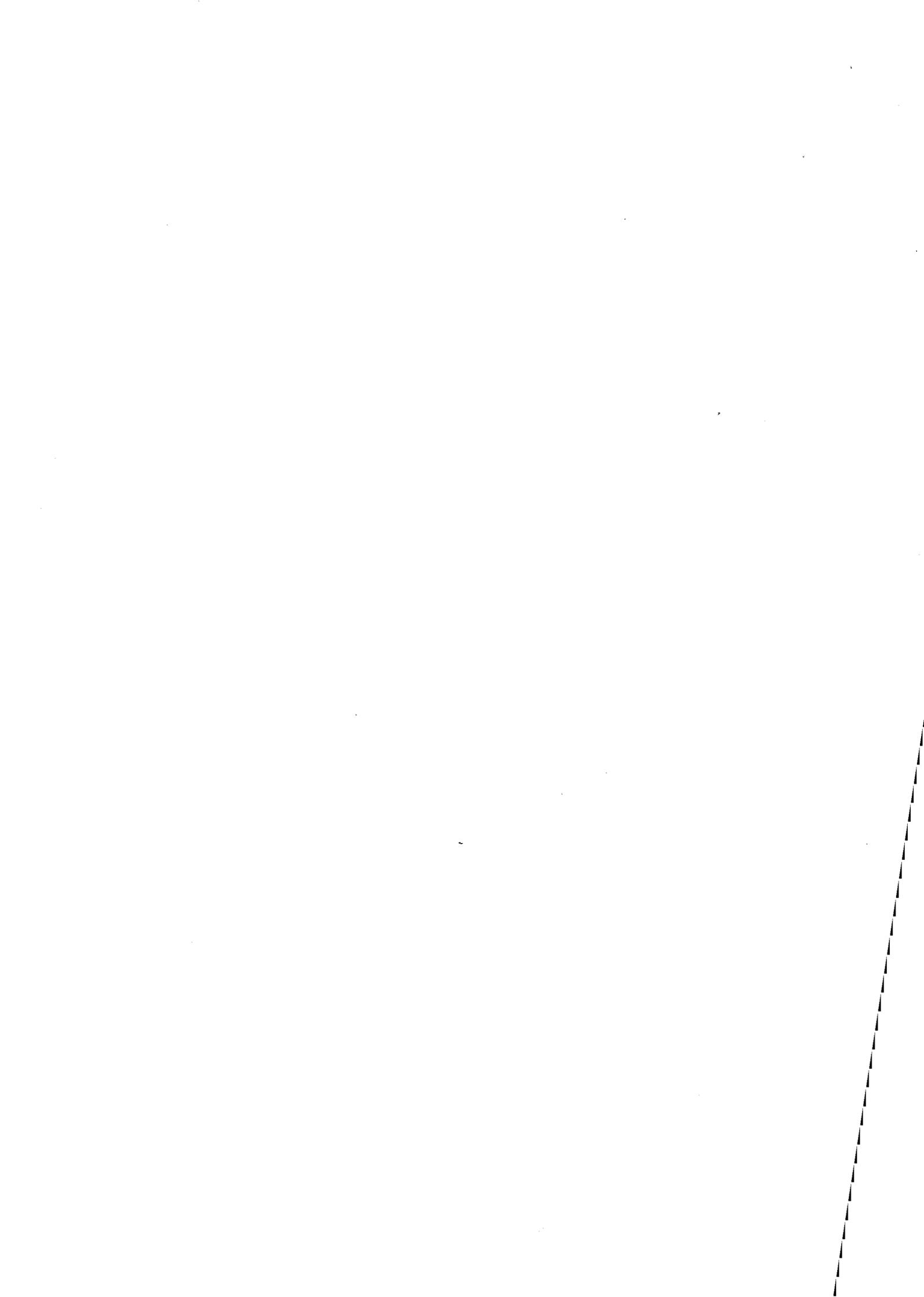
## LISTE DES FIGURES

Fig. 0.1 : Approche globale	22
Fig. I.2.1 : Un accident type : vue aérienne (Source : BRGM)	33
Fig. I.2.2 : Schéma d'une pollution aux hydrocarbures	34
Fig. I.2.3 : Suite des différents étapes de l'accident type	36
Fig. I.2.4 : Feu et explosion : les risques immédiats	36
Fig. I.2.5 : Hydrocarbures récupérés cumulés par puits de venting (Source : Géoclean)	38
Fig. I.2.6 : Carte géologique de la zone de l'accident type	39
Fig. I.2.7 : Coupe interprétative de la zone de l'accident type (schématique)	40
Fig. I.2.8 : Coupe géologique de la zone d'étude	41
Fig. I.2.9 : Zone d'étude : niveau du substratum	42
Fig. I.2.10 : Zone d'étude : niveau du sol	43
Fig. I.2.11 : Représentation de la zone d'étude : coupe O-E de l'aquifère	44
Fig. I.2.12 : Calage de la nappe en deux dimensions	45
Fig. I.2.13 : Effets suite à l'augmentation (gauche) et diminution (droit) de perméabilité	45
Fig. I.2.14 : Distribution des perméabilités calage du modèle en régime permanent	46
Fig. I.2.15 : Piézométrie calée en régime permanent	47
Fig. I.3.1 : Cartographie de l'accident type	50
Fig. I.3.2 : Arborescence des causes (de défaillance) pour les pollutions souterraines par hydrocarbures	52
Fig. I.3.3 : Arborescence de propagation des risques par les pollutions accidentelles	54
Fig. II.1.1 : Représentation schématique d'un système polyphasique	69
Fig. II.1.2 : Schéma de principe illustrant la supposition du sol mouillé par l'eau	70
Fig. II.1.3 : Réduction d'un système ternaire à deux sous-systèmes binaires	71
Fig. II.1.4 : Milieu alluvial hétérogène (Représentation schématique)	74
Fig. II.2.1 : Modèle conceptuel pour modéliser la propagation des hydrocarbures	77
Fig. II.3.1 : Triangle des textures pour la détermination des propriétés hydrauliques d'un sol (Source : d'après Wild, 1993)	86
Fig. II.5.1 : Enchaînement des outils et des données pour l'estimation des risques par les pollutions en milieu souterrain	100
Fig. III.2.1 : Couches de calcul pour le calcul des vitesses d'écoulement et du transport du polluant	111
Fig. III.2.2 : Simulation d'une pollution : $t = 4j$ , 2ème de 4 couches	112
Fig. III.2.3 : Evolution verticale de la pollution	113
Fig. III.3.1 : Echelles des dispersivités longitudinales (Source : Neuman, 1990)	115
Fig. III.3.2 : Dispersion d'un nuage en 2 dimensions, source constante, $\alpha L(300m) = 25m$	119
Fig. III.3.3 : Dispersion d'un nuage en 2 dimensions, source constante, $\alpha L(30m) = 2.5m$	120
Fig. III.3.4 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source constante, $\alpha L(300m) = 25m$	121
Fig. III.3.5 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source constante, $\alpha L(30m) = 2.5m$	121
Fig. III.3.6 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source intermittente, $\alpha L(300m) = 25m$	122
Fig. III.3.7 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source intermittente, $\alpha L(30m) = 2.5m$	123
Fig. III.4.1 : Propagation d'une pollution à partir d'une voie ferrée	130
Fig. III.4.2 : Gestion d'une pollution accidentelle par des hydrocarbures	131
Fig. IV.2.1 : Extension d'une pollution sans ou avec prise en compte les échelles des dispersivités	140
Fig. A.1 : Relation $h(q)$ de divers sols (Musy, 1991)	164
Fig. A.2 : Echelles des dispersivités d'après Lallemand-Barres et Peaudecerf (1978)	173
Fig. A.3 : Echelles des dispersivités d'après Gelhar (1986)	174



## LISTE DES TABLEAUX

<i>Tab. I.3.1 : Éléments cartographiques adaptés aux pollutions accidentelles</i>	49
<i>Tab. I.3.2 : Éléments de décision pour les mesures d'urgence à mettre en oeuvre dans le cas de pollution accidentelle</i>	55
<i>Tab. I.3.3 : Caractérisation d'un site : éléments de décision</i>	56
<i>Tab. I.3.4 : Informations spatiales pour un modèle numérique de simulation</i>	56
<i>Tab. I.3.5 : Choix d'une stratégie de gestion de l'accident</i>	58
<i>Tab. II.1.1 : Notation des phases et des espèces propres</i>	70
<i>Tab. II.5.1 : Critères pour le choix d'un modèle de transport du polluant dissout</i>	96
<i>Tab. II.5.2 : Critères pour un module d'écoulement polyphasique</i>	97
<i>Tab. II.5.3 : Critères à prendre en compte pour le choix d'un SIG</i>	98
<i>Tab. II.5.4 : Critères généraux pour les modules informatiques</i>	98
<i>Tab. C.1 : Etapes de la résolution numérique des équations aux dérivées partielles</i>	205
<i>Tab. D.1 : Calcul de la deuxième étape (transport)</i>	209
<i>Tab. E.1 : Modèles d'écoulements biphasiques</i>	230
<i>Tab. E.2 : Modèles d'écoulements triphasiques</i>	230



## LISTE DES SYMBOLES

### en minuscules latines :

$c$	[mol/l]	: concentration du polluant
$c_s$	[mol/l]	: concentration du polluant adsorbé sur la phase solide
$c_f$	[mol/l]	: concentration du polluant dissout dans la phase fluide
$c_m$	[mol/l]	: concentration du polluant dissout dans la partie mobile
$c_{im}$	[mol/l]	: concentration du polluant dissout dans la partie immobile
$d$	[m]	: diamètre des grains
$e$	[m]	: épaisseur mouillée de l'aquifère
$f$	[-]	: dimension fractale
$f$	[-]	: coefficient de partage
$g$	[m/s <sup>2</sup> ]	: constante de gravitation
$h$	[m]	: charge hydraulique
$i$	[-]	: coefficient de taux de transfert de masse
$k$	[m/s]	: perméabilité (des hydrogéologues)
$k_{ij}$	[m/s]	: tenseur de perméabilité
$k_{r,\alpha}$	[-]	: perméabilité relative de la phase $\alpha$
$k_i$	[m <sup>2</sup> ]	: perméabilité intrinsèque
$p$	[N/m <sup>2</sup> ]	: pression
$p_c^\alpha$	[N/m <sup>2</sup> ]	: pression capillaire dans la phase $\alpha$
$p_c^{\alpha/\beta,\gamma}$	[N/m <sup>2</sup> ]	: pression dans la phase $\alpha$ par rapport à la phase $\beta$ , sur le substratum $\gamma$
$q_z$	[m/s]	: flux en zone non saturée en direction verticale
$s$	[m]	: écart type
$t$	[s]	: temps
$u$	[m/s]	: vitesse de Darcy
$v$	[m/s]	: vitesse microscopique
$v_z$	[m/s]	: vitesse en zone non saturée "seepage velocity"
$x$	[m]	: 1 <sup>ère</sup> coordonnée horizontale de l'espace
$y$	[m]	: 2 <sup>ème</sup> coordonnée horizontale de l'espace
$z$	[m]	: coordonnée verticale de l'espace

---

en majuscules latines :

$C_m$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de drainage de la couche m
$D_L$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de la dispersion longitudinale
$D_T$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de la dispersion transversale
$D_{ij}^c$	[m <sup>2</sup> /s]	: tenseur de dispersion cinématique dans un milieu poreux
$D_{m,ij}^{k,\alpha}$	[m <sup>2</sup> /s]	: tenseur de diffusion moléculaire dans un milieu poreux
$D_0^{k,\alpha}$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau libre
$D^o$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de diffusion en milieu saturé en eau
$D_0'$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de diffusion en milieu partiellement saturé en eau
$D_{ij}^*$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de dispersion apparente
$E_k^\alpha$	[mol/m <sup>3</sup> s]	: apport externe de la composante k à la phase $\alpha$ par transformations (bio)chimiques
$I_k^\alpha$	[mol/m <sup>3</sup> s]	: transfert de la composante k à travers les limites des phases
$J_k^\alpha$	[mol/m <sup>2</sup> s]	: flux non-advectif de la composante k dans la phase $\alpha$ .
$K_{ij}^\alpha$	[N/m]	: tenseur de la mobilité
$L$	[m]	: distance de traçage
$Q$	[1/s] ou [m/s]	: terme de source pour l'écoulement
$R$	[mol/s]	: terme de source de masse
$S_\alpha$	[-]	: saturation volumique d'une phase $\alpha$
$S_m$	[-]	: coefficient d'emmagasinement en couche m
$T_m$	[m <sup>2</sup> /s]	: transmissivité de l'aquifère

en minuscules grecques :

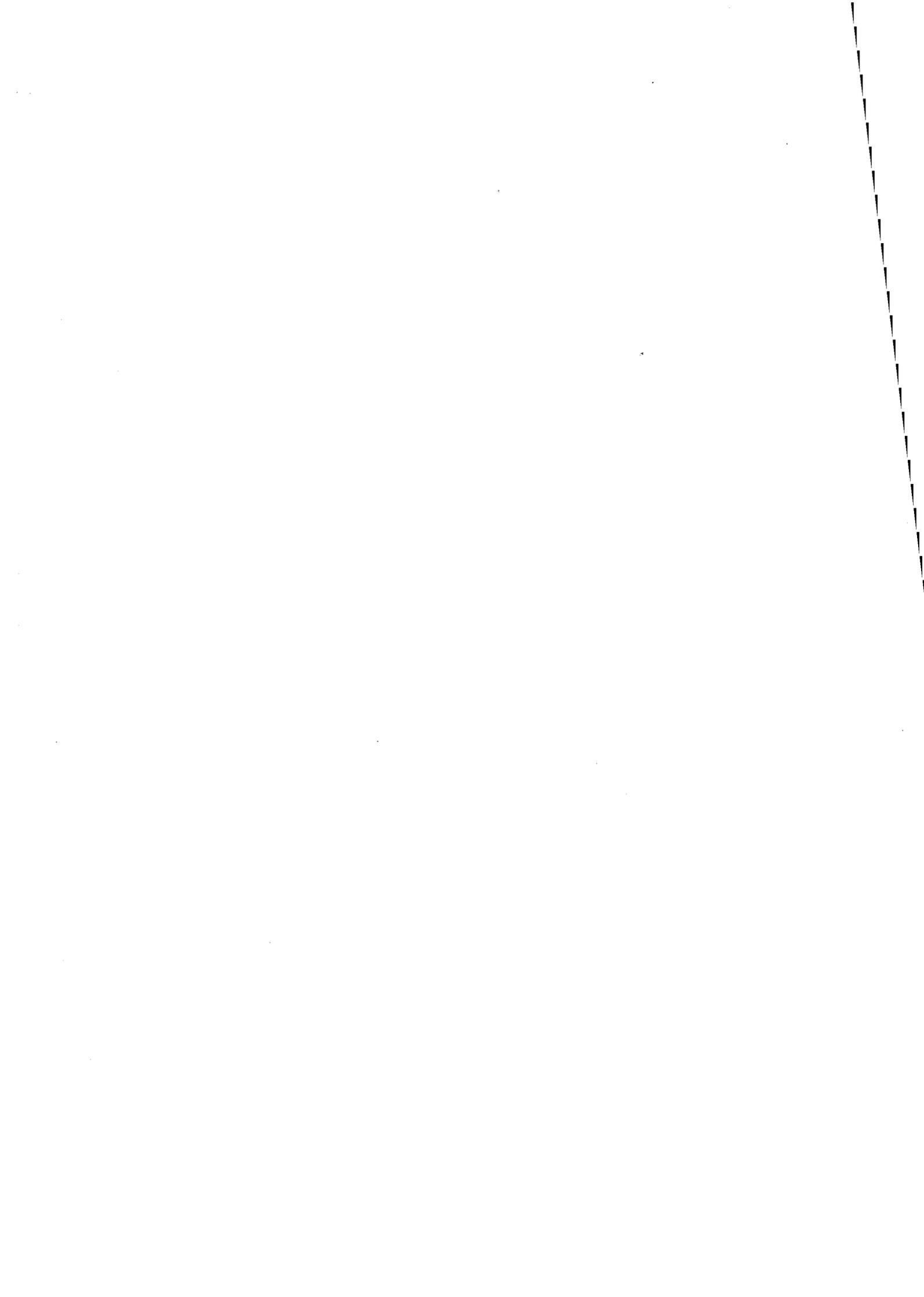
$\alpha_L$	[m]	: dispersivité longitudinale
$\alpha_T$	[m]	: dispersivité transversale
$\alpha_{ij}$	[m]	: tenseur de la dispersivité pour le milieu isotrope
$\alpha_{ijmn}$	[m]	: tenseur de la dispersivité dans le cas général
$\delta_{ij}$	$\square$	: delta de Kronecker : $\delta_{ij} = 1$ pour $i = j$ , 0 sinon
$\varepsilon_\alpha$	[-]	: teneur en phase $\alpha$
	[1/m]	: paramètre du milieu dans la relation de van Genuchten
$\eta_c$	[m]	: limite d'échelle fractale inférieure
$\mu_\alpha$	[Ns/m <sup>2</sup> ] = [kg/m s]	: viscosité dynamique de la phase $\alpha$
$\rho$	[ $\Omega^2 \cdot m$ ]	: résistivité électrique d'une tranche de terrain
$\rho_\alpha$	[kg/m <sup>3</sup> ]	: masse volumique de la phase $\alpha$
$\sigma_c^2$	[m <sup>2</sup> /s]	: coefficient de dispersion fractale
$\sigma_{\alpha_1, \alpha_2}$	[N/m] = [kg/s <sup>2</sup> ]	: tension superficielle entre la phase $\alpha_1$ et $\alpha_2$
$\tau_{ij}^\alpha$	[-]	: tenseur de la tortuosité de la phase $\alpha$
$\phi_F$	[mol/m <sup>2</sup> s]	: flux diffusif
$\phi_D$	[mol/m <sup>2</sup> s]	: flux dispersif
$\psi$	[kg m/s <sup>2</sup> ]	: succion (pression négative)
$\omega_c$	[-]	: porosité cinématique
$\omega_t$	[-]	: porosité totale
$\omega_k^\alpha$	[-]	: fraction de masse de la composante k dans la phase $\alpha$

en majuscules grecques :

$\theta$	[-]	: teneur en eau
$\theta_m$	[-]	: teneur en eau mobile
$\Gamma$	[m] ou [m <sup>2</sup> ]	: limite du domaine d'un modèle
$\Omega$	[m <sup>2</sup> ] ou [m <sup>3</sup> ]	: domaine d'un modèle



# **INTRODUCTION**



## **0. INTRODUCTION GENERALE**

La gestion des ressources en eau souterraine, qu'il s'agisse de prospection, de protection ou de prévention contre les pollutions, constitue un champ d'investigation multidisciplinaire. Il s'agit d'un domaine scientifique où interfèrent les connaissances en géologie, en hydrologie, en hydrodynamique, en chimie et en modélisation.

Les pollutions dues aux hydrocarbures sont parmi les plus complexes, à cause de leur comportement physico-chimique qui est le résultat de leur faible solubilité dans l'eau. Du fait qu'ils constituent une phase à part entière, on les appelle NAPL (Non Aqueous Phase Liquids). Leur caractère xénobiotique entraîne des risques de toxicité pour l'environnement naturel ainsi que pour la santé humaine. Pour pouvoir apprécier les dangers qui découlent de leur toxicité, il est d'abord nécessaire de comprendre leurs mécanismes de propagation dans les différentes zones du milieu naturel.

Dans le cas des pollutions par des hydrocarbures, les risques proviennent souvent des accidents. Les pollutions accidentelles peuvent se produire à proximité de zones aménagées ou habitées, ce qui impose d'une part des mesures d'urgence, d'autre part des opérations de dépollution. Pour ces raisons, ce type de pollution constitue un risque pour les sols, les ressources en eau et leur exploitation par des puits d'alimentation en eau potable. A l'heure actuelle, l'estimation des risques en cas de pollution accidentelle est surtout fondée sur les connaissances d'un expert intervenant sur le site.

La mise au point des modèles de simulation permet de produire des scénarios de propagation des pollutions. Les outils d'interprétation des risques dans leur dimension spatio-temporelle constituent un appui utile en matière d'aide à la décision.

Pour mettre au point un outil de simulation de propagation des polluants en milieu souterrain, il faut tenir compte des différentes caractéristiques physico-chimiques des polluants (miscibilité à l'eau forte ou faible, polluant conservatif ou non conservatif, NAPL plus ou moins dense que l'eau), du milieu récepteur (porosité d'interstices, porosité de fissures, milieu homogène ou hétérogène) et des conditions hydrologiques (zone saturée, non-saturée). Les approches théoriques de la modélisation sont elles aussi très variées : (modèle déterministe ou stochastique, aux différences finies, aux éléments finis).

La complexité des problèmes de pollution est peut-être leur seul point commun et il est souvent nécessaire de coupler différents modèles pour représenter le phénomène d'une manière globalement satisfaisante.

---

On maîtrise à l'heure actuelle la simulation du transport des pollutions dissoutes en milieu poreux. Il existe aussi des codes de calcul pour les écoulements à trois phases correspondant à la propagation des hydrocarbures.

Néanmoins, l'application de ce type de modèles en tant qu'outil d'aide à la décision reste problématique. Pour répondre à cette exigence, plusieurs problèmes sont à résoudre et concernent :

- l'adaptation ou le couplage des logiciels existants en vue de la création d'un outil d'aide à la décision qui soit un bon compromis entre la représentation de la complexité des phénomènes physico-chimiques et les ressources de calcul d'un ordinateur.
- le traitement et la visualisation de l'information spatiale et plus précisément la distribution spatiale des paramètres du système modélisé.
- Les erreurs introduites par les modèles du fait de la mauvaise connaissance des propriétés du milieu.

D'une part, les fonctions d'analyse spatiale doivent améliorer la visualisation des résultats de simulation pour un objectif d'aide à la décision. D'autre part, le couplage d'un logiciel de simulation avec des bases de données doit permettre d'améliorer l'introduction des données dans ces outils de simulation d'une manière efficace. Même si un modèle de simulation dispose des fonctionnalités de traitement des données d'entrée, les Systèmes d'Information Géographique (SIG) constituent des outils de traitement de l'information spatiale plus généraux.

Pour les cas de pollution en milieu hétérogène, des questions particulières demeurent : Pour les paramètres des modèles numériques, on a besoin de valeurs précises. Par ailleurs, ces modèles produisent des résultats numériques dont la précision dépend uniquement de certains paramètres mathématiques. Cependant, les données disponibles sont souvent imprécises et incomplètes étant donné les méthodes de reconnaissance du milieu souterrain (sondages, techniques géophysiques). La validation des modèles en terme de précision des prévisions constitue le plus souvent un obstacle important pour les modèles utilisés en tant qu'outils d'aide à la décision. Même si l'on dispose de quelques valeurs de mesure de terrain, on est obligé d'estimer la perméabilité représentative d'une maille du modèle à l'aide de méthodes géostatistiques.

Les aspects quantitatifs d'un modèle de simulation numérique utilisé en tant qu'outil d'aide à la décision ne doivent pas faire oublier d'autres aspects plus qualitatifs.

En effet subsiste le problème de l'interprétation des modèles quantitatifs qui est effectuée en général par un expert. Peut-on les rendre plus efficaces en leur associant des informations 'empiriques', 'heuristiques' ou 'qualitatives' plus directement liées à la prise de décision ? Comment peut-on formaliser ces connaissances qui sont difficiles à quantifier et comment peut-on les associer aux connaissances quantitatives ?

L'objectif de ce travail de thèse consiste à proposer une nouvelle méthodologie de simulation de la propagation des pollutions par hydrocarbures en milieu souterrain à partir des outils de simulation existant. La méthodologie proposée représente un outil d'analyse qui contribue à la maîtrise des risques générés par des pollutions non miscibles. La démarche globale adoptée dans le cadre de ce travail est indiquée par la fig. 0.1.

**Schéma Directeur de la Thèse :**

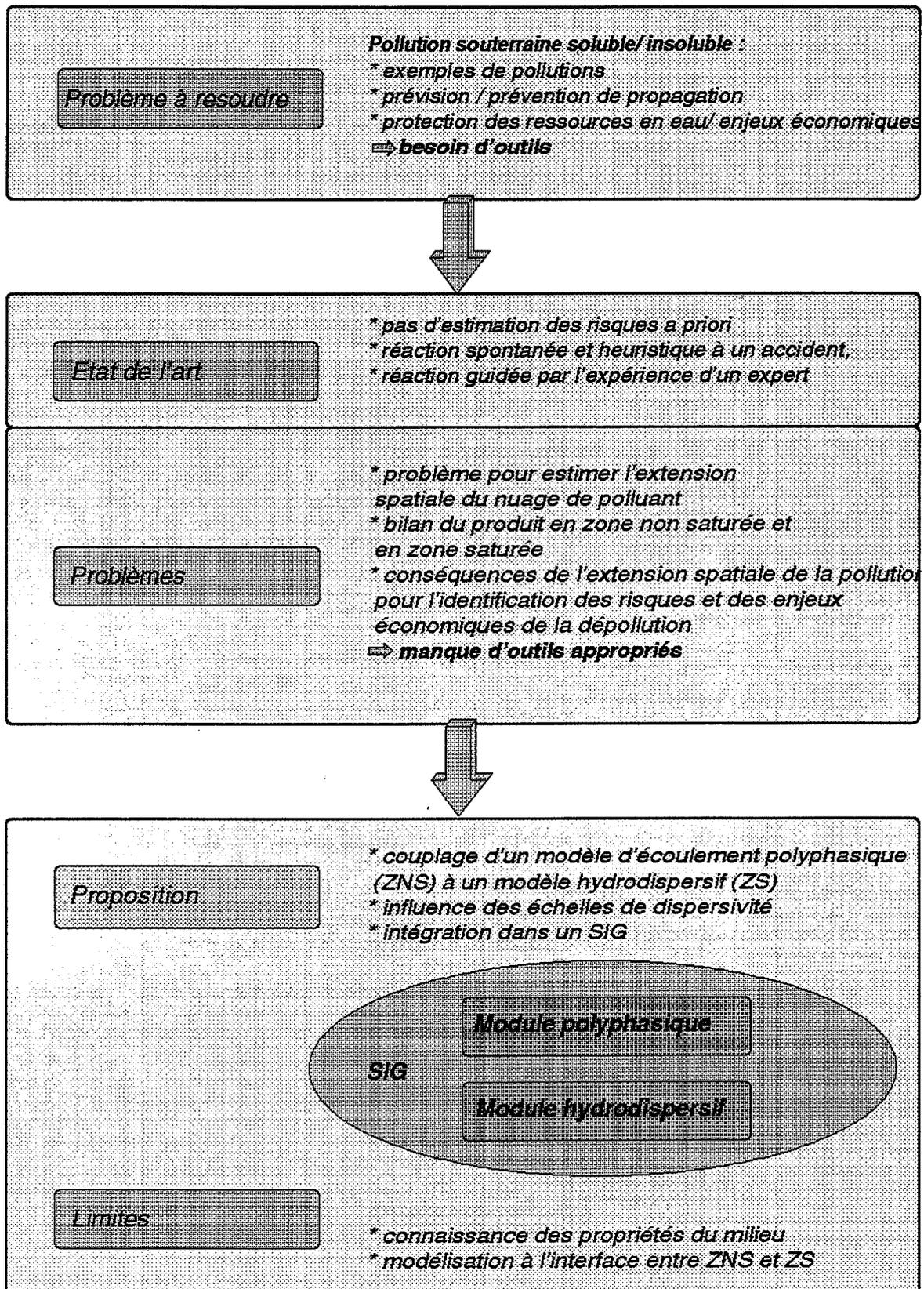


Fig. 0.1 : Approche globale

**PREMIERE PARTIE :**  
**CARACTERISATION DES**  
**POLLUTIONS SOUTERRAINES**



## **I. CARACTERISATION DES POLLUTIONS SOUTERRAINES**

Dans cette première partie, nous étudions les caractéristiques des divers types de pollutions, et nous examinons quelques exemples de pollution des sols par les hydrocarbures pour analyser leurs effets en terme des risques pour l'environnement et en terme d'enjeux économiques. Nous évoquons l'importance croissante du problème des pollutions souterraines ainsi que le cadre réglementaire qui les concerne. Dans le deuxième chapitre, nous analysons un cas type de pollution et nous en déduisons les paramètres qu'il est nécessaire de prendre en compte pour mettre en place un outil d'aide à la décision.

### **I.1 Caractéristiques générales des pollutions en milieu souterrain**

#### **I.1.1 Divers types de polluants**

Qu'est ce qu'une pollution ? J. Miller en Dubourgier (1995) définit comme un polluant "une substance qui constitue un risque potentiel pour la santé publique ou l'environnement". L'encyclopédie de l'écologie Larousse (1977), cité dans Pinay (1995), la définit comme "l'ensemble des rejets de composés toxiques libérés par l'homme mais aussi les substances qui, sans être vraiment dangereuses dans l'immédiat pour les organismes vivants, exercent tout de même une action perturbatrice sur l'environnement". Selon Gaujois (1993), il s'agit d'une pollution si un rejet a un effet sur la qualité de l'eau ou le milieu récepteur et si cet effet a des conséquences jugées négatives.

Parfois, il y a des "pollutions naturelles", qui ont le même effet sur l'environnement que les pollutions engendrées par l'activité humaine. On peut citer les activités géo-tectoniques comme des éruptions volcaniques, des accidents (ou catastrophes) naturelles ou les geysers relâchant des substances par exemple du soufre, tout à fait toxiques pour l'environnement animal et végétal. Cet élément, étant nécessaire pour tout être vivant dans des faibles quantités, devient toxique au-dessus d'un certain seuil.

Le phénomène de pollutions se présente donc de manière complexe. Dans ce travail, nous appelons pollution tout déversement de substances par l'activité humaine dans l'environnement qui perturbe l'évolution naturelle de ce dernier.

Il faut ensuite prendre en compte les origines diverses de la pollution, les nombreux mécanismes de propagation ainsi que les diverses conséquences. Il convient de distinguer les pollutions selon différents critères.

- Selon l'origine :

*En Agriculture* : l'utilisation abusive des engrais peut être à l'origine d'une pollution des eaux souterraines. Il y a les engrais organiques (effluents d'élevage, jus d'ensilage) ou de synthèse (N, P, K). La pollution vient de l'excédent d'engrais qui ne peut pas être utilisé par les plantes. D'autre part, il y a les produits phytosanitaires (pesticides, herbicides, fongicides) qui sont des molécules organiques complexes ou des composés organométalliques.

*Eaux usées domestiques* : les polluants sont de nature minérale (ammoniacale, ammonium) ou organique (urée, amines). Ces polluants sont le plus souvent biodégradables et se caractérisent par la DCO (demande chimique en oxygène) et la DBO<sub>5</sub> (demande biologique en oxygène au bout de 5 jours). Cependant, les métabolites des rejets ont souvent une toxicité plus élevée que le produit d'origine.

*L'industrie (chimique)*, utilise ou crée de nombreux produits chimiques, qui sont souvent des substances organiques (huiles, solvants, dioxines, ...) et des substances minérales (métaux lourds comme le cadmium, plomb, chrome etc, substances radioactives). En raison de la multitude des produits sur le marché, leur comportement écotoxique est souvent mal connu. Dans le domaine de la *circulation routière ou ferroviaire*, ('installations mobiles'), les produits transportés par train ou camions, essentiellement du domaine industriel, peuvent être à l'origine de pollution en cas d'accident.

*Stockage des déchets* : en France, on distingue différentes catégories de décharges. En cas de dysfonctionnement, les décharges de classe I concernant les déchets industriels peuvent être à l'origine du rejet de métaux lourds. Les décharges de classe II concernent les déchets ménagers, et peuvent donc être à l'origine des pollutions organiques caractérisées par leur DCO ou DBO<sub>5</sub>. Le plus souvent, les problèmes proviennent d'un mauvais aménagement du site : fractures ou trous dans une couche d'argile, déchets "dangereux" dans les sites de classe II, "patrimoine" d'une époque où un règlement adapté aux risques n'existait pas.

*Mines* : les pollutions sont de nature plutôt minérale. En cas d'abandon d'une mine, les niveaux piézométriques remontent et entraînent des problèmes de qualité dépendant en particulier du minerai exploité. Ainsi, on trouve souvent des hautes teneurs en métaux (fer, zinc, cuivre, manganèse sous forme de sulfates ou chlorures) avec les pH très bas (inférieur à 2).

*Alimentation en eau potable* : la surexploitation des aquifères côtiers peut entraîner des intrusions d'eau de mer (exemple de la Catalogne).

- Selon le type de substance :

*Substances radioactives* : Le risque de pollution vient des rayons ionisants qui sont émis par la décroissance radioactive et par les nouveaux éléments produits. Ils ont un effet sur les cellules animales et végétales et en particulier sur les molécules de l'information génétique (ADN, ARN).

*Substances chimiques* : on trouve une multitude de pollutions chimiques. Souvent, on pense en premier lieu aux substances chimiques quand on parle des pollutions. Ainsi trouve-t-on dans ce groupe (v. Moszkowicz et al. (1996) : hydrocarbures, nitrates, phosphates, dérivés du soufre, métaux. L'effet des métaux dépend de leur état d'oxydation. Ils existent sous forme métallique, ionique ou sous forme d'un sel. L'état d'oxydation dépend du pH (acidité) et eH (pouvoir de réduction).

*Substances biologiques* : cette catégorie regroupe tous les micro-organismes pathogènes comme des bactéries, virus, moisissures.

- Selon l'état physico-chimique :

*Pollutions solubles (à l'eau)* : entre une substance dite soluble ou non soluble, il y a toute une

gamme de solubilité plus ou moins forte. Entre autres, une substance est soluble à l'eau si le moment dipôle est comparable à celui de l'eau. On trouve donc à l'origine de ce phénomène les forces électrostatiques. Mais, il y a aussi une influence de la masse atomique et de la taille d'une molécule. (v. p.ex. Pinay, 1995). Parmi les pollutions solubles, il y a les sels comme les engrais minéraux ou les pesticides, les nitrates, les chlorides ou les phosphates. L'état physico-chimique caractérise la plupart des pollutions en provenance du domaine agricole et domestique et d'une partie des pollutions industrielles.

*Pollutions non-aqueuses ou non-solubles (dans l'eau) : ce sont des produits qui forment leur propre phase ayant une interface à l'eau. Les polluants non-solubles dans l'eau sont notamment les hydrocarbures comme les carburants ou les solvants. Parmi les polluants non-aqueux, on distingue :*

*les LNAPL (Light Non Aqueous Phase Liquids) : Ce sont en général les dérivés du pétrole comme les divers types de carburants sans transformation chimique majeure. Leur masse spécifique est inférieure à celle de l'eau, ce qui a pour effet de les faire "flotter" à la surface d'une nappe aquifère en cas d'infiltration (fraction surnageante). On peut citer l'essence ou le kérosène.*

*les DNAPL (Dense Non Aqueous Phase Liquids) : leur masse spécifique est plus élevée que celle de l'eau. En général, ce sont des produits chimiques transformés comme par exemple des hydrocarbures chlorés. En raison de leur masse spécifique, ils descendent dans la nappe aquifère avant d'atteindre une couche imperméable. On trouve par exemple dans cette catégorie des solvants ou bien les huiles des transformateurs électriques.*

*Pollutions de matière en suspension : ce sont des agrégats de macromolécules ou des complexes chimiques qui ne se dissolvent pas dans l'eau, qui présentent alors une phase solide dans l'eau. Ils ont un effet obscurcissant, qui diminue l'efficacité de la photosynthèse. En général, on peut les éliminer par microfiltration.*

- Selon un bilan de masse

On distingue les polluants conservatifs ou non-conservatifs. Les polluants non-conservatifs changent en composition ou masse pendant l'écoulement par interaction avec le milieu. Ces phénomènes sont régis par la capacité d'adsorption (réversible ou irréversible) du milieu vis-à-vis du polluant ou par la décroissance exponentielle des substances radioactives.

- Selon l'échelle spatio-temporelle de la source de pollution.

Pour l'*échelle temporelle*, on distingue les pollutions accidentelles (accidents routiers, accidents ferroviaires, rupture des conduites) et les pollutions chroniques (stations service, nonétanchéité des conduites)

Pour l'*échelle spatiale*, on distingue les pollutions ponctuelles et les pollutions diffuses. On trouve les pollutions ponctuelles p.ex. provoquées par des accidents routiers ou ferroviaires ou situés sur des sites d'ateliers de fabrication et des stations service. Les pollutions ponctuelles sont donc souvent issues des accidents. Les pollutions diffuses sont souvent issues des pratiques agricoles impliquant l'utilisation des engrais ou de produits phytosanitaires.

### **I.1.2 Importance du problème des sites pollués**

Selon Tannenbergh (1997), le nombre de sites pollués en France a évolué de 62 "points noirs" à traiter en 1978, à 669 en 1994 et à plus de 1000 sites en 1997. Selon le Ministère de l'Environnement (1994), avec 13% des 669 sites pollués, la région Rhône-Alpes se trouve au deuxième rang. Les sites pollués sont répartis en trois grandes catégories :

- les anciennes décharges de déchets industriels
- les dépôts de déchets et de substances polluantes abandonnés suite à des faillites d'entreprises ou générés par des pratiques frauduleuses d'importation ou d'élimination de déchets
- les sols pollués par des retombées, des infiltrations ou des déversements de substances polluantes, liés à l'exploitation présente ou passée d'une installation industrielle ou à un accident de transport

Selon cette typologie, les sites pollués se répartissaient en 1994 de la manière suivante :

- 255 anciennes décharges de déchets industriels spéciaux éventuellement mélangés à d'autres types de déchets, ordures ménagères ou déchets industriels banals
- 129 dépôts de déchets ou de substances polluantes
- 357 sols ou nappes pollués par des retombées, des infiltrations ou des déversements de substances polluantes

Les déversements accidentels peuvent avoir souvent lieu sur les sites de transformation du produit brut (raffineries) et au cours du transport. Selon la Direction Régionale de l'Industrie, de la Recherche et de l'Environnement Rhône-Alpes (1995), on observe pour la Région Rhône-Alpes une augmentation régulière des cas d'accidents liés aux installations fixes ou au transport de matières dangereuses entre 1988 (43 cas) et 1994 (146 cas). Selon la même source, 43% des accidents ont entraîné un rejet de produits dangereux, 25% ont eu pour conséquence la contamination des eaux de surface, des eaux souterraines ou la pollution des sols.

Les cas de déversements chroniques se trouvent en majorité dans les emplacements des stations service. En France, selon Imbert et Doubourgier (1995), leur nombre a décliné de 46000 en 1970 à 20000 en 1995. Ces anciens sites nombreux constituent une menace pour l'utilisation future du terrain.

Toujours selon le Ministère de l'Environnement (1994), 75% des sites recensés sont situés en zone vulnérable, dont :

- 32% correspondent à des habitations à moins de 100 m
- 36% correspondent à des cours d'eau à moins de 50 m
- 15% correspondent à des captages d'eau potable à proximité
- 4% correspondent à une installation dangereuse à proximité

Pour près d'un site sur deux, une menace de pollution des eaux souterraines ou superficielles existe.

Quelques exemples au niveau international (Goubier, 1994) :

- En Allemagne, les sites potentiellement pollués ont été évalués à 139 000 en 1992.
- Aux Etats-Unis, en 1994, selon le US General Accounting Office, le nombre des sites potentiellement pollués était estimé entre 130 000 et 425 000. L'inventaire des cas de pollution les plus graves comportait quelque 1 200 sites.
- Aux Pays-Bas, en 1990, le nombre des sites potentiellement pollués était de 600 000, le nombre des sites réellement pollués de 110 000.

Ces exemples nous renseignent sur l'hétérogénéité de perception du problème des sites pollués et sur sa complexité.

Selon le Ministère de l'Environnement (1994), dans les 669 sites recensés, les polluants suivants ont été trouvés :

- Hydrocarbures : 231 (35%)
- HAP : 66 (10%)
- Solvants halogénés : 62 (9%)
- Solvants non halogénés : 35 (5%)
- PCB (Polychlorobiphényles) : 34 (5%)  
PCT (Polychlorotriphényles)

A partir de ces informations, il apparaît que les phénomènes de pollutions aux hydrocarbures, accidentelles ou non soient de plus en plus importants. Le nombre de zones à risques pour le milieu récepteur augmente.

Dans le cadre de ce travail, nous nous concentrons sur les pollutions dues aux hydrocarbures légers (LNAPL) qui peuvent être relâchés chroniquement ou accidentellement. Pour estimer le potentiel de pollution d'un sol, il est indispensable de considérer les propriétés physiques et chimiques du polluant et plus particulièrement celles des hydrocarbures légers.

### **I.1.3 Cadre réglementaire et normes de protection des ressources en eau**

Selon Moszkowicz et al. (1996), la préservation de la qualité des ressources naturelles en eau ainsi que la gestion durable de cette ressource font partie des grandes préoccupations de notre époque. L'OMS (Organisation Mondiale pour la Santé) a édicté des normes internationales pour l'eau potable qui comprennent un exposé général des normes physiques, chimiques, bactériologiques et radiologiques.

En France, la loi stipule que "les eaux ne doivent présenter aucun signe de dégradation de qualité et doivent satisfaire aux exigences de qualité définies dans le décret no. 89-3 (03/01/89)". Ces exigences ont été réactualisées par la Loi sur l'Eau (03/01/92). Les objectifs définis sont de renforcer les mesures de contrôle et de sanctions pour la protection de la ressource en eau et des milieux aquatiques et de mettre en place une véritable gestion intégrée du patrimoine eau. Le Ministère de l'Environnement (1995) a édité une liste des critères d'aide à la décision pour les eaux souterraines et les eaux de surface qui sont destinées à la consommation humaine selon la directive européenne du 16 juin 1975.

Ainsi, la législation sollicite tous les acteurs sur l'eau, que ce soit l'Etat, les collectivités locales, les usagers industriels ou les agriculteurs. Il est donc important de faciliter la communication entre les différents acteurs. D'où la nécessité de disposer d'outils d'aide à la décision pour la protection des ressources en eau et la prévention des pollutions.

Même si nous n'abordons pas le problème de la dépollution dans le cadre de ce travail, il est important de rappeler qu'il existe aussi des normes de dépollution. Ces normes existent dans la plupart des pays industrialisés, qui prévoient des actions de dépollution en cas de dépassement des seuils (Pays-Bas, Allemagne, Royaume-Uni, Canada, Etats-Unis et Suisse (Association RE.CO.R.D., 1994). Ces seuils dépendent de la substance chimique en question. Les normes sont quelquefois exprimées en terme de seuils à atteindre en cours de dépollution. Pour l'accident type, auquel nous allons nous référer dans le cadre de ce travail, ces normes ont été fixées avant les opérations de dépollution par une commission d'experts. Souvent, pour déterminer le seuil à atteindre, on se réfère à des estimations scientifiques concernant le risque de développement d'un cancer chez les personnes exposées. C'est l'approche utilisée par l'EPA (Environmental Protection Agency) aux Etats-Unis.

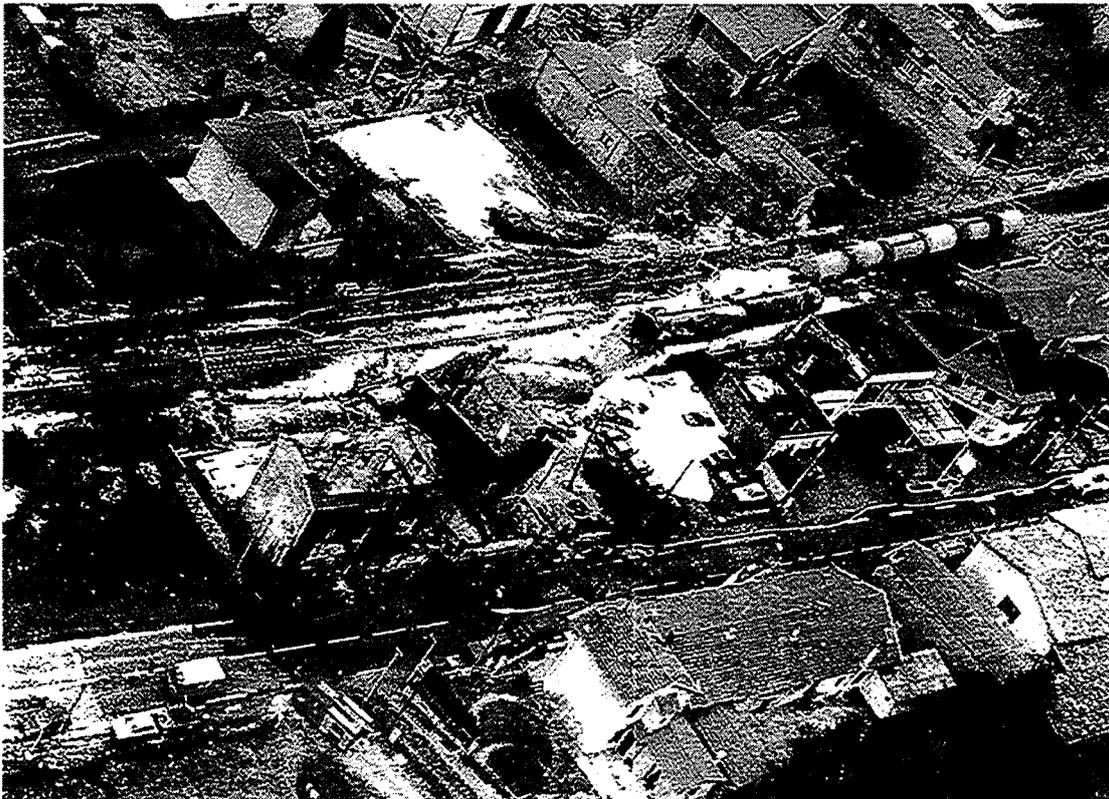
#### I.1.4 Exemples récents de pollution de sols et de nappes aquifères par les hydrocarbures

- 1) En 1993, suite à la rupture d'un essieu de wagon de particulier (i.e. n'appartenant pas à la SNCF), un transport ferroviaire de 20 wagons d'hydrocarbures légers déraillait dans sa traversée de l'agglomération de La Voulte dans la vallée du Rhône (Robert, 1995). Six wagons perdaient leur contenu relâchant 400 m<sup>3</sup> de produits et explosaient en partie. Cinq maisons étaient détruites, 5 autres endommagées. 150 m<sup>3</sup> d'hydrocarbures légers se sont infiltrés dans le sol. La pollution concernait le réseau d'assainissement, la zone non saturée ainsi que la zone saturée et s'est étendue à la surface sur 2.5 ha. Le feu et l'explosion ont menacé les réseaux d'électricité et de téléphone. 60m<sup>3</sup> ont été récupérés à la suite du pompage des hydrocarbures en surface et de la couche flottante. Trois semaines après l'accident, la dépollution a débuté par extraction sous vide qui s'est terminée 4 mois plus tard. 80 m<sup>3</sup> du produit ont été récupérés par cette technique de dépollution. Les coûts de dépollution s'élevaient à 11 millions de Francs.
- 2) La même année, un engin de terrassement chargé de curer le Canal du Rhône a heurté et perforé un conduit d'hydrocarbures de l'OTAN entraînant le déversement de 90 m<sup>3</sup> de kérosène. Le sol sableux a été pollué en surface sur 150 m<sup>2</sup>. La mise en place rapide des barrages flottants sur le canal a permis de drainer une partie de la pollution. L'intervention sur la canalisation ne s'est avérée efficace que plusieurs heures après l'accident. Malgré les confusions sur la responsabilité de la direction des opérations de secours, la pollution s'est limitée au canal, mais la nappe phréatique était menacée.
- 3) En 1993 également, la foudre a détruit un transformateur de 150 KV, hors service durant l'accident (disjoncteur ouvert) et protégé par un éclateur. A la suite de l'effet joule dû à la surtension, les 38 m<sup>3</sup> d'huile contenus dans l'appareil se sont enflammés. L'incendie a été maîtrisé en 2 h, mais certains matériaux se consumeront durant plus de 36 h. L'alimentation électrique de Lens a été interrompue durant 50 min. A la suite du sinistre, 45 m<sup>3</sup> d'émulsion huile/eau ont été récupérés et stockés en cuve pour être incinérés. Le sol a été pollué sur 200 m<sup>2</sup>. Des carottages, réalisés pour évaluer les risques de pollution de la nappe phréatique, ont permis de détecter les hydrocarbures jusqu'à 3m de profondeur dans le sol.
- 4) Toujours en 1993, d'après le BARPI (1994), la rupture d'une pipeline à Weyersheim (67) relâchait 248 m<sup>3</sup> de pétrole sur un terrain de 1,5 ha. 145 m<sup>3</sup> ont été récupérés rapidement. Une partie des terres polluées ont été déposées sur une aire étanche. Une autre partie a été régénérée in-situ par apport d'engrais, aération profonde et ensemencement en trèfle. La partie de la nappe polluée a été délimitée par une campagne de reconnaissance et pour stopper l'extension de la zone polluée, un système de rabattement a été mis en place. Les eaux de rabattement ont été décantées et rejetées sur place. Au total, 220 m<sup>3</sup> de la pollution étaient récupérés et 28 m<sup>3</sup> subsistaient sur le site.
- 5) En 1994, à la suite d'une fuite sur une conduite de 300 mm dans l'enceinte d'un stockage de produits pétroliers, environ 50 m<sup>3</sup> de gasoil rejoignent la Seine par le biais d'anciens réseaux souterrains. Des barrages flottants ont été installés et des produits absorbants répandus. La majeure partie du polluant, isolée dans une darse, a été récupérée après plus de 12 h de pompage. Le reste de la nappe polluante s'est dispersé progressivement. La valeur des produits perdus est estimée à 0.5 MF. Les autres coûts (en KF) sont les suivants : moyens humains engagés : 10; isolement de la canalisation : 50; barrage antipollution, pompage, barrage : 20; transfert des produits pompés : 300.

Cet échantillon d'accidents (Paret, 1997), met en évidence la diversité des causes de pollution par les hydrocarbures et les activités concernées par les risques induits (transport ferroviaire, transport par conduites, production et distribution d'électricité, ...). Ces accidents illustrent aussi la complexité des phénomènes mis en jeu en cas d'accidents de pollution par les hydrocarbures (pollution des nappes, des sols) ainsi que les interactions entre la pollution et le milieu naturel. Ces exemples mettent aussi en évidence la multiplicité des risques : feu, explosion, risques écotoxicologiques, risques de pollution de sols et de nappes aquifères. Comprendre la pollution demande un effort particulier pour appréhender le comportement des différentes sortes d'hydrocarbures (solubilité, poids spécifique), des différents milieux qui sont atteints (zone non saturée et zone saturée), les mécanismes d'échange et de transfert à travers les limites séparant ces différents milieux (échanges entre nappe et rivière, interface entre les zones saturées et non-saturées).

## I.2 Choix d'un accident type

Comme accident type, nous avons choisi un accident, qui peut être considéré comme représentatif, pour élaborer une méthodologie qui soit applicable à un maximum de situations à risque de pollution par hydrocarbures. Le site de l'accident est le siège de ressources en eau qui servent à l'alimentation en eau potable et comporte des zones aménagées. La zone de l'accident se situe en zone alluviale, où se trouvent des captages en eau potable. L'infiltration des écoulements dans la nappe concerne la zone non-saturée ainsi que la zone saturée. La fig. I.2.1 présente une vue aérienne de la zone sur laquelle l'accident s'est produit.



*Fig. I.2.1 : Un accident type : vue aérienne (Source : BRGM)*

### I.2.1 Description de l'accident

La description générale de la pollution des eaux souterraines par hydrocarbures dans le cas de l'accident type indique les quantités d'hydrocarbures déversées ainsi que les différents étapes de la pollution et de la dépollution.

### I.2.1.1 Introduction

Lors du déraillement d'une partie d'un train traversant la commune de Chavanay (42410), située en zone alluviale, 700 m<sup>3</sup> d'essence super sans plomb ont été relâchés. La majeure partie a explosé et brûlé, environ 200 m<sup>3</sup> se sont déversés dans l'aquifère alluvial du Rhône, dont 130 m<sup>3</sup> sont restés en zone non-saturée. Le polluant s'est infiltré sur une surface de 4 800 m<sup>2</sup>. La zone non-saturée était concernée par la pollution sur une surface de 25 000 m<sup>2</sup>.

Cette explosion a détruit 3 maisons et en a endommagé sept autres. Les habitations, le sol, les puits d'alimentation en eau potable et d'irrigation étaient menacés par le transport du contaminant dans le sous-sol. L'accident a entraîné les risques suivants : contamination du sol et des ressources en eau, détérioration des réseaux d'assainissement et des habitations, menace pour la santé humaine par respiration et inhalation.

### I.2.1.2 Description schématique d'une pollution aux hydrocarbures

Le polluant se propage dans le sol selon ses propriétés physico-chimiques et les conditions hydrologiques. La figure 1.2.2 présente le schéma de principe d'une pollution par hydrocarbures pour un aquifère alluvial.

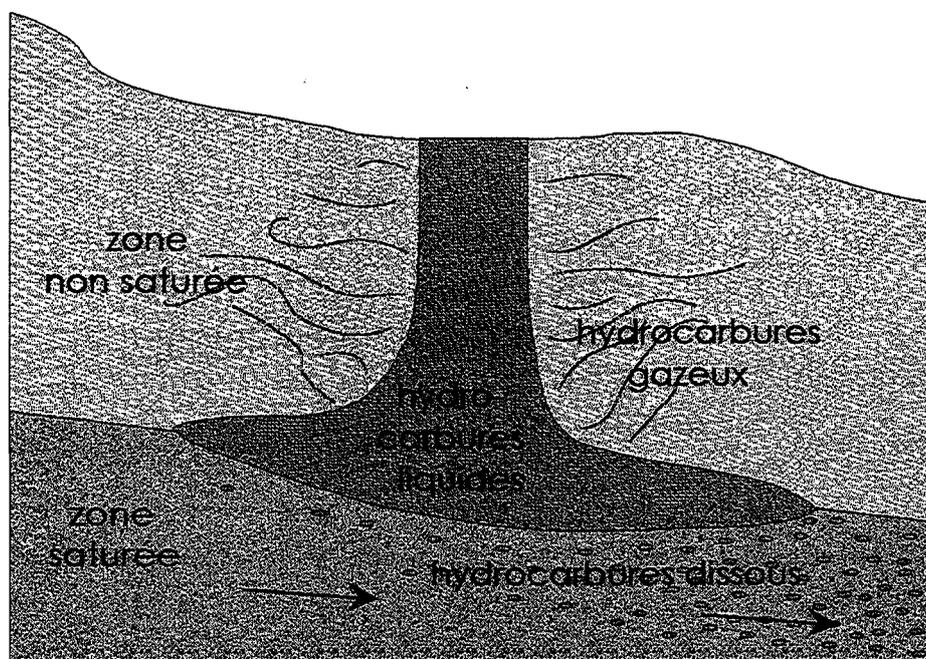


Fig. I.2.2 : Schéma d'une pollution aux hydrocarbures

Après infiltration, les hydrocarbures se répartissent verticalement en trois zones : Ils traversent d'abord la zone non-saturée par les forces gravitaires et capillaires, où ils remplissent la plupart des interstices. Après avoir traversé la zone non-saturée, les interstices entre les grains se vident et les hydrocarbures liquides se trouvent piégés et retenus par des forces capillaires. Quand les hydrocarbures atteignent la nappe, ils forment une couche séparée qui "flotte" sur la nappe du fait de leur densité plus faible. Une quantité plus faible se dissout dans l'eau de la nappe, ce qui représente un danger pour la qualité des ressources en eau, même si la cinétique de transfert, en terme de masse d'hydrocarbures est négligeable.

### I.2.1.3 Composition du produit :

Dans le cas de l'accident type auquel nous nous intéressons, il s'agissait d'essence super sans plomb, composé de :

- 6.4 % de paraffines normales
- 23.4 % d'iso-paraffines
- 57.2 % d'aromatiques, dont 1.4 % de Benzène, 16.5 % de Toluène, 2.0 % de naphènes.
- 12.1 % d'oléfines
- 1.4 % d'oxygènes : le MTBE (Méthyl-Tertio-Butyl-Ether), est utilisé comme produit de substitution du plomb et est très soluble dans l'eau.

Les détails sur la composition du produit et la solubilité des composants dans l'eau sont indiqués dans l'Annexe B.

### I.2.1.4 Etapes de la gestion d'un accident

La fig. I.2.3 indique l'enchaînement des différents opérations après l'accident type considéré. Il s'agit d'abord de mesures d'urgence, suivies d'une campagne de mesure des hydrocarbures dissouts, de la mise en place d'un réseau de contrôle, d'essais pilote avant la dépollution (biolixiviation et extraction sous vide), enfin la dépollution s'est effectuée par écrémage des hydrocarbures flottants et extraction sous vide.

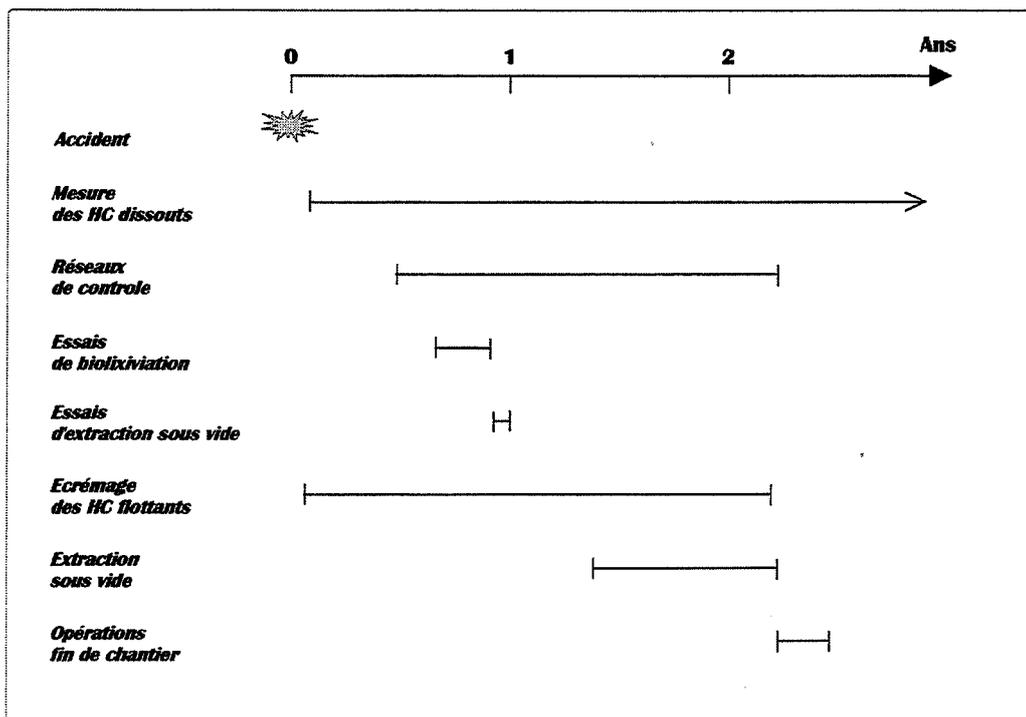


Fig. I.2.3 : Suite des différents étapes de l'accident type



Fig. I.2.4 : Feu et explosion : les risques immédiats

#### Mesures d'urgence :

Les mesures suivantes ont été entreprises :

- Maîtrise du feu
- Evacuation de la population
- Arrêt des puits des particuliers, de l'irrigation, de l'alimentation en eau potable
- Etablissement de trois réseaux de sécurité en fonction de la stabilité de la loupe des hydrocarbures gazeux en zone non saturée pour limiter le risque d'explosion, la toxicité sanitaire dans les ouvrages souterrains et les habitations et préserver la stabilité du terrain sous la voie ferroviaire, la route nationale et les habitations.

#### Limitation de la propagation de la pollution :

Pour limiter la propagation de la pollution, la nappe a été rabattue par pompages. Cela a permis d'établir une barrière hydraulique limitant la propagation de la pollution en zone saturée. A l'aide de ces pompages, la partie surnageante du polluant a été "écrémée". Les eaux de pompage ont été rejetées dans le cours d'eau voisin par deux rejets d'évacuation.

Suivi de la pollution :

La pollution a été suivie par des méthodes différentes, chacune adaptée à l'état physico-chimique du polluant dans la zone concernée :

- Les hydrocarbures dissouts en zone saturée ont été mesurés par prélèvement à partir des puits de rabattement selon les cas :
  - à partir des rejets des eaux de pompage. Dans ce cas, les valeurs mesurées ne représentent qu'une valeur moyenne de plusieurs puits de rabattement.
  - dans les puits : des mesures ont été réalisées en régime statique et dynamique, d'une part dans l'eau stagnante dans le puits et d'autre part dans l'eau qui provenait du milieu poreux. Le MTBE qui, a cause de sa solubilité élevée, se trouvait en forte quantité en zone saturée, n'a pas pu être mesurée par la méthode utilisée jusqu'en juin 1991.
- Les hydrocarbures en zone non saturée ont été mesurés sous phase gazeuse par la méthode DRAEGER, qui accumule les hydrocarbures dans l'air du sol. L'analyse a été effectuée ensuite par chromatographie à phase gazeuse.
- Des mesures de concentration en hydrocarbures totaux par volume d'échantillonnage du sol, ont aussi été réalisées en zone non saturée.
- L'épaisseur de la couche d'hydrocarbures flottants a été mesuré dans les puits.

Méthode globale de dépollution :

- Deux méthodes de dépollution ont été testées en zone non-saturée : 1. La biolixiviation. Cette méthode consiste à introduire des souches de bactéries dans le sol pollué ainsi que des nutriments et de l'oxygène. 2. L'extraction sous vide. Cette méthode consiste à baisser la pression dans le sol par rapport à la pression ambiante. Les hydrocarbures vont se volatiliser successivement, ensuite ils sont récupérés. La méthode de l'extraction sous vide a été retenue.
- Les hydrocarbures surnageants ont été écrémés à l'aide de puits de rabattement.
- La dépollution de la zone saturée, contenant des hydrocarbures dissouts n'était pas possible économiquement. Pour cette raison, les eaux polluées ont été rejetées.

Objectifs et résultats :

- L'objectif de la dépollution était de 10 ppm (sous forme gazeuse) en zone non saturée et de 2 mg/l d'hydrocarbures (sous forme dissoute) en zone saturée.
- Les résultats obtenus par dépollution étaient < 1 ppm HC en zone non saturée et < 0.5 mg/l en zone saturée. La figure I.2.5 indique la quantité d'hydrocarbures récupérés par puits d'extraction.

Opérations de clôture du chantier :

D'abord, l'état de pollution de la nappe a été contrôlé par mesure des concentrations. Une sonde pour enregistrer de façon continue la concentration du polluant a été mise ensuite en

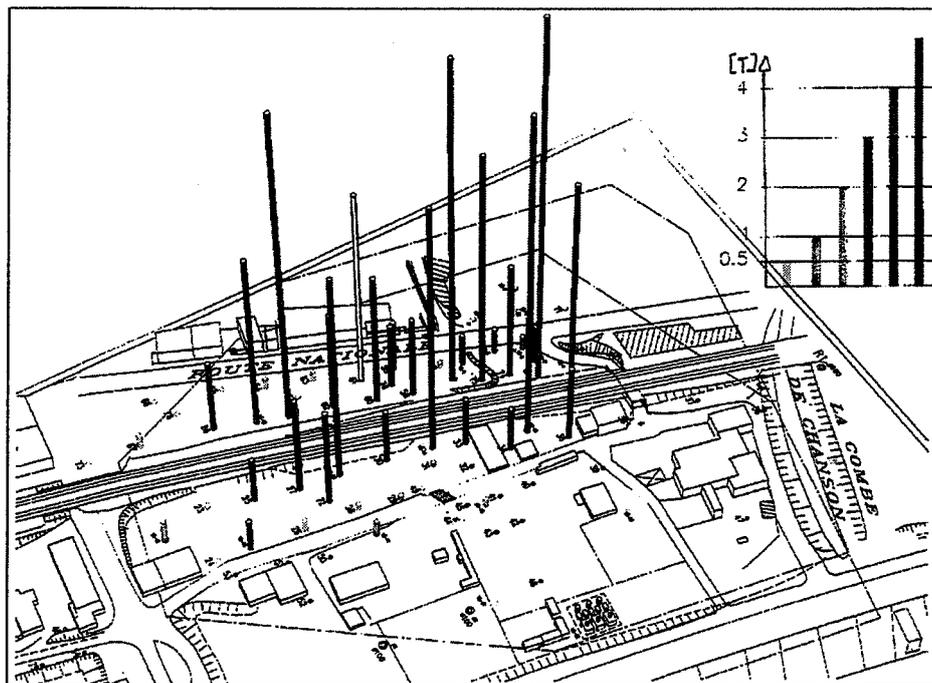


Fig. I.2.5 : Hydrocarbures récupérés cumulés par puits de venting (Source : Géoclean)

place. Puis, les pompages en nappe ainsi que l'extraction sous vide ont été arrêtés. Enfin, un bilan sur l'état de la nappe, la teneur en gaz et le sol a été établi.

### I.2.2 Présentation du site

Le site d'accident type est situé en plaine alluviale. Nous précisons ici les aspects géologiques et hydrologiques.

La figure 1.2.6 illustre le cadre géologique du site sur lequel s'est produit l'accident type :

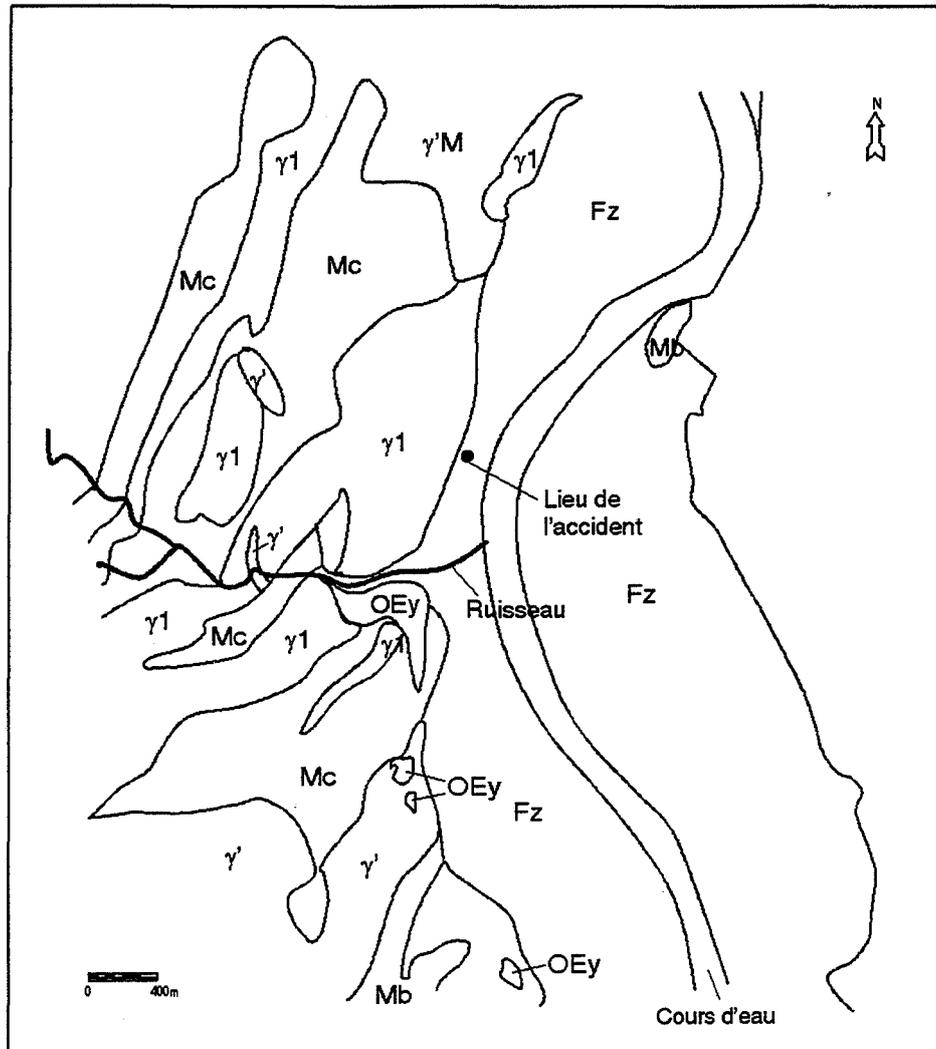


Fig. I.2.6 : Carte géologique de la zone de l'accident type

les symboles signifient :

Fz : Alluvions fluviales modernes

OEy : Loess et limons würmiens

Mb : Anatexites claires à cordiérite

Mc : Anatexites sombres à cordiérite

$\gamma^1$  : granite à muscovite

$\gamma$  : granite à biotite

$\gamma_M$  : granite à biotite hétérogène

Une coupe interprétative de cette zone est présentée en figure I.2.7.

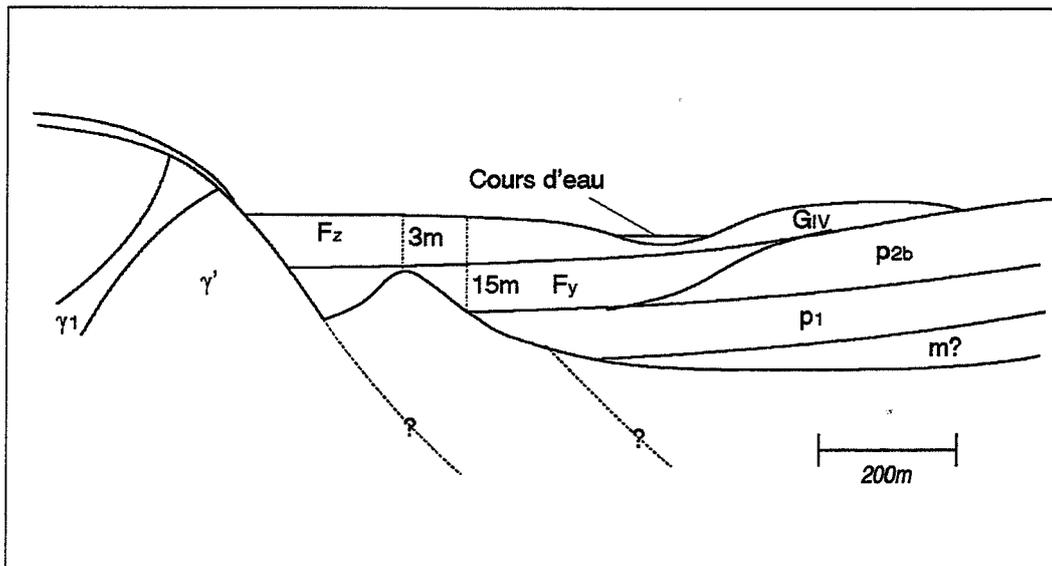


Fig. I.2.7 : Coupe interprétative de la zone de l'accident type (schématique)

avec :

$F_y$ : alluvions anciennes	$m$ : miocène
$F_z$ : alluvions modernes	$p^1$ : argiles bleue pliocènes
$G_{IV}$ : moraine glaciaire	$p^{2b}$ : pliocène
$\gamma^1$ : granite à muscovite	...?... : failles
$\gamma$ : granite à biotite	

Les argiles bleue ( $p^1$ ) constituent le substratum imperméable de la nappe.

#### I.2.2.1 Nature des roches rencontrées :

La formation aquifère est constituée par des alluvions. Il s'agit de petits galets et de graviers calcaires, métamorphiques et éruptifs à matrice sableuse. Elles sont souvent consolidées en poudingues et reposent sur le socle. Celui-ci est constitué de granites à biotites ou d'anatexites sombres à cordiérite et/ou sillimanite. Il existe cependant, entre alluvions et socle, des formations finement argileuses attribuées au Pliocène.

### I.2.2.2 Epaisseur et nature des alluvions

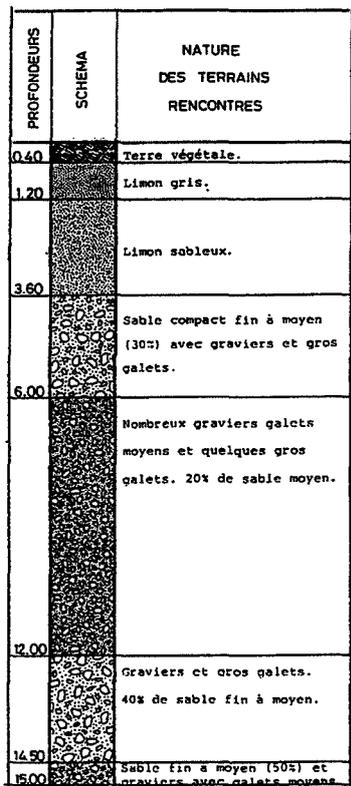


Fig. I.2.8 : Coupe géologique de la zone d'étude

L'examen des coupes géologiques a permis d'établir la succession verticale des faciès les plus couramment rencontrés et leur épaisseur (figure I.2.8)

- les *limons* de surface sont toujours présents avec des épaisseurs variant de 0.4 à 1.5 m.
- en dessous, on trouve toujours des *sables fins plus ou moins limoneux et graveleux* avec des épaisseurs variant de 1.5 à 3.3 m.
- il suit un ensemble de sable, graviers et galets à prédominance *graveleuse*, dont l'épaisseur varie suivant les secteurs de la plaine entre 3 et 9 m.
- localement, un ensemble à prédominance *sableuse* fait suite à ces alluvions grossières dont l'épaisseur varie entre 0 et 8 m.
- localement, à la base de ce faciès sableux, on observe un niveau de *gros galets et de blocs*.
- la base des alluvions est généralement assez *grossière*.

L'épaisseur de ces dépôts alluvionnaires augmente progressivement depuis les reliefs situés en bordure de la zone d'étude, en direction d'un contre-canal, de 0 m à 30 m.

### I.2.2.3 Fonctionnement hydrologique

L'état de "basses eaux" de la nappe prévaut en période d'été et d'automne pendant 4 à 5 mois de l'année, alors que pendant 7 à 8 mois, en période hivernale et au printemps, les apports du versant augmentent, ainsi que les apports pluviométriques.

L'aquifère est alimenté à l'ouest par un massif granitique cristallin. La zone Est est limitée par un contre-canal qui draine le cours d'eau et l'aquifère associé. Au nord, l'aquifère est limité par un ruisseau.

### I.2.3 Modélisation du régime hydrologique

Pour faire fonctionner un modèle hydrologique, nous définissons d'abord les limites de l'aquifère. Pour ajuster les paramètres hydrologiques de la zone d'étude à la piézométrie, nous effectuons le calage en régime permanent par rapport à la piézométrie d'étiage de l'année 1984.

### I.2.3.1 Données de modélisation relatives à la zone d'étude

Les données disponibles sur le site d'étude sont la géométrie de la zone modélisée, les résultats des sondages de sol, les conditions météorologiques, les paramètres hydrogéologiques, les données concernant l'hydrographie sur le bassin versant :

*a) Paramètres de définition de la zone d'étude :*

Les données sur le substratum proviennent d'une étude de terrain effectuée en 1986 et sont présentés en figure I.2.9. Le niveau du sol a été relevé à partir d'une carte IGN 1: 50000. Il est

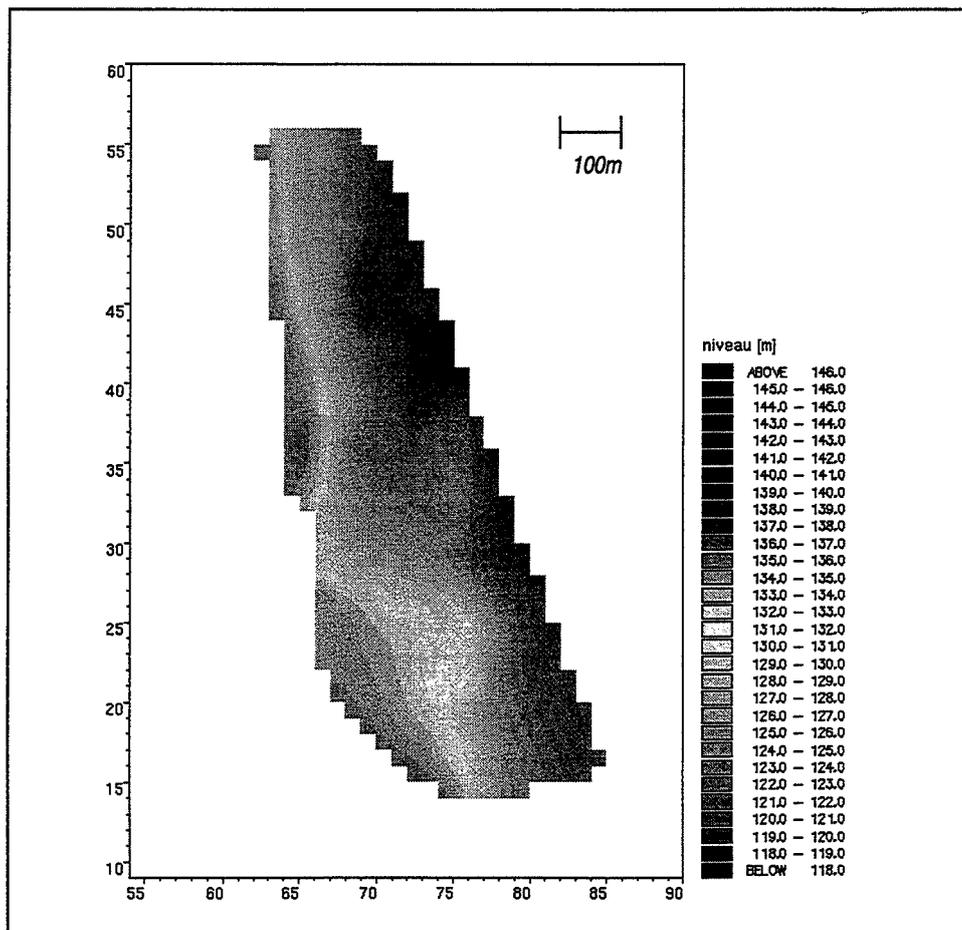


Fig. I.2.9 : Zone d'étude : niveau du substratum

présenté en figure I.2.10. L'aquifère en coupe peut donc être représenté comme illustré en figure I.2.11. L'épaisseur de l'aquifère varie entre 5 m à ouest et 20 m à l'est. L'épaisseur mouillée peut même diminuer jusqu'à 1 m environ, ce qui entraîne des vitesses d'écoulement élevées qui seront précisées en chap. III.2.

La taille des mailles choisie est de 30 x 30 m. Le nombre total des mailles est de 1800 sur le site d'application si on utilise une seule couche de calcul. Si nous prenons une résolution verticale de 10 couches, le nombre total des mailles est de 18000. Ce choix correspond donc

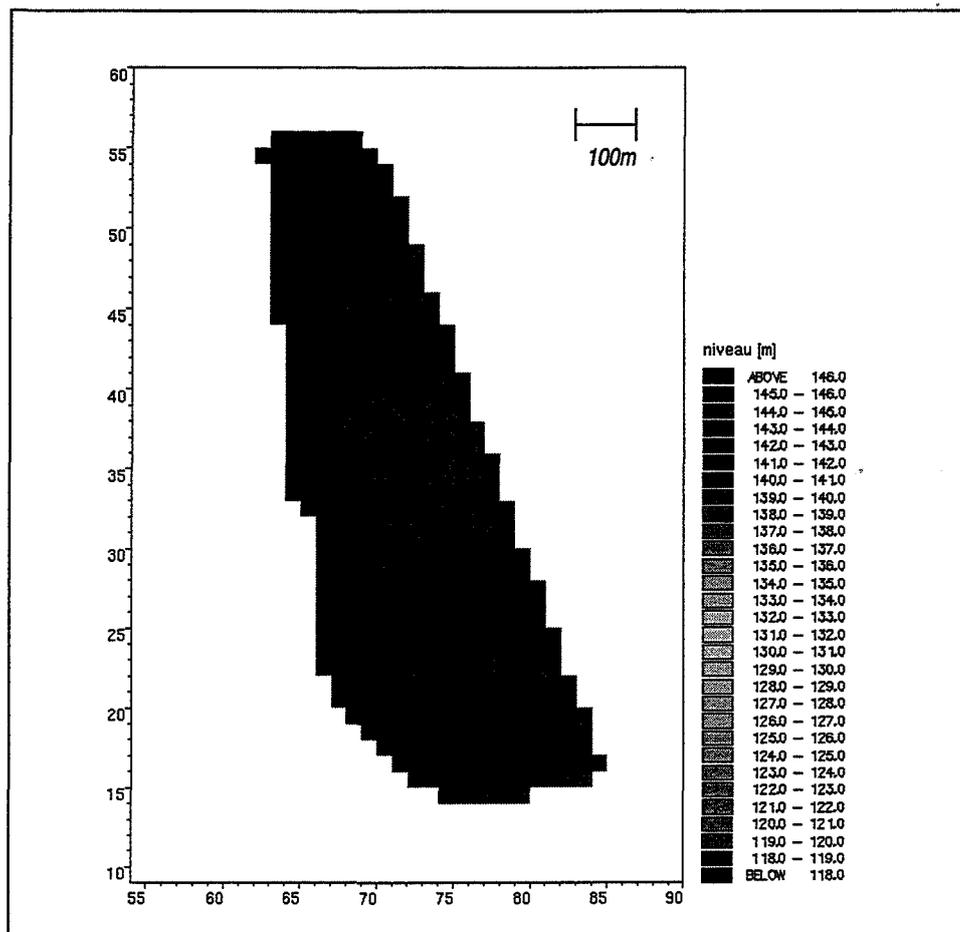


Fig. I.2.10 : Zone d'étude : niveau du sol

à un bon compromis entre la résolution spatiale d'une part et le temps de calcul lié au nombre maximal des mailles admissible d'autre part. Ce choix suffit largement pour la simulation hydrodynamique. Pour la modélisation de la dispersion en petite échelle, une résolution plus fine est cependant indispensable.

*b) Paramètres hydrologiques :*

La pluie brute a été estimée à 690 mm/an en moyenne pour 1985-1993. La recharge de l'aquifère a été évaluée à environ 200 mm/an en considérant des valeurs d'évapotranspiration correspondant à la latitude moyenne du site étudié.

*c) Paramètres hydrogéologiques :*

Les données de l'aquifère ont été acquises au cours d'une étude de terrain effectuée en 1986 avant l'accident. La porosité efficace ( $\omega_{\text{eff}}$ ) est de 0.06. La perméabilité de l'aquifère était de  $4.5 \times 10^{-3}$  m/s. Nous prenons cette valeur comme la perméabilité horizontale  $k_{\text{horiz}}$ . En général, sur un site donné, on observe une anisotropie des perméabilités dans les directions verticales et horizontales. Selon de Marsily (1981), on observe des rapports d'anisotropie entre 1 et 100. Selon Anderson et Woessner (1992), des rapports d'anisotropie entre 1 et 1000 ont été observés. Guswa et Le Blanc (1985) observent des variations du rapport d'anisotropie sur un

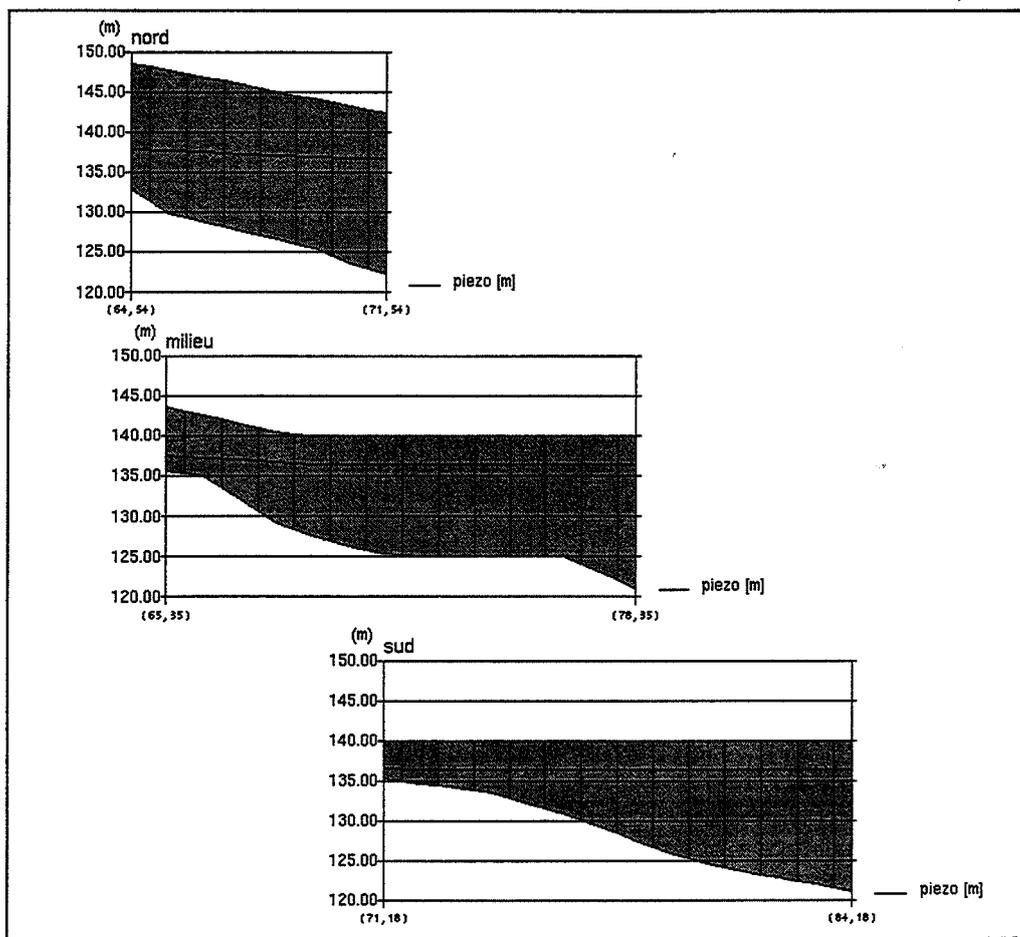


Fig. I.2.11 : Représentation de la zone d'étude : coupe O-E de l'aquifère

aquifère localisé à Cape Cod, Massachusetts, entre 10 et 1000. Nous prenons comme perméabilité verticale pour ce type d'aquifère une valeur égale au dixième de la valeur pour la perméabilité horizontale ce qui amène la perméabilité verticale à  $k_{\text{vert.}} = 4.5 \times 10^{-4}$  m/s. Les conditions initiales sont représentées par le potentiel hydraulique de la piézométrie relevée en octobre 1984, régime de basses eaux sans perturbation par prélèvement. Comme conditions aux limites, nous admettons des conditions de potentiel imposé (Dirichlet).

### I.2.3.2 Calage du modèle de la nappe

#### a) détermination des conditions aux limites

La zone d'étude est limitée au nord et à l'est par des cours d'eau et à l'ouest par un massif cristallin. Au sud, le gradient piézométrique est faible ( $< 10^{-3}$ ) et parallèle aux limites de la zone d'étude. Nous pouvons donc prendre des conditions de potentiel imposé pour les limites nord, sud et est. A la limite ouest, selon l'étude de 1986, il y a un flux d'infiltration de 10 l/s et par km de bordure du versant. Cependant, du fait des épaisseurs et des pentes bien hétérogènes de cette limite, le calage n'a pas donné de résultats satisfaisants. Pour cette raison, nous avons également choisi des conditions limites de Dirichlet en limite ouest.

### b) Résultats du calage

L'opération de calage des perméabilités à saturation consiste à ajuster les résultats de la simulation à une piézométrie de référence mesurée en faisant varier successivement les perméabilités du terrain (fig. I.2.12). Une augmentation de la perméabilité résulte en une montée

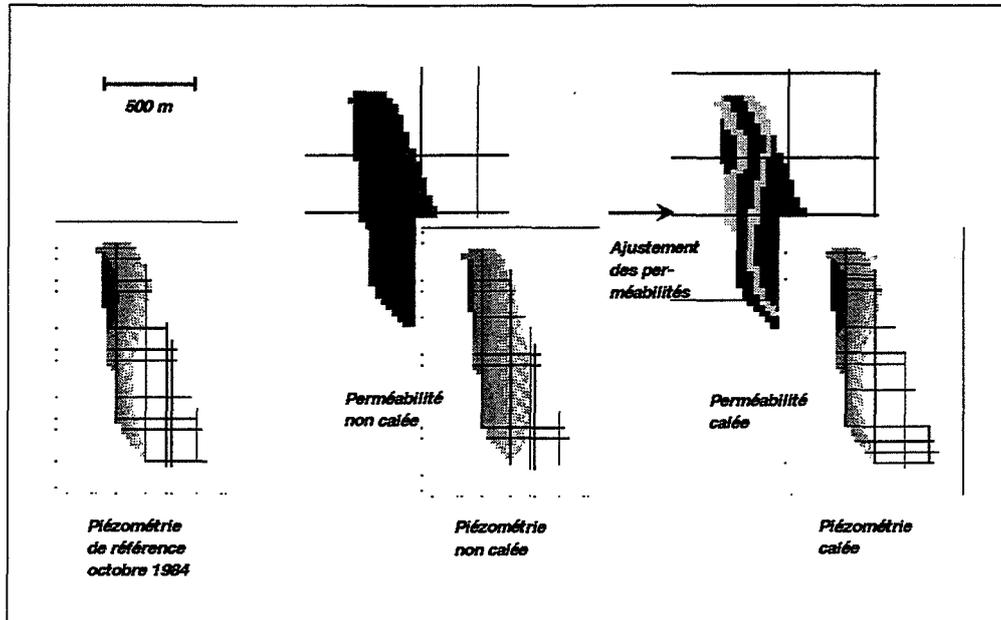


Fig. I.2.12 : Calage de la nappe en deux dimensions

de la piézométrie en amont ainsi qu'une baisse en aval. En même temps, les isolignes du niveau de la nappe en amont tendent vers l'aval et les isolignes en aval tendent vers l'amont. Une diminution de la perméabilité entraîne les effets contraires. Le modèle de la nappe du site

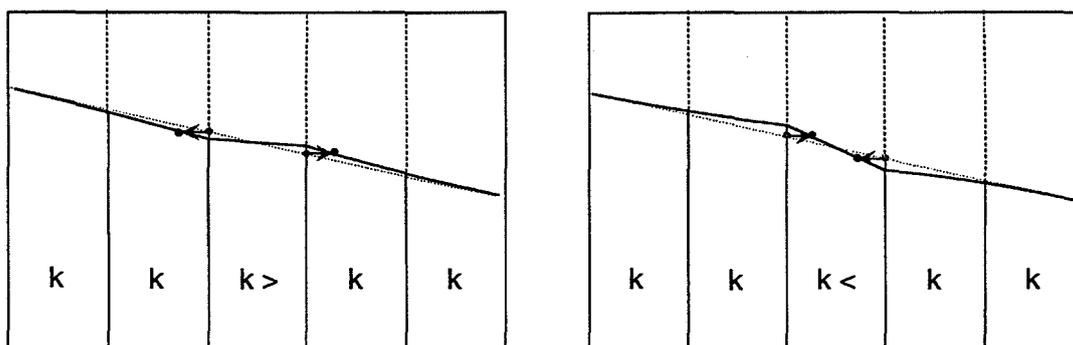


Fig. I.2.13 : Effets suite à l'augmentation (gauche) et diminution (droit) de perméabilité

d'étude a été calé en régime permanent par rapport à la piézométrie d'étiage de l'année 1986. L'épaisseur de l'aquifère varie fortement d'ouest en est. Pour cette raison, nous avons décidé de caler le modèle avec les perméabilités au lieu des transmissivités, généralement utilisées lorsqu'on ne dispose pas d'information sur la variation des perméabilités verticales.

Les variations piézométriques issues d'un changement des transmissivités sont indiqués dans la figure I.2.14. Les transmissivités observées varient entre  $10^{-2}$  et  $6 \cdot 10^{-4}$  m<sup>2</sup>/s. La moyenne harmonique des perméabilités a été utilisé pour le calage :

$$\frac{1}{k_{\text{repres}}} = \frac{1}{\sum_{\text{colonnes}} k_i} \quad \text{Eq. (I.2.1)}$$

Le résultat de l'opération de calage est présenté en figure I.2.14 a l'aide d'une échelle loga-

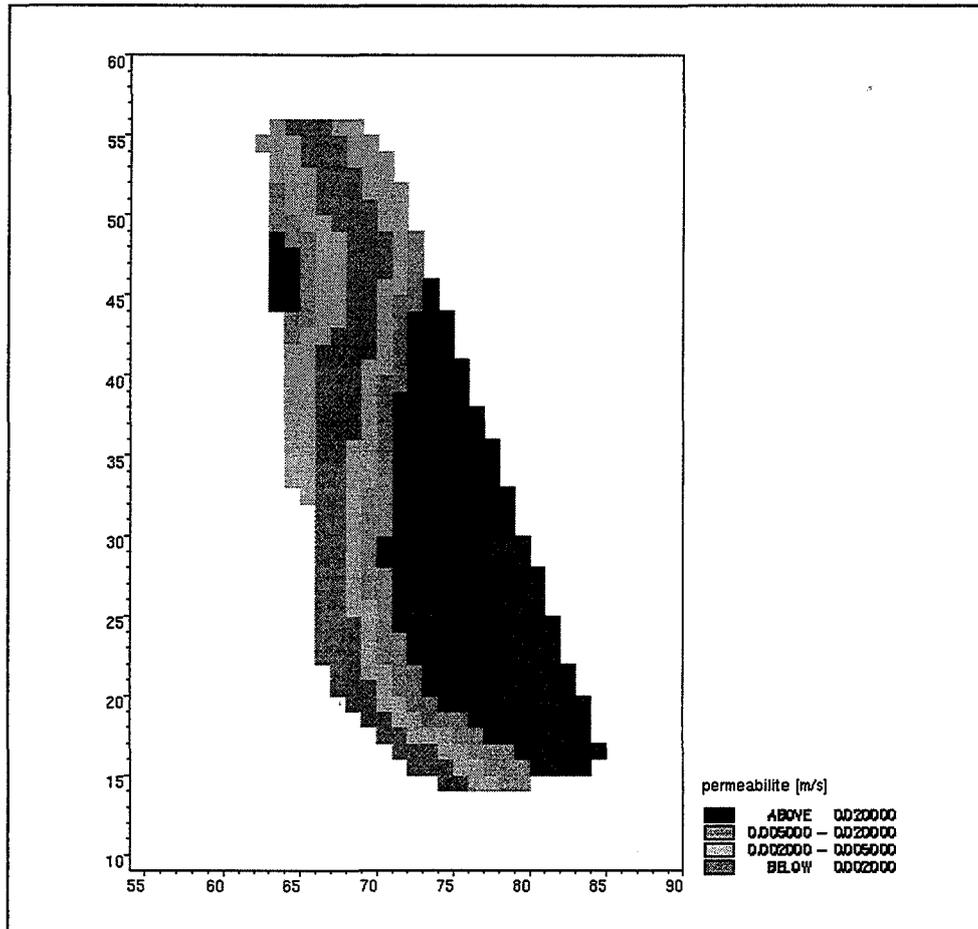


Fig. I.2.14 : Distribution des perméabilités calage du modèle en régime permanent

rithmique.

Pour l'aquifère étudié, nous observons des perméabilités plus faibles dans la partie nord-ouest. Dans la partie sud, d'autres relevés piézométriques mettent en évidence un gradient d'écoulement. Le résultat du calage en régime permanent, par rapport à la piézométrie de référence d'octobre 1984 est illustré dans la fig. I.2.15.

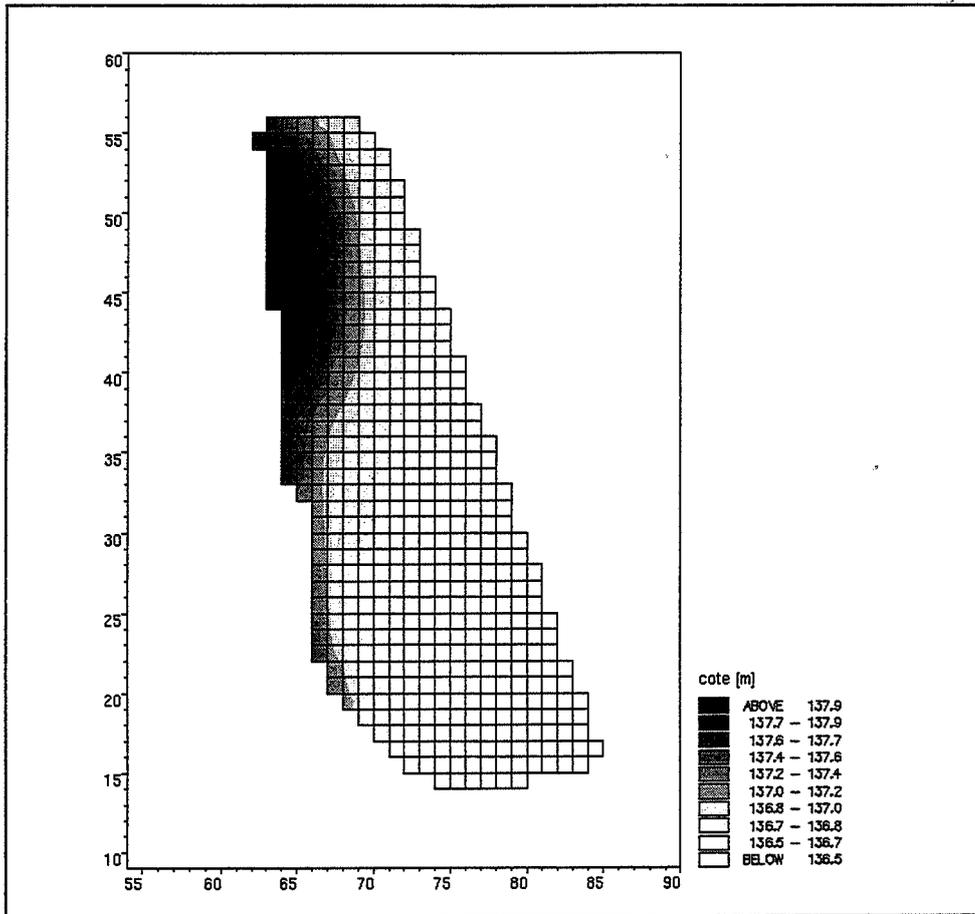
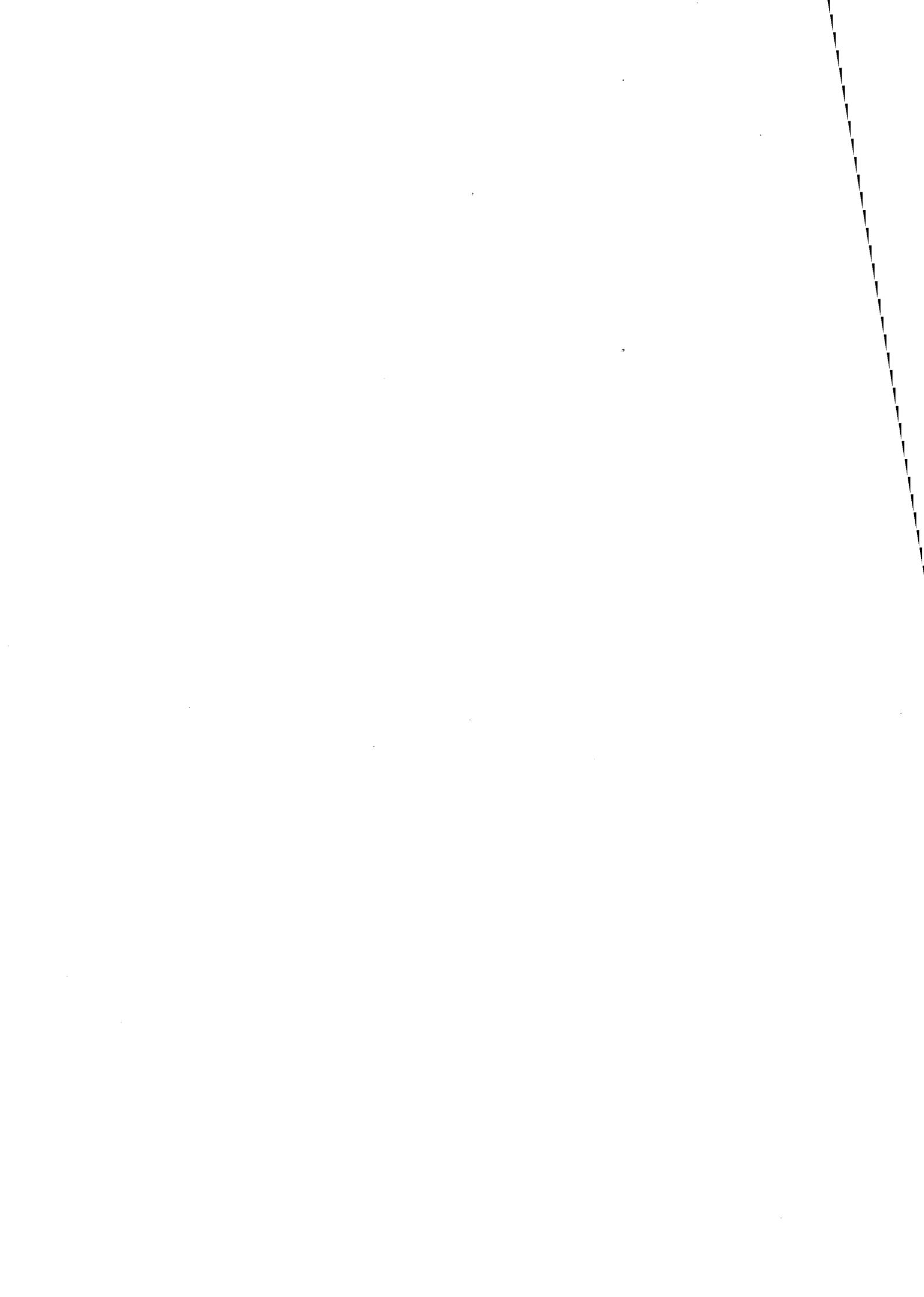


Fig. I.2.15 : Piézométrie calée en régime permanent



### I.3 Elaboration d'un schéma caractérisant les pollutions accidentelles

Pour pouvoir estimer les risques liés aux pollutions des eaux souterraines, nous proposons d'abord une cartographie qui soit adaptée à notre problème. Nous proposons un schéma arborescent illustrant la propagation des risques et des défaillances du système.

#### I.3.1 Proposition d'une cartographie adaptée aux pollutions accidentelles

Pour les besoins d'aide à la décision en matière des pollutions accidentelles, il est nécessaire de disposer des éléments cartographiques suivants :

<i>Zones à risques</i>	<i>habitations</i>
	<i>puits d'alimentation en eau potable (AEP)</i>
	<i>cours d'eau</i>
<i>Éléments infrastructuraux</i>	<i>voie ferrée</i>
	<i>route</i>
	<i>réseau d'assainissement</i>
<i>Sources de pollution</i>	<i>points de relâchement des polluants</i>
	<i>zones d'infiltration dans le sol</i>
<i>Moyens de suivi</i>	<i>piézométrie</i>
	<i>puits de rabattement</i>
	<i>puits d'écrémage</i>
	<i>puits de venting</i>
	<i>point d'analyse</i>

Tab. I.3.1 : *Éléments cartographiques adaptés aux pollutions accidentelles*

La prise en compte de ces éléments à notre cas de pollution accidentelle aboutit à la carte suivante (fig. I.3.1).

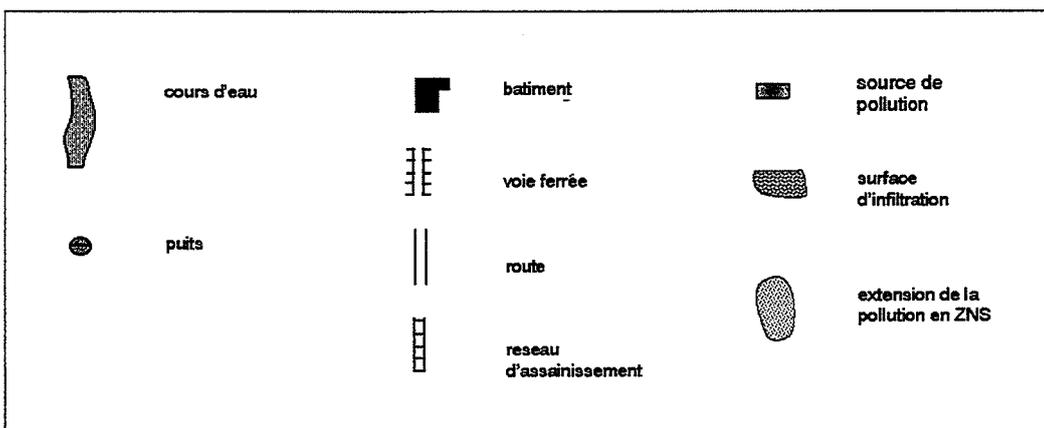
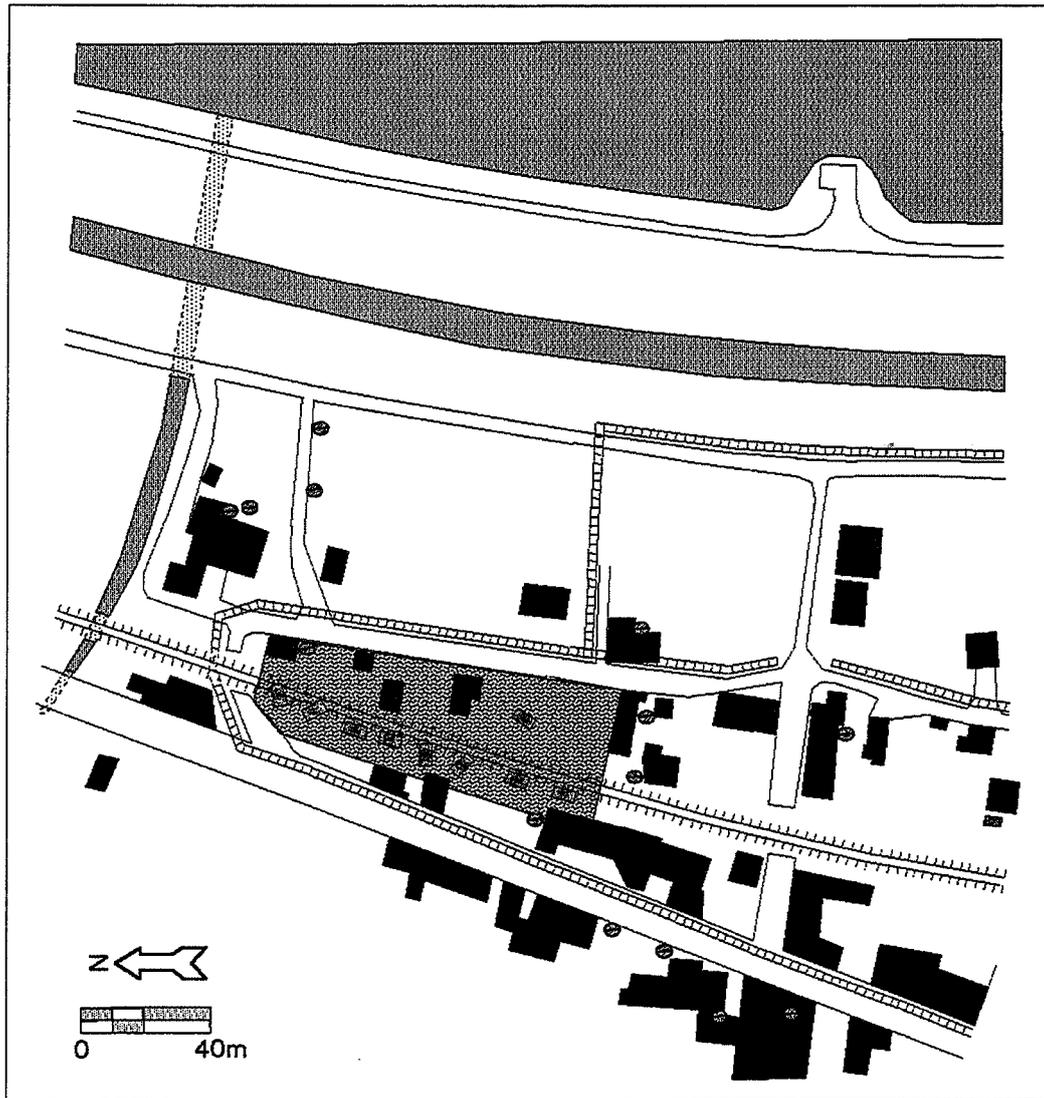


Fig. I.3.1: Cartographie de l'accident type

### I.3.2 Éléments spatio-temporels influençant le risque de pollution

Dans un outil d'aide à la décision, il est également important de connaître un nombre de paramètres caractérisant dans le temps et dans l'espace la situation de pollution :

- Dans l'espace :
  - localisation de la source de pollution
  - localisation des endroits où la pollution a été observée
  - localisation des zones à risques concernées par la pollution (captages, écosystèmes)
  - propriétés géologiques et physico-chimiques du milieu naturel atteint
- Dans le temps :
  - durée de l'injection de la pollution
  - temps d'intervention disponible pour trouver une solution de secours
  - temps de transfert de la pollution dans les zones du milieu naturel
- Dans l'espace et le temps :
  - activités à risque
  - concentrations mesurées
  - fonctionnement hydrologique du système naturel

### I.3.3 Analyse des risques de pollution accidentelles

Pour analyser les risques, il est important de connaître l'enchaînement des causes et des impacts d'évènements élémentaires. La théorie des arborescences, développée à l'origine par H.A. Watson en 1961 permet d'exprimer par des graphes le fait qu'une cause peut entraîner différents impacts ou qu'un impact peut avoir différentes causes. (Lambert, 1973, Henley et Kumamoto, 1981 ou Schreiber, 1982).

Dans le cas des pollutions souterraines, on se pose souvent la question suivante : D'où vient la pollution qu'on a détectée par analyse de l'eau potable, par exemple ? Il s'agit d'un *problème de diagnostic*. La théorie correspondante est alors celle des *arborescences de défaillance* ou *des causes*.

Pour la pollution des eaux, l'arborescence de défaillance est présentée en figure I.3.2. Le point de départ est la pollution de l'eau et on en recherche les causes. En remontant l'arborescence, on retrace le cheminement de la pollution depuis sa source liée soit à un accident de transport, soit à des pollutions chroniques.

Bien souvent, en particulier en matière de pollution des eaux, on se pose la question inverse : que se passe-t-il si une pollution est relâchée à un endroit précis et à un moment don-

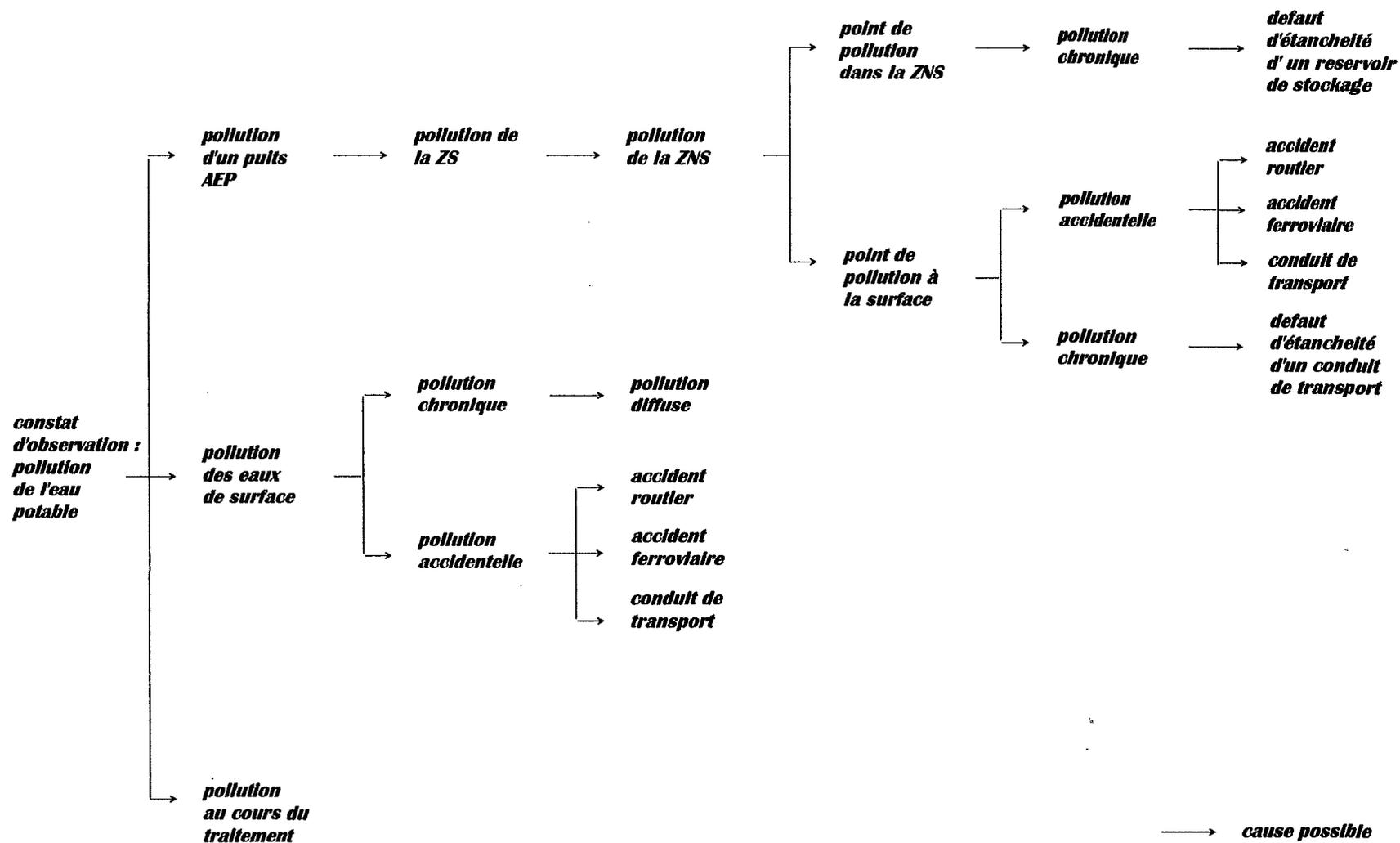


Fig. I.3.2 : Arborescence des causes (de défaillance) pour les pollutions souterraines par hydrocarbures

né ? Ce point de vue est donc tout à fait complémentaire du premier et a pour but la prévision des risques générés par une pollution. C'est le *problème de prévision*. Le type d'arborescence correspond dans ce cas à celui des *arborescences d'événements*. Pour cette raison, nous proposons un deuxième schéma (fig. I.3.3)<sup>1</sup> dont la racine correspond à l'observation d'une pollution liquide quelconque. On cherche ainsi à mettre en évidence les risques générés pour l'environnement. Cette arborescence des risques permet ensuite de suivre les modalités de propagation de la pollution dans les différentes zones et peut servir à choisir un modèle de simulation adapté.

On retrouve dans ce deuxième type d'arborescence trois types de risques principaux : les risques de dégâts matériels (réseau d'assainissement, habitations), le risque pour l'homme (par voie de respiration, ingestion ou effets caustiques) et le risque pour l'environnement naturel (faune, flore, sol, réseau hydrographique).

#### I.3.4 Paramètres mis en jeu

La première question qui se pose en contexte d'aide à la décision par rapport aux pollutions souterraines est celle des mesures d'urgence. La réponse nécessite des informations sur la nature et la quantité du polluant, la dimension spatiale de la zone concernée par la pollution ainsi que les risques d'exposition des milieux récepteurs. Ces paramètres sont indiqués dans le tableau I.3.2.

Au-delà des mesures d'urgence, deux autres points sont à considérer :

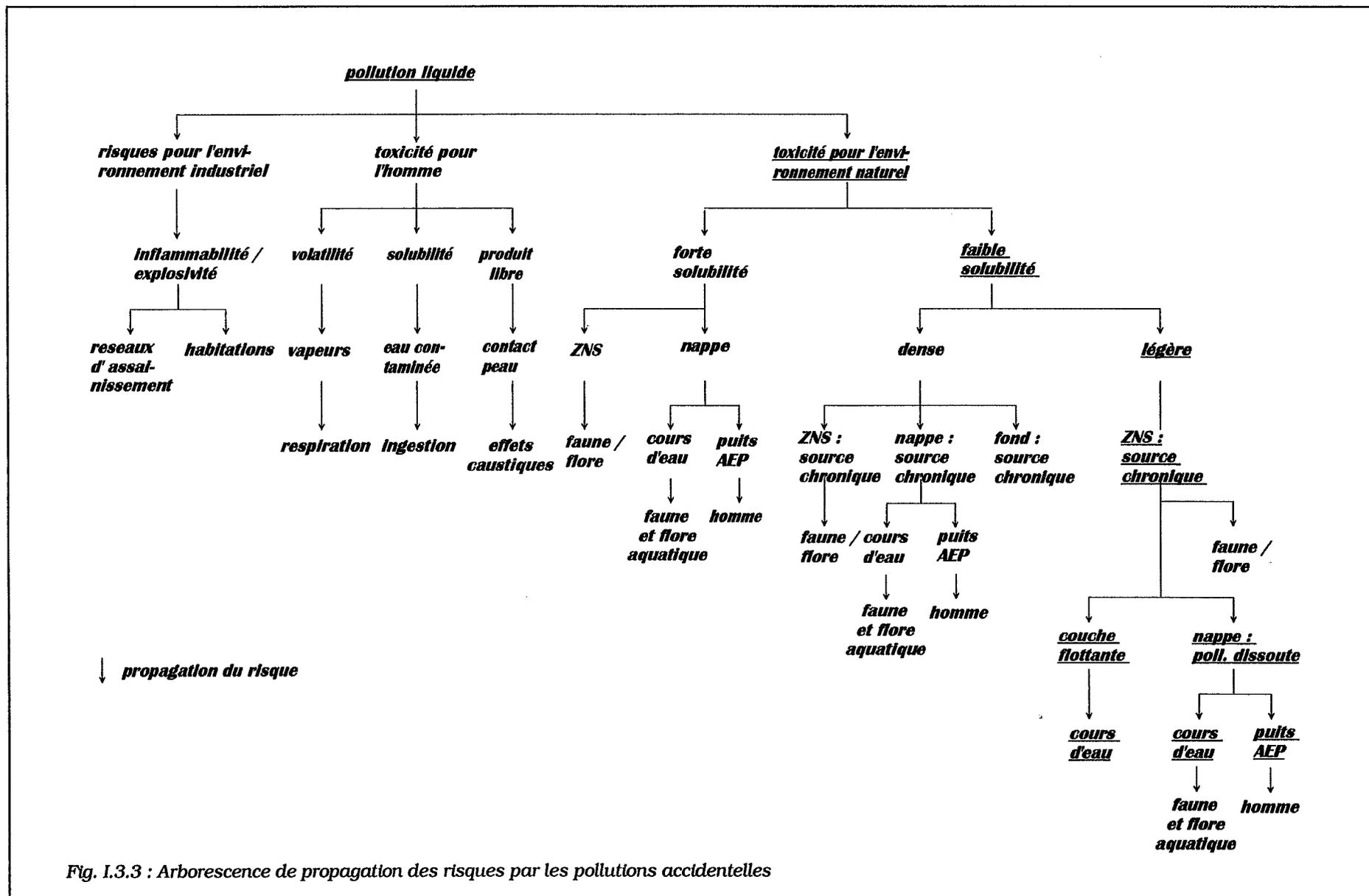
- L'estimation des risques pour l'environnement générés par la pollution.
- La dépollution : quelles normes faut-il respecter, quelle méthode faut-il utiliser ?

Les critères à prendre en compte pour répondre aux ces deux questions doivent d'abord caractériser le site pollué (Mouton, 1994) (tab. I.3.3) :

Le recours à la simulation s'avère parfois nécessaire mais demande des informations plus détaillées et plus quantitatives, elles font référence à une localisation spatiale (informations cartographiques) (tab. I.3.4) :

---

1. Les points soulignés seront développés en détail dans le cadre de ce travail



<i>Informations générales</i>	<i>origine</i>	<i>installation mobile / fixe</i>
	<i>historique</i>	
	<i>contexte</i>	
	<i>circonstances</i>	
<i>Produit</i>	<i>type du polluant</i>	
	<i>composition</i>	
<i>Quantité d'HC</i>	<i>total</i>	<i>relâché</i>
		<i>consommé</i>
		<i>infiltré</i>
	<i>en zone non-saturée</i>	
	<i>dans la nappe</i>	
<i>Dimension spatiale</i>	<i>pollution</i>	<i>sources</i> <i>zone d'infiltration</i>
	<i>bassin versant</i>	
<i>Milieux artificielles</i>	<i>habitations</i>	
	<i>infrastructure communale</i>	
	<i>industrie</i>	
<i>Ressources en eau</i>	<i>naturelles</i>	<i>aquifère</i>
		<i>réseau hydrographique</i>
	<i>artificielles</i>	<i>puits en AEP</i>
		<i>puits d'irrigations</i>
<i>Aquifère</i>	<i>type</i>	<i>poreux</i>
		<i>calcaire</i>
		<i>granite</i>
	<i>nappe</i>	<i>présence / absence</i>
		<i>profondeur</i>
<i>Risques immédiats</i>	<i>explosion</i>	
	<i>feu</i>	
<i>Menaces</i>	<i>environnement artificiel</i>	
	<i>ressources en eau</i>	
<i>Mesures à prendre</i>	<i>évacuation de la population</i>	
	<i>éteindre le feu</i>	
	<i>rabattement de la nappe</i>	
	<i>réseau de surveillance</i>	

Tab. I.3.2 : Eléments de décision pour les mesures d'urgence à mettre en oeuvre dans le cas de pollution accidentelle

<i>Substances polluantes</i>	<i>Bruit de fond géochimique</i>	
<i>Vulnérabilité</i>	<i>Ressources en eau</i>	<i>aquifère</i>
		<i>réseau hydrographique</i>
		<i>puits en AEP</i>
		<i>puits d'irrigations</i>
	<i>Utilisation agricole</i>	
<i>Utilisation du terrain</i>	<i>Actuelle</i>	<i>habitations</i>
		<i>infrastructure communale</i>
		<i>industrie</i>
		<i>loisirs</i>
	<i>Future</i>	<i>habitations</i>
		<i>infrastructure communale</i>
		<i>industrie</i>
		<i>loisirs</i>

Tab. I.3.3 : Caractérisation d'un site : éléments de décision

Les informations pour la simulation peuvent être obtenues à partir des données de sondage du terrain bruts ou interprétées sous forme de couches géologiques, à partir de chromatogrammes d'un mélange du produit dissout produisant des valeurs de concentration.

<i>Aménagements existants</i>	<i>puits d'alimentation en eau potable</i>
	<i>puits d'irrigation</i>
	<i>piézomètres</i>
	<i>habitations</i>
	<i>réseau d'assainissement</i>
	<i>localisation des coupes géologiques</i>
<i>Sondages à prévoir</i>	<i>sondages en carottes</i>
	<i>sondages électriques</i>
	<i>piézomètres</i>
<i>Pollution</i>	<i>points ou superficie d'injection</i>
<i>Gestion du chantier</i>	<i>périmètre d'insalubrité</i>
	<i>zone de réception du chantier de dépollution</i>
	<i>points de contrôle de la stabilité du terrain</i>
<i>Dépollution</i>	<i>forages de la phase test</i>

Tab. I.3.4 : Informations spatiales pour un modèle numérique de simulation

	<i>forages de la phase définitive</i>
	<i>rejets des eaux pompées</i>
<i>Contrôle de la pollution</i>	<i>teneur du polluant dans le sol</i>
	<i>teneur du polluant dans l'air du sol</i>
	<i>teneur du polluant dans l'eau</i>
<i>Géométrie de l'aquifère</i>	<i>niveau du sol</i>
	<i>couche d'argile superficielle</i>
	<i>substratum</i>
	<i>profil des carottes</i>
	<i>coupes géologiques</i>
	<i>profil géoélectriques</i>
<i>Propriétés hydrauliques de l'aquifère</i>	<i>granulométrie</i>
	<i>porosité</i>
	<i>coefficient d'emmagasinement</i>
	<i>transmissivité</i>
	<i>perméabilité saturée par couche</i>
	<i>dispersivité</i>
<i>Météorologie</i>	<i>précipitation</i>
	<i>température</i>
	<i>évaporation</i>
<i>Hydrologie</i>	<i>profil de teneur en eau</i>
	<i>piézométrie</i>
	<i>affluents et sorties</i>
<i>Aménagement hydraulique</i>	<i>pompages</i>
<i>Pollution</i>	<i>teneur dissoute</i>
	<i>teneur en gaz dans la ZNS</i>
	<i>teneur liquide volumique dans la ZNS</i>
	<i>teneur en masse dans la ZNS</i>
	<i>évolution des proportions d'un mélange dans les différents zones</i>
	<i>couche flottante ou restante au niveau du substratum</i>
<i>Dépollution</i>	<i>masse récupérée par écrémage</i>
	<i>masse récupérée par venting</i>
	<i>dépression de l'air</i>

Tab. I.3.4 : Informations spatiales pour un modèle numérique de simulation

La stratégie de gestion de l'accident de pollution fait intervenir les éléments suivants :

<i>planning général</i>	<i>arborescence des risques</i>
	<i>appel d'offres / choix des entreprises pour intervenir</i>
	<i>mesures d'urgence</i>
	<i>suiti</i>
	<i>dépollution</i>
	<i>clôture de chantier</i>
<i>mesures d'urgence</i>	<i>limitation de l'extension de la pollution</i>
	<i>rabattement de la nappe / barrière hydraulique</i>
<i>suiti</i>	<i>HC dissous</i>
	<i>HC surnageants</i>
	<i>HC vaporisés</i>
	<i>HC totaux dans le sol</i>
<i>dépollution</i>	<i>choix d'un site test</i>
	<i>test de différents méthodes : extraction sous vide, biolixiviation</i>
	<i>objectif : zone non-saturée, zone saturée</i>
<i>clôture du chantier</i>	<i>décision d'arrêt de la dépollution</i>
	<i>suiti</i>
	<i>essais finaux : battements de la nappe</i>

Tab. I.3.5 : Choix d'une stratégie de gestion de l'accident

La méthodologie proposée dans le cadre de ce travail doit permettre de mieux évaluer les conséquences d'un sinistre, de minimiser les risques d'une pollution accidentelle ainsi que ses conséquences.

Il s'agit donc d'un évènement difficile à identifier et à caractériser (méconnaissance sur le polluant, et sur son comportement dans le milieu) pour lequel les méthodes d'analyse dont on dispose aujourd'hui ne sont pas forcément adaptées à une situation accidentelle pour laquelle il faut intervenir rapidement.

**DEUXIEME PARTIE :**  
**METHODES D'ANALYSE**  
**DES POLLUTIONS SOUTERRAINES**



## **PARTIE II.**

### **METHODES D'ANALYSE DE LA PROPAGATION DES POLLUTIONS SOUTERRAINES**

La modélisation des phénomènes de pollution par hydrocarbures nécessite de bien connaître, dans un premier temps, les mécanismes physiques et physico-chimiques qui interviennent, en fonction du milieu, des conditions hydrologiques ainsi que de la nature du polluant.

Il existe des méthodes de modélisation quantitatives permettant d'élaborer des programmes de simulation de la propagation de ces phénomènes de pollution. Nous rappellerons les bases mathématiques et les méthodes numériques de ces modèles.

D'autres outils particulièrement conçus pour traiter et analyser des données spatiales (2D ou 3D) permettent de mieux préparer les données en entrée de modèles et d'en faciliter l'interprétation des résultats. Il s'agit des bases de données géographiques et des outils d'analyse spatiale, plus couramment appelés Systèmes d'information Géographiques (SIG).

Cette seconde partie se termine par une comparaison synthétique des différents outils existants susceptibles de contribuer à une meilleure évaluation des risques de propagation des pollutions souterraines.

#### **II.1 Phénomènes et lois d'écoulement des polluants**

Nous examinerons d'abord les processus physiques, physico-chimiques et biologiques indispensables à la compréhension de ces phénomènes pour en déduire les équations permettant leur modélisation dans les logiciels de simulation.

Pour comprendre ces phénomènes, il est important de spécifier les caractéristiques du milieu poreux où se propage la pollution et son rôle dans le transfert en zone saturée et en zone non-saturée.

Les mécanismes sont étudiés de la manière suivante :

- Ecoulement biphasique en zone non-saturée.
- Ecoulement monophasique dans la zone saturée des nappes aquifères.
- Etude du transfert monophasique de la matière dissoute.
- Ecoulement polyphasique

Dans le cadre de ce travail, nous considérons le cas des nappes aquifères alluviales et non celui des milieux à porosité de fissures comme par exemple les nappes karstiques.

Nous rappelons les conventions suivantes destinées à faciliter l'écriture des opérateurs mathématiques dans les équations différentiels :

$\vec{\nabla} \cdot \vec{a} = \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{\partial a}{\partial y} + \frac{\partial a}{\partial z}$  : *divergence* d'une variable (a), qui produit une grandeur scalaire à partir d'une grandeur vectorielle

$\vec{\nabla} a = \frac{\partial a}{\partial x} \vec{i}_x + \frac{\partial a}{\partial y} \vec{i}_y + \frac{\partial a}{\partial z} \vec{i}_z$  : *gradient* d'une variable (a), qui produit une grandeur vectorielle à partir d'une grandeur scalaire

### II.1.1 Ecoulement en zone non-saturée

Hors pollution, il s'agit d'un écoulement biphasique puisqu'une phase gazeuse (air) et une phase aqueuse sont présentes.

Le potentiel est appelé "charge hydraulique" :

$$h = \frac{\psi}{\rho g} + z$$

Eq. (II.1.1)

avec :

h [m] : charge (hydraulique)  
 $\psi$  [kg m/s<sup>2</sup>] : succion  
 $\rho$  [kg/m<sup>3</sup>] : masse volumique  
z [m] : cote  
g [m/s<sup>2</sup>] : constante de gravitation.

En zone non-saturée, la pression dans la phase aqueuse est en général négative par rapport à la pression de l'atmosphère. On parle de succion  $\psi$ . La succion dépend de la teneur en eau et peut être modélisée par une relation qui est fortement non-linéaire.

A partir de la charge, on détermine la vitesse d'écoulement selon la loi de Darcy :

$$\vec{u} = -k_{ij}(\theta) \cdot \vec{\nabla} h$$

Eq. (II.1.2)

avec

$\bar{u}$  [m/s] : vitesse d'écoulement (de Darcy)  
 $k_{ij}(\theta)$  [m/s] : tenseur de perméabilité de 2<sup>ème</sup> ordre  
 $\theta$  [-] : teneur en eau  
h [m] : charge (hydraulique)

Cette équation s'appelle également équation de Richards. Tant qu'on ne prend pas en compte les interstices les plus petits, on peut considérer que le problème à résoudre est monodimensionnel en direction verticale. Afin de justifier le modèle monodimensionnel d'infiltration des hydrocarbures en zone non-saturée, nous mettons en évidence la validité de cette hypothèse pour notre problème en Annexe A (Musy, 1991), (de Laat, 1993).

### II.1.2 Ecoulement en zone saturée

C'est l'écoulement le plus classique et couramment étudié en hydrogéologie où une seule phase liquide est présente. Dans ce cas, on s'intéresse pas aux substances transportées dans l'eau. Comme pour la zone non-saturée, on détermine la vitesse d'écoulement à partir de la charge selon la loi de Darcy :

$$\vec{u} = - k_{ij} \cdot \vec{\nabla}h$$

Eq. (II.1.3)

Dans ce cas, la perméabilité ne dépend plus de la saturation, mais du milieu fluide. Par exemple, elle prendra d'autres valeurs dans le cas des hydrocarbures. C'est pour cette raison qu'on introduit la notion de perméabilité intrinsèque. Cela nous donne l'équation suivante :

$$\vec{u} = - \frac{k_{ij}^{int} \rho g}{\mu} \cdot \vec{\nabla}h$$

Eq. (II.1.4)

avec

- $k_{ij}^{int}$  [ $m^2$ ] : perméabilité intrinsèque
- $\rho$  [ $kg/m^3$ ] : masse volumique du fluide
- $\mu$  [ $N/m^2s$ ] : viscosité dynamique du fluide

En faisant l'hypothèse de conservation de masse, nous obtenons l'équation de diffusivité pour une discrétisation multi-couche de l'aquifère :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( T_m \frac{\partial h_m}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( C_m \frac{\partial h_m}{\partial z} \right) - S_m \frac{\partial h_m}{\partial t} = Q$$

Eq. (II.1.5)

avec :

- $x_i$  : directions de l'espace :  $x_i = x, y$
- $T_m$  [ $m^2/s$ ] : transmissivité de la couche m  
 $T = k \cdot e$  avec  $e$  l'épaisseur mouillée de l'aquifère
- $C_m$  [ $m^2/s$ ] : coefficient de drainage de la couche m
- $S_m$  [-] : coefficient d'emmagasinement de la couche m
- $Q$  : [ $m^3/s$ ] : terme source

Pour la modélisation des pollutions par des hydrocarbures, nous avons besoin de cette équation pour construire le champ d'écoulement qui fonctionne comme vecteur pour les pollutions dissoutes.

### II.1.3 Transfert des polluants miscibles dans l'eau en zone non-saturée

Pour l'analyse du problème en zone non-saturée, où la dimension latérale est de l'ordre de quelques mètres voire quelques dizaines de mètres, il est raisonnable de ne prendre en compte que la direction z, ce qui revient à négliger les coefficients de suction  $\psi_x$  et  $\psi_y$ . Un aperçu sur le thème se trouve dans Charbeneau et Daniel (1991).

L'équation de transport monodimensionnel qui donne le flux de matière en zone non saturée (Danish Hydraulic Institute, 1995) est :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(c v_z) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D^c \frac{\partial c}{\partial z}\right) + D^{o'} + R$$

Eq. (II.1.6)

avec :

$c$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du soluté

$D^c$  : coefficient de dispersion cinématique

$D^{o'}$  : coefficient effectif de diffusion en milieu non saturée, qui dépend en principal de la tortuosité  $\tau(\theta)$  du milieu<sup>1</sup>.

$R$  [mol/s] : terme source de masse dissoute

$v_z = u_z/\theta$  : vitesse en direction z, qui est appelée dans les références anglo-saxonnes "seepage velocity"

$u_z$  : vitesse de Darcy en direction z

$$u_z = -k(\theta) \cdot \frac{\partial}{\partial z}(\psi + z)$$

Eq. (II.1.7)

### II.1.4 Transfert des polluants miscibles à l'eau en zone saturée

Les modèles correspondant aux transferts monophasiques prennent en compte les transferts de matière par convection, diffusion moléculaire et dispersion cinématique. On parle souvent des modèles hydrodispersifs.

La diffusion peut être formalisée par la loi de Fick :

$$\vec{\phi}_F = -D^0 \cdot \vec{\nabla} c$$

1. La tortuosité donne le prolongement du chemin pour un particule en fonction de la teneur en eau et par rapport au milieu saturé (Shackelford, 1991).

Eq. (II.1.8)

avec :

- $\phi_F$  [mol/m<sup>2</sup>s] : flux diffusif
- $D^o$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de diffusion moléculaire
- $c$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant

Le flux est proportionnel au gradient de la concentration du polluant.

Pour la dispersion cinématique, on admet une loi empirique analogue à celui de la diffusion :

$$\vec{\phi}_C = -D_{ij}^c \cdot \vec{\nabla} c$$

Eq. (II.1.9)

avec :

- $\phi_C$  [mol/m<sup>2</sup>s] : flux dispersif
- $D_{ij}^c$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de dispersion cinématique  
avec i, j correspondant aux trois dimensions de l'espace (i, j = x, y, z).
- $c$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant

La validé de l'approche hydrodispersive dépend du nombre de Peclet. En général, ce nombre met en relation la contribution des différents flux. Dans notre cas, il s'agit de flux convectifs et diffusifs :

$$Pe = \frac{v \cdot d}{D^o}$$

Eq. (II.1.10)

avec :

- Pe [-] : Nombre de Peclet
- d [m] : longueur caractéristique du milieu poreux (diamètre des grains)
- v [m/s] : vitesse microscopique  $v = u/\omega_c$ .

Il résulte de l'expérimentation, que pour  $Pe < 10^{-1}$ , le transport par diffusion est prédominant. Pour Pe entre  $10^{-1}$  et 10, il s'agit d'un régime de transition où les deux types de transport diffusion moléculaire et dispersion cinématique coexistent. Pour des nombres de Peclet compris entre 10 et  $10^5$  environ, le transport par dispersion cinématique est prédominant. Pour des valeurs encore plus élevées, on se trouve hors de la limite de validité de la loi de Darcy.

Dans le domaine où la dispersion cinématique prédomine, on définit un tenseur d'après Scheidegger (1961) de la manière suivante :

$$D_{ij}^c = \alpha_{ijmn} \frac{v_n v_m}{|v|}$$

Eq. (II.1.11)

avec :

- $D_{ij}^c$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de la dispersion du 2<sup>ème</sup> ordre : 9 coefficients de dispersion
- $v_n, v_m$  [m/s] : composantes de la vitesse microscopique en direction n, m (n, m = x, y, z)

$\alpha_{ijmn}$  [m] : tenseur des dispersivités de quatrième ordre : 36 coefficients

Le tenseur de dispersion dépend de l'échelle (distance parcourue). Il est lié au flux ainsi qu'au milieu.

Dans cette approche théorique, on néglige la contribution de la diffusion moléculaire. On définit un tenseur qui est la somme des contributions des flux dispersifs et diffusifs. Le tenseur des dispersivités peut se simplifier en cas d'isotropie du milieu et devient un tenseur de 2<sup>ème</sup> ordre  $\alpha_{ij}$  :

$$\alpha_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_L & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T \end{bmatrix}$$

Eq. (II.1.12)

où  $\alpha_L, \alpha_T$  [m] sont les dispersivités longitudinales et transversales

Malheureusement, on trouve rarement des aquifères qui ont des propriétés de transport isotropes et nous sommes obligés d'introduire plus de deux dispersivités dans les outils de simulation pour modéliser des problèmes en trois dimensions.

Dieulin (1980) considère les dispersivités comme une propriété représentative pour le milieu. Les mesures sur les dispersivités transversales sont moins connues que pour les dispersivités longitudinales. Selon de Marsily (1986), on peut estimer à  $\alpha_T$  une valeur entre 1/5 et 1/100 de  $\alpha_L$ , entre 1/6 et 1/20 selon Fetter (1993). Appelo et Postma (1996) proposent une valeur de  $\alpha_T$  égale à une dixième de  $\alpha_L$ .

Dans les modèles de simulation, on introduit les dispersivités. Puisqu'il est impossible (mais pas nécessaire) de connaître les 36 éléments du tenseur des dispersivités, on effectue des simplifications en introduisant des symétries ce que réduit le nombre des dispersivités à cinq en cas de symétrie axiale en direction z où à deux en cas d'isotropie.

Avec ce tenseur de dispersion, on peut établir l'équation de dispersion :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{V} \cdot (c\vec{V}) + \vec{V} \cdot (D_{ij}^* \vec{V}c) + R$$

Eq. (II.1.13)

avec :

$D_{ij}^*$  [m<sup>2</sup>/s] : Tenseur de dispersion apparente  $D_{ij}^* = D^0 + D_{ij}^c$

R [mol/m<sup>3</sup>s] : Terme source de matière dissoute

C'est l'équation qui régit le transport de matière en phase dissoute dans la zone saturée (Scheidegger, 1961), (de Marsily, 1981), (Dieulin, 1981) ou (Bear and Verrujt, 1987).

### II.1.5 Transfert des polluants non-miscibles dans l'eau - écoulement polyphasique

Après avoir décrit le phénomène de pollution par les hydrocarbures légers (LNAPL), il en résulte, que dans la zone non-saturée, une approche par écoulement polyphasique est nécessaire.

On distingue d'une part les phases et d'autre part les espèces. En hydrogéologie, on considère généralement le cas de trois phases : l'air, la phase liquide mouillante par rapport au solide, représentée par l'eau, et une phase non-mouillante liquide représentée par le polluant non-miscible. Les espèces présentes dans la phase air, sont les molécules d'oxygène et d'azote. Les diverses molécules d'hydrocarbures sont présentes dans la phase non-mouillante. Dans le cas général où on considère aussi les phénomènes de transport dans les différentes phases et l'échange de matière d'une phase à une autre, on parle d'approche polyphasique-multiespèce.

#### II.1.5.1 Définition de l'écoulement polyphasique : notions de phases et d'espèces

L'air, l'eau, le polluant et la matrice solide (sous forme de grains) constituent les divers composants du milieu étudié.

##### Rappel des définitions :

- Phase* : c'est une partie du milieu étudié pour lequel les propriétés physiques (masse volumique, viscosité,...) sont identiques
- Espèce* : c'est la plus petite unité chimique (molécule, ion)
- Interface* : c'est le plan séparant, dans le milieu étudié, deux phases distinctes

Les phases présentes dans un sol non pollué sont d'abord une phase solide, représentée par les grains. Selon les conditions hydrauliques, différentes phases fluides sont à considérer :

- Dans la zone non-saturée : deux phases fluides, représentées par l'eau et l'air.
- Dans la zone saturée : une phase fluide, représentée par l'eau.

A l'intérieur de chaque phase peuvent se trouver les différentes espèces selon leur solubilité dans la phase considérée. Par exemple, dans la phase aqueuse, on peut trouver des molécules d'hydrocarbures, il s'agit d'une espèce dissoute. La phase eau, est un milieu continu avec ses constantes physiques caractéristiques comme la viscosité; elle peut contenir des molécules O<sub>2</sub> ou N<sub>2</sub>, ces dernières provenant de la phase "air". Dans le cas de la phase solide, les espèces provenant des autres phases restent à la surface, il s'agit d'espèces adsorbées plutôt

que d'espèces dissoutes. Comme introduction à l'écoulement polyphasique, on peut citer, par exemple, Marle (Marle, 1981).

La porosité et la perméabilité par rapport à l'eau sont des macro-propriétés du milieu qui peuvent être déduites à partir des micro-propriétés sur un volume élémentaire représentatif (VER). Ce type de modélisation à l'échelle des pores, qui détermine les propriétés de l'écoulement dans les chenaux microscopiques, a été développé, par exemple, par Touboul et Lenormand (1987) ou Chaouche et al. (1994).

### II.1.5.2 Miscibilité

Le caractère polyphasique est une propriété majeure de l'écoulement des hydrocarbures en milieu naturel. Cependant, la phase des hydrocarbures n'est jamais complètement séparée des autres phases fluides présentes. Une certaine quantité de l'une se dissout toujours dans l'autre. Cela implique que des traces dissoutes peuvent être entraînées à l'intérieur de la zone saturée d'où le danger pour des puits d'alimentation en eau potable même si l'accident de pollution se produit loin d'eux.

La miscibilité se définit toujours à partir d'une phase par rapport à une autre et à travers une interface qui les sépare. Pour pouvoir préciser le mélange d'une espèce par rapport à une phase, nous rappelons les définitions suivantes :

*Espèce propre :* On peut définir par espèce propre, l'unité chimique qui forme sa propre phase sans la présence d'autres espèces. En hydrologie, elle correspond à des molécules d'eau dans la phase aqueuse, aux molécules d'azote ou d'oxygène dans la phase de l'air.

*Miscibilité :* C'est la capacité d'une espèce propre à traverser l'interface vers une autre phase. Cette miscibilité dépend des paramètres physico-chimiques, notamment de la pression et de la température. La miscibilité se caractérise à l'équilibre par la quantité à saturation de l'espèce (en mg), rapportée au volume de la phase (en l).

On dira qu'une espèce  $k$  est "miscible" dans une phase  $\alpha$ , si sa concentration d'équilibre  $c_k$  est supérieure à un seuil à choisir en fonction du problème de pollution (nature du polluant,...). Pour les pollutions aux hydrocarbures, malgré la faible miscibilité de la plupart des composants, ils ne peuvent pas être considérés comme totalement non miscibles dans l'eau.

### II.1.5.3 Application à l'infiltration d'un polluant (hydrocarbures)

Lorsque des hydrocarbures s'infiltrent dans le sol, ils forment une phase supplémentaire (que l'on appellera phase organique) non miscible à la phase aqueuse. Ils peuvent consister en plusieurs espèces (hydrocarbures) qui peuvent se retrouver dans toutes les autres phases existantes.

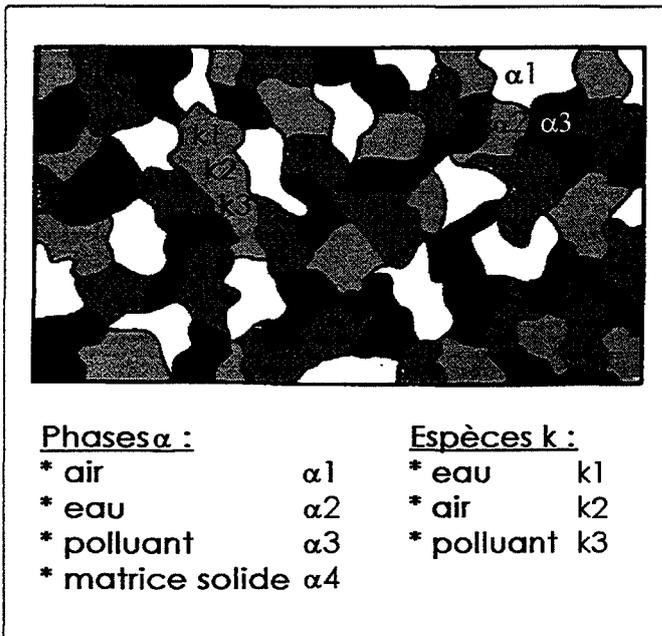


Fig. II.1.1: Représentation schématique d'un système polyphasique

Selon les lois de la cinétique et des équilibres chimiques, il peut se produire des échanges d'espèces entre deux phases : c'est ce que l'on appelle des *transferts de masse* entre les phases. Dans l'exemple de la fig. II.1.1, l'espèce  $k_1$  (molécule d'eau) représente l'"espèce propre" de la phase  $\alpha_2$  (phase aqueuse).

Bien qu'elle soit considérée en général, comme non miscible à la phase aqueuse, une petite partie du polluant se dissout dans la nappe (c'est-à-dire, dans la zone saturée). La propagation du polluant qui se produit dans la zone saturée corres-

pond en fait à la partie des hydrocarbures qui se dissout dans la nappe. Pour modéliser ce phénomène de propagation, le polluant est considéré comme une espèce dans la phase aqueuse.

Il faut distinguer l'infiltration d'un polluant non miscible de celle d'un polluant miscible à la phase aqueuse. Dans le premier cas, le polluant forme une phase supplémentaire dans le milieu et une espèce supplémentaire dans chacune des phases existantes, en particulier dans la phase aqueuse. Dans le second cas, il ne forme qu'une espèce supplémentaire dans chacune des phases existantes.

En résumé, dans la zone non saturée, on s'intéressera à un écoulement composé de trois phases : la phase aqueuse, la phase gazeuse et la phase organique. Dans la zone saturée, il n'y a qu'une seule phase présente (la phase aqueuse). Dans ce type d'écoulement, représentatif des phénomènes de pollution par les hydrocarbures, il faut tenir compte des transferts de masse entre les phases, en particulier à l'interface entre la zone non-saturée et la zone saturée.

Afin de ne pas confondre l'appellation correspondant à une phase et à l'espèce associée, nous adoptons pour le cas des pollutions par les hydrocarbures les notations suivantes (tab. II.1.1) : Dans le cas d'accidents de pollution impliquant des hydrocarbures à usage de carbu-

Phases	Espèce propre
liquide mouillant : aqueuse (m=a)	H <sub>2</sub> O
liquide non-mouillant : organique (n=o)	(hc <sub>1</sub> , hc <sub>2</sub> ,...)
gazeuse (g)	N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub>
solide (s)	

Tab. II.1.1 : Notation des phases et des espèces propres

rant, on trouve en général plusieurs espèces avec différentes propriétés physico-chimiques (solubilité dans l'eau, masse volumique). Bien que les espèces propres des phases aqueuse et gazeuse soient dissoutes dans les autres phases à un certain degré, elles n'ont pas d'influence notable sur la propagation du polluant et nous ne les prendrons pas en compte.

#### II.1.5.4 Phase mouillante et phase non-mouillante

Les perméabilités relatives des différentes phases fluides présentes dans le sol dépendent des saturations de la phase en question ainsi que des saturations des autres phases. Etant donné les difficultés de mesure de perméabilités triphasiques, on considère le plus souvent les perméabilités biphasiques. Cela implique des hypothèses sur la mouillabilité des différentes phases. On parle alors de systèmes mouillés à la phase aqueuse ("water wet systems") et de systèmes mouillés à la phase organique ("oil wet systems"). Dans le milieu souterrain, on se trouve généralement en présence de systèmes mouillés à l'eau puisqu'il reste toujours une certaine humidité dans le sol qui mouille les grains, même si ce dernier apparaît comme sec (Fetter, 1993). Ces conditions sont indiquées en fig. II.1.2.

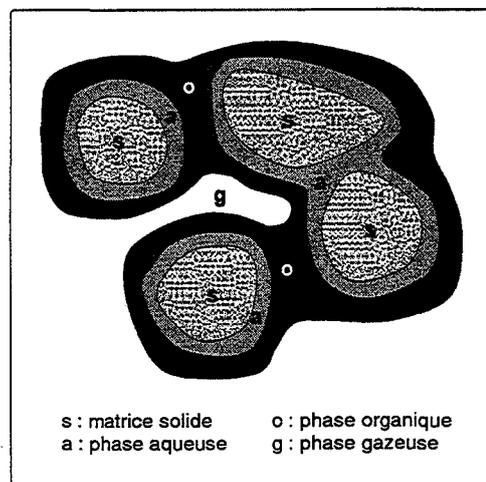


Fig. II.1.2: Schéma de principe illustrant la supposition du sol mouillé par l'eau

Cette approche suppose que d'une part, l'eau mouille les grains du sol, et que d'autre part, les hydrocarbures mouillent la phase aqueuse (fig. II.1.3.) Cette approche réduit les perméabilités relatives triphasiques aux perméabilités relatives diphasiques  $k_r(S)$  ainsi que les relations pression/saturation  $p(S)$  triphasiques aux relations diphasiques

$$p_c^{\alpha/\beta, \gamma} = f(S_\alpha)$$

pour la pression  $p_c^{\alpha/\beta, \gamma}$  [N/m<sup>2</sup>] dans la phase  $\alpha$  de saturation  $S_\alpha$  par rapport à la phase  $\beta$ , sur le substratum  $\gamma$ . L'estimation des perméabilités triphasiques, pour en déduire la perméabilité relative d'une phase à partir des saturations des deux autres phases  $k_{r,\alpha} = f(S_\beta, S_\gamma)$ , à été étudiée par Jégou (Jégou, 1997).

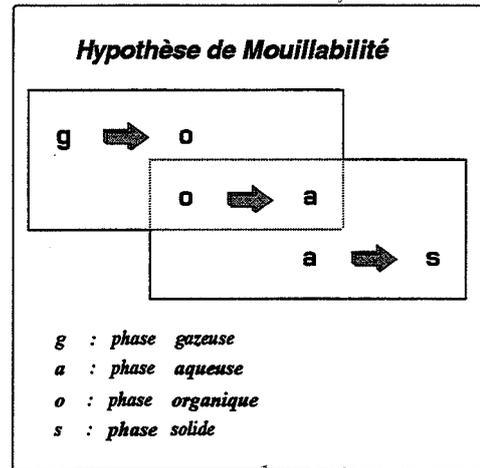


Fig. II.1.3: Réduction d'un système ternaire à deux sous-systèmes binaires

### II.1.5.5 Equation de l'écoulement polyphasique-multiespèce

La teneur en phase  $\alpha$  ( $\varepsilon_\alpha$ ) est égale au volume de la phase  $\alpha$ , rapporté au volume total de l'échantillon

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\text{volume de la phase } \alpha}{\text{volume d'échantillon du sol}}$$

La saturation en phase  $\alpha$  ( $S_\alpha$ ) est égale au volume de la phase  $\alpha$ , rapporté au volume total des pores

$$S_\alpha = \frac{\text{volume de la phase } \alpha}{\text{volume total des pores}}$$

Dans le domaine de l'écoulement polyphasique, on appelle parfois la teneur en phase  $\alpha$  ( $\varepsilon_\alpha$ ) "fraction de volume" (même si la saturation est aussi une fraction de volume)

A partir de l'approche générale pour l'écoulement polyphasique, nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_\alpha \rho_\alpha) = -\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \vec{v}_\alpha) + I_\alpha$$

Eq. (II.1.14)

avec :

- $\varepsilon_\alpha$  [-] : teneur en phase  $\alpha$
- $\rho_\alpha$  [kg/m<sup>3</sup>] : masse volumique de la phase  $\alpha$
- $\vec{v}_\alpha$  [m/s] : vitesse d'écoulement dans la phase  $\alpha$
- $I_\alpha$  [kg/m<sup>3</sup>s] : terme source entrant (+) ou sortant (-) de la phase  $\alpha$

on développe les équations de flux pour chacune des phases  $\alpha$ , aqueuse (a), organique (o) et gazeuse (g). Elles sont du type :

$$\omega \frac{\partial}{\partial t}(S_\alpha) = \vec{\nabla} \cdot (K_{ij}^\alpha (\vec{\nabla} h_\alpha + \rho_\alpha z)) + \frac{I_\alpha}{\rho_\alpha}$$

où :

$h_\alpha$  [m] : charge

$z$  [m] : cote

$K_{ij}^\alpha$  [N/m] : tenseur de mobilité de la phase  $\alpha$ .

Les relations constitutives expriment la relation (van Genuchten, 1980) entre la saturation  $S_\alpha$  et la pression ou cote capillaire  $h_\alpha$  d'une phase, pour les deux sous-systèmes binaires présentés en fig. II.1.3 :

$$S_\alpha = [1 + (\zeta h_\alpha)^n]^{-m}$$

Eq. (II.1.15)

où  $\xi$  et  $n$  sont des paramètres qui dépendent du milieu,  $m = 1 - 1/n$  et  $h_\alpha < 0$ .

Ce modèle de sol est le modèle le plus simple qui soit valide pour un sol sans éléments structuraux particuliers. Il y a cependant des modèles de sol qui prennent en compte les structures, les agrégats ou le gonflement du sol (Zeiliger, 1996).

Pour la modélisation du transport des hydrocarbures à l'intérieur d'une phase et de la dissolution dans la nappe aquifère, il faut faire une extension de cette approche vers l'écoulement polyphasique-multiespèce, ce qui conduit selon Kueper et Frind, 1992 à la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \omega_k^\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_\alpha \rho_\alpha \omega_k^\alpha \vec{v}_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k^\alpha = I_k^\alpha + E_k^\alpha$$

Eq. (II.1.16)

où :

$\omega_k^\alpha$  [-] : la fraction de masse de la composante  $k$  dans la phase  $\alpha$ .

$J_k^\alpha$  [kg/m<sup>2</sup>s] : le flux non-advectif de la composante  $k$  dans la phase  $\alpha$ , c'est-à-dire, le flux diffusif/ dispersif.

$I_k^\alpha$  [kg/m<sup>3</sup>s] : le flux diffusif d'une composante  $k$  au travers des limites de la phase  $\alpha$ .

$E_k^\alpha$  [kg/m<sup>3</sup>s] : l'apport externe de la composante  $k$  à la phase  $\alpha$  par transformation biologique et non-biologique.

Cette relation est détaillée en Annexe A.

### II.1.6 Transport réactif

Selon le type de polluant et la nature du milieu dans lequel il se propage, en plus des phénomènes de transport du polluant, on doit considérer les interactions avec le milieu et celles existant entre les espèces transportées. Puisqu'il y a des "sources" ou des "puits" pour les espèces transportées dans la phase liquide (par exemple, transformation des hydrocarbures en métabolites), le polluant n'a plus un comportement conservatif. Le phénomène de transport réactif de l'espèce  $k$  dans la phase  $\alpha$  peut être formalisé par l'équation suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{rev}} - \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{ir}} = \vec{\nabla} \cdot (D_{ij} \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{v})$$

(a)
(b)
(c)
(d)
(e)

Eq. (II.1.17)

où les termes (a), (b), (c), (d), (e) ont les significations suivantes :

- (a) : variation de la concentration du polluant en phase liquide en fonction du temps
- (b) : l'adsorption du polluant par la phase solide
- (c) : la réaction entre un espèce du polluant et un substratum (par exemple le solide)
- (d) : le transport dispersif du polluant
- (e) : le transport convectif du polluant

L'annexe A indique que cette équation est déduite de l'équation polyphasique-multiespèce et en présente différentes formulations pour le cas monophasique en zone non-saturée en une dimension, pour la zone saturée et pour le cas d'un équilibre du polluant entre la phase solide et la phase liquide (rétention réversible). Dans ce travail, nous effectuons des hypothèses concernant le comportement conservatif du polluant. En faisant des hypothèses pessimistes, nous ne prenons donc pas en compte les phénomènes du transport réactif, leur influence spatio-temporelle sur l'extension d'un "nuage" de pollution est difficilement quantifiable.

En cas de pollution par les hydrocarbures, les phénomènes de biodégradation interviennent. Dans le cas de l'accident type utilisé dans le cadre de ce travail des expériences ont été effectuées sur le site d'étude pour stimuler les microorganismes pour la dépollution du sol. Les résultats indiquent qu'il est possible de négliger ces effets dans le cas de l'analyse de la propagation du polluant.

La modélisation de ces phénomènes est un domaine bien complexe du fait des interactions existant entre les microorganismes, le sol et le régime hydraulique. Les paramètres physiques et chimiques qui interviennent dans ce phénomène sont difficilement quantifiables (Schaefer, 1992 ou Côme, 1996).

### II.1.7 Caractéristiques du milieu dans lequel se propage la pollution

La connaissance des mécanismes physiques guidant la propagation de pollutions n'est pas suffisante. Il est important de connaître aussi le milieu qui est le siège de cette propagation.

Les milieux aquifères sont des milieux hiérarchisés structurés (Dieulin, 1994). Ils consistent en structures autosimilaires emboîtées qui peuvent donc être décrites par des éléments fractals. Ces structures existent à l'échelle du grain, des pores, des hétérogénéités de base et à l'échelle de la structure sédimentaire.

Dans la nappe alluviale, concernée par le site d'étude, les hétérogénéités principales du milieu aquifère (en zone saturée et en zone non-saturée) ont une structure en forme de lentille, (fig. II.1.4). Selon les conditions de dépôt des alluvions, ces lentilles peuvent contenir de l'ar-

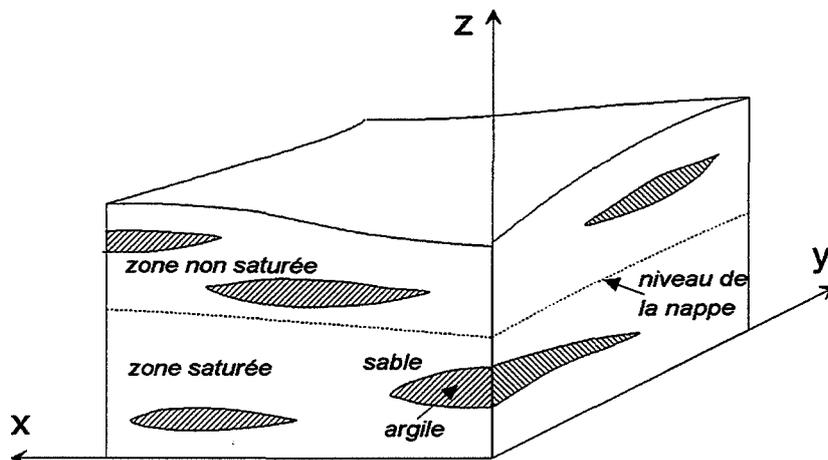


Fig. II.1.4: Milieu alluvial hétérogène (Représentation schématique)

gile ou bien des formations graveleuses (lentilles sablo-graveleuses).

S'il s'agit de lentilles d'argile, ces hétérogénéités constituent un milieu moins perméable à l'infiltration des hydrocarbures en zone non-saturée et au transport des polluants solubles en zone saturée. Dans le cas des lentilles graveleuses, cela peut représenter des chenaux d'écoulement préférentiel.

Dans la zone non-saturée, où les hydrocarbures forment une phase à part, on se trouve dans les conditions suivantes : Dans les zones à faible perméabilité, le cheminement du polluant est freiné en direction verticale. Il peut pénétrer dans la lentille seulement pour une pression capillaire élevée, appelée pression de seuil ou de déplacement (Molenaar, 1995). La majorité du polluant va suivre les contours de la lentille. Une fois que le polluant est arrivé au bord de la lentille, il va suivre un chemin plutôt vertical avant d'atteindre la nappe.

Dans la zone saturée, les polluants se trouvent sous forme dissoute dans l'eau. Entraînés par l'eau, les hydrocarbures vont être guidés autour des lentilles d'argile.

Le plus souvent, les mesures de la perméabilité n'existent pas en nombre suffisant pour utiliser les méthodes géostatistiques permettant de localiser les hétérogénéités du milieu. Les méthodes géophysiques (profils de sondages électriques) donnent la résistivité électrique des terrains et permettent ainsi de localiser les hétérogénéités en subsurface lorsqu'elles sont assez étendues en distinguant les zones de perméabilité différente. (Cara, 1989, Bhattacharya and Patra, 1968). L'interprétation de ces mesures n'est cependant pas toujours facile, surtout en présence d'argiles très conductrices mais très peu perméables.



## II.2 Analyse quantitative des phénomènes pour la mise en oeuvre de modèles de simulation

En vu d'établir un outil d'aide à la décision, il nous faut établir d'abord un modèle conceptuel à partir des lois et mécanismes physiques mis en jeu. Il faut implémenter ce modèle sur un système de calcul, ayant des ressources limitées en terme de mémoire et de vitesse d'exécution. L'approche mathématique envisagée pour le traitement des équations aux dérivées partielles, qui décrivent la propagation des pollutions, sous-tend des problèmes de résolution numérique, de discrétisation de l'espace et du temps (différences finies, éléments finis, et volumes finis). La discrétisation spatio-temporelle du système étudié conduit à la résolution du système d'équations.

### II.2.1 Modèle conceptuel

Le modèle conceptuel est le modèle qui résulte de l'analyse du phénomène que l'on veut représenter. Pour simuler l'écoulement de la phase huileuse à partir du sol et en direction de la nappe, on utilisera (fig. II.2.1) un modèle d'écoulement polyphasique à 1 dimension en zone

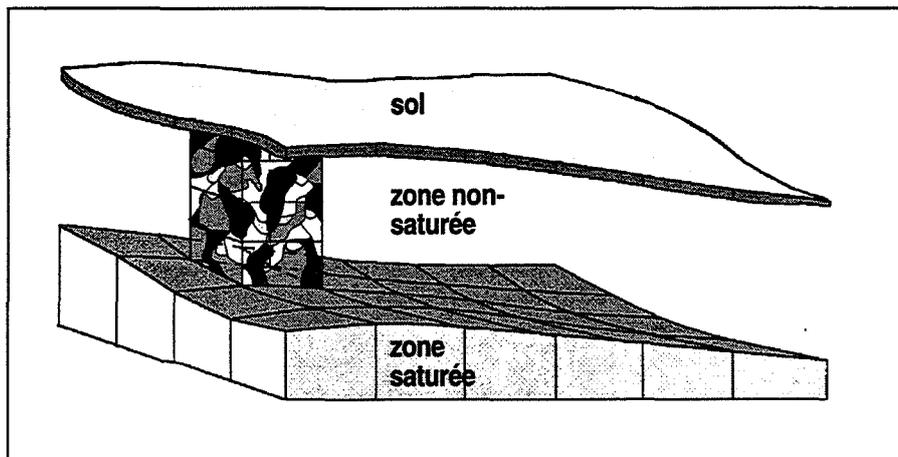


Fig. II.2.1: Modèle conceptuel pour modéliser la propagation des hydrocarbures

non-saturée. En zone saturée, nous avons besoin d'un modèle qui peut simuler le transport convectif et la dispersion des hydrocarbures dissouts. Il nous faut au moins un modèle en deux dimensions ou mieux en trois dimensions pour représenter le cheminement du polluant en direction verticale dans la nappe.

### II.2.2 Modélisation mathématique des phénomènes d'écoulement et de transport

Des applications de recherche actuelles dans le domaine des écoulements en milieu poreux portent sur la régularité et l'unicité de l'écoulement miscible en milieu poreux (Mikelic, 1993).

Pour la modélisation d'un écoulement à plusieurs phases, seuls les problèmes de modélisation à deux phases ont été résolus de manière satisfaisante du point de vue mathématique. Des travaux actuels sur l'écoulement biphasique portent sur l'homogénéisation du milieu, pour trouver des paramètres qui soient représentatifs du milieu hétérogène (Bourgeat et Mikelic, 1994), (Mikelic, 1995).

La modélisation quantitative de ces phénomènes d'écoulement utilise actuellement les méthodes de l'analyse numérique. Il faut donc approximer la solution en utilisant les méthodes de discrétisation, de résolution de systèmes d'équations algébriques et d'optimisation que propose l'analyse numérique.

Il existe ainsi des modèles d'écoulement triphasique qui sont proposés dans le domaine des pétroliers et des hydrogéologues et implémentés dans des logiciels de simulation. Malgré un manque des données expérimentales, ils représentent les phénomènes hydrogéologiques d'une manière satisfaisante.

Il faut toutefois remarquer qu'il y a souvent des notations différentes :

- En mathématique, on parle d'un écoulement à deux phases miscibles alors qu'en hydrogéologie, on parle de deux composantes d'une seule phase. La définition d'un système polyphasique est rappelée au chapitre II.1.
- Le mélange mécanique turbulent en mathématique correspond à la dispersion cinématique en hydrogéologie.

Nous proposons par la suite différentes catégories des modèles en indiquant le contexte dans lequel ils sont utilisés.

### II.2.3 Problème direct et problème inverse

Le problème direct se pose si on résout une équation de propagation où les paramètres du système (perméabilité par exemple) sont connus. Le problème inverse se pose si on veut déterminer les paramètres du système à partir de valeurs expérimentales pour ensuite les utiliser dans les équations de propagation. (Bonnet, 1982 Busch et al., 1993). Ces deux notions interviendront pour une analyse des coefficients des dispersivités.

## II.2.4 Approches Eulerienne et Lagrangienne

Les formes Euleriennes et Lagrangiennes (Bear and Bachmat, 1990) permettent d'établir une équation qui modélise un phénomène de transport :

Dans le cas de *la forme Eulerienne*, où la dérivée partielle du paramètre mesuré (par exemple de la concentration  $\frac{\partial c}{\partial t}$ ) indique la variation par rapport au temps en un point fixé dans l'espace, on résout l'équation avec un maillage fixe avec les méthodes des différences finies ou celle des éléments finis.

On peut également exprimer le transport d'un polluant sous *la forme Lagrangienne*, où la dérivée substantielle  $\frac{\delta c}{\delta t} = \frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c$  représente la variation de concentration  $c$  le long d'une ligne de courant du fluide. On a ainsi un maillage qui se déforme ou un système de coordonnées qui se déplace. En utilisant cette approche, il est possible de suivre le chemin des particules ("Particle tracking").

L'avantage de l'approche Eulerienne est le maillage fixe, et l'efficacité dans la résolution de problèmes qui sont caractérisés par des phénomènes dispersifs. La dispersion et les oscillations numériques ainsi que la limitation à des pas de temps et d'espace restreints qui sont plus importants, sont les inconvénients essentiels de cette approche.

L'approche Lagrangienne est mieux adaptée à des problèmes dominés par la propagation des fronts nets (advection), il y a moins d'oscillation et de dispersion numérique (Zheng, 1990).

Le modèle Mike-SHE du Danish Hydraulic Institute (1995) utilise l'approche Eulerienne pour la solution de l'équation advective-dispersive. Le modèle MT3D de Zheng (1990) utilise une approche mixte pour la solution de l'équation advective-dispersive : Le terme dispersif, ainsi que le terme source sont résolus en coordonnées Euleriennes, le terme advectif est résolu en coordonnées Lagrangiennes. Les méthodes mixtes Eulerienne-Lagrangienne ont été développées, entre autres, par Russel and Wheeler (1983). De telles approches peuvent être résolues par des méthodes d'analyse numérique.

Puisque nous nous intéressons à l'évolution de la concentration du polluant en un point fixe et aux phénomènes dispersifs, l'approche Eulerienne sera utilisée dans le cadre de ce travail.

## II.2.5 Modèles numériques

Du point de vue de l'utilisateur du modèle, les caractéristiques génériques des modèles numériques pour la simulation des phénomènes hydrologiques sont les suivantes :

- Numérotation globale des points de discrétisation du domaine et, dans le cas des éléments finis, numérotation locale des sommets des éléments pour l'introduction dans les matrices du système des équations.
- Les paramètres à introduire sont : la discrétisation de l'espace qui correspond à la définition des noeuds et des éléments, les propriétés du milieu, les conditions initiales et conditions aux limites, les paramètres de la simulation.

Du point de vue du concepteur du modèle, les points suivants sont à considérer :

- La construction des matrices comprend notamment : la construction de la matrice des éléments, l'assemblage de la matrice globale et l'entrée des conditions limites dans la matrice globale.
- La résolution du système d'équations.
- Le pas de temps en régime transitoire doit être contrôlé. En général, on commence avec un pas de temps petit et on augmente sa valeur progressivement.
- L'établissement d'un bilan de masse. Cette opération est un moyen de contrôle de la précision du calcul. En général, on essaie de minimiser l'erreur de bilan de masse.

### II.2.6 Modes de discrétisation

a) Vis-à-vis du *domaine de discrétisation*, différents modes de discrétisation de l'espace sont envisageables.

- Les différences finies sont généralement utilisées lorsqu'on peut discrétiser le domaine d'étude en sous-espaces réguliers et identiques.
- La méthode des éléments finis est préférable pour traiter les domaines de géométrie quelconque (mailles triangulaires). En trois dimensions, les éléments sont par exemple des tétraèdres, des hexaèdres ou des prismes. Cette méthode se trouve par exemple dans Dhatt et Touzot (1984) ou Zienkiewicz et Taylor (1989).
- Les volumes finis permettent, de travailler sur des maillages «mixtes», combinant à la fois des mailles triangulaires et des mailles rectangulaires.

Si on souhaite affiner le maillage à certains endroits (observation de phénomènes à une échelle plus fine compte-tenu des données disponibles), il est recommandé d'utiliser des éléments finis ou des volumes finis triangulaires.

b) Vis-à-vis de l'*équation différentielle*, il n'existe pas de règle générale en ce qui concerne le choix du mode de discrétisation quant au type d'équation : elliptique, parabolique, hyperbolique.

c) Si on considère l'évolution dans le temps des phénomènes évoqués (équations paraboliques ou hyperboliques), l'opération de discrétisation doit être effectuée aussi dans le temps. Souvent, on discrétise dans un premier temps les termes spatiaux, et ensuite le terme tempo-

rel. En général, pour discrétiser ce dernier, on utilise la méthode des différences finies. Un bref aperçu des méthodes de discrétisation se trouve dans Annexe C.

### II.2.7 Modélisation de l'écoulement polyphasique/multi-espèce

Nous avons vu que l'application des techniques de modélisation à l'infiltration des hydrocarbures dans le sous-sol demande un code de simulation de l'écoulement polyphasique/multi-espèces, permettant de modéliser trois phases non miscibles entre elles (air, eau et hydrocarbures), et les échanges entre ces trois phases. La résolution du système d'équations devrait permettre de déterminer l'évolution de la teneur en hydrocarbures et de la teneur en eau en chaque point de la zone d'étude en fonction du temps. Cette représentation des phénomènes permet de prendre en compte d'autres effets comme la pluie et l'évaporation dans la zone non-saturée. Kueper et Frind (1992) donnent un résumé de la théorie de l'écoulement polyphasique / multiespèce.

Toutes les phases sont supposées continues. Le matrice solide comprend différentes phases liquides  $\alpha$  qui sont non miscibles. Chacune des phases peut consister en différentes espèces (composants)  $k$ . On établit un bilan de masse pour chacun des composants  $k$  dans les différentes phases  $\alpha$ . Selon l'aspect auquel on s'intéresse, il y a deux possibilités pour traiter les équations résultantes :

a) Dans le cas de l'analyse de l'écoulement polyphasique : on étudie seulement l'écoulement des différentes phases sans regarder la composition de ces phases et sans prendre en compte un échange éventuel entre ces phases. Cela nous amène d'établir pour chacune des phases  $\alpha$  la somme de ses composants.

b) Dans le cas de l'étude du "transport multi-espèce" (approche compositionnelle) : l'accent est mis sur le comportement des espèces  $k$ . Contrairement au cas précédent, on établit dans ce cas pour chacun des composants  $k$  la somme sur les phases  $\alpha$ . (Kueper and Frind, 1992). En supposant un équilibre local, la distribution des espèces entre les phases est donnée par des lois empiriques de la thermodynamique (loi de Henry, loi de Raoult, courbes isothermiques).

Des problèmes particuliers pour la modélisation de l'écoulement polyphasique apparaissent:

- Pour les courbes de succion, qui sont des relations entre la pression négative à l'intérieur d'une phase  $\psi_\alpha$  et la saturation en la-dite phase  $S_\alpha$  dans le milieu considéré et pour l'estimation des perméabilités relatives. Dans le cas de trois phases liquides en présence, cas évident pour la modélisation des pollutions organiques, la mesure expérimentale est extrêmement difficile à obtenir. Pour cette raison, le contact entre les différentes phases doit faire l'objet d'hypothèses, qui ont été pré-

sentés en chapitre II.1. La validité de ces hypothèses est limitée et n'est pas encore vérifiée pour toutes les possibilités de saturation. En plus, on observe des phénomènes d'hystérésis selon le changement du régime : mouillage ou drainage.

- La perméabilité relative  $k_r$  est très difficile à mesurer. Pour cette raison, elle est souvent estimée à partir de la distribution de la taille des grains. Pour trois phases, on essaie de l'estimer à partir des valeurs de deux phases. Il y a cependant des travaux qui ciblent à déterminer  $k_r$  en fonction de la saturation de tous les phases liquides (Jégou, 1997). Des études théoriques indiquent, que l'anisotropie de perméabilité est une fonction de la saturation  $S$ . (Bear et al., 1987, Yeh et al., 1985, cité dans Kueper and Frind, 1992). Les phénomènes d'hystérésis peuvent également apparaître.
- Dans la plupart des cas, pour des sols et des conditions de drainage particuliers, il n'existe pas suffisamment de données de laboratoire et les méthodes de mesure fiables sont encore en développement (Schmid and Barczewski, 1994). Des expériences conduites à une échelle intermédiaire entre celle du laboratoire et du site naturel sont aussi en cours de développement. (Kobus et al., 1993)

## II.3 Modélisation de l'information qualitative liée aux risques

La complexité des phénomènes de pollution met en évidence la nécessité et la complémentarité de l'association des méthodes de simulation quantitatives de propagation avec les méthodes qualitative de raisonnement. En particulier, cette association est guidée par l'existence, la nature et distribution de l'information spatiale (Anker, Bourgois, Zelfani et Graillot, 1995).

Les informations qualitatives peuvent être traitées à l'aide de méthodes qui ne sont pas fondées sur des équations aux dérivées partielles et qui ne font donc pas référence de manière explicite aux notions spatio-temporelles.

Parmi ces méthodes, il y a les systèmes à base des connaissances. On modélise avec ces outils des connaissances qualitatives, on établit des règles d'inférence. A travers ces règles, on améliore les connaissances sur le système à modéliser.

### II.3.1 Modélisation qualitative d'un phénomène

La représentation qualitative d'un phénomène a été étudiée par Hernandez et Jungert (1996). Ici, la construction d'un modèle s'effectue à travers la représentation des connaissances sur le système observé, le problème principal étant de représenter ces connaissances qualitatives sur ce système d'une manière appropriée.

### II.3.2 Exemples des paramètres qualitatifs induits par un phénomène de pollution

On distinguera les paramètres dits continus des paramètres symboliques. Les paramètres "continus" sont par exemple la sensibilité de la population vis-à-vis d'un risque, le poids qu'on donne aux aspects financiers pour décider de recourir à une filière particulière de dépollution ou bien les contraintes que représentent les différents points de vue (associations écologistes et exploitants industriels par exemple).

La texture du sol est un paramètre symbolique particulièrement important. Pour la modélisation en hydrologie/ hydrogéologie, on a besoin de connaître au mieux les propriétés du milieu, et cela pour une résolution spatiale adaptée à la variabilité spatiale des phénomènes physiques. Cependant, malgré l'effort en sondages de reconnaissance, cela est rarement le cas. Dans le meilleur des cas, on a un nombre limité d'essais. Par la résolution du problème inverse, on détermine les propriétés en un point précis du milieu aquifère étudié et par calage par rapport à une piézométrie de référence, on en déduit les propriétés pour les autres points.

Dans le cas d'absence de données de terrain, les seules informations disponibles sont les connaissances fournies par les cartes. En général, les informations disponibles sur une zone d'étude sont d'abord la texture du sol et la géologie. Par exemple, on sait que le domaine d'étude se situe dans une zone d'alluvions graveleuses comportant des lentilles d'argile ou que

l'aquifère est un milieu calcaire. On peut considérer ces informations comme des connaissances qualitatives (type de sol sableux et/ou graveleux). On peut en déduire des connaissances quantitatives (perméabilité, porosité), mais imprécises. On sait par exemple, que pour les sables fins et argileux, la perméabilité  $k$  varie entre  $10^{-5}$  et  $10^{-9}$  m/s ou que, pour la craie, la porosité efficace  $\omega_e$  varie entre 2 et 5 % d'après l'U.S. Geological Survey, cité en Castany (1982).

Des travaux dans le domaine du raisonnement spatial qualitatif ont permis d'élaborer des modèles pour la topologie (relations spatiales entre les objets du système étudié) et l'orientation. Quelques progrès récents en représentations qualitatives permettent d'évaluer la forme (par exemple, d'un objet géométrique) et le mouvement. Les problèmes traités font appel aux techniques d'inférence spatiale, d'identification de similarités et d'indexation symbolique (Hernandez et Jungert, 1996).

### II.3.3 Outils pour le traitement de l'information qualitative

Parmi la multitude des outils de traitement de l'information qui existent (réseaux neuronaux, programmation par contraintes, systèmes multi-agents, ...), nous examinons les possibilités d'application dans notre cas de pollution souterraine. Seuls les systèmes à base de connaissances et la physique qualitative laissent entrevoir de réelles possibilités d'application.

a) La plupart des systèmes à base des connaissances est basée sur l'enchaînement logique de règles d'inférence. Les bases théoriques de cette technique sont largement décrits par Farreny et Ghallab (1987). Des applications en hydrologie ont été développés, par exemple, par Crès et al. (1988) pour le choix d'une filière de traitement d'eaux usées ou Graillot (1990) pour le contrôle en temps réel pour des réseaux d'assainissement et la détection de dysfonctionnements.

Cette technique peut s'avérer utile dans différents cas :

- Souvent, les seules informations qui sont disponibles, sont des informations cartographiques qui indiquent les types des sols, qui conditionnent les propriétés hydrauliques. Dans un modèle quantitatif, nous avons cependant besoin des propriétés quantitatives pour la perméabilité ainsi que la porosité. Il nous faut alors un outil qui peut traduire ces informations symboliques en informations quantitatives.
- A la sortie d'un modèle qui doit servir à l'aide à la décision, nous avons des informations quantitatives, distribuées dans l'espace. Pour un objectif d'aide à la décision, il peut s'avérer utile de disposer de quelques règles qui peuvent interpréter les résultats d'un modèle quantitatif. C'est le cas inverse du premier cas, ou nous avons besoin d'une traduction des données quantitatives en informations qualitatives.

b) La physique qualitative exploite davantage les raisonnements sur le comportement des systèmes physiques qui peuvent être le siège des phénomènes physiques, chimiques, hydrodynamiques.

Il s'agit de simplifier la description d'une structure afin qu'on puisse utiliser des techniques algébriques simples et quand même prédire les changements d'état importants (Puppe, 1988). Si le comportement du système change qualitativement, par exemple, le changement d'état eau liquide vers eau vaporisée, l'approche qualitative devient applicable. La simulation qualitative est une méthode qui décrit le comportement global d'un système où l'on examine les relations existant entre les différents paramètres intervenant. Il est possible d'inclure un raisonnement spatial dans la physique qualitative (Joskowicz and Sacks 1991), (Forbus et al. 1991).

Les modèles les plus connus sont ceux de De Kleer & Brown, de Kuipers et de Forbus. Les caractéristiques principales (Laurent et Vescovi, 1992) de la physique qualitative sont les suivants :

- La simulation qualitative est une méthode qui s'applique aux systèmes qui sont mathématiquement difficiles à décrire ou aux systèmes pour lesquels la description mathématique nécessite des paramètres du phénomène étudié trop soumis aux erreurs de mesure.
- Il est possible de faire une simulation même si la connaissance du système est incomplète.
- En général, les modèles qualitatifs sont *complets*, mais pas *corrects*. Il est donc possible d'obtenir des résultats qui n'aient pas de réalité physique.
- C'est une méthode qui n'est pas toujours consistante dans le formalisme qu'elle utilise (par exemple, manque de transitivité, associativité dans certaines opérations, hypothèses auxiliaires)
- C'est une méthode qui peut produire de l'incertitude (addition qualitative), ce qui conduit facilement à une "explosion combinatoire" : Pour réaliser une simulation, il faut examiner tous les comportements possibles et établir une typologie de cas.
- Le temps n'est pas explicitement représenté.

Selon Page (1991), la simulation qualitative a été utilisée jusqu'à présent uniquement pour des problèmes relativement simples (diagnostic des dysfonctionnements des réseaux techniques (électricité, eau), (Hutinet et al., 1994), basé sur le formalisme de Kuipers, elle n'a pas encore atteint une grande importance dans la pratique.

#### II.3.4 Application à l'analyse de texture d'un sol

Pour le cas où on ne dispose pas de valeurs expérimentales pour les données d'entrée dans les modèles (perméabilité ou des courbes de succion), il est possible (Rawls et Brakensiek, 1985), Saxton et al. (1986), de déterminer ces paramètres à partir de la texture (pourcentages des argiles, sables, ...), qui représentent donc des informations symboliques. A partir des triangles qui indiquent le pourcentage des fractions de sable, de limons et d'argile, on peut évaluer les propriétés hydrauliques. La figure II.3.1 présente un tel triangle des textures. Zeiliger (1996) détaille les types des sols selon les éléments structuraux.

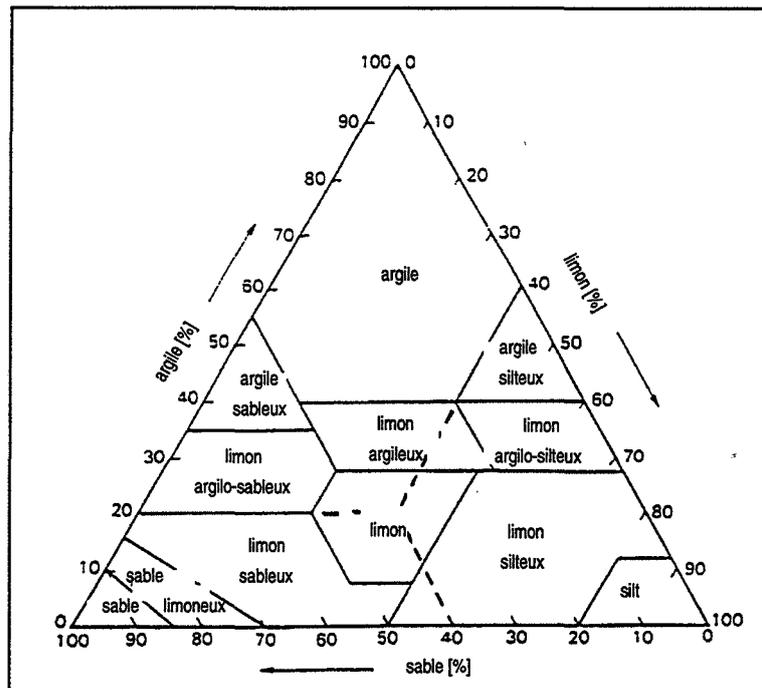


Fig. II.3.1: Triangle des textures pour la détermination des propriétés hydrauliques d'un sol (Source : d'après Wild, 1993)

Pour conclure sur les propriétés hydrauliques d'une zone d'étude à partir de ce type d'information, nous proposons une base des connaissances sur le bon choix des relations empiriques pour ces propriétés hydrauliques.

Cette base de connaissances pourra être établie à partir des critères suivants :

- 1) Quel est le paramètre hydraulique à estimer (Porosité efficace, perméabilité à saturation, perméabilité non-saturée)
- 2) Quel est le système de classification (US, canadien, européen)
- 3) Quel type d'information est disponible ? (courbe granulométrique, information cartographique, localisation sur un triangle de texture)
- 4) Détermination de la texture à partir de la courbe granulométrique
- 5) Localisation de texture sur le triangle
- 6) Interpolation du paramètre hydraulique souhaité

### II.3.5 Applicabilité des outils qualitatifs

Dans le domaine de l'hydrologie/hydrogéologie, Forbus (1984), a développé en particulier, une application dans le domaine de l'interprétation géologique.

La propagation de pollution en milieu souterrain est un phénomène trop compliqué pour pouvoir être modélisé par ce type d'outil, et ceci pour deux raisons principales :

1) Le raisonnement spatial qualitatif reste limité à un petit nombre de simples distinctions de cas, le temps n'intervient pas explicitement.

2) Les propriétés fortement non-linéaires et les hypothèses concernant le modèle du sol pour la pollution non-soluble ainsi que les échelles et les coefficients liés à la dispersion de polluants ne peuvent pas être prises en compte.

L'analyse multicritère, le raisonnement logique et l'application de bases de règles de production peuvent contribuer à l'amélioration des systèmes d'aide à la décision dans le domaine de la propagation des pollutions.



## II.4 Bases de données géographiques et outils d'analyse spatiale

Nous avons vu que pour les phénomènes continus spatiaux, ce qui est le cas pour un modèle de transport dispersif en zone saturée, les outils qualitatifs ne peuvent gérer qu'un nombre très limité de valeurs. Pour un grand nombre de données correspondant par exemple, à 100x100x10 valeurs obtenues par discrétisation dans les directions x,y,z, les Systèmes d'Information Géographique (SIG) peuvent rendre de réels services. Ils sont en particulier très utilisés dans les domaines de l'aménagement, de l'hydrologie et de la protection de l'environnement. Selon le type d'application envisagé, les SIG ou SIRS (Systèmes d'Information à Références Spatiales) permettent de disposer de nombreuses fonctions de gestion des données et d'analyse spatiale. En plus de leur capacité d'analyse, les SIG permettent de saisir, d'organiser et de mettre à jour l'information géographique. Les bases de données géographiques d'un SIG peuvent être organisées en couches thématiques, correspondant aux paramètres considérés. A l'aide de fonctions d'analyse spatiale appropriées, on peut évaluer les résultats d'un modèle de simulation (pour détenir des informations sur la zone d'influence d'un nuage de pollution par rapport à la position de captages d'AEP dans certaines conditions géologiques et hydrologiques ou sur les points de la zone d'étude atteints par la pollution au même moment (isochrones). Ce type d'information représente un ensemble de variables dites synthétiques, utiles à la prise de décision pour le suivi d'une pollution et la mise en place de mesures de protection.

L'échange de données entre un modèle de simulation et la base des données géographiques représente un intérêt particulier. Les informations que contient la base de données géographique sont souvent d'origine différente (multi-source). Par exemple, l'information sur les types de sols peut provenir de cartes pédologiques, leur occupation peut être renseignée à partir des photos aériennes et les informations sur le sol peuvent provenir des raisonnements effectués sur les triangles de texture.

### II.4.1 Modélisation hiérarchique des données dans un système d'information géographique

Pour organiser les informations à introduire dans un SIG, on distinguera plusieurs niveaux de données :

#### *a) Objets naturels*

Ce sont les phénomènes réels qu'on veut modéliser (une rivière, les propriétés du sol, une ligne de chemin de fer, ...). Les thèmes sont un assemblage logique de ces objets géographiques qui ont des propriétés communes (par exemple, les rivières et les canaux, qui sont des cours d'eau) ou identiques (par exemple, les niveaux topographiques).

### b) Éléments thématiques

Ce sont les données qui se retrouvent dans une couverture ou une couche thématique (exemple : épaisseur du sol, carte de perméabilités, ...). Selon l'objet modélisé, ces éléments peuvent consister en des données points, linéaires ou surfaciques.

### c) Tableaux attributaires

A chaque élément correspond un ensemble d'attributs qui permet de repérer ou d'identifier l'élément dans la couche thématique et sa topologie, le cas échéant. Il peut s'agir d'attributs géorelationnels.

### d) Détails sur les attributs

Les attributs peuvent contenir de l'information de détail comme par exemple des tableaux symboliques qui peuvent eux-mêmes contenir des valeurs qualitatives (type de sol), et d'autres caractéristiques plus orientées vers l'implémentation informatique (type de données, besoin en espace, format d'affichage).

## **II.4.2 Modes de représentation des données pour l'étude d'une pollution**

Pour pouvoir modéliser le grand nombre de propriétés et de relations existant entre les objets spatiaux, il faut introduire des types de données adaptés. Il faut d'abord distinguer deux catégories majeures de données : les données qui représentent une localisation dans l'espace, et des données qui associent des propriétés à ces objets.

### a) Données spatiales vectorielles

Les données vectorielles ont un point d'origine, une valeur scalaire et une orientation. Les données auxquelles on peut attacher une topologie, sont les suivantes :

- *Données point.* Ces données correspondent à une localisation exacte dans l'espace, une paire de coordonnées x et y leur est attribuée. On retrouve ce type de données pour la représentation des puits d'alimentation en eau menacés par la pollution, par exemple.
- *Données linéaires.* Ce sont les données, auxquelles une topologie "réseau" est attachée. Ce type de données est utilisé pour représenter la ligne ferroviaire, la route nationale, le réseau hydrographique et les réseaux d'égouts susceptibles d'être envahis par la pollution.
- *Données surfaciques.* Ce sont des éléments bidimensionnels utilisés pour représenter des objets qui ont une extension dans deux dimensions. Nous utilisons ce type de données pour la représentation des bâtiments et des cours d'eau importants. La topologie qui leur est attachée, sert à déterminer, par exemple, si le nuage du polluant peut atteindre la zone d'habitation.

Actuellement, les éléments volumiques sont rarement représentés dans les SIG. L'altitude (troisième dimension) est souvent prise en compte sous forme d'attribut. Dans l'application considérée, cette possibilité a été utilisée pour représenter les niveaux du sol, du substratum et celui de la nappe.

**b) Données spatiales "raster"**

Les données raster sont des données sans origine ni orientation. Pour obtenir des données raster, tout le domaine modélisé est réparti en une grille à deux dimensions, à chacun des 'pixels' est attribuée une valeur correspondant au paramètre modélisé. On stocke une valeur par pixel du domaine modélisé. Nous pouvons l'utiliser par exemple pour représenter les niveaux du sol, du substratum et les perméabilités calées sur la zone d'étude pour l'échange des données avec le logiciel de simulation.

**c) Données attributaires**

Ce sont des données qui sont attribuées aux données localisées dans l'espace. Elles peuvent représenter une information quelconque, aussi bien qualitative que quantitative. La relation avec les données graphiques est établie sous forme d'un tableau. On peut les utiliser pour représenter les valeurs altimétriques ou pour les débits pompés aux points de la pollution.

**II.4.3 Construction de la base de données géographiques**

La construction de la base de données compte trois étapes importantes : la spécification de la base des données, la numérisation des données et leur géoréférenciation.

**a) Spécification de la base des données**

La base des données doit assurer les fonctions suivantes :

- *Détermination de la zone d'étude* : il s'agit de localiser la zone d'étude où l'accident type est arrivé et de limiter la zone hydrologique concernée.
- *Identification des éléments géographiques et de leurs attributs*. Ici, il faut déterminer tous les objets et leurs propriétés qui doivent être modélisés.
- *Organisation des couches thématiques* selon les couvertures des différents thèmes (réseau hydrographique, points d'eau, propriétés du sol, etc.)
- *Définition des valeurs, classes de valeurs ou codes des attributs*. Pour les paramètres qui représentent une altitude (niveau du sol, substratum, piézométrie), il est nécessaire d'adopter un niveau de référence (niveau NGF).
- *Choix du système des coordonnées*. Les systèmes de référence géographique utilisent normalement des coordonnées sphériques en degrés de longitude et de latitude. Cependant, sur une carte, on préfère représenter les distances en unités métriques. Il faut donc choisir un système de projection : Coordonnées Lambert II étendu, la plupart des données géographiques du sud de la France utilisant ce système de géoréférenciation.

**b) Numérisation des données**

Cette étape comporte les points suivants :

- *Introduction des données spatiales dans la base des données géographiques*. Cette étape consiste à digitaliser les éléments souhaités (table à digitaliser ou scanner) pour aboutir à une couver-

ture du type vecteur.

- *Identification et édition des erreurs.* La couverture digitalisée contient normalement des erreurs comme des polygones non fermés ou des noeuds mal placés.
- *Création de la topologie.* Par cette opération, nous établissons les relations spatiales entre les éléments digitalisés. En utilisant la notion de la topologie, on peut déterminer, par exemple, quelles sont les parcelles du terrain concernées par la pollution.
- *Mise en relation des attributs et des données spatiales.* Une des caractéristiques des SIG est leur capacité à lier des données spatiales et attributaires. L'association d'une base de données relationnelle aux fonctionnalités graphiques ouvre la possibilité de l'analyse spatiale, pour créer d'une manière souple des nouvelles relations destinées à traiter un aspect spatial particulier du problème à résoudre.

### c) Géoréférenciation

Cette étape comporte les points suivants :

- *Création d'un fichier des points de repère.* Pour chaque couche thématique, au moins quatre points de coordonnées connues sont utilisés.
- A partir d'une couverture en unités de digitalisation (cm), la *géoréférenciation* est effectuée. Pour cette opération, nous utilisons des points de repère qui représentent des localisations pour lesquelles les coordonnées en Lambert II étendu sont connus.

D'autres modèles de données peuvent être utilisés dans le cadre de notre application :

- Couvertures basées sur le modèle raster : par cette méthode, on peut modéliser des phénomènes continus. On peut s'en servir pour l'analyse spatiale.
- Couverture TIN (Triangulated Irregular Network) pour construire le modèle numérique de terrain et l'altimétrie du substratum à partir des couvertures vectorielles des niveaux topographiques. Les détails concernant l'utilisation de cette fonction dans le cadre de notre application, sont reportés dans l'Annexe G.

#### II.4.4 Intérêt des fonctions d'analyse spatiale pour l'étude de la propagation des pollutions

Dans notre cas, l'analyse spatiale permet d'étudier les relations existant (par exemple de distance) entre les différentes données réparties sur la zone concernée par le phénomène de pollution à l'aide de modèles adaptés. Les fonctions ou primitives d'analyse spatiale existant dans les SIG, permettent de développer de nouveaux modèles pour représenter de nouvelles relations jusque là non identifiées (p. ex. de temps de transfert). Les résultats de l'analyse spatiale peuvent prendre la forme de paramètres statistiques ou de cartes ou encore des rapports permettant de synthétiser les données obtenues par simulation.

Un SIG adapté est ainsi en mesure de déterminer de manière automatisée des objets localisés géographiquement dans les zones d'influence des pollutions.

#### II.4.4.1 Fonctions d'analyse spatiale

Parmi les fonctions d'analyse spatiale, on distingue les fonctions locales, focales ou de voisinage et les fonctions zonales :

*Fonctions locales* : Ce sont des fonctions qui sont évaluées maille par maille. Ces fonctions peuvent être utilisées pour combiner les informations des différentes couches thématiques, par exemple pour déterminer l'épaisseur de l'aquifère à partir du niveau du sol et du substratum en un point particulier de la zone d'étude.

*Fonctions focales ou de voisinage* : Ce sont des fonctions de voisinage qui prennent en compte toutes les mailles dans un rayon défini. Ces fonctions servent par exemple, à déterminer, quels sont les objets d'une même classe se trouvant à une certaine distance du nuage du polluant.

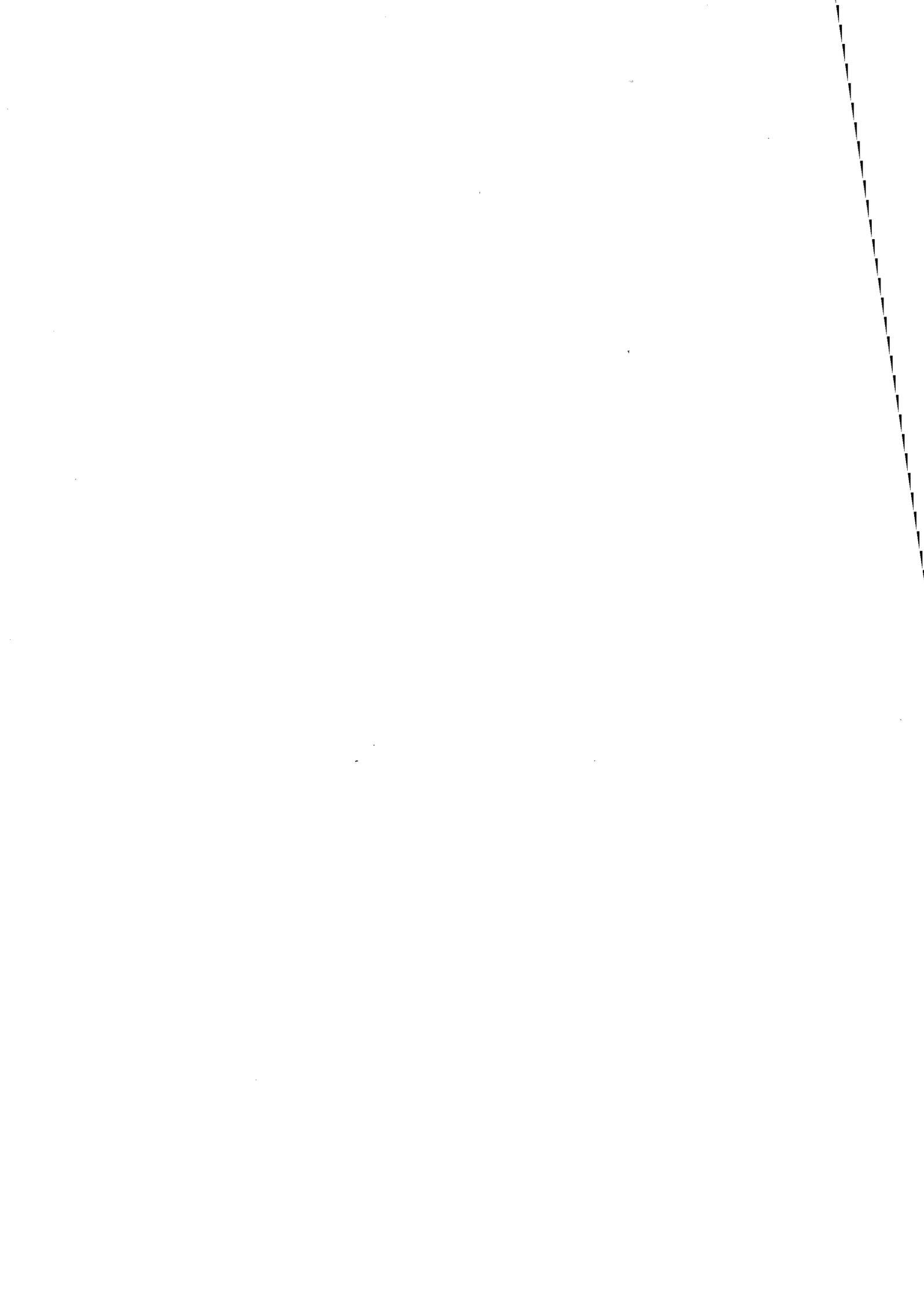
*Fonctions zonales ou aréales* : Ce sont des fonctions qui sélectionnent des parties à l'intérieur de la zone d'étude par un choix des valeurs (quantitatives ou qualitatives) d'un paramètre comme l'altitude, le type ou l'occupation du sol. On peut définir par ces fonctions les zones à risques en sélectionnant par exemple les zones se situant dans un rayon de 50 m autour des habitations pour ensuite évaluer les risques d'extension du nuage de polluant par rapport à cette zone.

#### II.4.5 Sources d'erreurs

La discrétisation spatiale de l'information contenue dans la base des données du SIG a été effectuée avec une taille des mailles identique à celle du modèle hydrodynamique pour limiter les sources d'erreurs liées aux effets multi-échelles (perte d'information par agrégation) des mailles (Laurent, 1996). La source principale des erreurs est essentiellement liée à la construction du modèle numérique de terrain (MNT). L'erreur maximale admise est de 2.5 m pour le niveau du substratum et celui du sol, elle est de 0.25 m pour la piézométrie d'octobre 1984 correspondant au régime des basses eaux.

#### II.4.6 Conclusion sur l'intérêt des SIG pour l'analyse des phénomènes de pollution

Les systèmes d'information géographique peuvent donc satisfaire un double objectif : D'abord, ils facilitent l'introduction des paramètres qui caractérisent l'aquifère dans les modèles hydrodynamiques. Ensuite, il est possible de superposer les résultats d'une simulation avec la base des données concernant l'aménagement du terrain (habitations, puits d'alimentation en eau potable, réseau d'égouts,...) pour "dégager" des variables synthétiques davantage exploitables pour l'aide à la décision.



## II.5 Comparaison synthétique de quelques outils dédiés à l'analyse de la propagation de pollutions en milieu souterrain

Pour répondre au problème d'aide à la décision dans le cas de pollution accidentelle par les hydrocarbures, le choix d'outils appropriés s'impose : modèles hydrodispersifs, modèles d'écoulement polyphasique et fonctions d'analyse spatiale (SIG).

La modélisation des raisonnements que l'on peut effectuer sur le comportement des systèmes physiques peut s'avérer utile. Même si elle a été très peu appliquée dans le domaine de la propagation des pollutions en milieu poreux.

Pour pouvoir effectuer une telle comparaison, il faut s'appuyer sur des critères adaptés à chaque catégorie d'outils : les modèles de transport du polluant dissout, d'écoulement polyphasique et les systèmes d'information géographique.

Cette comparaison entre les outils existant aujourd'hui doit permettre de construire une méthodologie adaptée pour répondre au problème posé par la représentation spatiale des risques de propagation de pollution par hydrocarbures en milieu souterrain.

### II.5.1 Critères pour le choix de modèles de transport en solution

Le tableau II.5.1 présente les critères utilisés pour le transport dissout en zone saturée :

- Pour la discrétisation spatiale de la zone d'étude, les éléments finis triangulaires sont souvent plus adaptés que les différences finies, surtout si elle présente des irrégularités (hétérogénéités). Pour la discrétisation dans le temps, la méthode des différences finies est utilisée dans la plupart des modèles.
- Un modèle multicouche est plus approprié pour un aquifère hétérogène qu'un modèle tridimensionnel, puisqu'on peut l'adapter plus facilement à la lithologie.
- En certains endroits (par exemple, un puits), il s'avère utile d'augmenter la résolution. Cela demande un maillage emboîté (mailles de taille variable).
- L'approche hydrodynamique à choisir dépend du problème à traiter. Pour connaître l'évolution en un point fixe, l'approche Eulerienne est préférable.
- Si on veut suivre l'évolution spatio-temporelle d'un nuage de polluant, il faut prendre en compte les mécanismes dispersifs. La modélisation des dispersivités  $\alpha_{LHH}$ ,  $\alpha_{THH}$ ,  $\alpha_{THV}$  est souhaitable. La diffusion moléculaire ne joue un rôle qu'à une échelle de l'ordre de quelques dizaines de cm.
- Du point de vue analyse numérique, on recherche toujours le meilleur compromis entre la vitesse de résolution du système d'équations et la robustesse c'est-à-dire l'efficacité de convergence.
- Le couplage d'un module de transport en zone saturée avec d'autres zones hydrologiques comme la zone non-saturée ou l'écoulement en surface constitue un avantage.
- Les sorties graphiques jouent un rôle déterminant pour mettre en valeur les résultats de simulation. Il ne faut donc pas les négliger.

<i>Discretisation du domaine</i>	<i>Méthode de discrétisation spatiale (et temporelle)</i>
	<i>Modèle multicouche Modèle tridimensionnel</i>
	<i>Définition du maillage : (Pré-processeur)</i>
	<i>Affinement local du maillage</i>
<i>Approche hydrodynamique</i>	<i>* Euler * Lagrange * Mixte</i>
<i>Phénomènes physiques de transport pris en compte</i>	<i>* convectif * diffusif * dispersif : isotrope ou symétrie axiale</i>
<i>Analyse numérique</i>	<i>Méthode de résolution des équations * vitesse * robustesse</i>
<i>Couplage vers d'autres modules</i>	<i>Interfaçage pour l'échange des données</i>
	<i>Possibilité d'extension vers d'autres modules : * Zone non-saturée * Modèle d'évaporation * Ecoulement en surface * Neige</i>
	<i>Possibilité des sorties graphiques (Post-processeur)</i>

Tab. II.5.1 : Critères pour le choix d'un modèle de transport du polluant dissout

### II.5.2 Critères pour le choix de modèles d'écoulement polyphasique

Les critères de choix pour modéliser la propagation des hydrocarbures légers dans la zone non-saturée sont indiqués dans le tableau II.5.2.

- Selon le cas, pour modéliser un phénomène d'écoulement, il n'est pas nécessaire d'utiliser un modèle tridimensionnel, d'autant plus, que la validation d'un tel modèle est encore bien plus difficile que pour les modèles à une ou deux dimensions.
- Le modèle conceptuel, avec lequel on peut modéliser le phénomène auquel on s'intéresse, doit être le plus simple possible. Le "Sharp Interface Model" (Huyakorn et al., 1994), (El-Kadi, 1992, 1994) ne prend pas en compte la pression capillaire. Le modèle polyphasique ne s'intéresse pas à la composition des phases. Le modèle transport multi-espèce finalement représente la formulation la plus générale pour l'écoulement et le transport en milieu poreux.

<i>Discrétisation du domaine</i>	<i>Méthode de discrétisation spatiale (temporelle)</i>
	<i>Prise en compte du caractère spatio-temporel : 1D, 2D, 3D</i>
	<i>Définition du maillage : (Pré-processeur)</i>
	<i>Affinement local du maillage</i>
<i>Approche conceptuelle polyphasique</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>* <i>Sharp Interface Model</i></li> <li>* <i>Ecoulement polyphasique</i></li> <li>* <i>Transport multi-espèce</i></li> </ul>
<i>Approche conceptuelle multi-espèce</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>* <i>Echange à travers les interfaces</i></li> <li>* <i>Modes de transport :</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>convectif</i></li> <li>- <i>diffusif</i></li> <li>- <i>dispersif : isotrope, symétrie axiale</i></li> </ul> </li> <li>* <i>Modèle du sol :</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>van Genuchten</i></li> <li>- <i>structuré</i></li> </ul> </li> </ul>
<i>Capacité</i>	<i>Nombre des phases liquides</i>
	<i>Nombre d'espèces</i>
<i>Analyse numérique</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li><i>Méthode de résolution des équations</i></li> <li>* <i>Rapidité</i></li> <li>* <i>Stabilité</i></li> </ul>
<i>Couplage vers d'autres modules</i>	<i>Interfaçage pour l'échange des données</i>
	<i>Possibilité de sorties graphiques (Post-processeur)</i>
<i>Validation du modèle</i>	<i>Résultats versus réalité (mesures) ?</i>

Tab. II.5.2 : Critères pour un module d'écoulement polyphasique

- Trois phases liquides seront suffisantes : la phase gazeuse, la phase aqueuse et la phase huileuse. Le nombre d'espèces peut être limitant s'il s'agit d'une mélange complexe.
- La validation reste un thème toujours délicat pour les modèles d'écoulement polyphasique-multi-espèce. Elle est effectuée par des essais sur terrain ou en laboratoire, par comparaison avec un modèle analytique ou un autre modèle numérique.

### II.5.3 Critères pour le choix de systèmes d'information géographique

- Une base de données puissante est une condition importante : Elle doit être relationnelle parce que les jeux de données en milieu naturel sont toujours très hétérogènes. Les couvertures vecteur sont nécessaires pour représenter les thèmes linéaires et ne demandent pas beaucoup d'espace mémoire. Les couvertures raster sont nécessaires à l'analyse spatiale. Les couvertures TIN peuvent servir pour construire les modèles numériques de terrain.

Les critères de choix pour un système d'information géographique sont indiqués dans le tableau suivant :

<i>Dimensions</i>	<i>2D/3D</i>
<i>Base des données</i>	<i>Relationnelle Vecteur Raster Triangulated irregular network (TIN)</i>
<i>Analyse spatiale</i>	<i>Fonctions * focales * zonales</i>
<i>Echange des données</i>	<i>Exportation/Importation des formats habituels vers d'autres logiciels .</i>
<i>Programmation</i>	<i>Langage macro pour la construction des fonctions d'analyse spatiale appropriées</i>

Tab. II.5.3 : Critères à prendre en compte pour le choix d'un SIG

#### II.5.4 Critères généraux pour l'élaboration d'outils d'aide à la décision

Ce type de critères (tableau II.5.4) a été également pris en compte pour tous les modules précédents :

<i>Type de code</i>	<i>Académique Commercial</i>
<i>Niveau d'ouverture</i>	<i>Accès au code source Possibilité d'ajouter ses propres modules</i>
<i>Logiciels de base nécessaires</i>	<i>Système d'exploitation</i>
<i>Matériel nécessaire</i>	<i>Quels besoins en - Processeur - RAM - Disque dur</i>

Tab. II.5.4 : Critères généraux pour les modules informatiques

L'analyse comparative de quelques outils de modélisation pour l'écoulement polyphasique et le transport de la pollution dissoute est présenté en Annexe E.

### II.5.5 Proposition d'une méthodologie d'analyse spatiale des risques de propagation d'une pollution

Depuis longtemps, on parle de l'intégration des modèles pour l'aide à la décision dans le domaine de la gestion des ressources en eau. L'introduction des SIG en tant que plate-forme d'intégration est plus récente et présente quelques avantages particuliers.

- On peut programmer un modèle hydrologique à l'intérieur d'un SIG si ce dernier possède un langage macro. Laurent, Anker et Graillot (1997) proposent un tel outil qui utilise la loi de Darcy intégrée dans une modélisation cartographique pour la détermination de la vulnérabilité des ressources en eau à partir des temps de transfert.
- Il existe souvent des modèles hydrodynamiques intégrés aux SIG.
- On peut coupler des modules spécialisés à un SIG. La communication entre SIG et modèle hydrodynamique peut être effectuée dans ce cas par des fichiers d'échange. Sørensen et al. (1995) décrivent le couplage entre un système d'aide à la décision comprenant un Système d'Information Géographique (ArcInfo), une base des données (INFORMIX) et des modèles hydrologiques. Ces derniers comprennent notamment le système de modélisation du cycle terrestre, Mike SHE, supporté par les logiciels de simulation en surface Mike 11, modèle 1D pour les écoulements dans les rivières, et Mike 21, modèle 2D de simulation des écoulements aux surfaces libres pour la gestion intégrée des plaines alluviales du Danube entre Bratislava et Komarno, située en Slovaquie. Les applications sont l'hydrodynamique et la géochimie des eaux souterraines, la qualité des eaux et le transport des sédiments dans les rivières, les impacts de l'agriculture et des aspects écologiques. Les interfaces comprennent l'export des fichiers du SIG vers les modèles hydrologiques ainsi que l'import des résultats de simulation de ces derniers dans le SIG et l'échange des séries temporelles.

### II.5.6 Conclusion sur les méthodes d'analyse des phénomènes de pollution

Les méthodes d'analyse existantes permettent d'étudier et de comprendre le comportement des phénomènes de pollution. Elles n'intègrent pas cependant la répartition spatiale des données dont ont besoin les modèles de simulation et par conséquent l'information nécessaire à l'évaluation spatiale des risques de pollution encourus.

En résumé, l'analyse spatiale du cheminement du polluant peut se faire en modélisant la propagation du polluant à travers la zone non saturée par un modèle d'écoulement polyphasique-multiespèce. Les résultats de ce modèle constituent une condition limite en tant que source du polluant pour le modèle de transport dissout. Ce dernier modèle simule le transport du polluant en zone saturée.

La base de données géographiques du SIG permet de préparer les données d'entrée des modèles de simulation (charge, porosité, perméabilité, transmissivité). La base de règles utilisée pour exploiter les triangles de texture permet d'améliorer la connaissance des caractéristiques du sol de la zone concernée par la pollution.

Enfin, la base de données du système d'information géographique et les fonctions d'analyse spatiale, que ce dernier permet de créer, produisent des variables synthétiques (zones d'influence, isochrones,...) davantage exploitables pour mieux comprendre l'évolution dans l'espace et dans le temps des risques de pollution (fig. II.5.1).

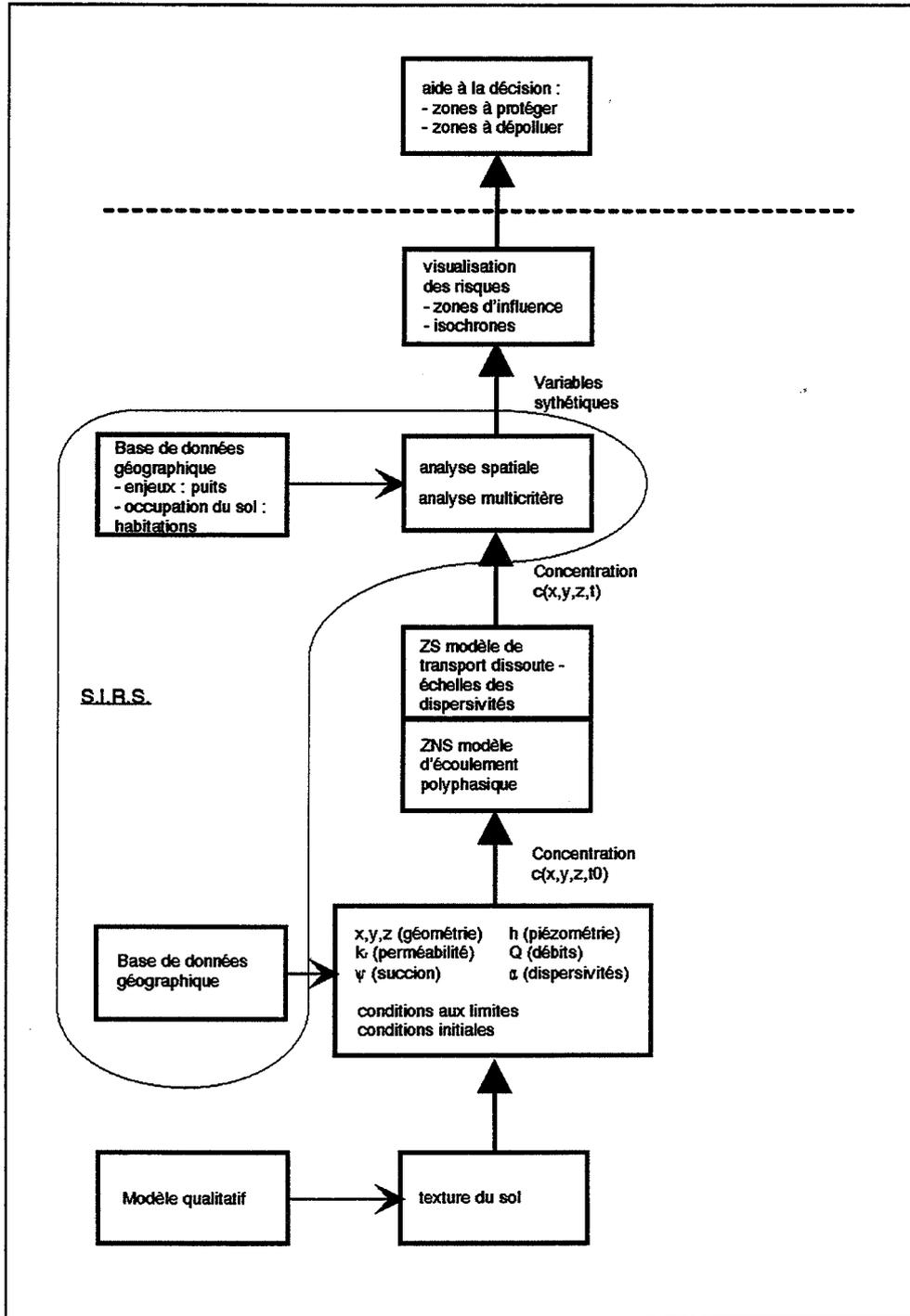


Fig. II.5.1: Enchaînement des outils et des données pour l'estimation des risques par les pollutions en milieu souterrain

**TROISIEME PARTIE :**  
**ANALYSE SPATIALE DES RISQUES**  
**DE POLLUTION PAR LES HYDROCARBURES**  
**- APPLICATION A L'ACCIDENT TYPE**



## **PARTIE III. ANALYSE SPATIALE DES RISQUES DE POLLUTION PAR LES HYDROCARBURES - APPLICATION A L'ACCIDENT TYPE**

Etant donné l'insuffisance des outils existant pour l'estimation des risques de pollutions accidentelles du sous-sol par des hydrocarbures légers, nous proposons dans cette partie un outil d'aide à l'évaluation des risques liés à la propagation de ces pollutions. Nous décrivons d'abord les composantes que doit avoir un tel système. Ensuite nous montrons comment les mettre au point pour répondre aux différentes fonctions qu'il doit remplir. Puis, nous présentons comment ces fonctions s'articulent dans un système d'aide à la décision.

Nous discutons enfin les performances de cet outil en dégagant les perspectives d'amélioration et de développements ultérieurs.

### **III.1 Pollution non-soluble en zone non-saturée**

Les conditions hydrauliques dans la ZNS impliquent une caractéristique fondamentale des mécanismes qu'il est nécessaire de représenter dans les modèles d'écoulement polyphasique : *le polluant est transporté dans la grande majorité dans une phase unique.*

Après avoir rappelé les mécanismes impliqués pour modéliser le phénomène, la simulation de la propagation d'une pollution par des hydrocarbures en zone non-saturée sera appliquée au site d'étude présenté précédemment avec un cas réel de pollution accidentelle. L'incertitude des paramètres de la simulation sur les résultats obtenus sera examinée.

#### **III.1.1 Préalable à la modélisation des pollutions en zone non saturée (ZNS) et hypothèses de travail**

En plus de la phase solide, les phases à prendre en compte dans un modèle, sont les suivantes : les phases liquides organique et aqueux, et la phase gazeuse. Nous nous intéressons dans un premier temps à une seule espèce de polluant organique, mais toujours avec la possibilité qu'elle soit présente dans les trois phases. Le milieu poreux sera caractérisée par sa teneur en phase organique liquide, les phases aqueuse et «air» par leur concentration en polluant.

### III.1.1.1 Aspects mathématiques de modélisation

#### a) Types d'équations intervenant

Les formules et les relations qui participent à l'élaboration de ce genre de modèle, sont de quatre types :

- Les équations différentielles de bilan. Elles décrivent le bilan de masse pour une phase ou une espèce, le bilan de masse ou d'énergie (ou moment) pour le milieu dans son ensemble.
- Les relations empiriques pour approximer les données expérimentales (par exemple, les relations entre pression et saturation) par des fonctions mathématiques.
- Les relations d'équilibre et cinétiques de transfert : Ce sont des relations thermodynamiques qui donnent la partition d'une espèce dans les différentes phases ainsi que leur tendance à atteindre un équilibre.
- Les «contraintes de définition» en tant que conditions aux limites pour les équations différentielles.

#### b) Problèmes principaux de l'analyse numérique des écoulements polyphasiques

Les principaux défauts à éviter lors de la mise en place d'un schéma numérique sont la diffusion et l'instabilité numérique :

- La diffusion numérique est un phénomène qui rend la solution numérique régulière là où il y a des discontinuités. Les schémas numériques d'ordre 2 présentent moins de diffusion que les schémas d'ordre 1.
- L'instabilité du schéma numérique se traduit par des oscillations qui, d'un point de vue physique, n'ont aucun sens.

#### c) Traitement des non-linéarités dans les relations empiriques

La non-linéarité représente une des difficultés principales dans la résolution numérique des équations de flux et de transport.

- Indépendamment du mode de discrétisation choisi, on aboutit à un système d'équations non linéaire. C'est l'une des principales difficultés de la résolution numérique pour les problèmes d'écoulement polyphasique. Cette non linéarité impose souvent au schéma d'être implicite : en effet, si on utilise un schéma explicite, la stabilité n'est assurée que pour des pas de temps extrêmement petits.
- La méthode de Picard (Carnahan et al., 1969) est l'une des méthodes les plus utilisées pour résoudre des systèmes non linéaires. C'est une méthode qui fournit dans ce cas une convergence acceptable. Cependant, pour résoudre des problèmes fortement non linéaires, la méthode de Picard nécessite beaucoup d'itérations et pose parfois quelques problèmes de convergence.
- La méthode de *Newton-Raphson* peut être considérée comme une généralisation de la méthode de Newton à des fonctions de  $R^n$  dans  $R^n$ . Elle semble être une des méthodes les plus robustes, à l'heure actuelle, pour la résolution de systèmes fortement non linéaires (Huyakorn and Pinder (1983)). Cependant, la méthode de Newton-Raphson est très coûteuse en temps de calcul et beaucoup plus difficile à mettre en oeuvre.
- Pour les problèmes fortement non linéaires, la technique de *pondération amont* ('upstream weig-

thing') peut améliorer la convergence : elle présente moins de problèmes de stabilité, moins de diffusion numérique. C'est une technique qui tient compte de la direction du flux. [Aziz and Settari, 1979].

### III.1.1.2 Hypothèses de travail

Pour modéliser un système polyphasique, on est amené de simplifier les phénomènes qui sont, par leur nature, assez complexes :

- Le gaz est considéré à pression constante en équilibre avec la pression atmosphérique. La phase gazeuse, dans ce cas est considérée comme étant infiniment mobile, sans prise en compte d'une cinétique. Cette hypothèse n'est cependant pas valable dans le cas d'une injection d'air à surpression et de l'extraction sous vide, comme c'est souvent le cas pour les opérations de dépollution. Au cours des opérations de dépollution, on est souvent intéressé par le suivi du transport de la phase gazeuse.
- Diverses méthodes de discrétisation des équations dans l'espace telles que les différences finies, les éléments finis ou les volumes finis sont utilisées dans le cas des modèles d'écoulement polyphasique. Certains auteurs ont développé des simulateurs avec des éléments finis (Kaluarachchi and Parker), leurs hypothèses de travail sont sensiblement les mêmes que ceux utilisant les différences finies (Tardy, 1995).
- En zone non-saturée, le transfert s'effectue essentiellement selon la direction verticale. Par contre, en direction latérale, les hydrocarbures sont peu mobiles, comme l'indiquent les mesures réalisées pour l'accident type. Cette caractéristique de la propagation de polluant nous permet d'utiliser un modèle d'écoulement en direction verticale à une ou deux dimensions.

### III.1.2 Choix d'un modèle de propagation de pollution en zone non-saturée

La simulation des écoulements polyphasiques nécessite de représenter des écoulements à trois phases ainsi que le transport convectif/ dispersif des espèces à l'intérieur d'une phase du milieu. D'une part, on doit simuler

- un écoulement biphasique : eau-NAPL dans un système où le gaz est considéré comme étant à pression constante
- un écoulement triphasique eau-NAPL-gaz pour des applications plus poussées (par exemple dépollution).

D'autre part, il faut simuler l'écoulement avec ou sans échange d'espèces entre les phases. S'il y a échange d'espèces entre les phases, il est nécessaire de pouvoir simuler de façon instantanée ou contrôlée ce phénomène par une cinétique de transfert entre les phases. Dans le cas d'un échange instantané, la phase gazeuse peut-être considérée comme étant à pression constante.

Etant donné les exigences requises pour représenter les mécanismes de propagation en ZNS tout en tenant en compte des hypothèses de travail effectuées précédemment, le modèle

MOFAT a été examiné pour effectuer la simulation sur la zone d'étude. Il a été développé par Kaluarachchi et Parker (1991) sur demande de l'U.S. Environmental Protection Agency (EPA), le ministère de l'environnement des Etats-Unis. Une description du modèle se trouve dans Kalyal et al. (1991). Un résumé du modèle et des méthodes numériques utilisées a été présenté par Wittmer (1996).

Les relations non linéaires pour la perméabilité et la pression capillaire qui dépendent de la saturation sont définies dans MOFAT par une extension du modèle de van Genuchten. La méthode de discrétisation est celle des éléments finis rectangulaires en dimension 2. La géométrie peut prendre en compte des sections verticales (plans z-x) ou une symétrie radiale (z-r). Le schéma numérique de MOFAT prévoit de coupler la résolution des équations de flux avec les équations de transport.

#### a) Equations intervenant

Les équations sont les suivantes : A partir de l'équation générale pour l'écoulement polyphasique-multiespèce où les symboles sont définis comme précédemment :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\omega_k^{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\omega_k^{\alpha}v_{\alpha i}) + \frac{\partial}{\partial x_i}J_{k,i}^{\alpha} = I_k^{\alpha} + E_k^{\alpha} \quad \text{Eq. (III.1.1)}$$

$\varepsilon_{\alpha}$  [-] : teneur en phase  $\alpha$

$\rho_{\alpha}$  [kg/m<sup>3</sup>] : masse volumique de la phase  $\alpha$

$\omega_k^{\alpha}$  [-] : la fraction de masse de la composante k dans la phase  $\alpha$ .

$J_k^{\alpha}$  [kg/m<sup>2</sup>s] : le flux non-advectif de la composante k dans la phase  $\alpha$ , c'est-à-dire, le flux diffusif/ dispersif.

$I_k^{\alpha}$  [kg/m<sup>3</sup>s] : le flux diffusif d'une composante k au travers des limites de la phase  $\alpha$ .

$E_k^{\alpha}$  [kg/m<sup>3</sup>s] : l'apport externe de la composante k à la phase  $\alpha$  par transformation biologique et non-biologique.

$\vec{v}_{\alpha}$  [m/s] : vitesse d'écoulement dans la phase  $\alpha$

plusieurs simplifications permettent d'aboutir aux équations de l'écoulement :

En ne considérant qu'une espèce par phase :

$$\omega_k^{\alpha} = 1 \quad \text{Eq. (III.1.2)}$$

Sans échange à travers les limites des phases,

$$J_{k,i}^{\alpha} = 0 \quad \text{Eq. (III.1.3)}$$

Pour un sol incompressible :

$$S_\alpha = \frac{\varepsilon_\alpha}{\omega_t} \text{ donc } \varepsilon_\alpha = S_\alpha \omega_t \quad \text{Eq. (III.1.4)}$$

$$\omega_t \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha \rho_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (S_\alpha \omega_t \rho_\alpha v_{\alpha i}) = R_\alpha \quad \text{Eq. (III.1.5)}$$

En milieu poreux, on remplace la vitesse microscopique par la vitesse de Darcy

$$v_{\alpha, i} = \frac{U_{D, \alpha i}}{\omega_t S_\alpha} \quad \text{Eq. (III.1.6)}$$

On obtient une formulation générale de l'équation d'écoulement polyphasique :

$$\omega_t \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha \rho_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_\alpha U_{D, \alpha i}) = R_\alpha \quad \text{Eq. (III.1.7)}$$

Pour les différentes phases, cette formulation devient :

$$\omega_t \frac{\partial}{\partial t} (S_m) + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_{D, mi}) = \frac{R_m}{\rho_m} \quad \text{pour la phase aqueuse}$$

$$\omega_t \frac{\partial}{\partial t} (S_n) + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_{D, ni}) = \frac{R_n}{\rho_n} \quad \text{pour la phase organique}$$

$$\omega_t \frac{\partial}{\partial t} (S_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_g U_{D, gi}) = R_g \quad \text{pour la phase gazeuse}$$

Eq. (III.1.8)

Avec

$$\rho_{rm} = \frac{\rho_m}{\rho_m^0} \quad \text{Eq. (III.1.9)}$$

où  $\rho_m^0$  est la densité de l'eau pure, les vitesses de Darcy dans les phases  $\alpha$  peuvent s'exprimer par la relation suivante :

$$U_{D, \alpha i} = K_{ij}^\alpha \left\{ \frac{\partial h_\alpha}{\partial x_j} + \rho_{r\alpha} \frac{\partial z}{\partial x_j} \right\} \quad \text{Eq. (III.1.10)}$$

avec :

$h_\alpha$  [m] : charge

$z$  [m] : cote

$K_{ij}^\alpha$  [N/m] : tenseur de mobilité de la phase  $\alpha$ .

### b) Aspects de l'analyse numérique

La discrétisation des équations dans l'espace utilise la méthode de la pondération amont, qui a été développée afin de surmonter les problèmes d'oscillation et de diffusion numérique associés aux *équations de transport* (en particulier lorsque le terme d'advection est dominant) [Huyakorn et Nilkuha, 1978]. Dans les équations de flux, cette méthode intégrée dans MOFAT a la particularité de réduire la non linéarité des équations. MOFAT utilise cette méthode de discrétisation pour les équations de flux ainsi que pour les équations de transport.

Les équations de flux sont résolues avec un schéma totalement implicite. Les équations de transport sont résolues avec un schéma soit explicite (dans le cas de transferts à l'équilibre) soit implicite (dans le cas de transfert hors de l'équilibre).

Résolution des systèmes d'équations : les équations de flux sont résolues avec la méthode de Newton-Raphson. Les équations de transport sont résolues avec la méthode de Picard.

### c) Données nécessaires pour effectuer une simulation

Le traitement numérique des équations nécessite la connaissance des données pour l'écoulement et le transport du polluant :

Pour l'écoulement :

- propriétés du fluide: masse volumique, viscosité...
- conditions initiales : la pression ou la saturation dans chacune des phases
- conditions aux limites : elles peuvent dépendre du temps et concerner soit les concentrations aux différents noeuds, soit le flux le long d'un segment de frontière.

Pour le transport :

- propriétés du fluide : masse volumique des composantes
- propriétés du polluant et ses interactions avec le milieu : coefficients de diffusion, coefficients de décroissance du premier ordre
- propriétés thermodynamiques : coefficients de répartition à l'équilibre, coefficient de transfert de masse (pour le cas des transferts hors de l'équilibre)
- conditions initiales : concentrations dans la phase aqueuse de chacun des composants, relations des équilibre dans les autres phases
- conditions aux limites : elles peuvent être stipulées de diverses façons, l'une étant de prendre en compte, par exemple, l'absence de flux dispersif.

## III.2 Pollution dissoute en zone saturée

Après avoir présenté comment réaliser une simulation de la pollution soluble en zone saturée à l'aide d'une méthode satisfaisant aux critères évoqués précédemment, nous simulons la propagation de la pollution dans la zone saturée du site étudié. L'influence de l'incertitude des paramètres de la simulation sur les résultats est également discutée.

### III.2.1 Rappel de mécanismes mis en jeu dans la zone saturée (ZS)

La plupart des modèles de transport de la matière dissoute résolvent dans un premier temps l'équation hydrodynamique en régime non-stationnaire. Ce résultat sert comme une condition de l'écoulement imposée pour la résolution de l'équation de transport de masse. Ceci est le cas dans le modèle Mike-SHE (1995) et dans MT3D (Zheng, 1990).

Les avantages de cette construction sont les suivants : la mémoire de calcul est économisée car il n'est pas obligatoire de stocker toutes les variables d'état liées aux phénomènes d'écoulement et de transport à chaque pas du temps. Pour traiter différents scénarios de transport de polluant, cela permet un gain de temps dans l'exécution des calculs si le champ d'écoulement est déjà déterminé.

Pour pouvoir modéliser la propagation de la pollution en direction verticale, nous devons discrétiser l'aquifère en direction  $z$  et effectuer le calcul hydrodynamique dans la zone ainsi discrétisée. Pour effectuer cela, nous définissons des couches de calcul. Il faut définir une épaisseur minimale pour ces derniers. En effet, si elle est trop fine, cela provoque des problèmes pour le calcul du bilan de masse.

### III.2.2 Simulation de la propagation de la pollution dissoute dans la zone saturée

Nous présentons les données à introduire dans le modèle qui sont notamment des dispersivités. Ensuite nous effectuons la simulation du transport de la matière dissoute au site d'application.

#### III.2.2.1 Choix d'un outil de simulation

Il est nécessaire de prendre en compte l'écoulement en trois dimensions ainsi que le transport advectif et dispersif dans la zone saturée. Pour cette opération de modélisation, on consi-

dérera l'écoulement d'une seule phase liquide dans la zone saturée. Des possibilités d'échange de données vers d'autres modules sont nécessaires : modules propagation en zone non-saturée, écoulement des eaux de surface et échange avec la nappe, évapotranspiration.

Pour la simulation de la propagation de la pollution dissoute en ZS, le système Mike-SHE (Système Hydrologique Européen) a été choisi (Abbott et al., 1986). Une description du modèle pour la zone saturée se trouve dans Refsgaard et al. (1993).

Le schéma numérique utilisé pour la simulation du transport hydrodispersif est fondé sur les travaux de Vested et al. (1992). Il est indiqué en Annexe D. La discrétisation du milieu utilise la méthode des différences finies.

### III.2.2.2 Données pour la simulation

Le milieu aquifère étant constitué de plusieurs couches de sédimentation sans discordance, nous pouvons supposer une symétrie axiale avec l'axe dans la direction z. Cela entraîne la présence de cinq dispersivités à introduire dans le modèle de transport dissout. Cependant, il ressort de la géométrie ainsi que du régime hydraulique de l'aquifère que les composantes de la vitesse en direction verticale sont faibles. Cela nous amène à négliger les coefficients de dispersivité pour le flux vertical qui sont d'ailleurs peu connus.

#### Introduction des coefficients de dispersivité :

Trois dispersivités sont à introduire dans le modèle :

$\alpha_{LHH}$  : dispersivité

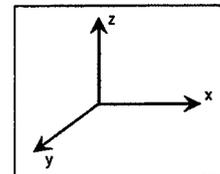
- longitudinale
- en direction horizontale
- pour le flux convectif horizontal

$\alpha_{THH}$  : dispersivité

- transversale
- en direction horizontale
- pour le flux convectif horizontal

$\alpha_{TVH}$  : dispersivité

- transversale
- en direction verticale
- pour le flux convectif horizontal



Conditions aux limites et conditions initiales :

- conditions initiales : comme condition initiale, on introduit une concentration de valeur nulle dans toutes les mailles de l'aquifère.
- conditions aux limites : terme source du polluant qui rentre dans le système. On peut le représenter par une concentration fixée dans le maillage, où, à chaque pas de temps, est "balayé" une partie définie du polluant par entraînement avec l'écoulement (Type I, Dirichlet), ou comme flux de masse qui rentre dans le système (Type II, von Neumann).

**III.2.2.3 Paramétrage du transport hydrodispersif**

Il faut considérer le mouvement de l'eau et le transport de polluant de façon découplée : Après avoir obtenu le régime hydrodynamique, on fait intervenir le produit polluant soluble en ajoutant la source de pollution, et on effectue le calcul du transport de ce polluant.

Si on veut simuler le transport du polluant en trois dimensions, il faut introduire une résolution du maillage en direction verticale, c'est-à-dire par un modèle tridimensionnel ou un modèle multicouche, puisqu'on ne peut pas approximer les niveaux du substratum et du sol sur la zone d'étude à des niveaux plats (épaisseurs variant entre 5 et 20 m), il est préférable de discrétiser l'aquifère en plusieurs couches. Dans le cas d'une stratification géologique connue, on effectue la discrétisation (couches de calcul) selon ces couches géologiques. Les conditions initiales et les conditions limites doivent être précisées pour chaque couche. Dans notre cas, il faut approximer l'aquifère à une couche géologique homogène. Pour avoir une résolution du modèle en direction verticale, nous discrétisons la zone d'étude en couches (de calcul) équidistantes. La taille des mailles choisie est de 30m. La figure III.2.1 présente le champ

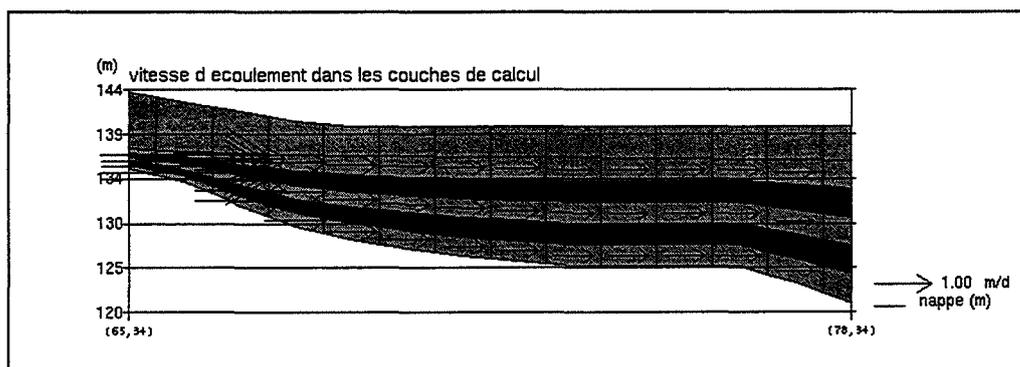


Fig. III.2.1 : Couches de calcul pour le calcul des vitesses d'écoulement et du transport du polluant

d'écoulement après discrétisation de la zone saturée en cinq couches de calcul équidistantes. Du fait de la faible épaisseur mouillée dans les versants ouest de la zone d'étude, les vitesses d'écoulement sont élevées (vitesses de Darcy jusqu'à 3 m/j, correspondant aux vitesses de

transport de 50 m/j) et diminuent vers l'est. Les schémas numériques pour le transport dissout selon Vested et al. (1992) sont présentés en Annexe D.

### III.2.2.4 Résultats de la simulation

Puisqu'il est difficile de quantifier les concentrations dans la nappe d'une pollution par des hydrocarbures infiltrés à la surface, nous étudions l'évolution spatio-temporelle de la pollution et la fraction de la concentration en un point par rapport à la concentration initiale. Nous n'indiquons donc pas les concentrations en masse par volume, mais en fraction de la concentration initiale. Nous avons introduit le polluant à la limite ouest de la zone où se trouvent la ligne de chemin de fer ainsi que la route nationale. La concentration initiale du polluant a été prise égale à 10, les conditions initiales sont égales à zero pour toute le domaine. La source de polluant est intermittente à  $t_0$ , c'est-à-dire, avec une concentration fixe pendant une heure au premier pas de calcul. Les dispersivités ont été choisies de la manière suivante :  $\alpha_{LHH} = 5m$ ,  $\alpha_{THH} = 1m$ ,  $\alpha_{TVH} = 1m$ . Le résultat de la simulation est présenté en figure III.2.2

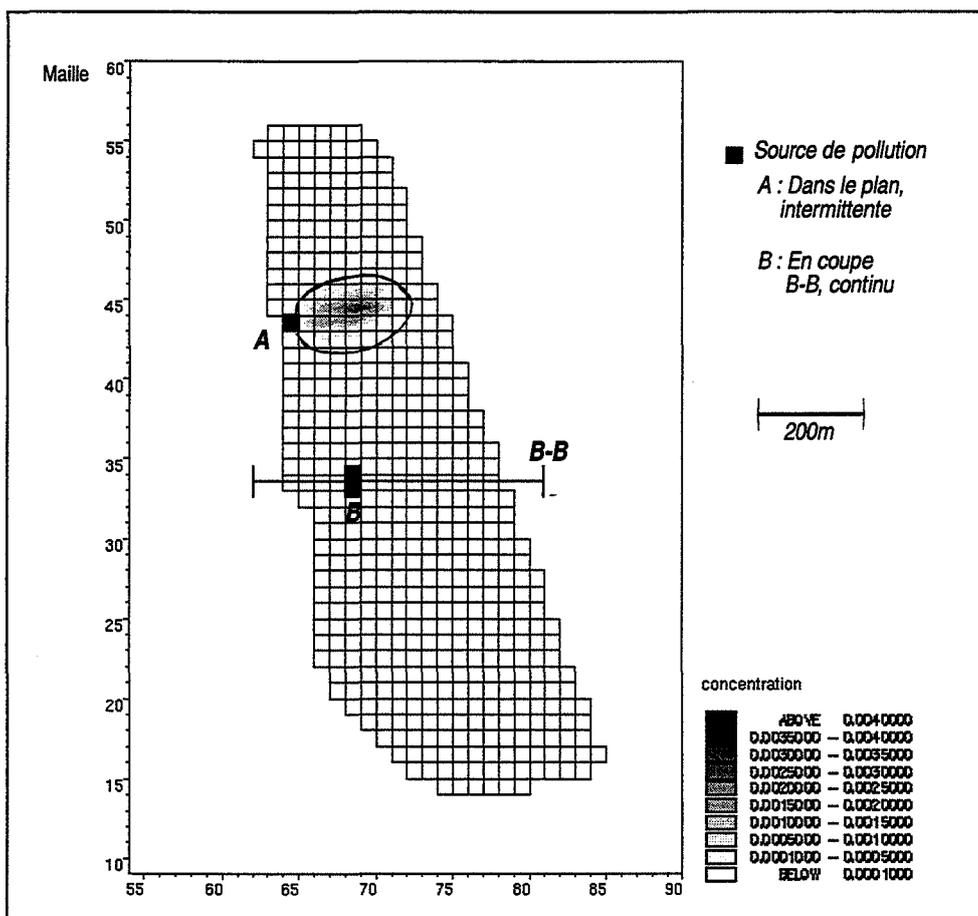


Fig. III.2.2 : Simulation d'une pollution :  $t = 4j$ . 2ème de 4 couches

Dans l'aquifère alluvial de la zone d'étude avec une perméabilité moyenne de  $2,5 \cdot 10^{-3}$  m/s et un gradient hydraulique de  $5 \cdot 10^{-3}$ , la vitesse de Darcy a été estimée à 1.1 m/j. Avec une porosité efficace de 6%, on obtient une vitesse moyenne de déplacement de 18 m/j. Il faut cependant remarquer que la perméabilité ainsi que le gradient varient de manière importante dans la zone d'étude. Pour cette raison, le polluant, avec une vitesse de déplacement de 18 m/j, a migré plus loin du fait des gradients élevés du côté ouest de l'aquifère.

La fig. III.2.3 montre l'évolution spatiale de la propagation de la pollution selon la coupe B - B dans la figure III.2.2 de direction ouest-est. La condition limite a été choisie avec une concentration de 10 unités et une source de pollution continue. La rupture de pente sur le contour du nuage est due à la discrétisation verticale de la zone saturée en cinq couches.

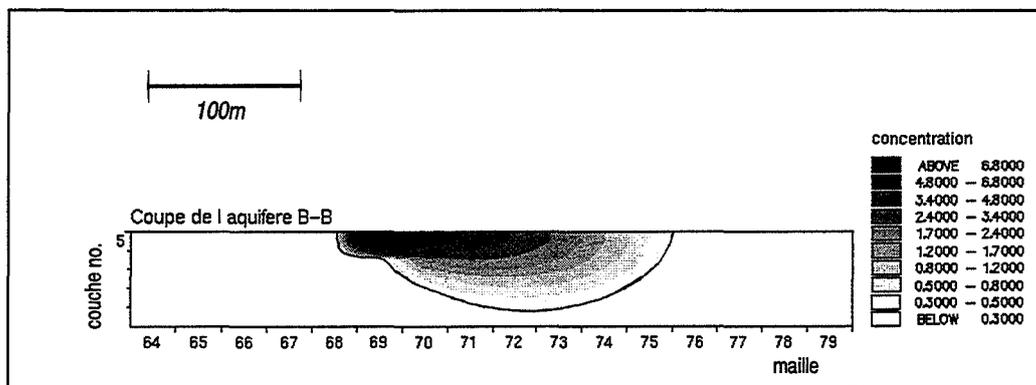
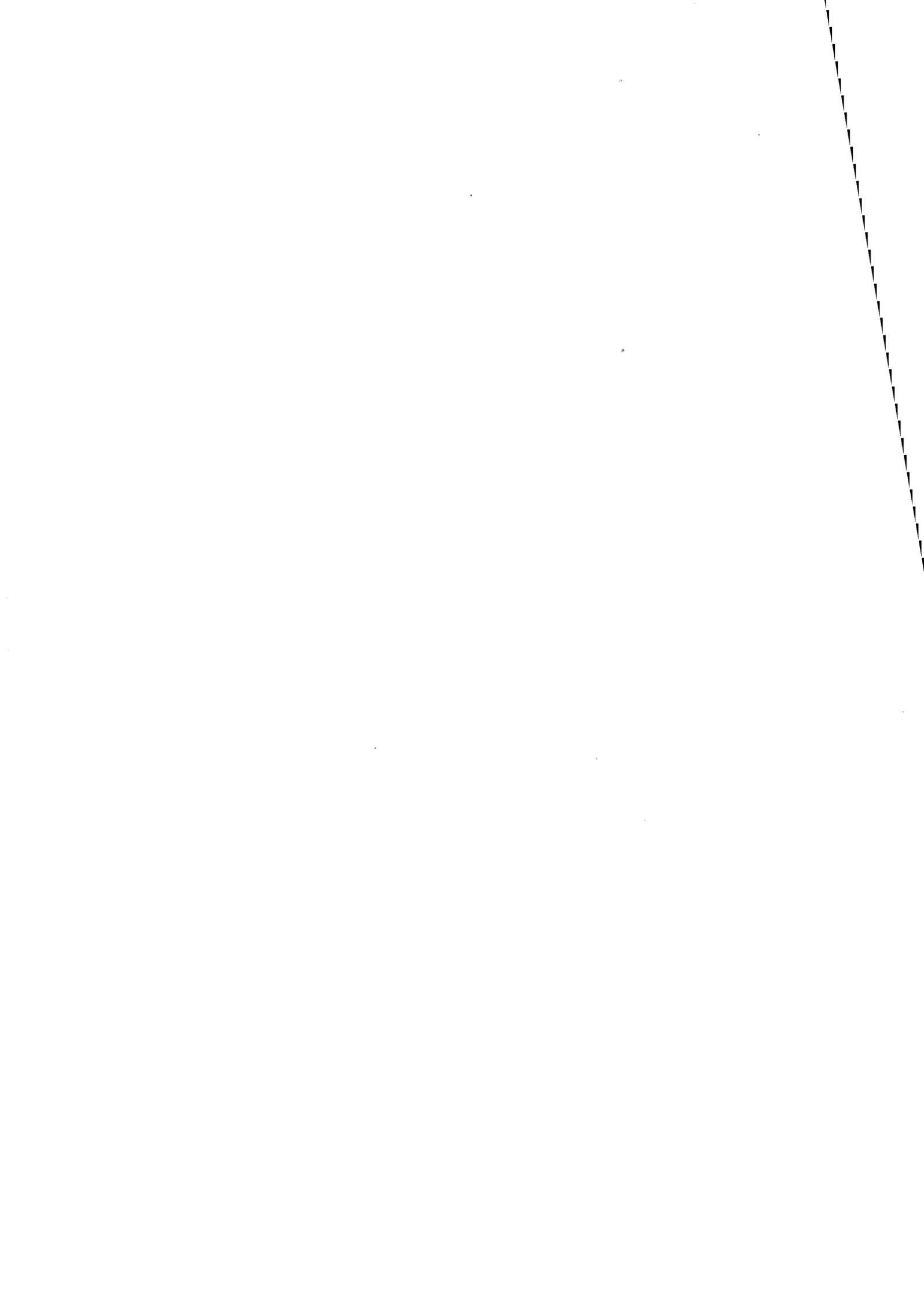


Fig. III.2.3 : Evolution verticale de la pollution

La fiabilité des résultats dépend de la précision avec laquelle le champ d'écoulement a été calé. Les incertitudes qui entrent dans ce résultat, sont notamment la résolution des perméabilités en direction verticale puisque nous avons calé ce champ en deux dimensions seulement. Dans le cas de l'aquifère, on suppose l'existence de lentilles de perméabilité différente dans la partie majeure de l'aquifère. Dans le cas de lentilles d'argile, les lignes d'écoulement sont guidées autour des lentilles, ce qui entraîne des perturbations modestes. Dans le cas des lentilles graveleuses, cela entraîne des chemins d'écoulement préférentiels.

Dans le paramétrage du transport, la fiabilité des résultats dépend en particulier des coefficients de dispersivité choisis dans les différentes directions de l'espace et de leur rapport ainsi que de l'échelle à laquelle les dispersivités du milieu aquifère sont observées.



### III.3 Prise en compte des échelles des dispersivités en zone saturée

#### III.3.1 Aspects théoriques

Plusieurs auteurs (Lallemand-Barres et Peaudecerf, 1978), (Gelhar, 1986) (Neuman, 1990), ont déjà constaté une dépendance entre les *coefficients de dispersivité* et la *distance de traçage* d'un polluant, c'est-à-dire, la distance entre le point où le polluant est relâché et le point où on mesure sa concentration. En ce qui concerne la dispersivité longitudinale, la figure III.3.1. indique cette dépendance. A l'échelle du grain, on parle de dispersivité locale; pour les

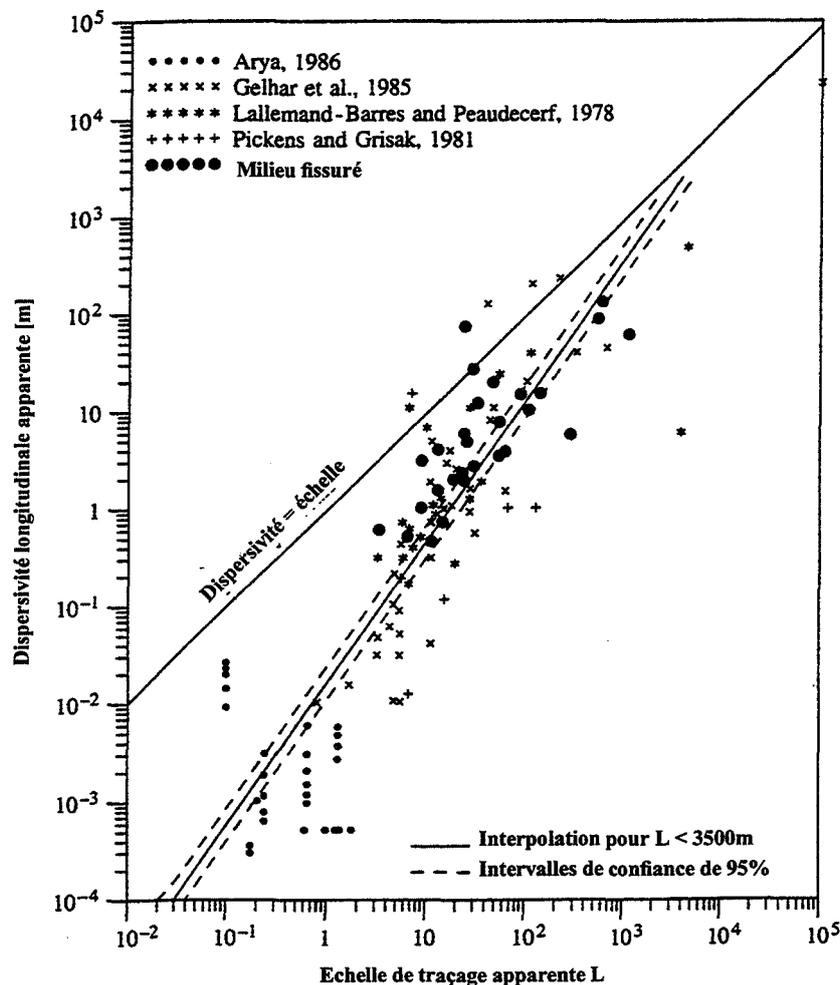


Fig. III.3.1 : Echelles des dispersivités longitudinales (Source : Neuman, 1990)

grandes valeurs de traçage, c'est-à-dire à l'échelle de l'extension d'un aquifère, on parle de macrodispersivité. Selon ces mêmes auteurs, les dispersivités mesurées sont égales au  $1/10^0$  de la valeur de la distance de traçage. Dans la première centaine de mètres, parcourus par le polluant, cette relation est à peu près linéaire. Selon Appelo et Postma (1996), cette dépen-

dance des dispersivités est due à l'hétérogénéité de l'aquifère. Si on considère un aquifère comme un milieu hiérarchisé par des structures fractales autosimilaires, évoquées au chapitre II.1.8 (les structures ont les mêmes propriétés géométriques sur différentes échelles) ces structures autosimilaires correspondent alors aux différentes échelles. Actuellement, les échelles intermédiaires sont très étudiées (Kobus, 1993). Trois remarques importantes s'imposent à ce sujet.

- 1) Cette dépendance a été observée aussi bien pour le milieu à porosité d'interstices que pour le milieu à porosité de fissures (Neuman, 1990).
- 2) La relation indiquée dans la figure III.4.1 concerne seulement le coefficient  $\alpha_{LHH}$  de la matrice des dispersivités qui contient 36 éléments (Scheidegger, 1961). Bien que tous ces éléments n'aient pas la même importance dans la pratique, les données sur les dispersivités transversales sont déjà beaucoup moins nombreuses. Bien que tous les éléments du tenseur de la dispersivité varient avec l'échelle, nous supposons, que les dispersivités transversales suivent la même loi de la dépendance que les dispersivités longitudinales. Cette hypothèse nous paraît d'autant plus justifiée, que plusieurs auteurs (Anderson, 1979), (Klotz et al., 1980) indiquent des relations  $\alpha_L/\alpha_T$ , qui ne dépendent pas de l'échelle d'observation.
- 3) Pour les grandes distances de traçage, (supérieure à 300m), certains auteurs (Gelhar, 1986, Ptak et Teutsch, 1992), indiquent que cette dépendance diminue et que les dispersivités atteignent un seuil.

Les réflexions sur la hiérarchisation des structures fractales, que représente le milieu poreux, permettent d'expliquer l'existence de ce seuil dû à une limite supérieure des structures caractérisant un aquifère et ses hétérogénéités. Cette limite correspond à la dispersivité maximale qu'il peut avoir.

Dans les modèles de simulation hydrodispersive, les coefficients de dispersivité correspondent à la distance de traçage à laquelle on s'intéresse. Ces coefficients mesurés expérimentalement sont en quelque sorte les dispersivités intégrées sur la distance de traçage à partir de la source jusqu'au point d'observation :

$$\alpha_i(r_{obs}) = \int_{r=0}^{r=r_{obs}} \beta_i(r) p_i(r) dr \quad \text{Eq. (III.3.1)}$$

où

$\beta_i$  [-] : coefficient, qui après multiplication avec la distance de traçage, correspond à un coefficient de la matrice des dispersivités

$r$  [m] : distance de la source

$r_{obs}$  [m] : distance d'observation

$p_i$  [-] : fonction de pondération traduisant par exemple, les caractéristiques des formations rencontrées lors du changement de l'échelle.

Si les coefficients de dispersivité sont bien choisis pour la distance concernée, cela revient à surestimer la dispersion du nuage pour toutes les distances inférieures à la distance de traçage et à sous-estimer celle-ci pour des distances supérieures. Les effets d'une telle sur- ou sous-estimation ont des conséquences importantes pour des sources de pollution qui sont approximativement ponctuelles. Pour cette raison, il semble que le choix des coefficients mérite une attention plus grande, pour simuler l'extension du nuage de pollution.

La relation est supposée linéaire entre l'échelle d'observation et les coefficients de dispersivité. Selon le graphique III.3.1, ceci est relativement bien validé pour une première centaine de mètres du traçage pour tous les coefficients du tenseur des dispersivités. Les effets de la diffusion moléculaire ne seront pas pris en compte. A partir de cette dépendance, on pourra distinguer pour la relation entre les différences de concentrations et l'extension du nuage et selon le régime de propagation les cas suivants. Si  $y$  représente l'extension transversale du nuage de pollution :

- pour une source continue en deux dimensions :

$$\frac{\Delta c_{ech}}{\Delta c_{ref}} \sim \frac{1}{\Delta y_{ech}/\Delta y_{ref}} \quad \text{Eq. (III.3.2)}$$

- pour une source continue en trois dimensions

$$\frac{\Delta c_{ech}}{\Delta c_{ref}} \sim \frac{1}{(\Delta y_{ech}/\Delta y_{ref})^2} \quad \text{Eq. (III.3.3)}$$

- pour une source intermittente en trois dimensions

$$\frac{\Delta c_{ech}}{\Delta c_{ref}} \sim \frac{1}{(\Delta y_{ech}/\Delta y_{ref})^3} \quad \text{Eq. (III.3.4)}$$

### III.3.2 Analyse spatiale du transport dispersif

Nous allons illustrer les conséquences de ces réflexions en effectuant des simulations sur un aquifère schématisé comparable à notre zone d'étude. La comparaison sera effectuée pour chaque simulation en utilisant soit la macrodispersivité, soit un coefficient de dispersivité adapté à l'échelle d'observation. L'aquifère modèle a les propriétés suivantes :

#### Paramètres géométriques de l'aquifère :

Dimensions : Longueur x Largeur x Epaisseur = 30m x 20.5m x 10m

Discrétisation du domaine en mailles 0.5m x 0.5m.

Paramètres pour l'écoulement :

Perméabilité :  $k = 4.5 \cdot 10^{-3}$  m/s;                      Porosité :                       $\omega_{\text{eff}} = 6\%$   
 Epaisseur mouillée :  $e = 6$ m;                      Gradient hydraulique :                       $\text{grad } h = 5 \cdot 10^{-3}$  [m/m]  
 Champ d'écoulement stationnaire

Paramètres concernant le transport du polluant :

Conditions aux limites de la source du polluant en concentration.

Nous choisissons deux distances de traçage  $L$  qui correspondent pour des aquifères alluviaux à une distance "proche" de la source (30m) et à une distance qui correspond à la macrodispersivité (300m). Dans le premier cas de pollution, des actions immédiates doivent être engagées par les décideurs en quelques jours pour prendre les mesures nécessaires : par exemple : installer une barrière hydraulique.

Pour ces distances, les dispersivités correspondantes sont, selon Neuman (1990) :

$\alpha_{LHH}(30\text{m}) = 2.51\text{m}$ ,  $\alpha_{LHH}(300\text{m}) = 72.4\text{m}$ . Lallemand-Barres et Peaudecerf (1978) donnent  $\alpha_{LHH}(30\text{m}) = 3\text{m}$ ,  $\alpha_{LHH}(300\text{m}) = 30\text{m}$ . Gelhar (1986) trouve des marges d'erreur importantes en partant de la relation  $\alpha_{LHH} = 0.1L$  (Annexe A). Nous faisons donc l'hypothèse d'une évolution modeste des dispersivités avec la distance de traçage et choisissons  $\alpha_{LHH}(30\text{m}) = 2.5\text{m}$ ,  $\alpha_{LHH}(300\text{m}) = 25\text{m}$ .

Dispersivité :  $\alpha_{LHH} = 25\text{m}$ ,  $\alpha_{THH} = 1\text{m}$  pour une distance de traçage de 300m  
 $\alpha_{LHH} = 2.5\text{m}$ ,  $\alpha_{THH} = 0.1\text{m}$  pour une distance de traçage de 30m  
 avec :  $\alpha_{LHH}$  [m] : dispersivité longitudinale en direction horizontale pour le flux convectif horizontal  
 $\alpha_{THH}$  [m] : dispersivité transversale en direction horizontale pour le flux convectif horizontal

Sans prendre en compte les effets de dispersion et de diffusion, une particule aura parcouru cette distance en 22 h environ.

En prenant en compte la dispersion et étant donné les répartitions des concentrations presque exponentielles, l'extension du nuage peut être définie comme la largeur où la concentration a atteint le rapport :

$$c(d) = \frac{c_{\text{max}}}{e} \quad \text{Eq. (III.3.5)}$$

où

$c(d)$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant au point qui définit l'extension  $d$  du nuage

$c_{\text{max}}$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration maximale du polluant

$e$  [-] : constante d'Euler

Pour les différentes conditions de simulations, nous comparons l'extension du nuage ainsi que la concentration maximale du polluant après avoir parcouru les 30m pour les deux jeux de dispersivités différentes.

a) Cas d'une source de pollution continue en deux dimensions

Selon le chapitre précédent (eq. III.3.2 à III.3.4), nous nous intéressons davantage à la relation entre les concentrations trouvées et la concentration à la source. Pour cette raison, nous choisissons une concentration du polluant à la source égale à l'unité. En comparant les résultats pour les coefficients  $\alpha(300m)$  et  $\alpha(30m)$ , nous obtenons les résultats suivants :

	concentration maximale $c_{max}$	extension du nuage [m]
$\alpha(300m)$	0.025	7.25
$\alpha(30m)$	0.052	2.85

$$c_{30}/c_{300} = 2.1$$

$$d_{30}/d_{300} = 0.4$$

Les fig. III.3.2 et III.3.3 présentent les résultats de la comparaison des différentes simula-

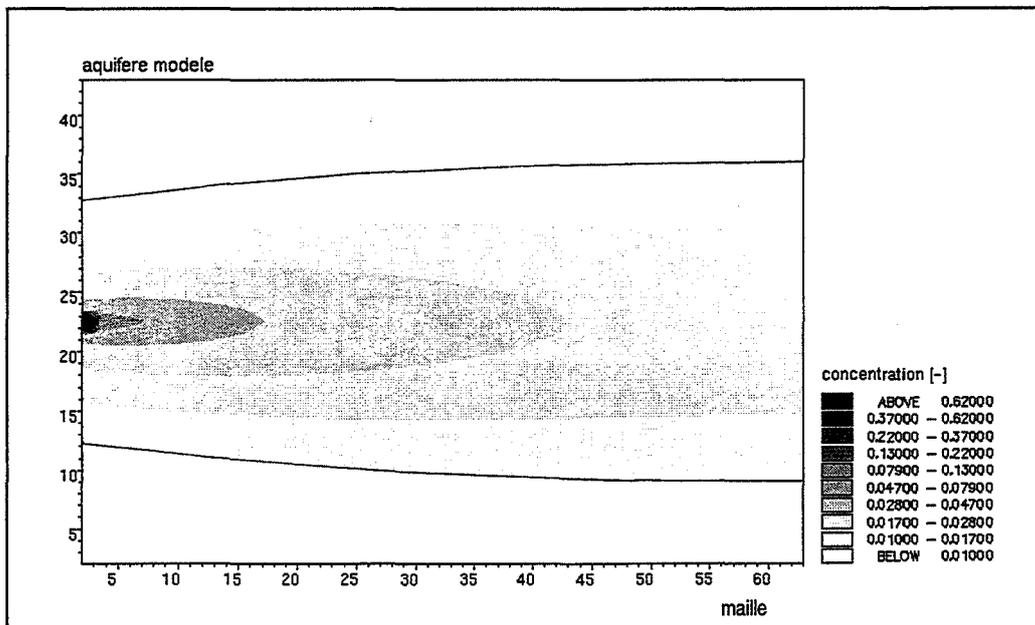


Fig. III.3.2 : Dispersion d'un nuage en 2 dimensions, source constante,  $\alpha_L(300m) = 25m$

tions. Les concentrations sont présentées sur 2 décades. La grande extension du nuage dès l'origine de la pollution est due aux effets numériques (fig. III.3.2).

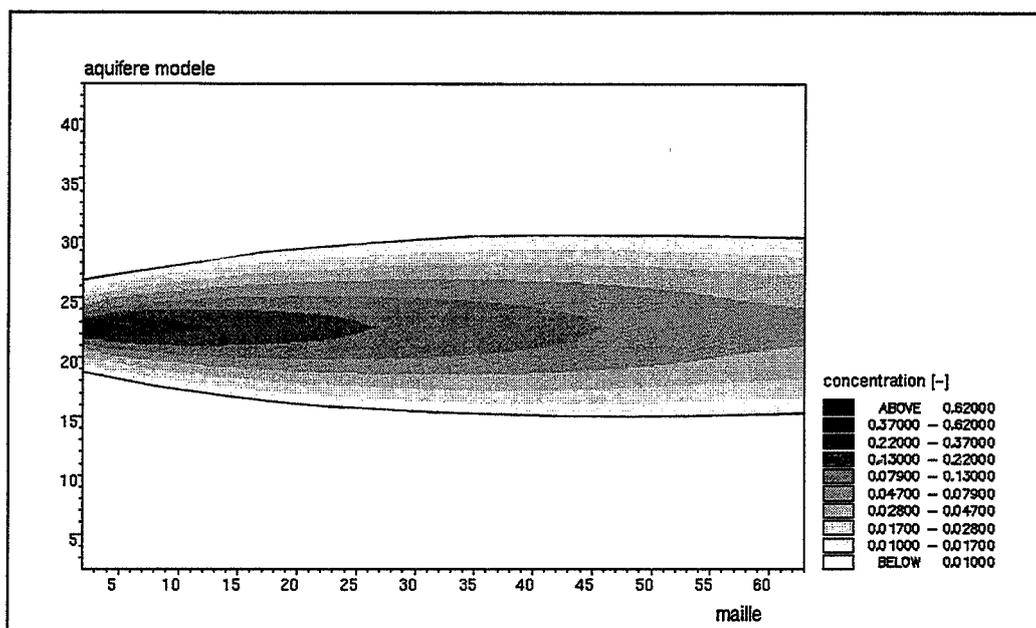


Fig. III.3.3 : Dispersion d'un nuage en 2 dimensions, source constante,  $\alpha_L(30m) = 2.5m$

b) Source continue en trois dimensions (10 couches dans notre cas)

Pour que la même quantité du polluant soit injectée, la concentration du polluant doit être 10 fois supérieure à celle de la source, du fait que le polluant est introduit dans la première couche d'une suite de 10 couches en direction verticale.

La dispersivité  $\alpha_{TVH}$  est égale à 0.5m pour une distance de traçage de 300m. La dispersivité  $\alpha_{TVH}$  est égale à 0.05m pour une distance de traçage de 30m où  $\alpha_{TVH}$  est la dispersivité transversale en direction verticale pour le flux convectif horizontal.

Nous obtenons les résultats suivants :

	concentration maximale $c_{max}$	extension du nuage [m]
$\alpha(300m)$	0.04	6.5
$\alpha(30m)$	0.175	2.75

$$c_{30}/c_{300} = 4.65$$

$$d_{30}/d_{300} = 0.42$$

Les fig. III.3.4 et III.3.5 présentent les résultats de la simulation pour la première des 10 couches. Les concentrations sont dessinées sur 2 décades. Sur la fig. III.3.4, on observe une dilution plus importante du polluant du fait de la plus grande dispersivité. Sur la fig. III.3.5, les concentrations paraissent plus élevées qu'en cas de propagation en deux dimensions, la raison étant qu'une grande partie du polluant reste toujours dans la première couche de terrain.

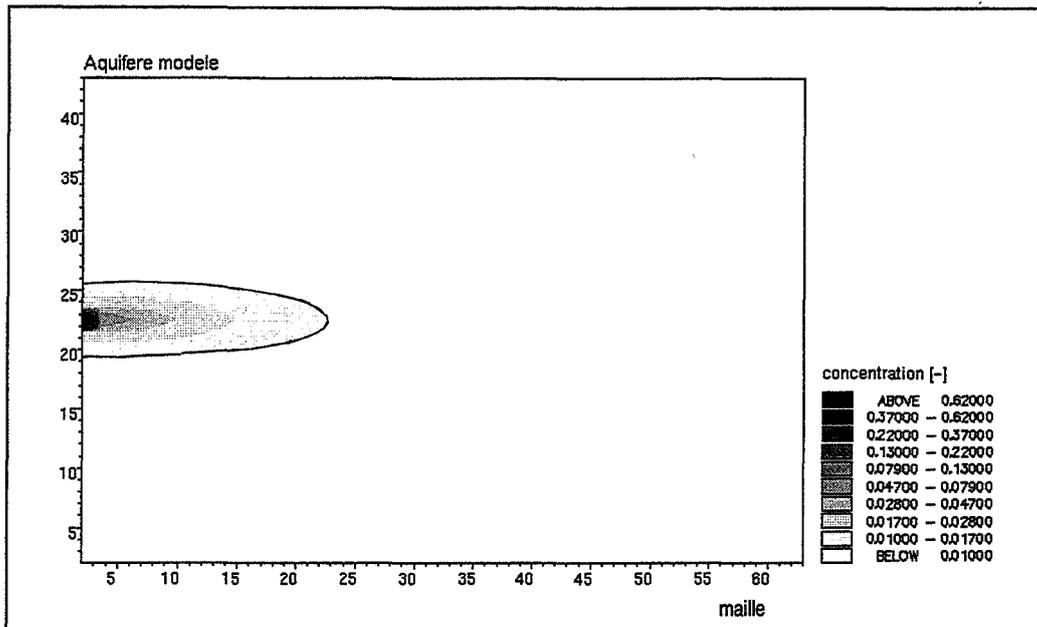


Fig. III.3.4 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source constante,  $\alpha_L(300m) = 25m$

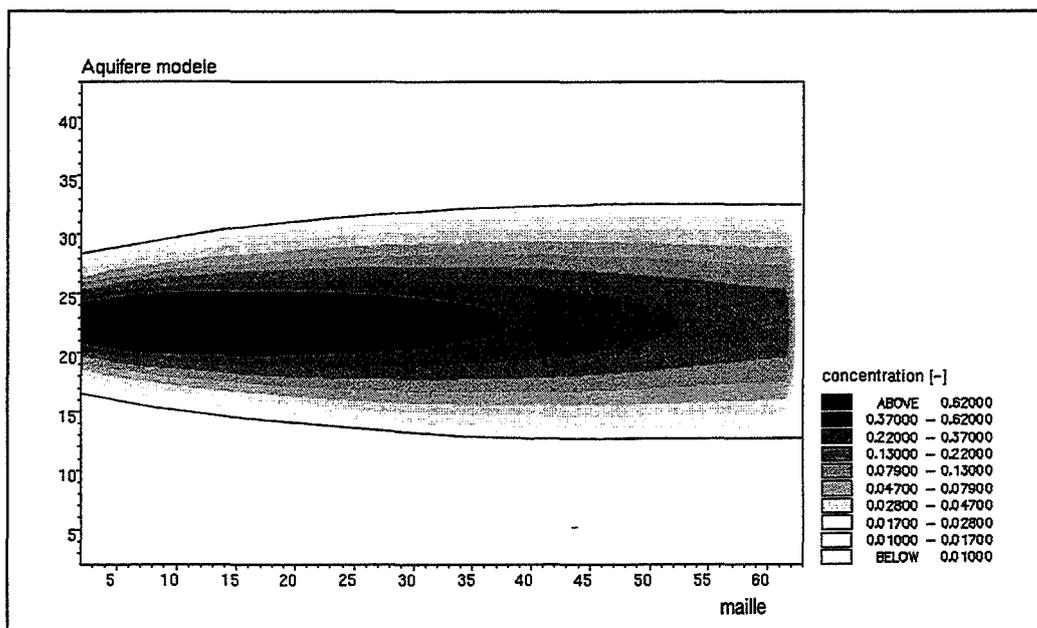


Fig. III.3.5 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source constante,  $\alpha_L(30m) = 2.5m$

c) Source intermittente en trois dimensions (10 couches dans notre cas)

Pour que la même quantité du polluant soit injectée, la concentration relative du polluant est 220 fois supérieure à celle introduite dans le cas d'une source de pollution continue en 2 dimensions.

La dispersivité  $\alpha_{TVH}$  est choisie égale à 0.5m pour une distance de traçage de 300m, et à 0.05m pour une distance de traçage de 30m.

	concentration maximale $c_{max}$	extension du nuage [m]
$\alpha(300m)$	$5.91 \cdot 10^{-5}$	
$\alpha(30m)$	$1.07 \cdot 10^{-3}$	$d = 3.25 \text{ m}$

$$c_{30}/c_{300} = 18.$$

Les fig. III.3.6 et III.3.7 présentent les résultats de la simulation pour la première des 10

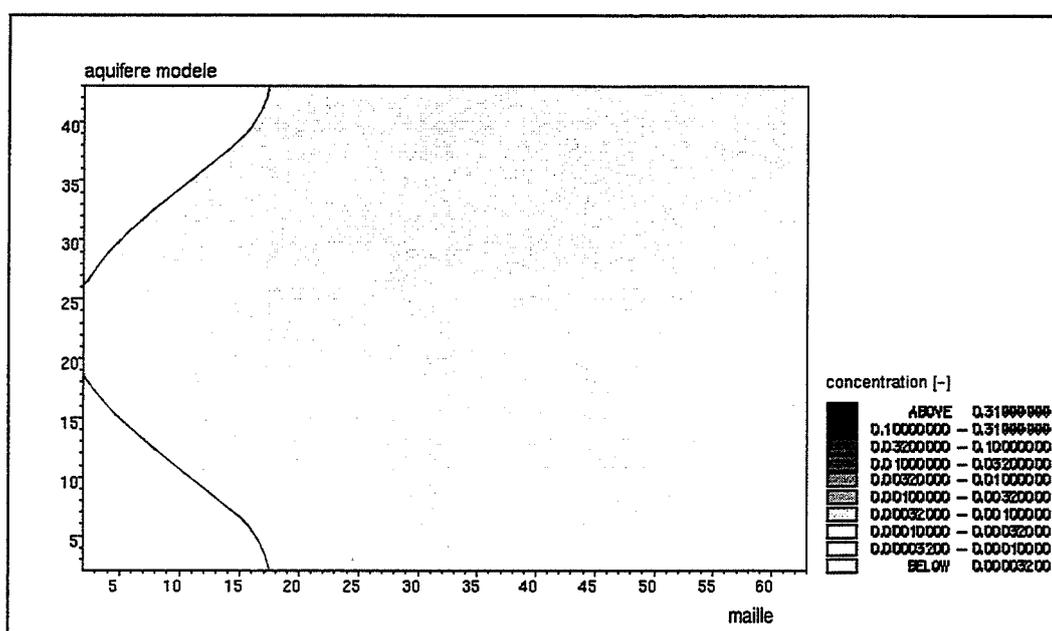


Fig. III.3.6 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source intermittente,  $\alpha_L(300m) = 25m$

courshe.pcxches. Les concentrations sont dessinées sur 5 décades. En fig. III.3.6, on voit que le nuage est très dispersé. Cela est dû à des effets numériques dominants, notamment proches de la limite. Il n'est plus possible alors de déterminer une extension du nuage.

Dans les fig. III.3.2 à III.3.7, les classes de valeurs dessinées ont été choisies d'une part pour une meilleure visualisation de la propagation de la pollution et d'autre part pour pouvoir comparer au mieux les résultats pour le même cas, mais avec différentes valeurs de dispersivité.

Des effets numériques influencent les résultats obtenus. Pour cette raison, il est difficile de quantifier exactement les différences obtenues. En effet, il n'est pas toujours facile de déterminer les extensions de la pollution pour les dispersivités les plus grandes en raison des effets

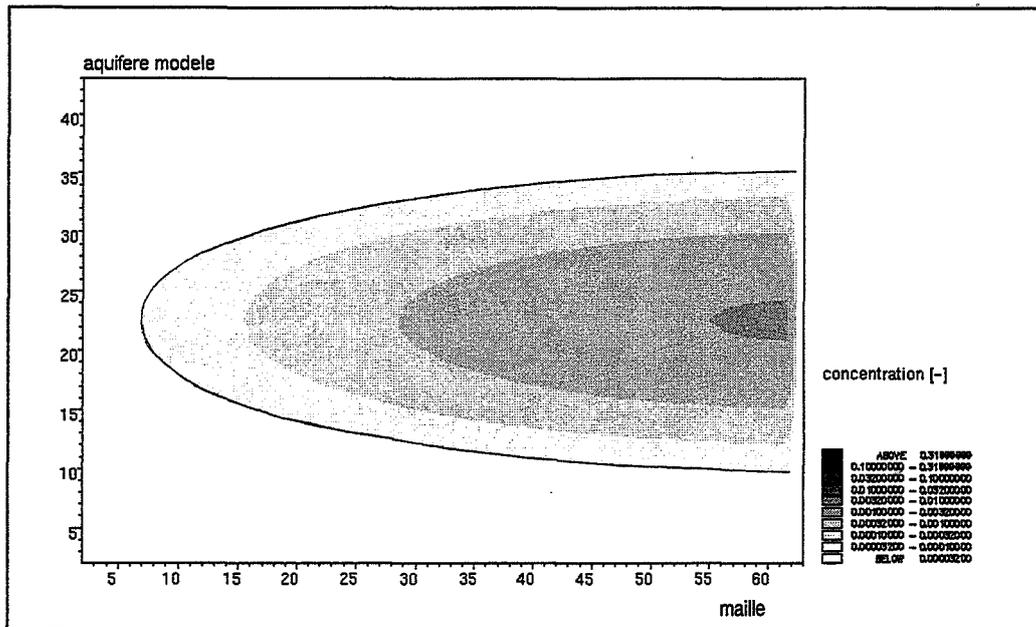


Fig. III.3.7 : Dispersion d'un nuage en 3 dimensions, source intermittente,  $\alpha_L(30m) = 2.5m$

de limites du modèle. Nous constatons néanmoins que, qualitativement, les résultats sont assez sensibles à l'échelle des dispersivités utilisées.

Le choix des dispersivités adaptées à l'échelle étudiée est donc important. Ces développements sur les échelles de dispersivités ont une conséquence importante du point de vue théorique sur la modélisation spatiale des phénomènes de pollution. La représentation spatiale des risques de propagation des pollutions en zone saturée dépend de l'échelle d'observation des dispersivités.

Pour la modélisation de l'écoulement, à partir des valeurs mesurées sur terrain, on obtient un paramètre caractérisant l'écoulement. La mesure ponctuelle est représentée par la perméabilité  $k$ . L'intégration de cette donnée sur l'épaisseur mouillée de l'aquifère donne la transmissivité  $T$ . Pour la dispersion d'un polluant, le même type de problème qu'en hydrodynamique se pose. Proche de la source, existe une dispersivité locale, qui correspond à la valeur de la dispersivité ponctuelle mesurée. Si un traçage est réalisé sur une certaine distance, les dispersivités  $\alpha$  mesurées intègrent les hétérogénéités existantes dans le terrain, toujours par rapport au point d'origine de la pollution. Si la dépendance des dispersivités de l'échelle est due à l'hétérogénéité du terrain et que cette dépendance est évaluable, elle peut constituer une appréciation implicite de l'hétérogénéité du milieu.

Dans le cas d'un modèle dédié à un aquifère particulier, il faut donc introduire les coefficients de dispersivité par rapport à la distance de chaque objet qui est susceptible d'être menacé par la pollution. En absence de mesures sur l'aquifère particulier, ce qui est le cas pour la grande majorité des sites étudiés, il faut se contenter des mesures qui ont été publiées pour une distance de traçage particulière pour un aquifère dont la structure est comparable.

On peut réaliser les calculs de ce chapitre par des routines d'un macro-langage programmé à l'intérieur d'un Système d'Information Géographique. Cela permettrait de détailler et d'automatiser les performances de l'analyse spatiale pour encore mieux comprendre le comportement des pollutions dissoutes.

### III.4 Intégration des modèles de simulation en ZS et ZNS dans un Système d'Information Géographique (SIG)

Après avoir simulé la propagation de polluants dans la zone non-saturée par l'approche polyphasique et par l'approche hydrodispersive dans la zone saturée, il s'agit d'intégrer ces deux modules dans un Système d'Information Géographique. L'intérêt de cette intégration consiste d'abord à échanger les données spatiales entre les modèles hydrodynamiques et le SIG et de valoriser les résultats des modèles hydrodynamiques pour un objectif d'aide à la décision.

L'utilisation d'un système d'information géographique apporte des avantages importants pour le traitement des données avant et après la simulation (prétraitement et post-traitement)

Pour le prétraitement, le recours à un SIG permet :

- la gestion des échelles différentes (taille des mailles des modèles de simulation)
- la gestion des données en fonction de leur précision et cohérence
- l'utilisation de méthodes d'interpolation et de procédures géostatistiques pour le traitement des mesures ponctuelles de la zone d'étude
- une gestion cohérente des données provenant des sources différentes
- l'intégration d'algorithmes pour la production d'un maillage qui peut être exploité ensuite par les logiciels de simulation hydrodynamique

Pour le post-traitement, les fonctionnalités d'un SIG permettent de traiter les aspects suivants :

- la "durée de vie" des données : Certaines données, comme la géologie et la pédologie, sont valides de façon quasi-permanente. D'autres dépendent de l'évolution de l'occupation du sol et des activités d'aménagement du terrain, elles sont à mettre à jour à des intervalles du temps réguliers.
- la visualisation en trois dimensions. Pour un modèle de propagation en trois dimensions, la visualisation en trois dimensions des résultats est plus facile. Il faut évidemment que les données correspondantes soient disponibles.
- le raisonnement spatio-temporel à travers des fonctions zonales et focales: Cette option peut constituer un support d'expertise.

### III.4.1 Couplage entre la zone non saturée et la zone saturée

Le couplage entre la simulation de la propagation de la pollution en zone non-saturée d'une part et dans la zone saturée d'autre part mérite un intérêt particulier. Ce couplage fait intervenir le comportement spatio-temporel des processus physiques de transfert de polluants, le flux de changement de phase, le flux à l'intérieur d'une phase et du battement de la nappe.

#### Processus physiques du transfert des polluants :

- d'une part, il y a l'eau liée aux grains et celle de la frange capillaire, contenant de la pollution dissoute qui va s'infiltrer dans la zone saturée par diffusion moléculaire.
- d'autre part, il y a le processus de dissolution à l'interface hydrocarbures/eau qui modifie la phase huile/eau.
- étant donné qu'à l'intérieur de l'eau liée, le polluant est transporté par diffusion moléculaire, l'infiltration résultant de ce mécanisme sera considérée comme négligeable par rapport au transport par écoulement polyphasique. Le flux des hydrocarbures dans la zone saturée est donc considéré comme provenant uniquement du changement de phase du polluant liquide.

#### Cinétique de dissolution :

Le mécanisme de changement de phase s'effectue selon une cinétique qui rend le flux  $\phi$  du polluant vers la phase non-polluée proportionnel à la différence des concentrations dans chaque phase (Côme, 1996):

$$\Phi \sim \alpha(c_h - c_e)$$

Eq. (III.4.1)

où

$c_h$  est la concentration du polluant dans la phase liquide organique

$c_e$  est la concentration dans la phase aqueuse

$\alpha$  est une constante de proportionnalité qui dépend du polluant et des paramètres thermodynamiques.

#### Flux à l'intérieur d'une phase sans la présence d'un courant :

Dans la phase aqueuse, le polluant se propage d'abord par diffusion moléculaire, qui est modélisée par la loi de Fick. L'évolution spatiale de la concentration peut donc être représentée par une fonction exponentielle de type Gauss

$$c(x) \sim e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2D\tau}}$$

Eq. (III.4.2)

où :

$e$  : constante d'Euler

$x_0$  : point de départ

$x$  : point d'observation

Battement de la nappe :

Si le niveau piézométrique de la nappe baisse plus rapidement que le front des hydrocarbures, le polluant n'arrive pas à la nappe. Pour une baisse des deux interfaces (front d'infiltration et nappe) du même ordre de grandeur, le polluant chemine par digitation capillaire là où la perméabilité est la plus élevée. Si le niveau de la nappe augmente, des poches d'hydrocarbures piégés en dessous de ce niveau apparaissent; ces poches généreront une pollution par dissolution dans la phase aqueuse. Si pour le battement de la nappe, l'échelle de temps est de l'ordre du mois, celle de la migration verticale des hydrocarbures à travers de la zone non-saturée est de l'ordre du jour, le battement de la nappe peut être considéré comme négligeable par rapport à la migration du polluant.

Comportement spatio-temporel :

La propagation spatiale du polluant par diffusion moléculaire en ZS s'effectue selon une fonction exponentielle Gaussienne selon  $z$  en-dessous la surface d'infiltration de pollution dans la ZNS et de manière symétrique dans le plan  $(x,y)$  au droit du point d'injection du polluant.

Si le gradient d'écoulement en nappe est très faible, les concentrations en polluant augmenteront en fonction du temps selon la cinétique de changement de phase.

Pour prendre en compte la propagation par advection, on compare le flux de polluant par changement de phase avec le flux advectif. Soit le flux en direction  $x$  et le point d'observation en aval du cône des hydrocarbures :

Si la cinétique de changement de phase est forte et le gradient est faible, la concentration en polluant va tendre vers la saturation après une durée  $\tau_1$  relativement courte et la concentration va tendre vers la saturation après une courte distance  $\xi_1$ . Si la cinétique de changement de phase est faible et le gradient est fort, la concentration en polluant va tendre vers la saturation après une durée  $\tau_2$  plus longue et la concentration va tendre vers la saturation après une distance  $\xi_1$  plus longue.

La représentation du comportement spatio-temporel de l'ensemble de ces mécanismes peut-être améliorée à l'aide d'un SIG grâce aux possibilités d'organisation des données qu'il propose, en fonction de leur comportement spatio-temporel.

Couplage entre les modèles de simulation :

Il s'agit donc de faire "cohabiter" les deux modèles de propagation de pollution en ZNS et ZS pour représenter au mieux le phénomène de pollutions à deux phases. La direction princi-

pale d'écoulement étant la verticale en zone non-saturée, on peut la représenter avec le système MOFAT, en incluant les phénomènes d'échange entre les phases, notamment la vaporisation des hydrocarbures volatiles.

Le couplage entre les deux modèles de simulation (dans notre cas MOFAT et Mike-SHE) à l'interface entre la zone non saturée et la zone saturée fait intervenir un terme de cinétique d'échange de masse entre les deux zones.

Pour la discrétisation à l'interface : MOFAT étant limité à la discrétisation en deux dimensions, on définit des sections ayant le même comportement (même type de sol, mêmes conditions initiales et aux limites). Les éléments finis ainsi que les différences finies fournissent les valeurs des inconnues en chacun des noeuds du maillage. On peut donc coupler les deux modèles à l'interface entre la zone non-saturée et la zone saturée. Les paramètres caractéristiques de la cinétique d'échange de la matière à travers l'interface, seront la saturation en phase non-aqueuse dans la zone non-saturée (MOFAT) d'une part, et la concentration en hydrocarbures dissoutes dans la zone saturée (Mike-SHE).

#### **III.4.2 Introduction des données spatiales dans les modèles de simulation et interprétation des résultats**

Les outils de simulation comme les modèles hydrodynamiques et hydrodispersifs ont besoin de nombreuses données réparties dans l'espace, c'est le cas des perméabilités, des transmissivités et des dispersivités. On peut gérer ces données de manière plus flexible si on se sert d'une base des données qui facilite l'introduction de ce type de données.

Si on veut mettre les résultats des modèles de simulation en relation avec des objets géographiques comme des installations techniques qui sont susceptibles de relâcher des pollutions ou des ressources en eau (puits d'alimentation en eau potable, cours d'eau) qu'il faut protéger contre les pollutions, le croisement des résultats de la simulation avec les couches thématiques correspondantes du système d'information géographique s'impose.

La "coopération" entre système d'information géographique et logiciel de simulation, suppose cependant un pré-requis important : la géoréférenciation. Il s'agit de trouver un système de référence où les attributs d'un point localisé puissent être affectés de leurs coordonnées géographiques dans le maillage de simulation. La localisation de la piézométrie ou des pollutions simulés doivent être aussi bien référenciées dans l'espace.

Pour la géoréférenciation, il existe différents systèmes :

Les systèmes des coordonnées Lambert II (souvent Lambert IIe (étendu)) et Lambert III sont les systèmes les plus connus. Etant donné la localisation du site d'étude, la géoréférenciation a été faite en coordonnées Lambert II.

La topographie, le niveau du substratum, la piézométrie ou les propriétés hydrauliques et hydrodispersives, intervenant comme données d'entrée dans les modèles de simulation, ont été acquises et introduites de la manière suivante :

- Les isolignes ont été digitalisées à partir des cartes de niveau. Ces informations ont été traduites en données linéaires dans le système d'information géographique.
- Pour la carte digitalisée, on construit la topologie
- L'information dans les couvertures vecteur est traduite en format raster. Pour un logiciel de simulation qui utilise les différences finies, on choisit la taille des cellules correspondant à la taille des mailles pour la simulation. Si le logiciel de simulation travaille sur d'autres objets que des rectangles, il faut récupérer les informations avec un maillage de simulation.
- La couche thématique est ensuite exportée dans un format qui soit lisible pour le modèle de simulation, le plus couramment connu en ASCII.

### III.4.3 Analyse spatiale des résultats de simulation

Avec le modèle hydrodispersif, nous avons estimé l'extension du nuage de polluant latéralement dans l'espace. L'analyse spatiale nous permet à l'aide de fonctions zonales de transformer ces informations de concentrations dans l'espace en temps de transfert ou proximités, informations qui peuvent être utilisées pour l'estimation du risque en formant des paramètres statistiques à partir des paramètres distribués dans l'espace. Ces paramètres, moins spatialisés mais plus synthétiques, peuvent être ainsi utilisés comme des paramètres d'entrée pour des outils plus directement utilisables pour l'aide à la décision en matière d'intervention ou de déclenchement de plans de protection ou de gestion de l'accident.

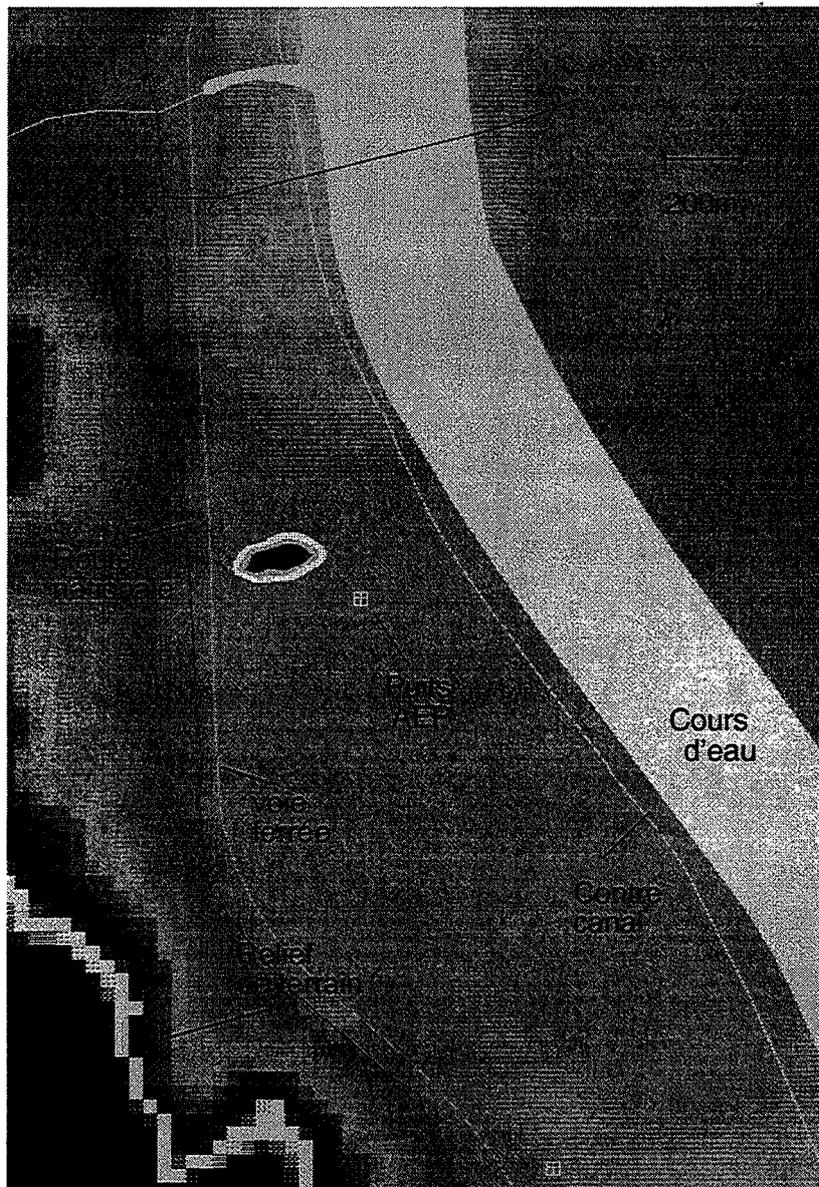


Fig. III.4.1: Propagation d'une pollution à partir d'une voie ferrée

La figure III.4.1 présente un exemple de pollution sur le site d'étude où la source est localisée à côté de la voie ferrée. Elle se propage en direction d'un canal à côté d'une rivière. La source

est supposée comme intermittente.

### III.4.3.1 Place de la modélisation dans un schéma de gestion d'un accident

L'intégration des modèles de simulation dans un SIG permet de mieux se rendre compte de leur intérêt et de mieux valoriser les résultats. La figure III.4.2 présente le schéma de gestion

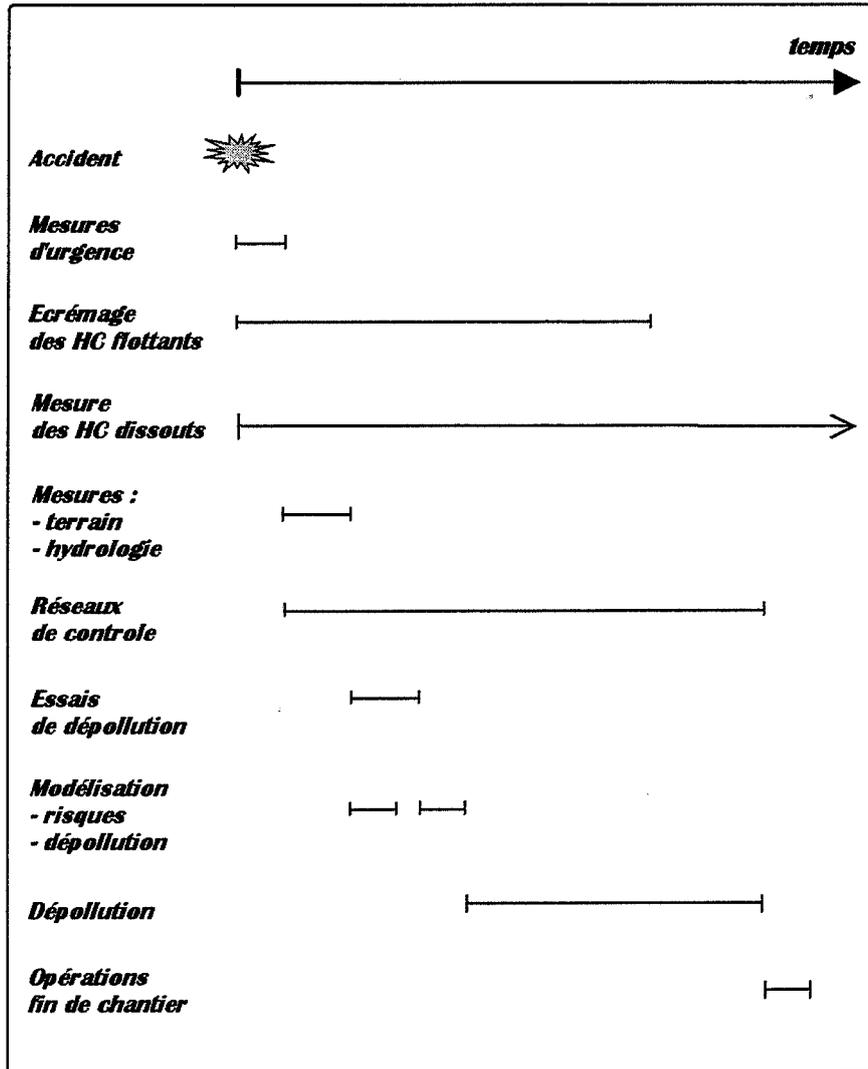


Fig. III.4.2: Gestion d'une pollution accidentelle par des hydrocarbures

d'un accident de pollution par les hydrocarbures. Après les mesures du terrain qui sont nécessaires pour alimenter un modèle de simulation, ce type de schéma peut contribuer à cibler les risques à l'aval de l'accident. Une deuxième phase de modélisation pourra être envisagée pour optimiser les actions de la dépollution.

L'opération de modélisation /simulation ne doit pas rester une tâche isolée du contexte de l'accident et de ses conséquences. Elle doit pouvoir s'intégrer dans la séquence des actions à entreprendre à condition, bien sûr, qu'un minimum d'informations (mesures, modélisations existantes) soit accessible et utilisable.

**QUATRIEME PARTIE :**  
**LIMITES DE MODELISATION**  
**ET PERSPECTIVES D'AMELIORATION**



## **PARTIE IV. LIMITES DE MODELISATION ET PERSPECTIVES D'AMELIORATION**

Après une appréciation critique de la méthode proposée qui discute les incertitudes de la modélisation, nous précisons les conditions d'utilisation de la méthodologie proposée et ses champs d'application.

Les perspectives d'amélioration et un enrichissement du système de modélisation sont ensuite indiqués.

### **IV.1 Appréciation critique de la méthode proposée**

Les incertitudes sur les résultats des simulations ont pour origine les erreurs de cartographie, la connaissance du milieu pour l'approche hydrodispersive ainsi que celles concernant le module d'écoulement polyphasique.

Ces différents facteurs d'incertitude n'ont pas la même importance. La prise en compte ou non de l'hétérogénéité du terrain, la méthode de discrétisation du milieu et le choix des coefficients de dispersivité sont les facteurs d'incertitude qu'il nous semble le plus intéressant d'examiner pour dégager quelques conditions de généralisation de la méthode proposée fondée sur le couplage des deux modèles de simulation.

#### **IV.1.1 Facteurs d'incertitudes liées à la modélisation en zone non saturée et zone saturée**

##### *Aspects généraux*

Selon les cas, les sources d'erreurs peuvent être dues à une mauvaise évaluation des concentrations, des relations entre concentrations ou du cheminement du polluant. Dans le cas d'un changement de phase, des processus chimiques ou biologiques qui interviennent sont souvent difficile à quantifier et on se placera le plus souvent dans le cas pessimiste qui consiste à négliger les interactions avec le milieu et les transformations biologiques.

Il est important d'estimer les erreurs dans les relations entre concentrations si le polluant reste dans une seule phase et s'il n'a pas d'interaction avec le milieu. Nous avons montré l'influence de ces erreurs dans le cas des dispersivités.

##### *Pour l'écoulement en zone non-saturée*

En zone non-saturée, les incertitudes sont élevées puisque dans cette zone, le régime hydraulique (teneur en eau, succion) est en changement permanent. L'incertitude introduite est due aux non-linéarités de ces fonctions empiriques et aux effets d'hysteresis. En cas d'écoulement triphasique, la situation est encore plus compliquée. Les modèles ne sont en général

pas validés pour toutes les combinaisons de sols et de régimes hydrauliques possibles. En cas d'écoulement polyphasique, l'erreur reste cependant localisée sur la zone d'infiltration.

*Pour l'écoulement en zone saturée*

En zone saturée, les incertitudes sont dues en principe au manque de mesures de perméabilités. En général, les études sur le terrain produisent une seule valeur de perméabilité. Sur la zone d'étude, les perméabilités des lentilles d'argile ou graveleuses sont mal renseignées.

*Pour le transport en zone saturée*

Les incertitudes sont d'abord dues au fait que si sur beaucoup d'aquifères, on connaît au moins une valeur de perméabilité, les dispersivités, en revanche, ne sont pratiquement jamais mesurées. On est donc amené à les estimer par interpolation à partir des données synthétiques sur différents sites. Pour les valeurs de dispersivité transversale qui se rapportent toujours aux dispersivités longitudinales, les estimations sont différentes selon les auteurs.

Si on prend en compte les échelles de dispersivité, l'erreur ne dépend plus de la distance de traçage. Elle sera homogène pour toutes les distances. Cependant, si les mesures sur l'aquifère sont peu nombreuses, il apparaît que l'incertitude sur les dispersivités est beaucoup moins élevée que pour les perméabilités ou transmissivités. En faisant des hypothèses conservatives, nous négligeons des effets d'adsorption et de biodégradation.

D'autres incertitudes sont introduites par la discrétisation verticale qui sera toujours limitée à un nombre faible de couches pour limiter l'effort de calcul. Nous avons démontré de ces effets en Fig. III.2.3.

*Pour le couplage entre zone non-saturée et zone saturée*

Il est difficile d'estimer les erreurs de concentration en hydrocarbures dissouts dans la zone saturée. A l'interface entre ZNS et ZS, la géométrie du milieu entraîne des effets de piégeage des hydrocarbures. Cela implique des mécanismes de transfert compliqués.

*Erreur de discrétisation*

La discrétisation se heurte aux limites quand il est difficile de modéliser des contours compliqués ou des lentilles dans un aquifère avec, par exemple, des mailles rectangulaires. L'erreur due à la discrétisation de l'équation peut être maîtrisée de manière à rester en deçà d'un seuil imposé.

#### **IV.1.2 Conditions d'utilisation de la méthode**

La méthode proposée dans le cadre de ce travail a été appliquée au milieu poreux alluvial. La méthode peut être utilisée pour les déversements d'hydrocarbures légers dans ce milieu. Les échelles de dispersivité sont à prendre en compte surtout pour les sources ponctuelles, par exemple, en cas de rupture de pipelines ou d'accident de transports de matières dangereuses. Il ressort des mécanismes mis en jeu, que le modèle en zone non-saturée est davantage approprié pour réaliser un bilan de la masse des hydrocarbures puisque le polluant ne migre pas beaucoup latéralement. Cependant, c'est la migration prédominante en zone saturée qui est à l'origine du risque pour les habitations, les puits d'AEP, le milieu naturel.



## IV.2 Améliorations pour modéliser les transferts de polluant

Les améliorations des modèles d'écoulement polyphasique peuvent porter sur deux niveaux de connaissances :

- 1) La qualité des données en entrée du modèle et en particulier : la sensibilité des données de dispersivité en fonction de leur échelle d'observation, les connaissances des caractéristiques du terrain à partir des triangles de texture des sols.
- 2) les mécanismes de modélisation eux-mêmes. En essayant de développer des approches plus simplifiées.

L'amélioration de la représentation de l'écoulement polyphasique comprend notamment une meilleure caractérisation des échanges entre la zone non-saturée et la zone saturée, la représentation des perméabilités et des mécanismes de succion en présence de deux autres phases, la prise en compte des hétérogénéités et la dimensionnalité.

Dans le domaine des modèles hydrodispersifs, nous proposons des coefficients de dispersivité qui sont valables pour des distances de traçage quelconques et donc applicables au milieu poreux alluvial.

Il y a également à réfléchir sur les modèles "sharp interface models" combinés avec un maillage dynamique pour la mise au point d'un modèle d'écoulement polyphasique plus simplifié.

### IV.2.1 Prise en compte de l'échelle d'observation des coefficients de la dispersivité en modélisation hydrodispersive

Nous avons vu les lacunes des modèles hydrodispersifs habituellement utilisés pour représenter d'une manière correcte la dépendance des coefficients hydrodispersifs à l'échelle d'observation. Russel et al. (1995) montrent la nécessité de modèles qui soient valides aux échelles multiples et proposent des modèles stochastiques.

L'introduction d'une dispersivité d'observation  $\alpha_l(r_{\text{obs}})$  constante dans un modèle de simulation mène à deux conséquences importantes :

- 1) La sur- ou sous-estimation de la dispersivité pour les autres distances de traçage.
  - 2) Le traçage d'un nuage de polluant dans son évolution spatio-temporelle n'est pas correct.
- La régression effectuée à partir de la fig. III.3.1., (Neuman, 1990) permet d'obtenir :

$$\alpha_{L, m} = 0,0175L^{1,46}$$

Eq. (IV.2.1)

où  $L$  est l'échelle d'observation. A la place de coefficients de dispersivité qui varient avec la distance, on pourra définir les coefficients d'interpolation comme des dispersivités :

$$\bar{\alpha}_{l,m} = (0.0175, 1.46)$$

Eq. (IV.2.2)

Cela donne un jeu de coefficients qui ne varient plus avec la distance  $L$ . (Su, 1995) donne une équation qui traite une dispersivité fractale. Cette équation est du type Fokker-Planck :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_c^2 (\eta_c) x_s^m \left[ -\frac{k}{\omega_{\text{eff}}} \frac{\partial h}{\partial x} \right]^n \frac{\partial c}{\partial x} \right\} - \frac{\partial}{\partial x} (vc)$$

Eq. (IV.2.3)

où

- $c$  [kg/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant
- $\eta_c$  [m] : limite d'échelle fractale inférieure
- $\sigma_c^2$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de dispersion fractale
- $x_s^m$  [m] : échelle

Notre proposition consiste donc à discrétiser une équation qui conserve "en mémoire" la distance parcourue par la pollution depuis la source jusqu'au point de mesure ce qui permet d'attribuer toujours la "bonne" dispersivité d'une maille du domaine de discrétisation par rapport à la distance de l'origine du polluant.

Les bénéfices possibles seraient une meilleure estimation de l'extension du nuage, surtout

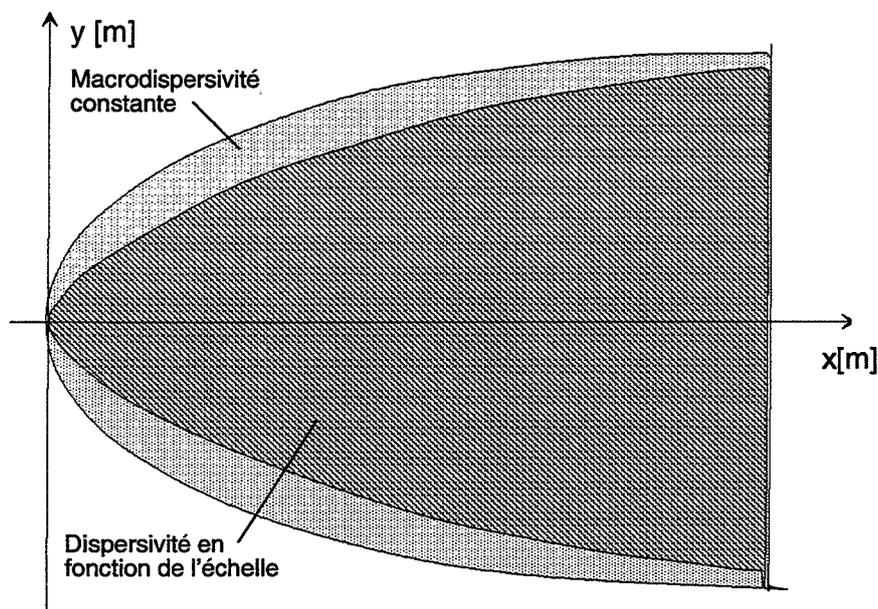


Fig. IV.2.1: Extension d'une pollution sans ou avec prise en compte les échelles des dispersivités

proche de la source (si on admet que les dispersivités atteignent une valeur constante pour des longues distances). La figure IV.2.2 montre l'extension d'un nuage que l'on obtiendrait en cas de dispersivités constantes (nuage extérieur) et en cas de prise en compte de l'échelle à

laquelle elles sont observées. Si les dispersivités atteignent une limite à grande distance, les extensions du nuage vont se rapprocher pour ces distances.

Les problèmes pour la validation de cette approche sont essentiellement liés à la disponibilité de valeurs expérimentales par rapport aux différentes distances de traçage. Les comparaisons des valeurs expérimentales obtenues pour différents types de sol, sont rares.

#### IV.2.2 Réflexion sur une approche simplifiée : 'Sharp interface model'

Une possibilité pour modéliser ce phénomène émerge de la supposition que la plupart des LNAPL (Light Non-Aqueous Phase Liquide) forme une phase non-miscible avec la phase aqueuse au-dessus de la zone saturée. S'il s'agit d'hydrocarbures, une faible partie se dissout dans la nappe, négligeable en terme de masse d'hydrocarbures infiltrés dans le sol, mais pas en terme de la qualité de l'eau résultante.

Une approche pour la modélisation de ce phénomène consisterait à modéliser les deux phases de façon indépendante en terme d'échange de matière, c'est-à-dire, sans considérer un flux diffusif traversant l'interface entre les deux phases.

a) Dans la phase aqueuse, l'approche de modélisation reste hydrodispersive selon les modèles connus parce qu'il y a toujours une faible partie des hydrocarbures qui reste en solution.

b) Dans la phase non-aqueuse, il faudrait changer les propriétés hydrodynamiques du milieu vis-à-vis des hydrocarbures en prenant en compte la faible partie de l'eau liée aux grains qui reste dans cette zone.

Cependant, en terme de charge, les deux phases exercent une influence l'une sur l'autre. Le poids de la lentille d'hydrocarbures aura un effet sur la phase aqueuse qui se trouve en dessous. De ce fait, l'interface entre les deux phases va évoluer avec l'écoulement, ce qui implique les précautions de modélisation suivantes :

- étant donné que l'interface change la géométrie du maillage au cours de l'écoulement, ce dernier devrait s'adapter de façon dynamique en liaison avec les pas de calcul à l'interface des deux phases (l'approche eulerienne n'est plus valable).

- un raffinement des mailles près de l'interface des deux phases devient nécessaire pour équilibrer le bilan de masse pour les deux phases.

Garcia (1991) présente la génération d'un maillage adaptatif intégrant l'ensemble des caractéristiques géométriques et géologiques du domaine pour construire un maillage de type quelconque. L'approche entièrement automatique permet aussi d'ajuster dynamiquement le maillage à des champs de gradient. Elle comporte deux étapes : la construction d'un maillage

initial qui recouvre le domaine, et son ajustement aux caractéristiques du domaine par déformations successives du maillage.

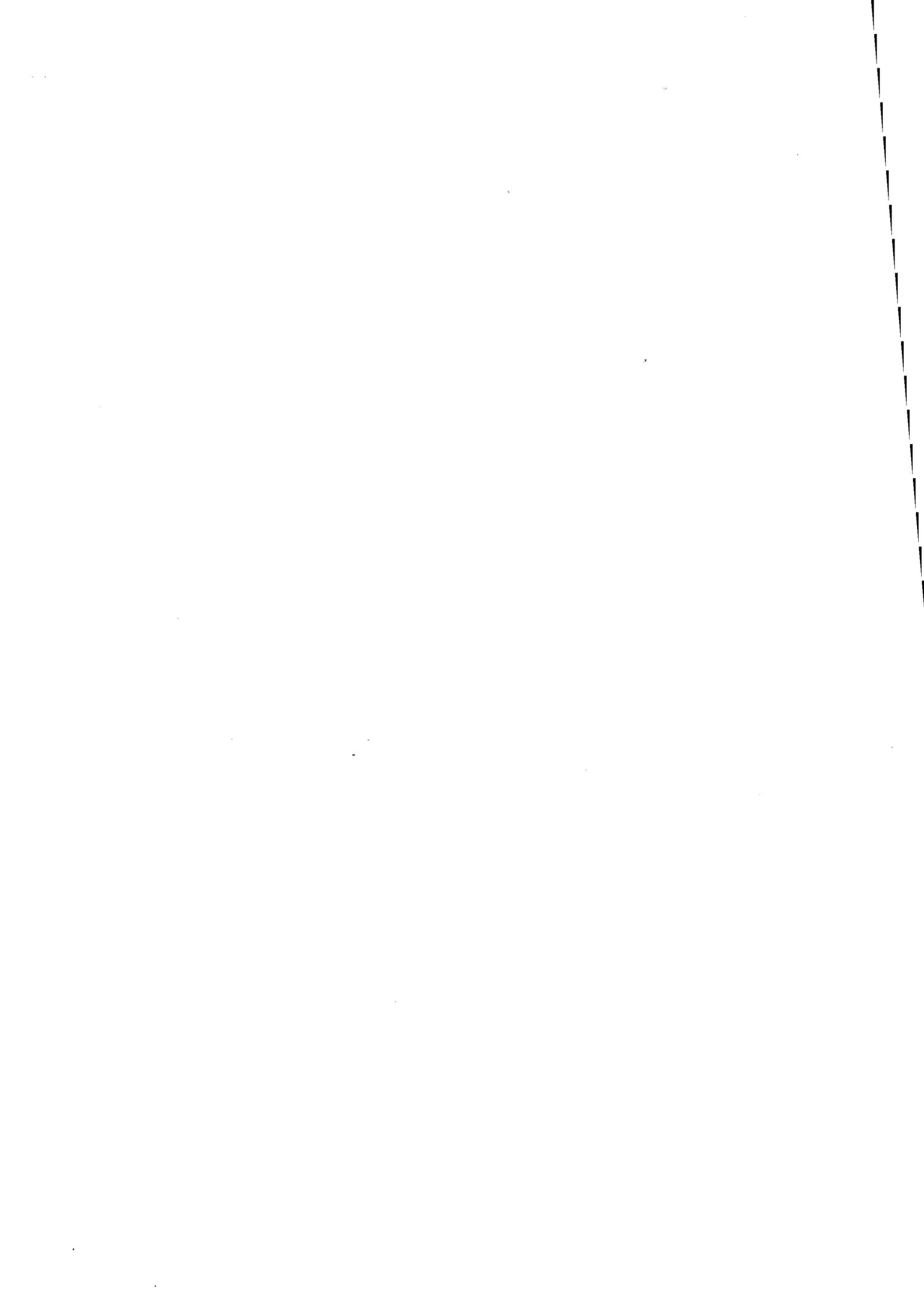
La répartition initiale du nuage du polluant serait la condition initiale du modèle. Les conditions limites seraient les propriétés de l'aquifère et la masse de polluant injectée.

La variable à déterminer serait, comme dans le cas d'un écoulement monophasique, la charge ou la pression, le calage du modèle s'effectuant avec les perméabilités.

Ce type de modélisation a cependant, lui aussi, ses limites :

1. Cette approche suppose une zone non saturée qui est stabilisée et dont la teneur en eau n'évolue pas en fonction du temps, sans prendre en compte, par exemple, les situations de pluie.
2. La méthode permettant un maillage adaptif dynamique est plus lourde que pour un maillage statique.

## **CONCLUSIONS**



## Conclusions

L'aide à la décision dans le cas d'une pollution par des hydrocarbures requiert des informations de nature différente : qualitatives, quantitatives, spatiales et temporelles. Le traitement de ces informations fait appel à différentes catégories d'outils. Les méthodes d'analyse existantes permettent d'étudier et de comprendre le comportement des phénomènes de pollution, mais, elles ne sont pas en mesure d'accomplir cette tâche seules, étant donné la complexité du problème à résoudre.

Pour simuler la propagation de la pollution dans les eaux souterraines, il est nécessaire de mettre en place un modèle fondé sur les lois physiques impliquées et permettant leur discrétisation dans l'espace et dans le temps. L'ensemble MOFAT/Mike-SHE comparé à d'autres modèles a été retenu puisqu'il représente un bon compromis par rapport au double objectif de ce travail de thèse : analyse du comportement de la pollution et analyse des risques de propagation pour l'aide à la décision.

L'analyse spatiale des risques de propagation de la pollution et la gestion des données distribuées dans l'espace, a été réalisée à l'aide du Système d'Information Géographique ArcInfo. L'analyse spatiale du cheminement du polluant a été effectuée en modélisant la propagation du polluant à travers la zone non saturée et la zone saturée. L'approche dédiée est celle de l'écoulement polyphasique-multiespèce en zone non-saturée. Les incertitudes du modèle d'écoulement polyphasique sont dues au manque de connaissances sur les propriétés hydrauliques des sols où se produit l'écoulement polyphasique et à l'absence de mesures. Dans la zone non saturée du milieu alluvial, le polluant n'a pas tendance à migrer latéralement et la grande majorité du polluant reste donc localisée à la zone d'infiltration. L'évaluation du comportement de l'écoulement polyphasique permet d'établir des bilans en hydrocarbures dans différentes zones hydrologiques.

Les résultats du modèle en zone non-saturée obtenus à l'aide du système MOFAT constituent une condition limite en tant que source du polluant pour le modèle de transport dissout en zone saturée, où il faut recourir à une approche de transport du polluant dissout, en prenant en compte les mécanismes de convection et de dispersion. Ici, il est important de prendre en compte la migration en trois dimensions et d'introduire dans le modèle un coefficient de dispersivité longitudinale et deux coefficients de dispersivité transversale. La comparaison des résultats de la simulation hydrodispersive en zone saturée avec des mesures de terrain, lorsqu'elles existent, et qu'elles sont fiables, est indispensable en matière d'ajustement des paramètres de sensibilité principaux, à savoir les coefficients de dispersivité. Ces valeurs des dispersivités en fonction de l'échelle d'observation ainsi que le rapport entre les différents coefficients ont une influence décisive sur la forme et l'extension du nuage de pollution. Pour un objet menacé (habitations, puits d'alimentation en eau potable, réseaux d'assainissement,...), nous considérons une distance traçage par rapport à la source pour le choix des coefficients des dispersivités.

Les systèmes d'information géographique peuvent satisfaire ici un double objectif : d'abord, ils facilitent l'organisation, l'introduction, la maintenance, la cohérence..., des paramètres qui caractérisent l'aquifère dans les modèles hydrodynamiques. La base de données géographiques du système permet de préparer les données d'entrée des modèles de simulation (potentiel, porosité, perméabilité, transmissivité). Une base de règles utilisée pour exploiter les triangles de texture permet d'améliorer la connaissance des caractéristiques du sol de la zone concernée par la pollution. Ensuite, les résultats des simulations issus du modèle Mike-SHE ont été superposés avec la base des données relative à l'aménagement du terrain . Les fonctions d'analyse spatiale, que le système d'information géographique permet de créer, peuvent produire des variables synthétiques (zones d'influence, isochrones,...) davantage exploitables pour mieux comprendre l'évolution, dans l'espace et dans le temps, des risques de pollution pour l'aide à la décision.

Des améliorations de modélisation sont encore possibles selon deux approches différentes : La première possibilité est d'améliorer les modèles. Pour cela, il est nécessaire de se concentrer davantage sur les aspects liés à la compréhension du phénomène de pollution et à sa représentation dans des modèles numériques adaptés au contexte du milieu poreux (Sharp Interface Model). Ce type de modèle peut constituer un bon choix si les effets capillaires sont négligeables. Mais il demeure indispensable d'améliorer la qualité des données à introduire dans les modèles. Les simulations réalisées montrent que les résultats sont sensibles du choix des coefficients de dispersivité pour un même évènement. Ces coefficients changent en fonction de la distance de traçage considérée, cette dernière évoluant en fonction de la progression de la pollution. Il a donc été nécessaire d'intégrer ces contraintes dans le modèle de simulation en zone saturée.

**REFERENCES**  
**BIBLIOGRAPHIQUES**



**REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES****Mathématiques et méthodes d'analyse numérique**

Bourgeat, A. and Mikelic, A. Homogenization of two-phase immiscible flows in a one-dimensional porous medium. *Asymptotic Analysis*, North-Holland, Elsevier Science B.V., 1994, vol. 9, pp. 359-380.

Carnahan, B., Luther, H.A. and Wilkes, J.O. Applied numerical methods. New York : Wiley, 1969.

Dhatt, G. et Touzot, G. *Une présentation de la méthode des éléments finis*, deuxième édition, 1984. Collection Université de Compiègne.

Garcia, M. *Génération automatique de maillage appliquée aux domaines complexes du sous-sol*. Thèse : Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1991, 204 p.

Hornung, U., Jaeger, W. and Mikelic, A. Reactive transport through an array of cells with semi-perméable membranes. *M<sup>2</sup>AN Modélisation mathématique et analyse numérique*, 1994, vol. 28, no. 1, pp. 59-94.

Huyakorn, P.S. and Nilkuha, K. Solution of Transient Transport Equation Using an Upstream Weighted Finite Element Scheme. *Appl. Math. Modelling*, 1979, vol. 3, pp. 7-17.

Huyakorn, P.S. and Pinder, G.F. *Computational Methods in Subsurface Flow*. Academic Press, 1983. 473 p. ISBN 0-12-363480-6.

Lucquin, B. et Pironneau, O.: *Introduction au Calcul Scientifique*. Sous la direction de P.G. Ciarlet et J.L. Lions. Masson, Paris, 1996. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise.

Mikelic, A. Regularity and uniqueness results for two-phase miscible flows in porous media. *International Series of Numerical Mathematics*, Birkhaeuser-Verlag, Basel, 1993, vol. 114, pp. 139-154.

Mikelic, A. Effets inertiels pour un écoulement stationnaire visqueux incompressible dans un milieu poreux. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 1995, t. 320, Série I, pp. 1289-1294.

---

Russel, T.F. and Wheeler, M.F. : Finite element and finite difference methods for continuous flow in porous media. *SIAM The Mathematics of Reservoir Simulation*. Edited by R.E. Ewing, 1983.

Sibony, M. et Mardon, J.C. *Systèmes Linéaires et Non Linéaires*. Hermann éditeurs, 1984.

Su, N. Development of the Fokker-Planck equation and its solutions for modelling transport of conservative and reactive solutes in physically heterogeneous media. *Water Res. Rech.*, 1995, vol. 31 no. 12, pp. 3025-3032.

Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L. *The Finite Element Method, vol. 1 : Basic Functions and Linear Problems*. 4th edition. Paris : Mc Graw-Hill, 1989. 648p. ISBN 0-07-084174-8.

### **Etudes des risques**

Henley, E.J. and Kumamoto, H. *Reliability engineering and risk assessment*. Eaglewood Cliffs : Prentice-Hall, 1981, N.J. 07632.

Hutinet, T., Lajeunesse, S. et Martin, L. Atelier FIABEX. Vers une integration des études SdF en phase de conception. Note de la société DATA CEP, 32bd. Ornano, 93287 Saint Denis Cedex

Lambert, H.E. *Systems safety analysis and fault tree analysis*. Lawrence Livermore Laboratory, 1973, UCID, 16238n, 70p.

Schreiber, A.M. Using event trees and fault trees. *Chemical Engineering*, October 4, 1982, pp. 115-120.

### **Hydrogéologie**

Bhattacharya, P.K. and Patra, H.P. *Direct Current Geoelectric Sounding*. Amsterdam : Elsevier Publishing Company, 1968.

Cara, M. *Geophysique*. Paris : Dunod, 1989. 186p. ISBN 2-04-012340-7.

Castany, G. Principes et méthodes de l'hydrogéologie. Paris : Bordas, 1982. 236p. ISBN 2-04-011221-9.

Gelhar, L.W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research*, 1986, vol. 22, no. 9, pp. 135 - 145.

Klotz, D. et al. Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field relationships. *Journal of Hydrology*, 1980, vol. 45, no. 3, pp. 169-184.

Lallemand-Barres, P. et Peaudecerf, P. Recherche des relations entre la valeur de la dispersivité macroscopique d'un milieu aquifère, ses autres caractéristiques et les conditions de mesure. *Bulletin, Bureau de Recherches Géologiques et Minières*. 1978, Sec. 3/4, pp. 277-287.

Neuman, S.P. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. *Water Resources Research*, 1990, vol. 26, no. 8, pp. 1749-1758.

de Marsily, G. *Hydrogéologie quantitative*. Paris : Masson, 1981. 219 p. Collection sciences de la terre.

Musy, A. et Soutter, M. *Physique du sol*. Lausanne : Presses polytechniques et universitaires romandes, 1991. 335p. ISBN 2-88074-211-0.

Wild, A. *Soils and the environment*. Cambridge : Cambridge University Press, 1993. 287p. ISBN 0-521-43859-4.

## **Pollutions**

Anker, W. *Comparaison des méthodes de modélisation pour l'évaluation des risques de pollution des eaux souterraines*. Rapport de DEA : Ecole des Mines de Saint-Etienne, 1994, 120 p.

Appelo, C.A.J. and Postma, D. *Geochemistry, Groundwater and Pollution*. Balkema, 1996.

Fetter, C.W. *Contaminant Hydrogeology*. New York : Macmillan Publishing Company, 1993, 458 p.

Dubourgier, H.C. et Hofman, M. (ed's). *L'assainissement des sols pollués*. Compte-Rendu des Conférences des 4 et 5 mai 1995. Ecotop 95, 3-6 mai 1995. Foire Internationale de Bruxelles.

Gaujous, D. *La pollution des milieux aquatiques*. Paris : Technique & Documentation - Lavoisier, 1993. 212 p. ISBN 2-85206-917-2.

---

Goubier, R. *Action internationale dans le domaine des sites pollués*. La lettre Ademe, mars 1994. numéro spécial, pp. 51-52.

Graillot, D. et Anker, W. *Gestion des ressources en eau souterraine. Pollution des eaux souterraines et impacts sur les eaux de surface. Méthodes de recherche, outils et technologies de dépollution*. Saint-Etienne : Ecole des Mines, 1994. Compte-rendu du Workshop des Régions Partenaires, Stuttgart, 17-20 avril 1994. Contributions des participants de la Région Rhône-Alpes.

Imbert, T. Light hydrocarbon soil contamination : what is about the market in France ? in : *L'assainissement des sols pollués*. Edité par H.C. Dubourgier et M. Hofman. Compte-Rendu des Conférences des 4 et 5 mai 1995. Ecotop 95, 3-6 mai 1995. Foire Internationale de Bruxelles.

Kobus, H. et al. Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung - Konzeption und Programmrahmen. *Mitteilungen des Instituts fuer Wasserbau der Universitaet Stuttgart*, Heft 82, Oktober 1993.

Miller, J. Site investigation and remediation priorities : how to tackle the problem ? in : *L'assainissement des sols pollués*. Edité par H.C. Dubourgier et M. Hofman. Compte-Rendu des Conférences des 4 et 5 mai 1995. Ecotop 95, 3-6 mai 1995. Foire Internationale de Bruxelles.

Moszkowicz, P. et al. *Etat de l'art de la simulation des transferts de polluants dans les sols*. Association RE.CO.R.D., 1997. 71 p. plus annexes. Contrat N° 95-504.

Mouton, C. *Les étapes du processus de réhabilitation*. La lettre Ademe, mars 1994. numéro spécial, pp. 40-43.

Paret, C. *Analyse Statistique des Coûts des Accidents Technologiques*. Rapport de stage : Ecole des Mines de St.-Etienne, 1997. 96 p.

Pinay, O. *Remédiation des polluants du sol*. Travail réalisé dans le cadre d'un protocole d'accord entre les ministères de la défense et de l'environnement : Ecole des Mines de Saint-Etienne, 1995. 64 p.

Razakarisoa, O. et al. Pollution contrôlée d'aquifère alluvial par infiltration de gazole : impact du battement de nappe sur le degré de contamination de l'eau souterraine. *Groundwater Quality : Remediation and Protection (Proceedings of the Prague Conference, May 1995)*. IAHS publ. no. 225, 1995. Edited by K. Kovar, K. and J. Krasny'. Wallingford, Oxfordshire, UK : IAHS Press, 1995. pp. 139-147.

Robert, P. Exemplary Cases of Decontamination of Soils polluted by Light Hydrocarbons [l'accident place] in : *L'Assainissement des sols pollués*. Edité par H.C. Dubourgier et M. Hofman. Compte-Rendu des Conférences des 4 et 5 mai 1995. Ecotop 95, 3-6 mai 1995. Foire Internationale de Bruxelles.

Schmid, G. and Barczewski, B. Developpement and application of a fibre optic fluorometer for in-situ tracer concentration measurements. *Proceedings of the International Symposium on Transport and Reactive Processes in Aquifers*, Switzerland, April 1994.

Schwille, F. Groundwater pollution in porous media by fluids immiscible with water. In : *The Science of the Total Environment*, Elsevier Scientific Publishing Company, 1981. Vol. 21, pp. 173-185.

Strebelle, A. Contaminated sites : policy and strategy. in : *L'assainissement des sols pollués*. Edité par H.C. Dubourgier et M. Hofman. Compte-Rendu des Conférences des 4 et 5 mai 1995. Ecotop 95, 3-6 mai 1995. Foire Internationale de Bruxelles.

Tannenberg, P. de. Peut-on encore s'installer en France ? *Entreprises et techniques*, Jan/ Fév. 1997, no. 1554, pp. 31-35.

Sans auteur. *Merck Index. Code permanent environnement et nuisances*, 11<sup>e</sup> éd. Merck & Co., 1989. Editions législatives.

Sans auteur. *Recensement des sites et sols pollués. Etat au 30 septembre 1994*. Ministère de l'environnement.

Sans auteur. *Investigation sur les différentes approches de la définition et de la qualification des sites et sols pollués*. Association RE.CO.R.D, 1994, 103p. Contrat no. 93-503.

Sans auteur. *Analyse des risques et pollutions industrielles*. Bureau d'Analyse des Risques et Pollutions Industrielles : Ministère de l'environnement, 1994.

Sans auteur. *Gestion des sites (potentiellement) pollués*. Orléans : BRGM, 1995. Edité avec le Ministère de l'Environnement.

Sans auteur. *L'état de l'environnement industriel en Rhône-Alpes*. Direction Régionale de l'Industrie, de la Recherche et de l'Environnement Rhône-Alpes, édition novembre 1995.

---

## Modélisation

Anderson, M.P. and Woessner, W.W. *Applied groundwater modeling : simulation of flow and advective transport*. San Diego : Academic Press, 1992. 381p. ISBN 0-12-059485-4.

Bear, J. and Bachmat, Y. *Introduction to modeling of transport phenomena in porous media*. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 1990, 553p. ISBN 0-7923-0557-4.

Bonnet, M. *Méthodes des modèles de simulation en hydrogéologie*. 1982, 438p. Documents du BRGM Nr. 34. Thèse Doctorat d'Etat en Sciences, Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, 1978.

Busch, K.F., Luckner, L. und Tiemer, K. *Geohydraulik*. 3. Auflage. Berlin : Borntraeger, 1993, 497 S. Lehrbuch der Hydrogeologie, Bd. 3. ISBN 3-443-01004-0.

Guswa, J.H. and Le Blanc, D.R. (1985). Digital models of ground-water flow in the Cape Cod aquifer system, Massachusetts. *USGS Water Supply Paper*, 1985, no. 2209, 64p.

Laat, P.J.M. de : *Unsaturated flow modelling*. Delft : International Institute for Infrastructural, Hydraulic, and Environmental Engineering, 1993.

Rawls, W.J. and Brakensiek, D.L. Prediction of soil water properties for hydrologic modeling. *Proceedings of symposium on watershed management*. American Society of Civil Engineers, New York : 1985, pp. 293-299.

Saxton, K.E. et al. Estimating generalized soil-water characteristics from texture. *Soil Sci. Am. J.*, 1986, Vol. 50, pp. 1031-1036.

Zeiliguer, A.M. Coupled models for estimating hydraulic properties and simulating water flow into and through soil medium. *Hydroinformatics '96*. A. Mueller. Rotterdam : Balkema, 1996, pp. 581-588.

## Modélisation du transport

Anderson, M.P. Using models to simulation the movement of contaminants through groundwater flow systems. *Critical Reviews in Environmental Controls*, 1979, vol. 9, no. 2, pp. 97-156.

Bear, J. and Verrujt, A. *Modeling Groundwater Flow and Transport*. Dordrecht : D. Reidel Publ. Company, 1987.

Charbeneau, R.J. and Daniel, D.E. *Handbook of Hydrology*. D.R. Maidment (Editor in Chief). New York : McGraw-Hill, Inc., 1991. Ch. 15., Contaminant Transport in Unsaturated Flow.

Dieulin, A. *Propagation de pollution dans un aquifère alluvial - l'effet de parcours*. Thèse : Université Pierre et Marie Curie - Paris VI et Ecole Nationale Supérieure des Mines des Paris, 1980, 207 p.

Dieulin, A. *Transport de masse en milieu aquifère - théorie de la dispersion*. Cours à l'Ecole des Mines de Paris, 1994.

Gelhar, L.W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research*, 1986. Vol. 22, no.9, pp. 135-145.

Guy, B. Mathematical revision of Korzhinskii's theory of infiltration metasomatic zoning. *Eur. J. Mineral.*, 1993, vol. 5, pp. 317-339.

Ptak, T. and Teutsch, G. Macrodispersivity in highly heterogeneous porous aquifers. *Tracer Hydrology*. Edited by H. Hoetzel and A. Werner. Rotterdam : Balkema, 1992. Proceedings of the 6th international symposium on water tracing, Karlsruhe, Germany, 21-26 september 1992.

Refsgaard, A. et al. *A Three-dimensional Module for Groundwater Flow and Solute Transport in the SHE*. Danish Hydraulic Institute, 1993, Internal Note.

Russel, T.F. et al. Upscaling of Dispersivity in Modeling of Solute Transport : Mathematical Theory and Simulations of Laboratory Experiments. *Mathematical modelling of flow through porous media*. Edité par C. Carasso.

Sanchez, F. et al. Modélisation des transferts de matière en milieu poreux : modèle couplé dissolution/ diffusion. *Déchets - Sciences et Techniques*, 1996, no. 4, pp. 23-26.

Schaefer, W. *Numerische Modellierung mikrobiell beeinflusster Stofftransportvorgaenge im Grundwasser*. Muenchen : R. Oldenbourg Verlag, 1992. 156p. Schriftenreihe gwf Wasser - Abwasser, Band 23. ISBN 3-486-26269-6.

Scheidegger, A.E. General Theory of Dispersion in Porous Media. *Journal of Geophys. Research*, 1961, vol. 66, no. 10, pp. 3273-3278.

Shackelford, C.D. Laboratory diffusion testing for waste disposal - a review. *J. Contaminant Hydrol.*, 1991, vol. 3, no. 7, pp. 467-484.

---

Vested, H.J., Justesen, P. and Ekebjærg, L. Advection-dispersion modelling in three dimensions. *Appl. Math. Modelling*, 1992, vol. 16, pp. 506-519.

Zheng, C. *MT3D : A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reaction of Contaminants in Groundwater Systems*. Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1990. Prepared for The United States Environmental Protection Agency. Available by : Center for Subsurface Modeling Support, P.O. Box 1198, Ada, OK, USA.

Sans auteur. *Solute Transport in the Unsaturated Zone*. in : Mike-SHE. Advection-Dispersion Technical Reference Manual. Danish Hydraulic Institute, 1995. Available by : Danish Hydraulic Institute, Agern Allé 5, DK-2970 Horsholm, Denmark.

Sans auteur. *Solute Transport in the Saturated Zone*. in : Mike-SHE. Advection-Dispersion Technical Reference Manual. Danish Hydraulic Institute, 1995. Available by : Danish Hydraulic Institute, Agern Allé 5, DK-2970 Horsholm, Denmark.

### **Modélisation de l'écoulement polyphasique**

Abriola, L.M. and Pinder, G.F. A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds. *Water Resources Research*, 1985, vol. 21, no. 1. 1. Equation Development, p.11-18. 2. Numerical Simulation, pp. 19-26.

Aziz, K. and Settari, A. *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers, 1979

Bear, J., Braester, C. and Menier, P.C. Effective and relative permeabilities of anisotropic porous media. *Trans. Por. Med.* Vol. 2, pp. 301-316.

Chaouche, M. et al. Capillary effects in drainage in heterogeneous porous media : Continuum modelling, experiments and pore network simulations. *Chemical Engineering Science*, 1994, Vol. 49, no. 15, pp. 2447-2466.

Côme, J.-M. *Expérimentation et modélisation des procédés in situ de dépollution par biodégradation aérobie des aquifères contaminés par des hydrocarbures. Prise en compte d'une phase huile résiduelle*. Mémoires des Sciences de la Terre de l'Ecole des Mines de Paris, no. 29. Thèse : Ecole des Mines de Paris, 1995, 311 p.

El-Kadi, Aly I. Applicability of Sharp-Interface Models for NAPL Transport. *Ground water*, 1. Infiltration. 1992, vol. 30 no.6, p. 849-856. 2. Spreading of a LNAPL. 1994, vol 32 no.5, p. 784-793.

Genuchten, M.T. van. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Am. J.*, 1980. vol. 44, no. 5, pp. 892-898.

Huyakorn, P.S. et al. An improved sharp-interface model for assessing NAPL contamination and remediation of groundwater systems. *J. of Contaminant Hydrology*, 1994, vol. 16, p. 203-234.

Jégou, S. Estimation des perméabilités relatives dans des expériences de déplacements triphasiques en milieu poreux. Thèse : Université Lyon 1, 1997.

Kaluvarachchi, J.J. and Parker, J.C. An Efficient Finite Element Method for Modeling Multiphase Flow, *Water Resour. Res.*, 1989, vol. 25, no. 1, pp. 43-54.

Katyal, A.K., Kaluvarachchi, J.J. and Parker, J.C. *MOFAT: a two-dimensional finite element program for multiphase flow and multicomponent transport*. Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, United States Environmental Protection Agency, 1991. Program Documentation and User's Guide. Available by : Center for Subsurface Modeling Support, P.O. Box 1198, Ada, OK, USA.

Kueper, B.H., Frind, E.O. Numerical modeling of multiphase/multicomponent flow and transport in porous media: An overview. *Subsurface Contamination by Immiscible Fluids*, Edited by K.U. Weyer. Rotterdam : Balkema, 1992. pp. 3-17.

Marle, C.M. *Multiphase flow in porous media*. Paris : Technip, 1981. 257p. ISBN 2-7108-0404-2.

Molenaar, J. Density driven two phase flow in heterogeneous porous media. *Mathematical modelling of flow through porous media*. Edité par C. Carasso.

Tardy, P. *Modélisation de la pollution des sols et des nappes par des hydrocarbures*. Thèse : Université Bordeaux 1, 1995, 161 p.

Touboul, E. and Lenormand, R. *Immiscible Displacements in Porous Media : Testing Network Simulators by Micromodel Experiments*. Richardson, TX, USA : Society of Petroleum Engineers, 1987, SPE 16954, p. 213-222. Paper presented at 62<sup>nd</sup> Annual Technical Conference of the Society of Petroleum Engineers, Dallas, TX, USA, 1987.

Wittmer, F. *L'Analyse Numérique des Ecoulements Polyphasiques : Principes de Base et Application à un Logiciel de Simulation*. Rapport de stage : Ecole des Mines de Saint-Etienne, 1996, 60 p. plus annexs.

---

Yeh, T.C., Gelhar, L.W. and Gutjahr, A.L. Stochastic analysis of unsaturated flow in heterogeneous soils. 2. Statistically anisotropic media with variable. *Wat. Resour. Res.* 21(4), pp. 457-465.

### **Méthodes de modélisation qualitatives**

Crès, F.N., Graillet, D. et Beaune, P. Intelligence artificielle et télématique pour l'adaptation des techniques d'assainissement individuel en milieu rural. Communication au salon Hydroplan 88. Marseille, 17-20 mai 1988.

Dowla, F.U. and Rogers, L.L. *Solving Problems in Environmental Engineering and Geosciences with Artificial Neural Networks*. MIT Press, 1996, 310 p. ISBN 0-262-04148-0.

Farreny, H. et Ghallab, M. *Eléments d'intelligence artificielle*. Paris : Hermès, 1987. 367 p. Traité des Nouvelles Technologies. Série Intelligence Artificielle. ISBN 2-86601-072-8.

Forbus, K.D. Qualitative process theory. *Artificial Intelligence*, Vol. 24, 1984, p.1-3.

Forbus, K.D. et al. Qualitative spatial reasoning : the clock project. *Artificial Intelligence*, Vol. 51, 1991. pp. 417-471.

Graillet, D. Application of expert system technology in drainage systems. *First European Junior Scientist Workshop "Applications of Operations Research to Real Time Control of Water Resources Systems"*. Kastanienbaum/ Luzern, Switzerland, 15-18 March 1990.

Joskowicz, L. and Sacks, E.P. Computational Kinematics. *Artificial Intelligence*, Vol. 51, 1991. pp. 381-416.

Laurent, J.P. et Vescovi, M.R. *La représentation des connaissances et le raisonnement sur les systèmes physiques - physique qualitative*. Toulouse : Cépadnès-éditions, 1992.

Page, B. *Diskrete Simulation*. Berlin : Springer, 1991. 417p. ISBN 3-540-54421-6.

Puppe, F. *Einfuehrung in Expertensysteme*. Berlin : Springer, 1988.

### **Intégration des modèles**

Abbott, M.B. et al. An Introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen "SHE" 1: History and philosophy of a physically based distributed modelling system. *Journal of Hydrology*, 1986, vol. 87, pp. 45-59.

Abbott, M.B. et al. An Introduction to the European Hydrological System - Système Hydrologique Européen "SHE" 2: Structure of a physically based distributed modelling system. *Journal of Hydrology*, 1986, vol. 87, pp. 61-77.

Anker, W., Bourgois, J., Zelfani, M. and Graillot, D. *Quantitative and qualitative tools for porous medium. Application to risk estimation in soil decontamination*. International conference on mathematical modelling of flow through porous medium, Saint-Etienne, 22-26 mai 1995.

Laurent, F. *Outils de modélisation spatiale pour la gestion intégrée des ressources en eau. Application aux Schémas d'Aménagement et de Gestion des Eaux*. Thèse : Ecole des Mines de Saint-Etienne et Ecole des Mines de Paris, 1996, 357 p.

Laurent, F., Anker, W. and Graillot, D. Cartographic modelling with geographic information system for determination of water resources vulnerability. *J. of the American Water Resources Association*, 1997. A paraître.

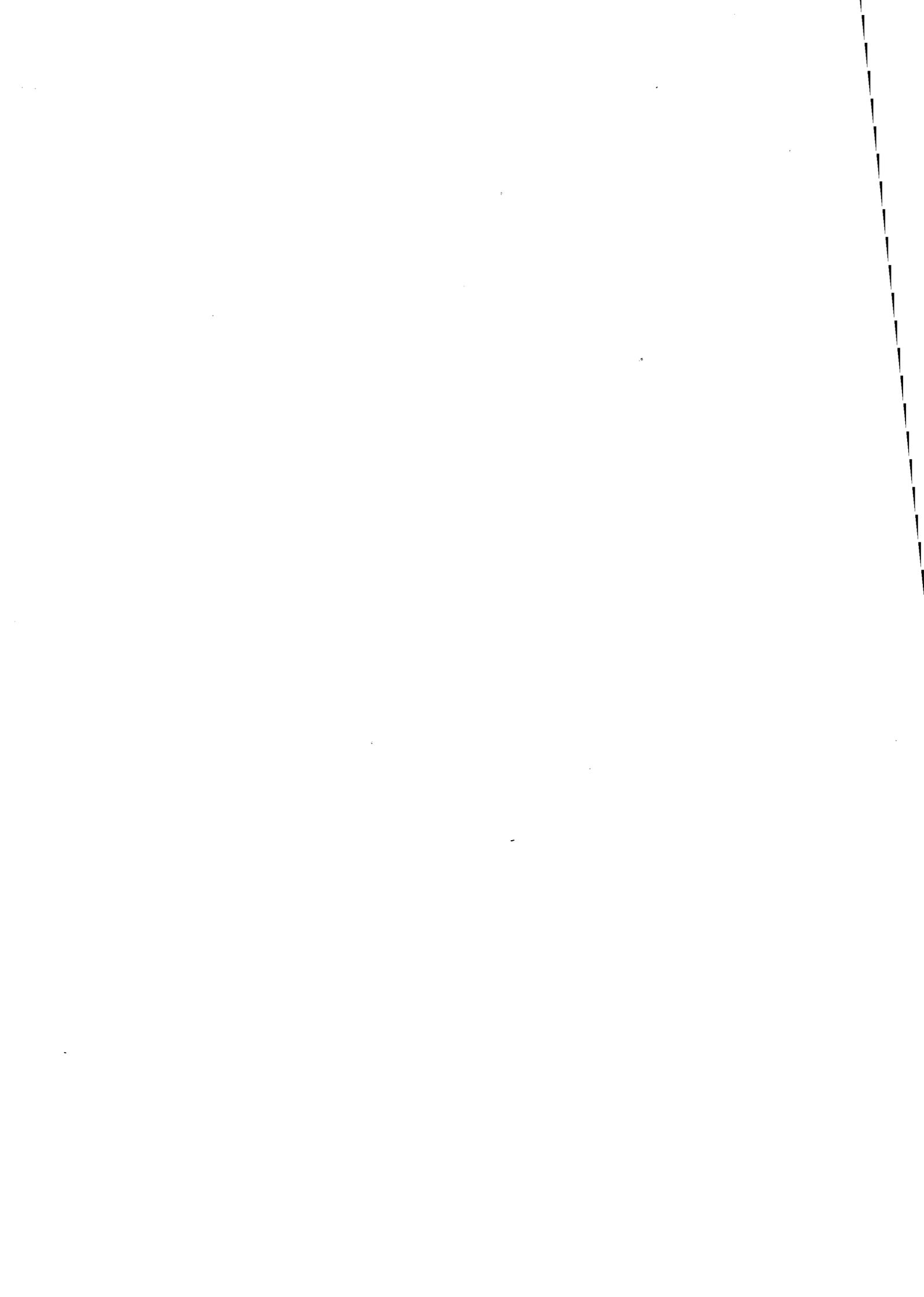
Soerensen, H.R. et al. *Hydrological Information Management for the Danubian Lowland, Integration of Arc/Info and MIKE SHE*. User conference, Environmental Systems Research Institute, may 22-25, 1995.

Sans auteur. *Understanding GIS : The ARC/INFO method* : rev. 6 for workstations. New York : Wiley, 1993. Copublished with Environmental Systems Research Institute (ESRI), Redlands, CA, USA. ISBN 0-470-21958--0.

Sans auteur. *ARC/INFO - Data Model, Concepts & Key Terms*. 2nd edition, Redlands, CA, USA : Environmental Systems Research Institute (ESRI), 1991.



## **ANNEXES**



**ANNEXE A : LOIS D'ÉCOULEMENT ET DE TRANSPORT DES POLLUANTS**

Pour simplifier l'écriture, on se sert des conventions pour les opérateurs mathématiques suivants :

$\vec{\nabla} \cdot \vec{a} = \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{\partial a}{\partial y} + \frac{\partial a}{\partial z}$  : divergence d'une variable (a), qui produit une grandeur scalaire à partir d'une grandeur vectorielle

$\vec{\nabla} a = \frac{\partial a}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial a}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial a}{\partial z} \vec{k}$  : gradient d'une variable (a), qui produit une grandeur vectorielle à partir d'une grandeur scalaire

**A 1 A1 Ecoulement en zone non-saturée et en zone saturée**

La charge hydraulique  $h$  [m] correspond à l'énergie potentielle d'un volume d'eau à l'intérieur d'un aquifère

$$h = \frac{u^2}{2g} + \frac{p}{\rho g} + z$$

Eq. (A.1)

et consiste en un terme d'énergie cinétique  $u^2/2g$ , de pression  $p/\rho g$  et d'altitude  $z$  avec

$h$  [m] : charge (hydraulique)

$p$  [kg m/s<sup>2</sup>] : pression

en cas de zone non-saturée :  $p = -\psi$  ("suction")

$\rho$  [kg/m<sup>3</sup>] : masse volumique

$z$  [m] : cote (coordonnée de l'espace en direction verticale)

$g$  [m/s<sup>2</sup>] : constante de gravitation

En hydrogéologie, les vitesses sont en général faibles. On peut donc négliger ce terme.

$$h = z + \frac{p}{\rho \cdot g}$$

Eq. (A.2)

En zone non-saturée, la pression est négative par rapport à la pression ambiante et dépend de la saturation comme il est présenté en fig. A1 :

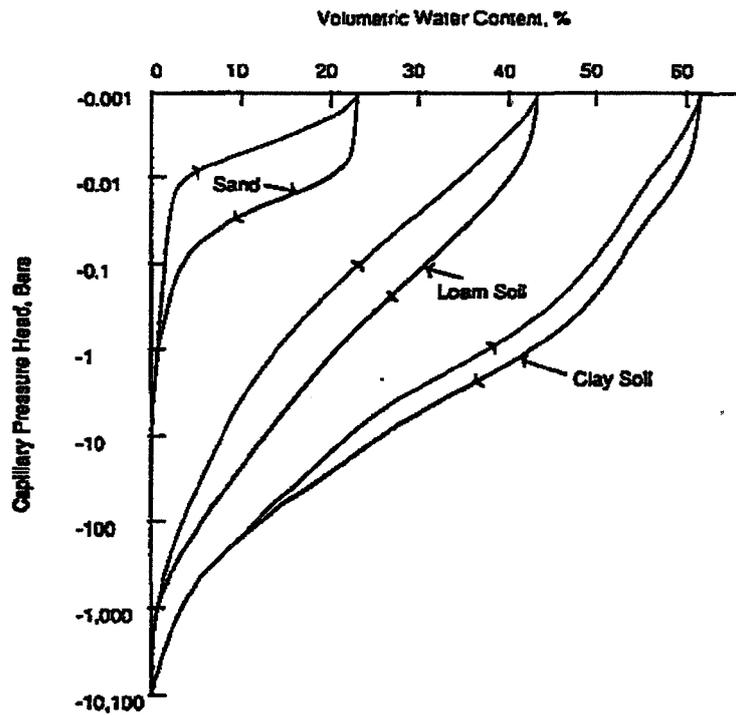


FIGURE 15.3.2 Moisture characteristic curves for three soils. (After Yong and Warkentin, 1972)

Fig. A.1 : Relation  $h(\theta)$  de divers sols (Musy, 1991)

On obtient la vitesse d'écoulement selon la loi de Darcy :

$$\vec{u} = -k_{ij}(\theta) \cdot \vec{\nabla}h$$

Eq. (A.3)

avec

- $u$  [m/s] : vitesse d'écoulement (de Darcy)
- $k_{ij}(\theta)$  [m/s] : tenseur du 2<sup>ème</sup> ordre de perméabilité
- $\theta$  [-] : teneur en eau

## A 2 Ecoulement en zone saturée

La vitesse est donnée par la loi de Darcy :

$$\vec{u} = -k_{ij} \cdot \vec{\nabla}h$$

Eq. (A.4)

où  $u$  [m/s] est la vitesse de DARCY,  $h$  est la charge hydraulique,  $k$  [m/s] est le tenseur de la perméabilité, qui s'écrit, si on choisit les axes en direction d'écoulement, de la façon suivante:

$$\bar{k} = \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix} \quad \text{Eq. (A.5)}$$

L'équation de la continuité donne la conservation de la masse :

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \rho q = 0 \quad \text{Eq. (A.6)}$$

où  $\omega$  est la porosité du milieu et  $q$  un terme de source. A partir de la loi de Darcy et l'équation de conservation de la masse, on établit l'équation de diffusivité. Pour une nappe captive en deux dimensions, cela donne :

$$\vec{\nabla} \cdot (T \vec{\nabla} h) = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - Q \quad \text{Eq. (A.7)}$$

avec

$S$  [-] : coefficient d'emmagasinement

$T$  [m<sup>2</sup>/s] : transmissivité

$T = k e$  et  $e$  est l'épaisseur mouillée de l'aquifère

$q$  [m/s] : terme de source

Pour une nappe libre, la porosité de drainage  $\omega_d$  prend la place du coefficient d'emmagasinement  $S$  :

$$\vec{\nabla} \cdot (T \vec{\nabla} h) = \omega_d \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - Q \quad \text{Eq. (A.8)}$$

Pour un aquifère discrétisé en multi-couche, nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( T_m \frac{\partial h_m}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( C_m \frac{\partial h_m}{\partial z} \right) - S_m \frac{\partial h_m}{\partial t} = Q \quad \text{Eq. (A.9)}$$

avec :

$x_i$  [m] : directions de l'espace :  $x_i = x, y$  et  $m$  : numéro de la couche

$C_m$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de drainage de la couche de calcul  $m$

C'est l'équation qui modélise l'écoulement de l'eau en zone saturée.

### A 3 Transport des polluants miscibles à l'eau en zone non-saturée

Le transport de la matière en milieu preux est dû essentiellement à trois mécanismes : la *convection*, qui est l'entraînement du polluant avec le courant d'eau, la *diffusion moléculaire* due au mouvement thermique des molécules et la *dispersion cinématique* due à l'hétérogénéité des vitesses dans le champ d'écoulement.

L'équation convective-dispersive dans le sol selon le principe de la conservation de masse est la suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(c v_z) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D^c \frac{\partial c}{\partial z}\right) + D^{0''} + R$$

Eq. (A.10)

avec :

$c$  [mol/l] : concentration du soluté

$D^c$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de dispersion cinématique

$D^{0'}$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient effectif de diffusion en milieu non saturée, qui dépend en principal de la tortuosité  $\tau(\theta)$  du milieu. Ce terme donne le prolongement du chemin à parcourir pour un molécule en fonctionne la teneur en eau.

$R$  [mol/s] : terme de source de masse dissoute

$v_z = u_z/\theta$  : vitesse en direction  $z$

$$u_z = -k(\theta) \cdot \frac{\partial}{\partial z}(\psi + z)$$

$\theta$  [-] : Teneur en eau

$\psi$  [m] : terme de succion (pression négative)

La vitesse en direction  $z$  est souvent appelée "seepage velocity" dans la littérature anglo-saxonne.

En zone non-saturée, les pores ne sont que partiellement remplis par l'eau. Pour cette raison, il faut distinguer le coefficient de la diffusion en zone non-saturée du coefficient de diffusion dans l'eau libre.

Si on se limite à une seule dimension, seul le coefficient de dispersion longitudinal  $D_L$  intervient. Dans le cas où le flux convectif est prédominant par rapport au flux par diffusion moléculaire, on établit une relation linéaire entre le coefficient de la dispersion et la vitesse d'écoulement. De plus, on néglige la variation avec la teneur en eau. Cela donne :

$$D_L = \alpha_L v_z$$

Eq. (A.11)

où  $\alpha_L$  [m/s] est la dispersivité longitudinal (en direction  $z$ )

## A 4 Transport des polluants miscibles à l'eau en zone saturée

### A 4.1 Loi de Fick

Pour modéliser la dispersion, on utilise une approche analogue à la loi de Fick qui s'écrit pour la diffusion moléculaire comme suit :

$$\vec{\phi}_F = -D^0 \cdot \vec{\nabla} c$$

Eq. (A.12)

avec

$\phi_F$  [mol/m<sup>2</sup>s] : flux diffusif

$D^0$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de diffusion moléculaire

$c$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant

Le flux diffusif est proportionnel au gradient de la concentration du polluant.

Une approche analogue donne pour la dispersion :

$$\vec{\phi}_C = -D_{ij}^c \cdot \vec{\nabla} c$$

Eq. (A.13)

avec

$\phi_C$  [mol/m<sup>2</sup>s] : flux dispersif

$D_{ij}^c$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de la dispersion

$c$  [mol/m<sup>3</sup>] : concentration du polluant

### A 4.2 Etablissement de l'équation convective-dispersive en zone saturée :

Il faut d'abord connaître le domaine de validité de l'équation de transport à établir. C'est pourquoi on définit le nombre de Peclet :

$$Pe = \frac{v \cdot d}{D^0}$$

Eq. (A.14)

avec :

$Pe$  [-] : nombre de Peclet

$d$  [m] : longueur caractéristique du milieu poreux (diamètre des grains)

$\vec{v}$  [m/s] : vitesse microscopique

$$\vec{v} = \frac{\vec{u}}{\omega_c}$$

Eq. (A.15)

$\dot{u}$  [m/s] : vitesse de Darcy  
 $\omega_c$  [-] : porosité cinématique

Le nombre de Peclet compare les contributions des flux [m<sup>2</sup>/s] convectifs (vd) et diffusifs (D<sup>o</sup>) pour déterminer les différents régimes d'écoulement.

On applique l'approche hydrodispersive dans le régime d'écoulement où le flux diffusif devient négligeable devant le flux dispersif. Dans ce régime, on peut définir le tenseur de la dispersion D<sub>ij</sub>. D'après Scheidegger (1961), il y a une relation linéaire entre le coefficient de la dispersion et la vitesse d'écoulement de la manière suivante :

$$D_{ij}^c = \alpha_{ijmn} \frac{v_n v_m}{|v|} \quad \text{Eq. (A.16)}$$

avec :

$D_{ij}^c$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de la dispersion du 2<sup>ème</sup> ordre : 9 coefficients de dispersion  
 $v_n, v_m$  [m/s] : composantes de la vitesse microscopique en direction n, m (n, m = x, y, z)  
 $\alpha_{ijmn}$  [m] : tenseur de la dispersivité de quatrième ordre : 36 dispersivités

Dans ce régime, on peut alors établir l'équation de transport de la manière suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\vec{V} \cdot (c\vec{V}) + \vec{V} \cdot (D_{ij}^* \cdot \vec{V}c) + R \quad \text{Eq. (A.17)}$$

avec :

$D_{ij}^*$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de dispersion apparente  $D_{ij}^* = D^o + D_{ij}^c$ .  
 Cette équation sera enfin couplée à l'équation de l'écoulement.

On peut justifier cette approche en théorie par la probabilité de présence de *particules* dans un champ d'écoulement aléatoire correspondant à la *concentration* du polluant. Cette approche est également justifiée empiriquement par des expérimentations en laboratoire et sur site.

Cependant, il y a aussi des limitations d'un point de vue théorique, par exemple lorsqu'on considère le cas de balayage du polluant par l'eau non contaminée. Dans ce cas, selon le poids relatif des termes dispersifs et convectifs, la théorie peut postuler une remontée des particules à l'inverse de la direction de l'écoulement. L'équation suivante monodimensionnelle

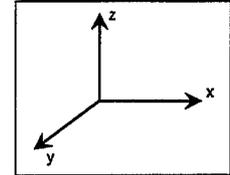
$$\phi_c = -v \left( \alpha \frac{\partial c}{\partial x} - c \right) \quad \text{Eq. (A.18)}$$

représente dans le cas d'un balayage du polluant par de l'eau non polluée, un flux des particules vers l'amont, selon la contribution relative des termes  $\alpha \frac{\partial c}{\partial x}$  et c.

### A 4.3 Simplifications pour limiter le nombre de dispersivités :

#### A 4.3.1 Anisotropie avec symétrie axiale par rapport à l'axe z

Pour tenir compte de cette géométrie, on définit le système des coordonnées selon la figure ci-contre. Ce choix de géométrie limite les dispersivités différentes de zéro au nombre de 5 et correspond à la structure de la plupart des aquifères qui sont stratifiés en couches géologiques dans une suite verticale.



Suivant Baer et Verruijt (1987), on arrive à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \alpha_{ijmn} = & a_I \delta_{ij} \delta_{mn} + \\ & + a_{II} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}) + \\ & + a_{III} (\delta_{ij} h_m h_n + \delta_{mn} h_i h_j) + \\ & + a_{IV} (\delta_{im} h_j h_n + \delta_{jm} h_i h_n + \delta_{in} h_j h_m + \delta_{jn} h_i h_m) + \\ & + a_V (h_i h_j h_m h_n) \end{aligned}$$

Eq. (A.19)

avec :

$a_I, a_{II}, a_{III}, a_{IV}, a_V$  : paramètres indépendants

$h$  : vecteur à valeur 1 et dirigé le long de l'axe de symétrie (z), donc  $h = (0,0,1)$

Cela mène à l'introduction de 5 dispersivités  $\alpha_{LHH}, \alpha_{THH}, \alpha_{LVV}, \alpha_{TVH}$  et  $\alpha_{THV}$  qui sont présentés ci-dessous.

Symboles utilisés pour représenter les flux convectifs et dispersifs :

Si le vecteur du flux convectif est symbolisé par :



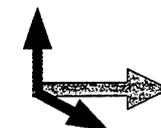
et le vecteur du flux dispersif par :



on symbolise la dispersivité longitudinale  $\alpha_L$  par



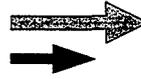
et la dispersivité transversale  $\alpha_T$  par



---

$\alpha_{LHH}$  : dispersivité

- longitudinale
- en direction horizontale
- pour le flux convectif horizontal



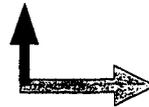
$\alpha_{THH}$  : dispersivité

- transversale
- en direction horizontale
- pour le flux convectif horizontal



$\alpha_{TVH}$  : dispersivité

- transversale
- en direction verticale
- pour le flux convectif horizontal



$\alpha_{LVV}$  : dispersivité

- longitudinale
- en direction verticale
- pour le flux convectif vertical



$\alpha_{THV}$  : dispersivité

- transversale
- en direction horizontale
- pour le flux convectif vertical



Les coefficients de dispersion s'expriment de la manière suivante :

$$D_{xx} = \left( \alpha_{LHH} v_x^2 + \alpha_{THH} v_y^2 + \alpha_{THV} v_z^2 \right) \cdot \frac{1}{|v|}$$

$$D_{yy} = \left( \alpha_{THH} v_x^2 + \alpha_{LHH} v_y^2 + \alpha_{THV} v_z^2 \right) \cdot \frac{1}{|v|}$$

$$D_{zz} = \left( \alpha_{TVH} v_x^2 + \alpha_{TVH} v_y^2 + \alpha_{LVV} v_z^2 \right) \cdot \frac{1}{|v|}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_{LHH} - \alpha_{THH}) \cdot \frac{v_x v_z}{|v|}$$

$$D_{xz} = D_{zx} = \left( \frac{\alpha_{LVV} + \alpha_{LHH}}{2} - \frac{\alpha_{TVH} + \alpha_{THV}}{2} \right) \cdot \frac{v_x v_y}{|v|}$$

$$D_{yz} = D_{zy} = \left( \frac{\alpha_{LVV} + \alpha_{LHH}}{2} - \frac{\alpha_{TVH} + \alpha_{THV}}{2} \right) \cdot \frac{v_y v_z}{|v|}$$

Eq. (A.20)

Pour  $\alpha_{LHH} = \alpha_{LVV} = \alpha_L$  et  $\alpha_{THH} = \alpha_{TVH} = \alpha_{THV} = \alpha_T$ , on obtient les valeurs pour le cas de l'isotropie.

La variabilité spatiale des paramètres hydrodynamiques (porosité, perméabilité) a une influence sur les valeurs de dispersivité. En effet, la dispersion cinématique, par exemple, est due à la variabilité des vitesses d'écoulement.

### A 4.3.2 Isotropie

En cas d'isotropie, le tenseur de la dispersivité  $\alpha_{ijmn}$  a seulement 2 termes différents de 0 : une dispersivité longitudinale  $\alpha_L$  et une dispersivité transversale  $\alpha_T$ .

D'après Baer et Verrujt (1987), cela peut s'écrire de la manière suivante :

$$\alpha_{ijmn} = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{mn} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm})$$

Eq. (A.21)

avec :

$\delta$  : delta de Kronecker :  $\delta_{ij} = 1$  pour  $i=j$ ,  $\delta_{ij} = 0$  sinon.

Avec les vitesses sont  $v_x, v_y, v_z$ , selon le système de coordonnées présenté dans le paragraphe avant, on obtient les expressions suivantes pour les coefficients du tenseur de la dispersion :

$$D_{xx} = (\alpha_T(v_y^2 + v_z^2) + \alpha_L v_x^2)/U$$

$$D_{yy} = (\alpha_T(v_x^2 + v_z^2) + \alpha_L v_y^2)/U$$

$$D_{zz} = (\alpha_T(v_x^2 + v_y^2) + \alpha_L v_z^2)/U$$

$$D_{xy} = D_{yx} = ((\alpha_L - \alpha_T)v_x v_y)/U$$

$$D_{xz} = D_{zx} = ((\alpha_L - \alpha_T)v_x v_z)/U$$

$$D_{yz} = D_{zy} = ((\alpha_L - \alpha_T)v_y v_z)/U$$

Eq. (A.22)

si le flux est dirigé le long de l'axe x :

$v_y = v_z = 0$ , puis :

$D_{xy} = D_{yx} = D_{xz} = D_{zx} = D_{yz} = D_{zy} = 0$ .

Dans ce cas, on peut écrire le tenseur de la dispersion de la façon suivante :

$$D_{ij} = \alpha_{ij} \cdot u_D$$

ou bien

$$\begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_L & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T \end{bmatrix} \cdot \vec{U}_D$$

Eq. (A.23)

avec :

$D_L, D_T$  [ $m^2/s$ ] : coefficient de la dispersion longitudinal, transversal

$\alpha_L, \alpha_T$  [m] : dispersivité longitudinale, transversale

#### A 4.4 Dispersivités en fonction de l'échelle du traçage selon les différents auteurs

Différents auteurs ont publié des abaques recueillant les résultats des expériences sur différents sites. Nous en présentons deux:

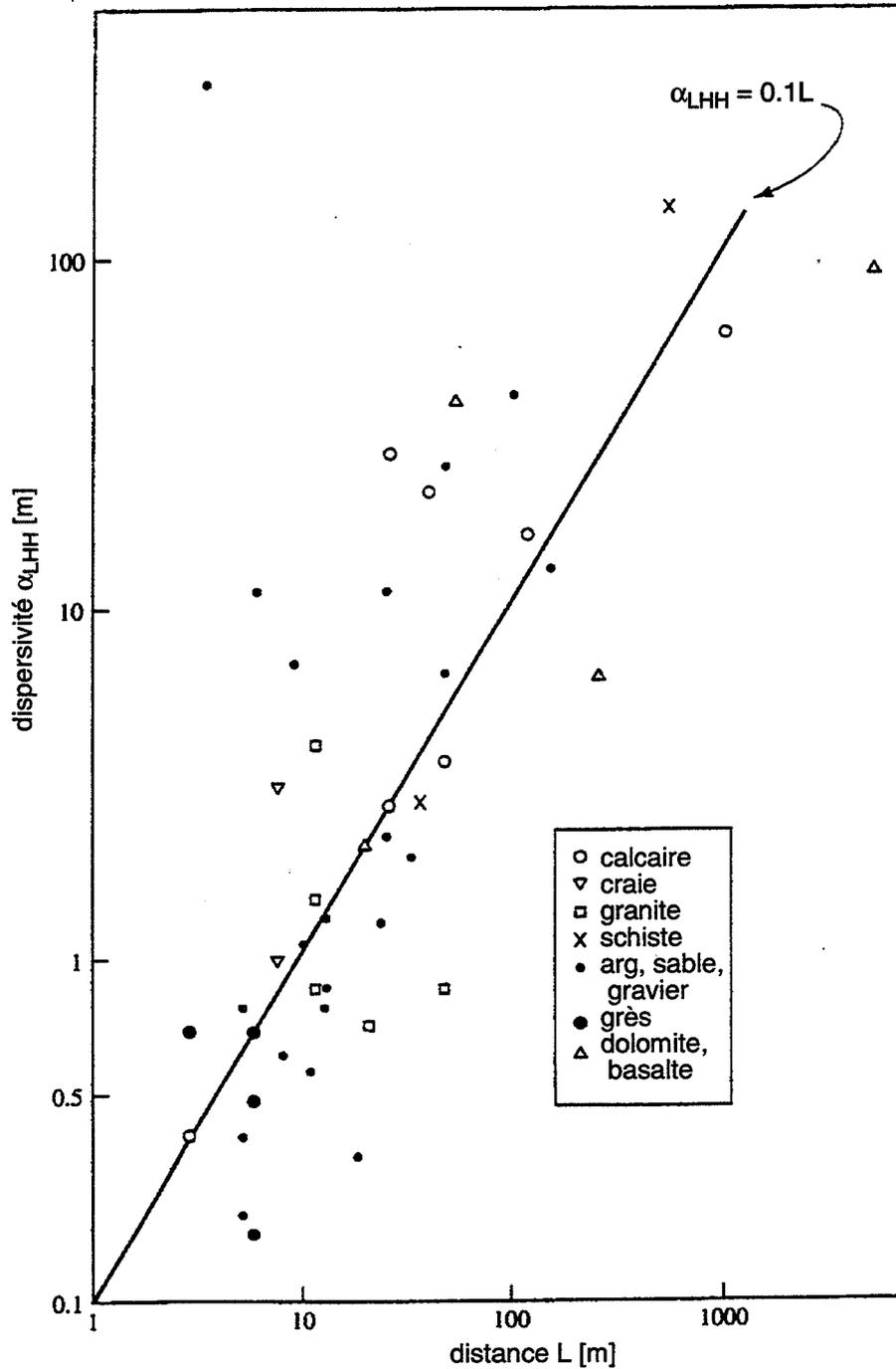


Fig. A.2 : Echelles des dispersivités d'après Lallemand-Barres et Peaudecerf (1978)

Lallemand-Barres et Peaudecerf trouvent comme loi de l'échelle  $\alpha_{LHH} = 0.1L$ .

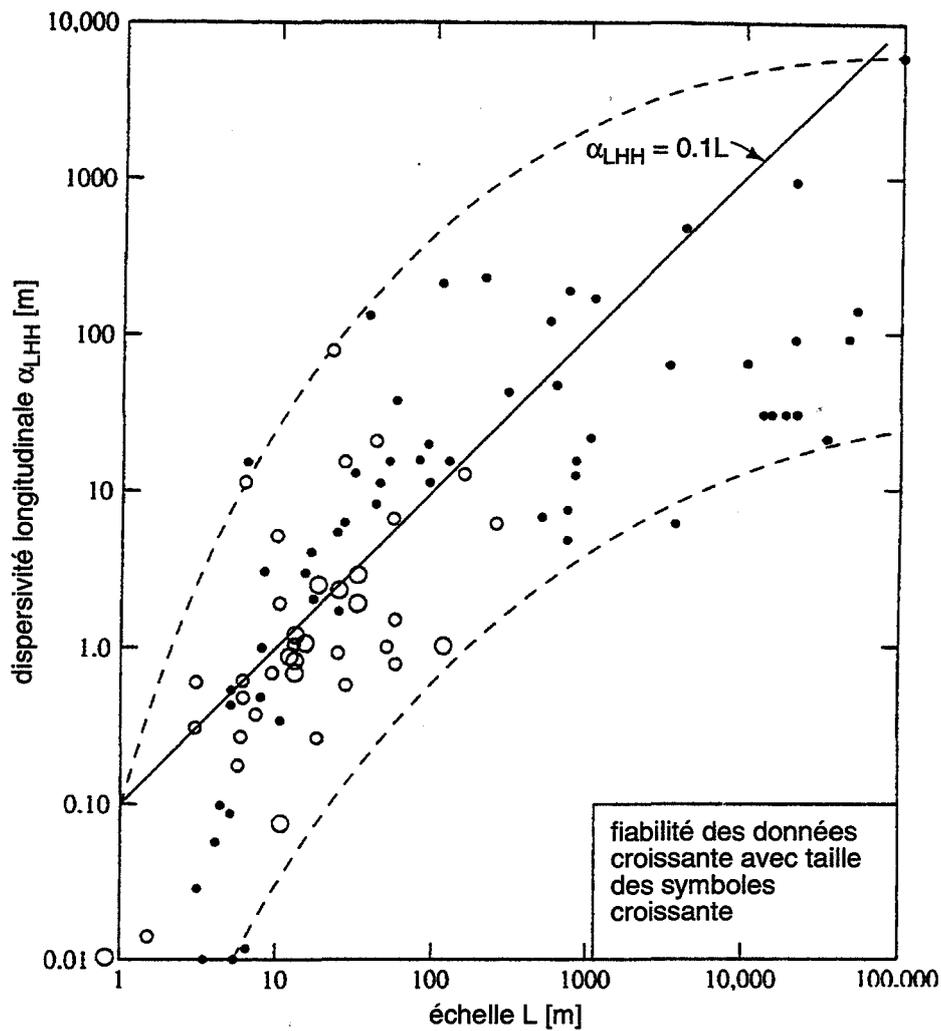


Fig. A.3 : Echelles des dispersivités d'après Gelhar (1986)

D'après Gelhar (1986), la loi d'échelle  $\alpha_{LHH} = 0.1L$  se trouve grossièrement confirmée. Cependant, la marge d'erreur s'étend presque sur tous les mesures qui ont été effectuées. Aussi suggère sa graphique que pour des grandes distances  $L$ , les dispersivités tendent vers une valeur de saturation (Macrodispersivité).

## **A 4.5 Conditions aux limites et échanges avec d'autres composantes :**

### **A 4.5.1 Condition de Dirichlet**

**C'est le cas où la concentration  $c$  est prescrite.** On peut les spécifier pour toutes les mailles de la zone d'étude. Aux limites de la zone d'étude, les conditions aux limites correspondent aux conditions initiales. La concentration peut être constante ou varier au cours du temps.

### **A 4.5.2 Condition de von Neumann**

**C'est le cas où le flux ( $\phi \cdot c$ ) est prescrit.** On peut les spécifier pour toutes les mailles de la zone d'étude. Aux limites de la zone d'étude, le flux correspondant aux conditions aux limites peut être constant ou varier avec le temps.

### **A 4.5.3 Représentation des sources et des puits**

En cas de sources, on suppose l'introduction de flux de masse soit par une source point [kg/s] ou source en ligne [kg/m s] sur un certain intervalle de profondeur, soit par une source distribuée dans une couche de calcul spécifiée sur le plan [kg/m<sup>2</sup>s].

En cas des puits, on suppose soit que l'eau non polluée est abstraite (ce qui correspond, par exemple, au cas d'évaporation ou l'espèce de l'eau change de la phase, mais souvent pas les espèces du polluant), soit que l'eau est abstraite à la concentration du polluant (ce qui correspond par exemple à un puits de remédiation ou à l'échange avec les autres parties du milieu naturel (zone non-saturée, échange nappe-rivière).

Les deux types de sources peuvent être constant dans le temps ou varier en fonction du temps.

## **A 4.6 Conditions initiales**

Pour chaque couche, il faut introduire les concentrations à  $t = 0$  : Cette concentration initiale peut être soit uniformément répartie, soit distribuée dans le plan de la zone d'étude.

## A 5 Transport des polluants non-miscibles à l'eau - l'écoulement polyphasique

Cette annexe présente les équations pour l'écoulement polyphasique et pour le transport multi-espèce, les lois pour le transport de masse d'une phase à l'autre.

### A 5.1 Equations du flux polyphasique

#### A 5.1.1 Obtention des équations

Equation générale : loi de conservation de la masse d'une phase  $\alpha$  :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}) = -\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\vec{v}_{\alpha}) + I_{\alpha}$$

Eq. (A.24)

avec :

$\varepsilon_{\alpha}$  [-] : teneur en phase  $\alpha$ .

$\rho_{\alpha}$  [kg/m<sup>3</sup>] : masse volumique de la phase  $\alpha$ .

$v_{\alpha}$  [m/s] : vitesse d'écoulement de la phase  $\alpha$  en direction  $i$ .

$I_{\alpha}$  [kg/m<sup>3</sup>s] : terme de source entrant à (+) ou sortant de (-) la phase  $\alpha$ .

Si on considère que le milieu est incompressible, on peut écrire :

$$\varepsilon_{\alpha} = \omega S_{\alpha}$$

Eq. (A.25)

où  $\omega$  [-] est la porosité du sol et  $S_{\alpha}$  [-] la saturation de la phase  $\alpha$ . Le terme temporel devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}) = \omega \frac{\partial}{\partial t}(S_{\alpha}\rho_{\alpha})$$

Eq. (A.26)

Si on regarde en plus les phase mouillantes et non-mouillantes comme incompressibles, on peut écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t}(S_{\alpha}\rho_{\alpha}) = \rho_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial t}$$

Eq. (A.27)

La phase gazeuse est cependant considérée toujours comme compressible.

La vitesse d'écoulement est obtenue par une généralisation de la loi de Darcy :

$$\vec{v}_{\alpha} = -\frac{K_{ij}^{\alpha}}{\varepsilon_{\alpha}} \vec{\nabla}(p_{\alpha} + \rho_{\alpha}gz)$$

Eq. (A.28)

avec :

- $K_{ij}^\alpha$  [N/m] : tenseur de mobilité de la phase  $\alpha$ .  
 $p_\alpha$  [N/m<sup>2</sup>] : pression dans la phase  $\alpha$ .  
 $g$  [m/s<sup>2</sup>] : constante de gravitation  
 $z$  [m] : cote

La mobilité  $K_{ij}$  est définie comme :

$$K_{ij}^\alpha = \frac{k_{ij} k_{r,\alpha}(\varepsilon_\alpha)}{\mu_\alpha} \quad \text{Eq. (A.29)}$$

avec :

- $\mu_\alpha$  [[N/m<sup>2</sup>s]] : coefficient de viscosité dynamique de la phase  $\alpha$   
 $k_{ij}$  [m<sup>2</sup>] : tenseur de perméabilité intrinsèque

$$k_{ij} = \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix} \quad \text{Eq. (A.30)}$$

si on choisit les axes dans les direction principales d'anisotropie.

Des fois, on exprime les vitesses de la façon suivante : On fait référence à la masse volumique de l'eau pure  $\rho_m$ , en divisant la charge hydraulique par  $\rho_m g$

Cela permet d'écrire la vitesse sous la forme :

$$\vec{v}_\alpha = - \frac{K_{ij}^\alpha \rho_m g}{\varepsilon_\alpha} \vec{\nabla} (h_\alpha + \rho_{\alpha>m} z) \quad \text{Eq. (A.31)}$$

où  $h_\alpha = \frac{p_\alpha}{\rho_\alpha g}$  et  $\rho_{\alpha>m} = \frac{\rho_\alpha}{\rho_m}$ .

Cette écriture permet de déduire la saturation  $S_\alpha$ , qui est fonction de la pression  $p_\alpha$ , à partir d'un terme de hauteur  $h_\alpha$  en phase  $\alpha$ .

Les équations des flux deviennent :

*pour la phase liquide mouillante :*

$$\omega \frac{\partial}{\partial t} (S_m) = \vec{\nabla} \cdot (K_{ij}^m (\vec{\nabla} h_m + \rho_m z)) + \frac{I_m}{\rho_m}$$

Eq. (A.32)

*pour la phase liquide non-mouillante :*

$$\omega \frac{\partial}{\partial t} (S_n) = \vec{\nabla} \cdot (K_{ij}^n (\vec{\nabla} h_n + \rho_n z)) + \frac{I_n}{\rho_n}$$

Eq. (A.33)

pour la phase gazeuse :

$$\omega \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g S_g) = \vec{\nabla} \cdot (K_{ij}^g (\vec{\nabla} h_g + \rho_g z)) + I_g$$

Eq. (A.34)

Les inconnues sont  $h_m$ ,  $h_n$ ,  $h_g$ . La phase liquide mouillante correspond dans la plupart de cas pour les systèmes naturels à l'eau ( $m = \text{eau}$ ). Par conséquence, la phase liquide non-mouillante correspond en général aux hydrocarbures ( $n = \text{hydrocarbures}$ ).

### A 5.1.2 Conditions initiales et conditions aux limites

*Conditions initiales*

$$h_\alpha(x_i; 0) = h_{\alpha 1}(x_i) = 0 \text{ dans } \Omega$$

Eq. (A.35)

pour  $\alpha = m, n, g$ .

*Conditions aux limites*

Condition de type I (de Dirichlet) :

$$h_\alpha(x_i; t) = h_{\alpha 2}(x_i; t) \text{ sur } \Gamma_1 \text{ à } t > 0$$

Eq. (A.36)

pour  $\alpha = m, n, g$ . Elle est utilisée surtout

- aux limites de la zone saturée
- pour les gaz en contact avec l'atmosphère

Condition de type II (von Neumann) :

$$\vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} = \hat{v}_\alpha \text{ sur } \Gamma_2 \text{ à } t > 0$$

Eq. (A.37)

utilisée surtout pour les flux entrant dans le domaine du modèle. Par défaut cette valeur est égale à 0.

## A 5.2 Equations de transport multi-espèce

### A 5.2.1 Obtention des équations

Equation générale pour la conservation de masse de l'espèce  $k$  dans la phase  $\alpha$ , qui contient en plus du terme temporel et de la divergence du flux de Darcy, la divergence du flux non-convectif, qui est la dispersion apparente, et deux termes de source :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\omega_k^{\alpha}) + \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{\alpha}\rho_{\alpha}\omega_k^{\alpha}\vec{v}_{\alpha}) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k^{\alpha} = I_k^{\alpha} + E_k^{\alpha} \quad \text{Eq. (A.38)}$$

avec :

$\omega_k^{\alpha}$  [-] : fraction de masse de la composante  $k$  dans la phase  $\alpha$ .

$J_k^{\alpha}$  [mol/m<sup>2</sup>s] : flux non-advectif de la composante  $k$  dans la phase  $\alpha$ , c.a.d. flux diffusif/dispersif.

$I_k^{\alpha}$  [mol/m<sup>3</sup>s] : transport d'une composante  $k$  au travers des limites de la phase  $\alpha$ .

$E_k^{\alpha}$  [mol/m<sup>3</sup>s] : apport de la composante  $k$  à la phase  $\alpha$  par réactions chimiques et transformations biologiques.

Attention : le  $\omega$  et le  $\omega_k^{\alpha}$  correspondent à deux différents entités physiques (porosité et fraction de masse).

Le terme  $I_k^{\alpha}$  peut être regardé comme une source par rapport à une seule phase et est un flux diffusif à travers des limites des phases pour équilibrer des différences des concentrations dans les phases. Il peut être décrit par un équilibre local (équilibrage instantané des différences des concentrations) ou une cinétique de transport. Le terme  $E_k^{\alpha}$  est une source par rapport au système et n'est pas pris en compte par la suite.

Les termes de l'équation de transport multi-espèce sont les suivantes :

a) On peut donc écrire le terme de transport au de la manière suivante :

$$I_k^{\alpha} = \delta_k^{\alpha}\rho_{\alpha}\omega_k^{\alpha} \quad \text{Eq. (A.39)}$$

avec :

$\delta_k^{\alpha}$  est un coefficient de décroissance de premier ordre.

b) Le terme du flux non-convectif  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k^{\alpha}$  contient les termes pour la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire, qu'on peut exprimer par :

$$\vec{J}_k^\alpha = -\varepsilon_\alpha \tau_{ij}^\alpha (D_k^{\alpha,0} \cdot \vec{\nabla}(\rho_\alpha \omega_k^\alpha)) - (\varepsilon_\alpha D_{k,ij}^{\alpha,m} \cdot \vec{\nabla}(\rho_\alpha \omega_k^\alpha))$$

Eq. (A.40)

avec :

$\tau_{ij}^\alpha$  [-] : tenseur de tortuosité de la phase  $\alpha$

$D_{k,0}^\alpha$  [m<sup>2</sup>/s] : coefficient de diffusion moléculaire en solution libre de l'espèce k dans la phase  $\alpha$

$D_{k,ij}^{\alpha,m}$  [m<sup>2</sup>/s] : tenseur de dispersion mécanique

Pour simplifier, on écrit :

$$\vec{J}_k^\alpha = \varepsilon_\alpha D_{k,ij}^{\alpha,*} \cdot \vec{\nabla}(\rho_\alpha \omega_k^\alpha)$$

Eq. (A.41)

avec :

$D_{k,ij}^{\alpha,*} = \tau_{ij}^\alpha D_k^{\alpha,0} + D_{k,ij}^{\alpha,m}$  : tenseur de dispersion apparente et le terme et

$\rho_\alpha \omega_k^\alpha = c_k^\alpha$  : représente la concentration de l'espèce k dans la phase  $\alpha$ .

A l'aide des mêmes simplifications qu'on avait utilisée pour les équations de flux, on aboutit à l'équation de transport de l'espèce k dans la phase  $\alpha$  :

$$\omega \frac{\partial}{\partial t} (c_k^\alpha S_\alpha) = \vec{\nabla} \cdot (\omega D_{ij} S_\alpha \vec{\nabla} c_k^\alpha) - \vec{\nabla} \cdot (c_k^\alpha \vec{v}_\alpha) + I_k^\alpha + \delta_k^\alpha c_k^\alpha$$

Eq. (A.42)

c) le terme temporel peut être simplifié de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (c_k^\alpha S_\alpha) = S_\alpha \frac{\partial}{\partial t} (c_k^\alpha) + c_k^\alpha \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha)$$

Eq. (A.43)

De plus, à l'aide des équations des flux déterminés dans le chapitre précédent, on peut écrire :

$$\omega S_\alpha \frac{\partial}{\partial t} c_k^\alpha = \vec{\nabla} \cdot (\omega D_{ij} S_\alpha \vec{\nabla} c_k^\alpha) - \vec{v}_\alpha \cdot \vec{\nabla} c_k^\alpha + I_k^\alpha - c_k^\alpha \left( \frac{I_\alpha}{\rho_\beta} + \delta_k^\alpha \right)$$

Eq. (A.44)

Cette équation est valable pour les phases mouillante m, non-mouillante n et gazeuse g.

d) on considère néanmoins qu'il y a de l'adsorption de l'espèce k sur la phase solide (i.e. par les grains); on ajoute donc au système l'équation de continuité suivante, qui correspond à la phase solide :

$$\frac{\partial}{\partial t} c_k^s = I_k^s - \delta_k^s c_k^s$$

Eq. (A.45)

Si on connaît tous les termes, on fait ensuite la somme des trois équations de transport, en tenant compte de la contrainte suivante : Pour chaque espèce, la somme des flux au travers des limites des phases (i.e. la somme des taux de transport de masse) est égale à zéro.

$$\sum_{\alpha=1}^N I_k^{\alpha} = 0 \quad \text{Eq. (A.46)}$$

On aboutit ainsi à une équation qui contient quatre concentrations inconnues :  $c_k^m$ ,  $c_k^n$ ,  $c_k^g$  et  $c_k^s$ . On cherche à exprimer les concentrations en fonction de la concentration de l'espèce k dans la phase de l'eau  $c_k^m$ .

### A 5.2.2 Conditions initiales et conditions aux limites

#### Conditions initiales

$$c_k^{\alpha}(x_i;0) = c_k^{\alpha 1}(x_i) \text{ dans } \Omega \quad \text{Eq. (A.47)}$$

pour  $\alpha = m, n, g$ .

#### Conditions aux limites

Condition de Dirichlet :

$$c_k^{\alpha}(x_i;t) = c_k^{\alpha 1}(x_i;t) \text{ sur } \Gamma_1 \text{ à } t > 0 \quad \text{Eq. (A.48)}$$

pour  $\alpha = m, n, g$ .

Cette condition est peu utilisée car, si on connaît  $c_k^m$  en un point donné, on peut déterminer les autres concentrations par l'intermédiaire des coefficients de répartition. Néanmoins, cette condition est intéressante dans le cas où c'est le terme de diffusion qui domine.

Condition de von Neumann :

$$\frac{\partial}{\partial n} c_k^{\alpha} = 0 \text{ sur } \Gamma_2 \text{ à } t > 0 \quad \text{Eq. (A.49)}$$

pour  $\alpha = m, n, g$ .

C'est la dérivée suivant la normale à la frontière du domaine. On l'utilise pour les flux sortants. On l'utilise cependant pas pour l'infiltration du polluant.

Une troisième condition aux limites peut s'utiliser de la manière suivante :

$$\sum_k c_k^n = \rho_n \quad \text{Eq. (A.50)}$$

---

et s'exprime uniquement sur la frontière supérieure du domaine (où le polluant est infiltré) et considère que les espèces des hydrocarbures sont présentes seulement dans la phase de l'huile (i.e., la phase non-mouillante).

### A 5.3 Transport de masse à l'équilibre

Une difficulté principale dans la résolution des équations de transport réside dans le fait que les échanges d'espèces entre les phases se font selon une cinétique de transport. Dans la plupart des schémas existants, on ne tient pas compte de cette cinétique en considérant que les transports de masse se font instantanément, le système est regardé étant toujours à l'équilibre.

Il est intéressant d'étudier ce cas dans un premier temps pour l'étendre ensuite au cas où les échanges se font par une cinétique de transport. Pour cela, on exprime les concentrations du chapitre précédent à l'aide des relations approximatives suivantes :

$$c_k^n = \Gamma_k^n c_k^m$$

$$c_k^g = \Gamma_k^g c_k^m$$

$$c_k^s = \Gamma_k^s c_k^m$$

Eq. (A.51)

où les coefficients de répartition  $\Gamma_k^\alpha$  à l'équilibre d'une espèce  $k$  sont donnés de la manière suivante :

$\Gamma_k^n$  : entre la phase mouillante et la phase non-mouillante

$\Gamma_k^g$  : entre la phase mouillante et la phase gazeuse

$\Gamma_k^s$  : entre la phase mouillante et la phase solide

*Remarque* : Pour les systèmes où les grains solides sont mouillés par l'eau, il est naturel d'exprimer toutes les concentrations par rapport à la concentration dans la phase de l'eau. Ce qui est le cas le plus souvent. En cas où les grains sont mouillés par l'huile, on peut exprimer les concentrations en fonction de la concentration dans la phase de l'huile. Mais cela pourrait relever des difficultés en cas que l'huile n'est pas présent autour de tous les grains du système.

#### A 5.4 Transport de masse hors équilibre (cinétique de transport)

La cinétique de transport est prise en compte par un coefficient de répartition  $\Gamma^*$  correspondant aux coefficients de transport dans le chapitre précédent :

$$c_k^n = \Gamma_k^{n*} c_k^m$$

$$c_k^g = \Gamma_k^{g*} c_k^m$$

$$c_k^s = \Gamma_k^{s*} c_k^m$$

Eq. (A.52)

où les coefficients  $\Gamma_k^{n*}$ ,  $\Gamma_k^{g*}$  et  $\Gamma_k^{s*}$  sont appelés coefficients de répartition apparents.

On peut déterminer ces coefficients de répartition apparents de la manière suivante :

*entre la phase mouillante (aqueuse) et la phase non-mouillante (organique) :*

$$\Gamma_k^{n*} = \Gamma_k^n + \frac{I_k^{n \rightarrow m}}{i_k^{n \rightarrow m}}$$

Eq. (A.53)

*entre la phase non-mouillante (organique) et la phase gazeuse :*

*phase organique piégée :*

$$\Gamma_k^{g*} = \Gamma_k^g + \frac{I_k^{n \rightarrow g}}{i_k^{n \rightarrow g}}$$

*phase organique pas piégée :*

$$\Gamma_k^{g*} = \Gamma_k^g + \frac{I_k^{m \rightarrow g}}{i_k^{m \rightarrow g}}$$

Eq. (A.54)

*entre la phase mouillante (aqueuse) et la phase solide :*

$$\Gamma_k^{s*} = \Gamma_k^s + \frac{I_k^{m \rightarrow s}}{i_k^{m \rightarrow s}}$$

Eq. (A.55)

où  $i_k^{\alpha \rightarrow \beta}$  est le coefficient du taux de transport de masse de la phase  $\alpha$  vers la phase  $\beta$ .

Dans les deux cas des transports à l'équilibre et des transport hors l'équilibre, on aboutit à une équation du type suivant qu'on appelle somme-équation de transport.

$$\omega_k^* \frac{\partial c_k^m}{\partial t} = \vec{V} \cdot (D_{ij}^* \vec{V} c_k^m) - \vec{v}_k^* \vec{V} c_k^m - \delta_k^* c_k^m$$

Eq. (A.56)

où :

$\omega_k^*$  dépend de la porosité, des termes de saturation, des coefficients de répartition

$D_{ij}^*$  dépend de  $D_{ij}^p$ , des termes de saturation et des coefficients de répartition

$\vec{v}_k^*$  dépend des vitesses et des coefficients de répartition

$\delta_k^*$  dépend des taux de transport, des densités, des coefficients de répartition

L'inconnue est  $c_k^m$ .

## A 6 Transport non-conservatif

A partir de l'équation de l'écoulement polyphasique-multiespèce, nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{\alpha} c_k^{\alpha}) + \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{rev}} - \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{ir}} = \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{\alpha} D_{ij} \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{\alpha} c_k^{\alpha} \vec{v}_{\alpha})$$

Eq. (A.57)

avec :

$$c = \rho_{\alpha} \omega_k^{\alpha} \quad (\text{concentration})$$

$$J_k^{\alpha} = \varepsilon_{\alpha} D_{ij} \frac{\partial c_k^{\alpha}}{\partial x_j} \quad (\text{flux dispersif})$$

$$I_k^{\alpha} = \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{rev}} \quad (\text{réactions réversibles})$$

$$E_k^{\alpha} = \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{ir}} \quad (\text{réactions irréversibles})$$

En zone saturée dans le cas monophasique, on peut alors écrire :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{rev}} - \left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{ir}} = \vec{\nabla} \cdot (D_{ij} \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{v})$$

(a)    (b)    (c)    (d)    (e)

Eq. (A.58)

et les termes signifient :

- (a) : concentration en phase liquide
- (b) : adsorption
- (c) : réaction
- (d) : dispersion
- (e) : convection

En zone non-saturée, pour une espèce i, en direction z :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c_f) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho c_s) - \left(\frac{\partial c_f}{\partial t}\right)_{\text{ir}} = -\frac{\partial}{\partial z}(c_f q) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta D_i(\theta, q) \frac{\partial c_f}{\partial z}\right)$$

(a)    (b)    (c)    (d)    (e)

Eq. (A.59)

avec :

$c_s$  : concentration de soluté adsorbé par unité de masse solide

$c_f$  : concentration en solution par unité de volume liquide

## A 6.1 Réactions réversibles

### a) Rétention

La rétention est l'échange entre une partie d'eau dans une phase qui est mobile et une partie qui est immobile car il s'agit de l'eau liée. Pour en tenir compte, on introduit le coefficient de partage (voir Moszkowicz et al., 1997) :

$$f = \frac{\theta_m}{\theta}$$

avec :

- f [-] : coefficient de partage
- $\theta_m$  [-] : teneur en eau mobile
- $\theta$  [-] : teneur en eau totale

Le terme réversible dans l'équation de transport réactif devient :

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{rev}} = \frac{1-f}{f} \frac{\partial C_{\text{im}}}{\partial t} \quad \text{Eq. (A.60)}$$

L'équation de transport devient :

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{1-f}{f} \frac{\partial c_{\text{im}}}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D_{ij} \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{v}) \quad \text{Eq. (A.61)}$$

avec :

- $c_m$  [mol/l] : concentration du polluant dissout dans la partie mobile
- $c_{\text{im}}$  [mol/l] : concentration du polluant dissout dans la partie immobile

### b) Adsorption - Désorption

Le transport non-conservatif comprend d'abord les phénomènes d'interaction par les forces électrostatiques entre le milieu et le polluant. On fait souvent l'hypothèse d'un équilibre local : les processus de sorption sont instantanés par rapport à la convection et à la dispersion. Dans ce cas, on peut les décrire par une isotherme  $s(c)$ . On appelle la relation  $c_s/c_f$  *Coefficient de répartition*  $K_d$ .

Pour une adsorption linéaire, réversible et instantanée, il y a une relation entre  $K_d$  et le "facteur de retard" en comparant la vitesse de déplacement d'un pic avec la vitesse de déplacement de l'eau. On parle aussi du processus de chromatographie.

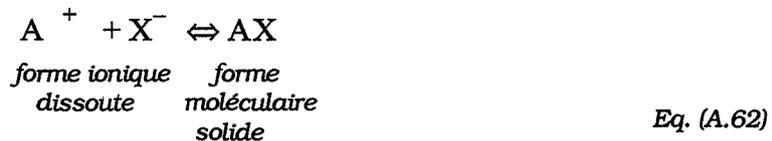
Les éléments transportés peuvent se répartir entre une fraction immobilisée et une fraction dissoute selon trois classes d'équilibre : la relation *linéaire*, où on peut définir le coefficient de

répartition  $K_d$ , l'*isotherme de Langmuir*, où la concentration  $c_s$  tend vers une limite pour  $c_f$  grand et l'*isotherme de Freundlich* où un limite pour  $c_s$  n'est pas atteint pour  $c_f$  grand.

## A 6.2 Réactions irréversibles

### a) Réaction chimique :

La plus courant des réactions réversibles est celle de réaction chimique : il y a une réaction entre les éléments transportés en solution et le milieu. il y a surtout les réactions d'échange ionique et de précipitation - solubilisation. L'équilibre réactionnel est fonction de nombreux paramètres comme des concentrations, la composition du sol, température, pression, pH et eH. La formulation la plus générale est donnée en équation II.1.5.

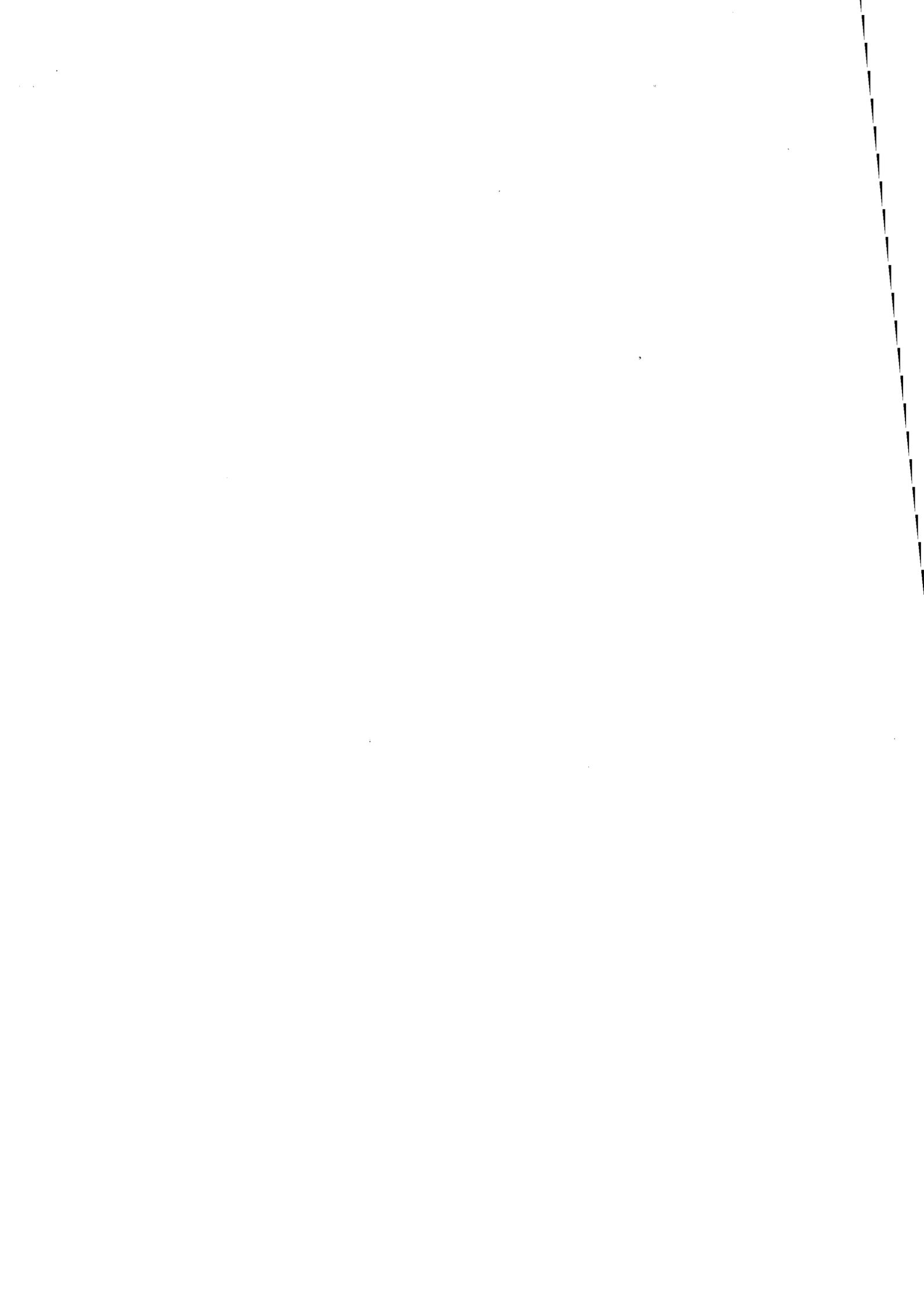


En cas de pollution des hydrocarbures en milieu alluvial, nous négligeons cet effet. Cependant, ces mécanismes de transport réactif ont déjà été modélisés pour des applications en géologie (genèse des roches et zonage métasomatique, Guy, 1993). Ils sont aussi d'importance pour les pollutions par des métaux. Sanchez et al. (1996) proposent un modèle de dissolution/ transport par diffusion pour décrire le relargage d'espèces solubles contenues dans un milieu solide poreux en contact avec l'eau pour étudier les risques à long terme des déchets solidifiés.

### b) Réaction biochimique (Dégradation microbiologique)

Un cas particulier de pollution non-conservative est la dégradation microbiologique. Du fait de l'activité microbienne dans le sol, on rencontre toujours une certaine dégradation microbiologique lors de la propagation des hydrocarbures dans le sol. On se sert souvent de ces processus en les stimulant comme une méthode de dépollution du sol.

Il y a des mécanismes pour la décomposition aérobie ( $O_2$  servant comme accepteur des électrons) ou anaérobie ( $NO_3^{2-}$  servant comme accepteur des électrons). Ces processus aboutissent à une minéralisation, c.a.d. une transformation du produit organique dans ses composés inorganiques. Souvent, les produits intermédiaires sont encore plus toxiques que le produit de base, car il s'agit souvent des radicaux.



**ANNEXE B : PROPRIÉTÉS PHYSICO-CHIMIQUES DES HYDROCARBURES****B 1 Teneurs à saturation dans l'eau des composants des hydrocarbures de l'accident type****ETUDE DU CONTACT EAU/ESSENCE**

ECHANTILLON : PRODUIT PUR RECUPERE EN PE1 LE 12 FEVRIER 1991 (\*)

RESULTATS DES TENEURS A SATURATION DANS L'EAU :

MTBE	µg/l	333113,6
BENZENE	µg/l	15722,0
TOLUENE	µg/l	87528,3
ETHYL BENZENE	µg/l	3135,9
P. XYLENE	µg/l	8928,3
m. XYLENE	µg/l	3815,5
o.XYLENE	µg/l	5485,6
C9+C10 AROS	µg/l	2794,2
NAPHTALENE	µg/l	214,5
OLEFINES	µg/l	31100,7
AROS/MTBE		0,32
AROS/OLEFINES		3,46
OLEFINES/MTBE		0,09

(\*) Il est remarquable d'observer que le produit récupéré le 12 février 1991 contenait une concentration en MTBE inférieure à celle annoncée par Shell. On peut attribuer cette différence à la grande solubilité du MTBE (10 mg/l) qui a migré préférentiellement.

B 2 Indications sur l'explosivité de l'essence

PRODUITS	Point d'éclair en ° C	Température d'auto-inflammation en ° C	Limites d'inflammabilité en volume % dans l'air	
			Inférieure	Supérieure
Diméthylaniline .....	62.8	371.1	—	—
Diméthyl-2-2 butane...	— 47.8	425	1.2	7
Diméthyl-2-3 butane...	— 28.9	420	1.2	7
Diméthylchloracétal....	43.9	232.2	—	—
Diméthylformamide....	57.8	445	2.2 à 100° C	—
Diméthyl-2-3 hexane ..	7.2 (C.O.)	437.8	—	—
Diméthyl-2-4 hexane...	10 (C.O.)	—	—	—
Diméthylsulfoxyde.....	95	—	2.6	28.5
Diméthyl-2-3 pentane..	< — 6.6	337.2	1.1	6.7
Diméthyl-2-4 pentane..	— 12.2	—	—	—
Diméthyl-2-2 propane..	Gaz	450	1.4	7.5
Dinitrochlorobenzène...	194.4	—	2	22
Dioxane-1-4.....	12.2	181	2	22
Dioxolane.....	1.7 (C.O.)	—	—	—
Dipentène .....	45	236.7	0.7 à 150° C	6.1 à 150° C
Diphénylamine .....	152.7	633.9	—	—
Diphényle .....	112.8	540.1	0.6 à 111° C	5.8 à 155° C
Diphénylméthane.....	130	486.1	—	—
Dodecane.....	73.9	203.8	0.6	—
Essence (indice d'octane 56 à 60).....	— 42.8	280	1.4	7.6
Essence (indice d'octane 73).....	—	—	1.4	7.6
Essence (indice d'octane 92).....	—	—	1.3	7.6
Essence (indice d'octane 100).....	— 37.8	456.1	1.4	7.4
Essence de térébenthine.	35	253.3	0.8	—
Éthane.....	Gaz	515	3	12.5
Éthanolamine .....	85	—	—	—
Éther allylique.....	— 6.6 (C.O.)	—	—	—
Éther allylvinylique (oxyde d'allyle et de vinyle) .....	< 20 (C.O.)	—	—	—
Éther amylique (oxyde d'amyle).....	57.2 (C.O.)	171.1	—	—
Éther butylique (oxyde de butyle).....	25	194.4	1.5	7.6
Éther butylvinylique (oxyde de butyle et de vinyle) .....	— 9.4 (C.O.)	—	—	—
Éther de pétrole .....	< — 17.8	287.8	1.1	5.9
Éther éthylique (oxyde d'éthyle).....	— 45	180	1.9	48
Éther éthylpropénylique (oxyde d'éthyle et de propényle).....	< — 6.6	—	—	—
Éther isopropylique....	— 27.8	443.3	1.4	21
Éther méthyléthylique (oxyde d'éthyle et de méthyle).....	— 37.2	190	2	10.1
Éther méthylique.....	Gaz	350	3.4	18
Éther vinyléthylique (oxyde d'éthyle et de vinyle) .....	< — 45.5	201.6	1.7	28

## B 3 Indications sur la toxicité du benzène

— Les conséquences physiologiques d'une exposition à différentes concentrations de benzène

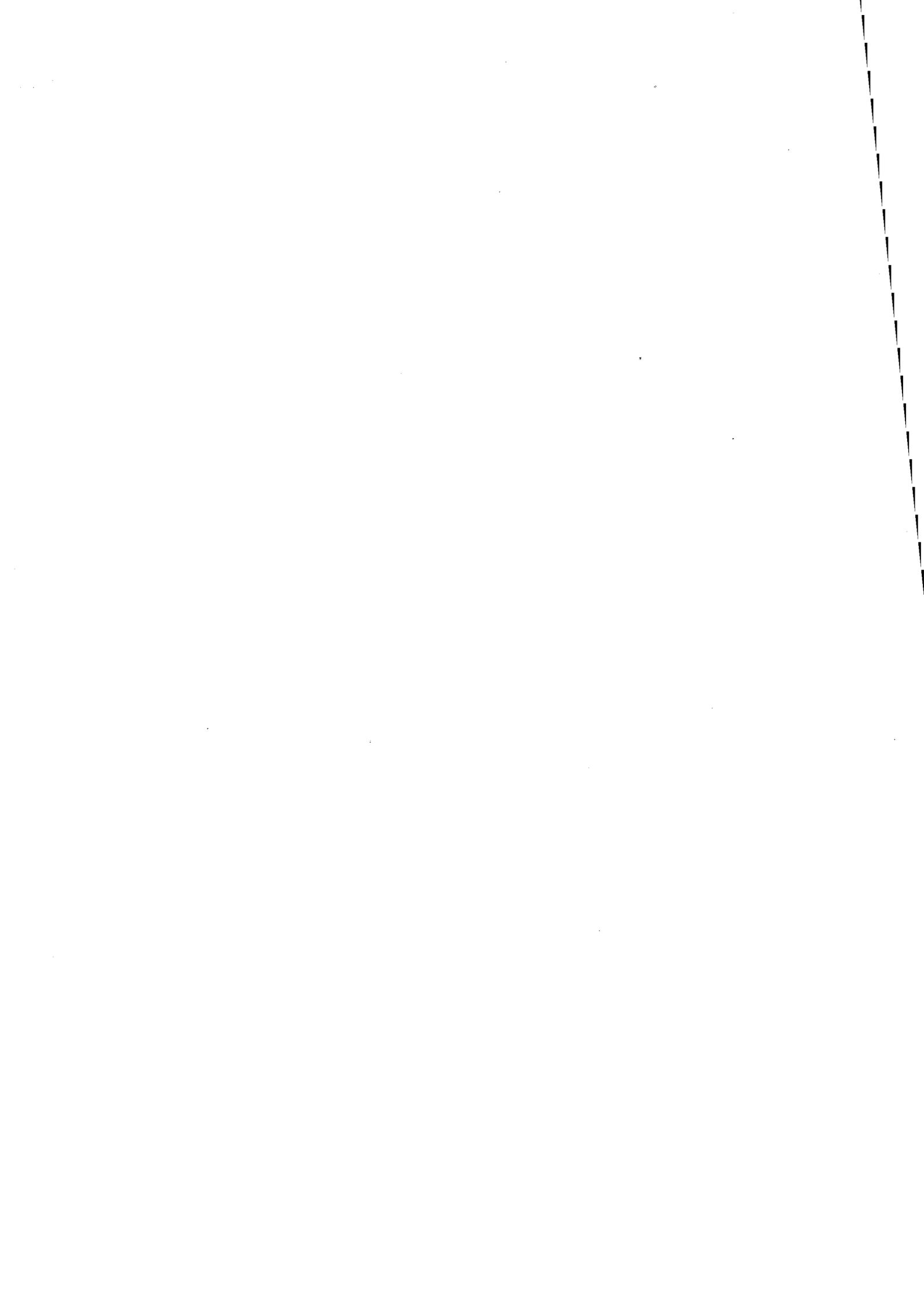
5 ppm <sup>(1)</sup>	V.M.E. (valeur moyenne d'exposition admissible 8 heures par jour et 5 jours par semaine) pour les nouvelles installations et pour les anciennes dans 5 ans
10 ppm <sup>(1)</sup>	V.M.E. idem ci-dessus pour les anciennes installations pendant 5 ans
15 ppm	Valeur moyenne d'exposition qui, à longue échéance, donne des risques éprouvés
25 ppm <sup>(2)</sup>	V.L.E. (valeur limite d'exposition pour une durée maximale de 15 minutes) Concentration sans effet détectable
50 à 100 ppm	Maux de tête, paleur, etc
1500 ppm	Vertiges
2000 ppm <sup>(3)</sup>	Concentration maximale admissible dans les dissolvants
13000 ppm	L.I.E. (limite inférieure d'explosivité)
20000 ppm	Dose mortelle pour 5 à 10 minutes d'exposition

(1) Ces V.M.E. sont celles qui devraient être retenues dans le décret devant paraître au Journal Officiel avant fin 1985.

(2) Cette V.L.E. a été fixée au B.I.T. (Bureau International du Travail) par la convention internationale 136 et reprise par décret en 1976.

(3) Cette concentration limite remplace celle de 10000 ppm préalablement en vigueur. Elle est en rapport avec les étiquetages européens.

Source : C. Mayer. La détection du Benzène par Photoionisation. Chimie Magazin, novembre 1985.



## **ANNEXE C : REPRESENTATION DES PHENOMENES D'ECOULEMENT ET DE TRANSPORT DANS LES MODELES DE SIMULATION**

### **C 1 Equations aux dérivées partielles**

Equation aux dérivées partielles avec deux variables  $x$  et  $y$ , la fonction cherchée est  $u$  :

$$A \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + E \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + Fu = G$$

Eq. (C.1)

#### 1. Equation elliptique :

Si  $B^2 - 4AC < 0$ ; Exemple (équation de Laplace)

$$\Delta c = 0$$

Eq. (C.2)

#### 2. Equation parabolique :

Si  $B^2 - 4AC = 0$ ; Exemple :

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \Delta c = 0$$

Eq. (C.3)

#### 3. Equation hyperbolique :

Si  $B^2 - 4AC > 0$ ; Exemple (propagation d'une onde) :

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} - \Delta c = 0$$

Eq. (C.4)

La formulation par équation aux dérivées partielles selon l'équation (C.1) s'appelle *formulation forte*. A l'opposé, dans la forme d'une équation intégrée avec une distribution comme noyau d'intégrale (cas des éléments finis) il s'agit d'une *formulation faible*.

### **C 2 Résolution numérique des équations aux dérivées partielles**

On s'intéresse à la résolution d'une équation différentielle aux dérivées partielles (problème continu). On considère alors un schéma numérique associé à cette équation (problème approché). Un schéma de résolution numérique doit allier précision, stabilité et convergence. Un phénomène à éviter lors de la mise en place d'un schéma numérique est la diffusion numérique.

## C 2.1 Discrétisation dans l'espace

On introduit ces diverses méthodes d'approximation d'équations aux dérivées partielles en se basant sur l'exemple classique de l'équation elliptique de la chaleur en deux dimensions.

Soit un domaine  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^2$ , limité, de frontière  $\Gamma$  suffisamment régulière. Soient  $k$  et  $h$ , respectivement le pas de temps et d'espace,  $v$ , la solution du problème continu et  $u$ , la solution du problème approché. On cherche une fonction  $\phi$  telle que

$$\begin{aligned} -\Delta\phi &= f \text{ dans } \Omega \\ \phi &= 0 \text{ sur } \Gamma \end{aligned}$$

Eq. (C.5)

$$\text{avec } \Delta\phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} : \text{laplacien.}$$

C'est ce que l'on appelle la *formulation forte* du problème.

### C 2.1.1 Différences finis

La méthode des différences finies consiste à découper le domaine  $\Omega$  en plusieurs petits éléments rectangulaires, de largeur  $h_x$  et de longueur  $h_y$ . C'est une méthode qui convient, en général, aux domaines réguliers.

Le problème discret consiste à trouver une approximation de la fonction  $\phi$  au point  $(x_i, y_j)$ , notée  $u_{i,j}$ , et ce, en chacun des points internes du maillage (la solution étant considérée comme connue sur la frontière du domaine.)

Les différentes valeurs  $u_i$  sont solutions du problème discret :

$$-\left( \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h_y^2} \right) = f_i \quad \text{Eq. (C.6)}$$

où les dérivées du problème continu sont approximées par :

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h_x} \quad \text{Eq. (C.7)}$$

$$\left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{i,j} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h_x^2} \quad \text{Eq. (C.8)}$$

où  $u_{ij}$  est la valeur de  $u$  au point  $(x_i, y_j)$

On aboutit ainsi à la résolution d'un système linéaire

$$[A] \cdot U = F \quad \text{Eq. (C.9)}$$

où  $[A]$  est une matrice (ici tridiagonale) et  $U=(U_j)$  et  $F=(F_j)$  sont des vecteurs.

### C 2.1.2 Eléments finis

#### a) Approche générale

La méthode des éléments finis utilise les principes suivants :

a1) On fait une discrétisation de la zone d'étude en éléments discrets. On approxime la fonction recherchée par ses valeurs aux points de discrétisation de la zone d'étude. Entre chacun de ces points, la fonction est interpolée par pondération.

a2) On cherche une fonction de pondération des valeurs aux coordonnées et une fonction d'interpolation pour les valeurs intermédiaires. Pour cela, il y a différentes possibilités (voir Huyakorn and Pinder, 1983) :

- la fonction "delta de Dirac" autour des points de discrétisation. Cette méthode est appelée "*localisation par points*" (*pointwise collocation*). La fonction "delta de Dirac" est appelée une *fonctionnelle* ou une *distribution*, c'est-à-dire, il s'agit de la limite d'une suite de fonctions. Ces dernières fonctions sont à support infiniment "petit" (c.a.d. la partie de la fonction où ses valeurs sont différents de 0), à valeurs infiniment "grandes" et de masse unité. Cela signifie, que l'intégrale de telles fonctions est égale à 1.
- la fonction de pondération est identique à la fonction d'interpolation. Cette méthode est appelée "*Standard Galerkin Method*".

a3) On intègre ensuite les conditions initiales et les conditions aux limites dans les équations.

a4) La fonction analytique recherchée qui doit satisfaire l'équation différentielle est substituée par la fonction qui ne la satisfait qu'avec un résidu  $\epsilon$ . Le résidu correspond alors à la différence entre la fonction analytique exacte et la fonction approximée. Le but dans l'approche des éléments finis est de minimiser ce résidu.

#### b) Approche théorique des éléments finis

La méthode des éléments finis consiste à trouver également une approximation de la solution de l'équation (c5) en chacun des points  $(x_i, y_j)$  du domaine, mais cette méthode ne s'applique pas directement à l'équation différentielle (c5) :

On peut montrer que résoudre équation (c5) revient à résoudre le problème de minimisation suivant : trouver  $\min J(v)$  avec  $v$  dans un espace  $V$  (ici  $H_0^1(\Omega)$ ) où

$$J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 d\Omega + \int_{\Omega} f v d\Omega \quad \text{Eq. (C.10)}$$

et est une fonctionnelle quadratique.

L'espace de Sobolev  $H^1(\Omega)$  est donné par  $H^1(\Omega) =$  (fonctions  $v$  de carré intégrable telle que  $\frac{\partial v}{\partial x}$  soit de carré intégrable).

L'espace  $H_0^1(\Omega)$  est l'ensemble des fonctions appartenant à  $H^1(\Omega)$  et qui s'annulent sur la frontière du domaine. On parle de *fonctionnelle* pour  $J$  car on a à faire à des fonctions dont les variables sont elles-mêmes des fonctions. L'espace  $V$  est un espace de dimension infinie.

Or, résoudre équation (C10), c'est trouver  $u$  telle que  $J'(u) = 0$ , i.e.

$$J'(u) \cdot v = 0 \text{ pour tout } v \tag{Eq. (C.11)}$$

où

$J'$  est la différentielle de  $J$  en  $u$  appliquée en  $v$

$u$  est l'approximation de la fonction cherchée en équation (c5) et équation c10.

La *différentielle* correspond en quelque sorte à la «dérivée» d'une fonctionnelle, mais elle dépend de plusieurs variables (ici  $u$  et  $v$ )

A l'aide de dérivées directionnelles, on peut montrer que

$$J'(u)v = \int_{\Omega} \nabla u \nabla v d\Omega - \int_{\Omega} f v d\Omega \tag{Eq. (C.12)}$$

on cherche donc  $u$  dans  $V$  telle que

$$\int_{\Omega} \nabla u \nabla v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega \tag{Eq. (C.13)}$$

C'est ce que l'on appelle la *formulation faible* associée au problème équation (c5).

### c) Méthode pratique pour déterminer la formulation faible d'un problème

En général, la fonction  $v$  est appelée une fonction test et  $V$  l'espace des fonctions tests.

La démarche ci-dessous est illustrée par l'exemple de l'équation de la chaleur, mais reste valable dans le cas d'une équation aux dérivées partielles quelconque.

On multiplie tous les termes de l'équation différentielle par une fonction test  $v$ , c'est-à-dire une fonction d'appui pour évaluer un intégral.

$$-\Delta \phi v = f v \tag{Eq. (C.14)}$$

On intègre ensuite sur tout le domaine  $\Omega$  :

$$\int_{\Omega} (-\Delta \phi v) d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega \tag{Eq. (C.15)}$$

A l'aide de la formule de Green, on diminue l'ordre de la dérivée.

$$\int_{\Omega} (\nabla \phi \nabla v) d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega \tag{Eq. (C.16)}$$

d) Approximation selon la méthode de Galerkin

La méthode des éléments finis consiste à découper le domaine  $\Omega$  en plusieurs petits éléments qui peuvent être aussi bien des triangles, des rectangles, etc. de taille maximale  $h$  ( $h$  tendant vers 0). La triangulation du domaine est définie par :

$$\Omega_h = \bigcup_{k=1}^{n_t} T_k \quad \text{Eq. (C.17)}$$

tel que  $\bar{\Omega} \subset \Omega_h$  (où  $n_t$  est le nombre total de triangles et  $T_k$ , le triangle numéro  $k$ ).

Les détails sur les divers critères de découpage du domaine sont donnés dans Luquin et Pironneau, 1996. Le terme  $h$  correspond au pas d'espace : il dépend souvent du pas de temps et est choisi généralement de la manière suivante :  $h = \inf |T|$ .

La méthode des éléments finis selon *Galerkin* consiste à approximer l'espace  $V$ , de dimension infinie, par une suite d'espaces  $V_h$  de dimension finie. On définit alors un espace fonctionnel approché  $V_h$ , constitué de fonctions continues sur tout le domaine de calcul et qui sont égales à des polynômes sur chacun des triangles (Lucquin et Pironneau, 1996).

Les fonctions sur cet espace  $V_h$  sont entièrement déterminées par leurs valeurs en chacun des noeuds internes du domaine.  $P^1$  est l'ensemble des polynômes  $p$  sur  $\mathbb{R}^2$ , d'ordre 1 pour chacune des variables i.e. tels que  $p(x,y) = ax+by+c$ . Les éléments finis considérés ici sont alors appelés : éléments finis  $P^1$  ou éléments finis triangulaires linéaires.

Dans ce cas, l'espace d'approximation  $V_h$  est donné par :

$$V_h = \left( v_h \in C^0; v_h|_T \in P^1 \right) \quad \text{Eq. (C.18)}$$

Il existe différents types d'éléments finis triangulaires. Les noeuds du maillage peuvent correspondre à la fois à des sommets de triangles et à des points situés sur les arêtes des triangles. C'est ainsi que l'on distingue des éléments finis triangulaires  $P^1$ ,  $P^2$ , ..

Il en est de même pour les éléments finis quadrangulaires où l'on distingue les éléments finis quadrangulaires  $Q^1$ ,  $Q^2$ ...  $Q^1$  est l'ensemble des polynômes  $p$  sur  $\mathbb{R}^2$ , d'ordre total égal à 1 i.e. tels que  $p(x, y) = ax + by + cxy + d$

Les éléments finis considérés alors sont dits de type  $Q^1$  ou quadrangulaires linéaires.

On se ramène ainsi à un problème de minimisation en dimension finie, et donc à une autre formulation faible appelée formulation faible discrète.

$$\int_{\Omega_h} \nabla u \nabla v_h d\Omega = \int_{\Omega_h} f v_h d\Omega \quad \text{Eq. (C.19)}$$

e) Réduction de la formulation variationnelle discrète à une formulation dépendant des fonctions de base de  $V_h$

L'espace  $V_h$  étant de dimension finie, on peut en déterminer une base: on montre que les fonctions de l'espace  $V_h$  qui valent 1 en un noeud et 0 pour tous les autres noeuds forment une base de  $V_h$ . Il suffit en fait de montrer que ces fonctions forment une famille libre de  $V_h$ , car il y en a autant que le nombre de noeuds du maillage. Les fonctions de base de  $V_h$  sont généralement notées  $N_i(x,y)$  et valent ainsi 1 au noeud numéro  $i$  et 0 pour tous les autres noeuds. Il est suffisant d'écrire la formulation équation (c19) en choisissant comme *fonction test* les fonctions de base  $N_i$ .

De plus, on peut écrire la décomposition de la fonction  $u$  dans la base  $(N_i)_j$  :

$$u = \sum_j u_j N_j \quad \text{Eq. (C.20)}$$

La formulation variationnelle équation (c19) se réduit ainsi à la formulation suivante :

$$\sum_j \int_{\Omega} u_j (\nabla N_i \nabla N_j) = \int_{\Omega_h} (f N_i) \quad \text{Eq. (C.21)}$$

pour tous les noeuds  $i$  du maillage. C'est généralement sous cette forme que la formulation variationnelle est donnée lors de la description d'un modèle numérique.

Le problème se ramène ainsi à la résolution d'un système linéaire

$$[A] \cdot U = F \quad \text{Eq. (C.22)}$$

où

$$A_{ij} = \int_{\Omega_h} (\nabla N_i \nabla N_j) d\Omega \text{ est une matrice.}$$

$$U = (u_j) \text{ et } F = (F_i) \text{ sont des vecteurs.}$$

Il faut noter que le terme  $A_{ij}$  se réduit au calcul d'intégrales sur chacun des éléments du maillage (ici sur chacun des triangles) :

$$A_{ij} = \sum_{\text{triangles } T} \int (\nabla N_i \nabla N_j) d\Omega = \sum_{\text{triangles } T} A_{ij}|_T \quad \text{Eq. (C.23)}$$

Compte tenu du support des fonctions  $N_i$ , il suffit de calculer les intégrales  $A_{ij}|_T$  sur un nombre restreint d'éléments finis  $T$ .

Souvent, on parle de la méthode de *Galerkin standard* : cela signifie que l'on multiplie tous les termes de l'équation différentielle par une même fonction  $N_i$  (Huyakorn&Pinder, 1984).

f) Détermination des fonctions de base des différents éléments finis*Eléments triangulaires :*

Les fonctions de base associées aux éléments finis triangulaires sont déterminées à partir des coordonnées barycentriques. Mais pour des maillages contenant un grand nombre de points, les calculs se font souvent par passage à l'élément fini de référence. [Zienkiewicz, 1989, Dhatt et Thouzot 1984, Raviart et Thomas, 1983 pour plus de détails]. Le calcul des intégrales se fait en premier lieu sur l'élément de référence. On en déduit ensuite les calculs sur des éléments quelconque par changement de variables. Cela impose donc le calcul d'une matrice jacobienne (à chaque changement de variable) [Zienkiewicz, 1989].

Passage à l'élément de référence : Soit  $G$  une fonction quelconque définie sur  $\mathbb{R}^2$ .

$$\begin{aligned} \int_T G(x, y) dx dy &= \int_{\hat{T}} G \circ F(\hat{x}, \hat{y}) |\text{Jac}F| d\hat{x} d\hat{y} \\ &= \int_{\hat{T}} \hat{G}(\hat{x}, \hat{y}) |\text{Jac}F| d\hat{x} d\hat{y} \end{aligned} \quad \text{Eq. (C.24)}$$

Lors des calculs, on aboutit généralement à des fonctions  $G$  dépendant des fonctions de base des éléments finis  $N_i$ .

*Eléments quadrangulaires :*

Les fonctions de base sont, dans ce cas, un peu plus difficile à déterminer.

A la différence des éléments finis triangulaires, l'approche des éléments finis quadrangulaires se fait en premier lieu au travers de l'élément de référence [Raviart et Thomas, 1983]. Mais les calculs sur des éléments quelconques se déduisent de la même façon, à savoir par changement de variable. [Zienkiewicz, 1989].

**C 2.1.3 Volumes finis**

Dans le cas des volumes finis, on découpe le domaine en plusieurs mailles qui peuvent être soit triangulaires, soit quadrangulaires, voir même les deux à la fois.

La méthode des volumes finis s'apparente tantôt à une méthode de différences finies, tantôt à une méthode d'éléments finis. En fait, cette méthode est vue comme une méthode d'éléments finis car elle se base sur une formulation intégrale du problème. Mais ce n'est pas la formulation faible du problème (dans la mesure où il n'y a pas de fonctions test) : c'est ce que l'on pourrait appeler une forme intégrale forte.

Cette formulation se réduit ensuite aux calculs d'intégrales, non pas sur des éléments, mais sur ce que l'on appelle des volumes de contrôle : la solution approchée est alors considérée comme constante sur chaque volume de contrôle. Il existe différentes manières de construire ces volumes de contrôle. Mais cette construction doit respecter deux principes : les volumes ne doivent pas se chevaucher et il ne doit pas rester de trous entre ces volumes. Les constructions les plus employées sont les volumes finis centrés aux noeuds ou centrés sur la maille.

Les calculs se simplifient en utilisant généralement les fonctions de base associées aux éléments finis.

---

## C 2.2 Discrétisation dans le temps

Pour pouvoir suivre l'évolution temporelle, on intègre l'équation différentielle obtenue par rapport au temps.

Les schémas explicites ont l'avantage de consommer beaucoup moins de mémoire et de temps d'exécution que les schémas implicites. Cependant, leur stabilité dépend du pas du temps et de la largeur des mailles.

Lorsque l'on étudie une équation différentielle aux dérivées partielles qui contient des dérivées par rapport au temps, on discrétise généralement les termes de dérivation par rapport au temps avec les *différences finies*. A ce moment, on décide si l'on choisit un schéma explicite ou implicite.

a) Un schéma *explicite* peut s'écrire sous la forme

$$u^{n+1} = Q \cdot u^n \quad \text{Eq. (C.25)}$$

L'inconnue  $u^{n+1}$  est alors directement déterminée.

b) Un schéma *totalemtent implicite* s'écrit sous la forme

$$Q \cdot u^{n+1} = u^n \quad \text{Eq. (C.26)}$$

Il faut alors résoudre un système pour déterminer l'inconnue  $u^{n+1}$ .

c) Un schéma *implicite* s'écrit :

$$Q \cdot u^{n+1} = R \cdot u^n \quad \text{Eq. (C.27)}$$

Ici, également, il faut résoudre un système pour déterminer  $u^{n+1}$ .

Q et R sont des opérateurs dépendant des pas d'espace et de temps  
 $u^n$  est un vecteur dont chaque composante correspond à sa valeur  
en un point du maillage en espace, calculée à l'instant n

## C 2.3 Résolution des systèmes d'équations d'analyse numérique

### C 2.3.1 Systèmes linéaires

Un système linéaire se présente sous la forme

$$[A] \cdot x = b$$

*Eq. (C.28)*

où

[A] est une matrice de dimension nxn

x = (x<sub>1</sub>, x<sub>2</sub>, ..., x<sub>n</sub>) est le vecteur inconnu du système

ou bien sous la forme de n équations à n inconnues :

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n &= b_1 \\ a_{12} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \dots + a_{2n} \cdot x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1} \cdot x_1 + a_{n2} \cdot x_2 + \dots + a_{nn} \cdot x_n &= b_n \end{aligned}$$

*Eq. (C.29)*

#### a) Factorisation L.U

Cette méthode consiste à factoriser la matrice A sous la forme :

$$[A] = [L] \cdot [U]$$

*Eq. (C.30)*

où

L est une matrice triangulaire supérieure

U est une matrice triangulaire inférieure

Le système devient alors :

$$[L] \cdot [U] \cdot x = b$$

*Eq. (C.31)*

On pose ensuite :

$$y = [U] \cdot x$$

*Eq. (C.32)*

La résolution se décompose par la suite en deux parties :

on résout d'abord le système  $Ly = b$ , puis le système  $L'x = y$

### b) Méthodes de décomposition

Ces méthodes consistent à construire une matrice B et un vecteur c tels que la suite :

$$x^{k+1} = Bx^k + c \quad \text{Eq. (C.33)}$$

converge vers la solution de

$$[A] \cdot x = b \quad \text{Eq. (C.34)}$$

Pour cela, on décompose la matrice A sous la forme :

$$[A] = [M] - [N] \quad \text{Eq. (C.35)}$$

La suite  $x^k$  est donc donnée par :

$$x^{k+1} = M^{-1} \cdot N \cdot x^k + M^{-1} \cdot b$$

#### Exemples :

##### Méthode de Jacobi :

on prend  $M = D$   
 $N = E + F$

où

D est une matrice diagonale égale à la diagonale de A.

E est une matrice triangulaire inférieure, égale à la partie inférieure de A.

F est une matrice triangulaire supérieure, égale à la partie supérieure de A.

La méthode s'écrit :

$$x^{k+1} = D^{-1} x^k (E + F) x^k + D^{-1} b \quad \text{Eq. (C.36)}$$

##### Méthode de Gauss-Seidel

on prend  $M = D + E$   
et  $N = F$

La méthode s'écrit :

$$x^{k+1} = (D + E)^{-1} F x^k + (D + E)^{-1} b \quad \text{Eq. (C.37)}$$

Dans la méthode de Jacobi,  $x_i^{k+1}$  est calculé à partir des n composantes de  $x^k$ , qui doivent être conservées jusqu'au calcul de  $x_n^{k+1}$ . Dans la méthode de Gauss-Seidel,  $x^{k+1}$  est calculé à partir des (i-1) premières composantes de  $x^{k+1}$  et des (m-i-1) dernières composantes de  $x^k$ .

On peut donc dans ce dernier cas remplacer au fur et à mesure des calculs les composantes de  $x^k$  par les composantes de  $x^{k+1}$ .

### C 2.3.2 Systèmes non linéaires

Un système non linéaire se présente sous la forme :

$$f(x) = 0$$

Eq. (C.38)

où

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

ou bien sous la forme de n équations à n inconnues :

$$f_1(x_1; x_2; \dots x_n) = 0$$

$$f_2(x_1; x_2; \dots x_n) = 0$$

:

$$f_n(x_1; x_2; \dots x_n) = 0$$

Eq. (C.39)

Nous nous limitons par la suite à des systèmes non linéaires de  $\mathbb{R}^3$ .

#### a) Méthode de Newton-Raphson

Cette méthode peut être considérée comme une généralisation de la méthode de Newton à des fonctions de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}^n$ .

En général, on résout le système de la manière suivante :

On cherche h tel que

$$f(x + h) = 0$$

Eq. (C.40)

Par un développement de Taylor, on peut aboutir à

$$f(x) + h \cdot [\text{Jac}(f)](x) = 0$$

Eq. (C.41)

ou plus précisément chercher h tel que :

$$h = -[\text{Jac}^{-1}(f)] \cdot f(x)$$

Eq. (C.42)

où [jac(f)] désigne la matrice jacobienne de f au point x i.e. :

$$[\text{Jac}(f)]_{ij} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)$$

Eq. (C.43)

On part d'un point x et, à partir de x, on détermine le point x' suivant :

---

$$x' = x + h$$

Eq. (C.44)

La méthode de Newton-Raphson consiste, à chaque itération  $k$ , à évaluer et à inverser la matrice jacobienne (calculée au point  $x^k$ ) suivant l'algorithme ci-dessous :

1. On se donne un point de départ  $x^0$
2. Tant que la différence entre les points  $x^k$  et  $x^{k+1}$  est grande :

$$x^{k+1} = x^k + h$$

Eq. (C.45)

$$k + 1 \leftarrow k$$

C'est une méthode qui nécessite un certain effort du calcul pour l'inversion d'une matrice à chaque pas de temps.

#### b) Méthode de Picard

C'est une variante de la méthode de Newton-Raphson: au lieu d'évaluer et d'inverser la matrice jacobienne à chaque étape de temps, la méthode de Picard calcule et inverse la matrice jacobienne à une certaine étape de temps et conserve cette matrice pendant un nombre d'itérations définies.

#### c) Critères de choix pour les méthodes Newton-Raphson ou Picard

De ce fait, la méthode de Picard est beaucoup moins coûteuse que la méthode de Newton-Raphson, mais elle est évidemment moins précise.

La méthode de Newton-Raphson est néanmoins plus robuste que la méthode de Picard dans le cadre des problèmes fortement non linéaires.

Les méthodes de résolution sont expliquées dans [Sibony et Mardon, 1984].

## C 3 Tableau : Etapes de la résolution numérique des équations aux dérivées partielles

	<i>Problèmes physiques en général</i>	<i>Écoulement polyphasique en milieu poreux</i>	<i>MOFAT</i>
<b>EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES</b>	<i>Stationnaire :</i> - Elliptique <i>Evolutif :</i> - Parabolique - Hyperbolique	Parabolique Hyperbolique	Parabolique Hyperbolique
<b>DISCRETISATION EN ESPACE</b>	<i>Dimension : 1, 2, 3</i>  <i>Modes de discrétisation :</i> - Différences Finies - Éléments Finis - Volumes Finis  <i>Schémas :</i> - Centré - Décentré	<i>Dimension : 1,2,3</i>  <i>Modes de discrétisation :</i> - Différences Finies - Éléments Finis - Volumes Finis  <i>Schéma :</i> - Décentré amont («upstream weighted»)	<i>Dimension : 2</i>  <i>Mode de discrétisation :</i> - Éléments Finis Rectangulaires  <i>Schéma :</i> - Décentré Amont («upstream weighted»)
<b>DISCRETISATION EN TEMPS</b>	<i>Mode général :</i> - Différences Finies  <i>Schémas :</i> - Explicite - Totalement Implicite - Implicite	<i>Mode :</i> - Différences Finies  <i>Schémas :</i> - Totalement Implicite - Implicite	<i>Mode :</i> - Différences Finies  <i>Schémas :</i> - Totalement Implicite (Equations de flux) - Implicite (Equation de transport)
<b>METHODES DE RESOLUTION DU SYSTEME</b>	<i>Systèmes linéaires</i> - Factorisation L.U - Jacobi - Gauss-Seidel  <i>Systèmes non-linéaires</i> - Picard pour les systèmes légèrement non-linéaires - Newton-Raphson pour les systèmes fortement non-linéaires	- Newton-Raphson - Picard	<i>Newton-Raphson :</i> - Equation de flux  <i>Picard :</i> - Equation de transport)

Tab. C.1 : Etapes de la résolution numérique des équations aux dérivées partielles

OPTIMI- SATION	<p><b>PLACE MEMOIRE :</b>  <i>Stockage des Matrices</i>  - en bande  - Morse</p> <p><b>ACCELERATION DE LA CONVERGENCE :</b>  <i>Systèmes linéaires :</i>  - méthode de relaxation</p> <p><i>Systèmes non-linéaires :</i>  - gradient conjugué (avec préconditionnement)</p> <p><b>PRECISION :</b>  - affinage du Maillage  - éléments finis d'ordre supérieur</p> <p><b>DIFFUSION NUMERIQUE :</b>  - préférence des schémas décentrés aux schémas centrés</p>	<p><i>Gradient conjugué (avec préconditionnement)</i></p> <p><i>Schémas décentrés amont (c.f. Buckley-Leverett)</i></p>	<p><i>Schémas décentrés amont</i></p>
-------------------	---	---	---------------------------------------

Tab. C.1 : Etapes de la résolution numérique des équations aux dérivées partielles

- Polyphasique : Systèmes non-linéaires :  
prise en compte des relations entre saturation et pression capillaire
- Optimisation : Il s'agit d'intervenir à différents niveaux de la discrétisation afin d'améliorer la précision, la stabilité, la rapidité, d'économiser la place mémoire et d'éviter la diffusion numérique
- Diffusion numérique : elle est liée à l'espace d'approximation (pour les éléments finis)

**ANNEXE D : SCHÉMAS NUMÉRIQUES UTILISÉS****D 1 Traitement du transport dispersif en zone saturée**

Résolution numérique : méthode QUICKEST (Leonard, 1979).

- efficace pour le transport de la matière dominé par l'advection.
- entièrement explicite :

$$c^{k+1} - c^k = f(c^k)$$

Eq. (D.1)

(implicite :  $c^{k+1} - c^k = f(c^{k+1})$ )

- développement jusqu'au 3<sup>ème</sup> ordre : schéma conservatif

**D 1.1 Termes advectifs**

Equation advective :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i c) = 0$$

Eq. (D.2)

- pondération décentrée amont

Pour une maille 3D :

- multiplication par  $\Delta t$  :

$$c_{j,k,l}^{n+1} - c_{j,k,l}^n + \sigma_x \left( c_{j+\frac{1}{2},k,l} - c_{j-\frac{1}{2},k,l} \right) + \sigma_y \left( c_{j,k+\frac{1}{2},l} - c_{j,k-\frac{1}{2},l} \right) + \sigma_z \left( c_{j,k,l+\frac{1}{2}} - c_{j,k,l-\frac{1}{2}} \right) = 0$$

Eq. (D.3)

où :

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  : nombres de courant directionnels :

$$\sigma_x = \frac{v_x \cdot \Delta t}{\Delta x}$$

$$\sigma_y = \frac{v_y \cdot \Delta t}{\Delta y}$$

$$\sigma_z = \frac{v_z \cdot \Delta t}{\Delta z}$$

Eq. (D.4)

Interpolation des termes  $c^n, c^{n+1}$  à la limite d'une maille, à partir des concentrations rencontrées en amont (Pondération amont) :

$$c_{j+\frac{1}{2},k,l} = \sum_{i=1}^8 \delta_i c_i$$

$$c_{j,k+\frac{1}{2},l} = \sum_{i=1}^8 \gamma_i c_i$$

$$c_{j,k,l+\frac{1}{2}} = \sum_{i=1}^8 \beta_i c_i$$

Eq. (D.5)

où :

$c_i$  : concentration autour du point actuel

$\delta_i, \gamma_i, \beta_i$  : fonctions de pondération construites de façon à ce que le schéma devienne 3<sup>ème</sup> ordre (Vested et al., 1992)

- positionnement des pondérations relative à la direction actuelle du flux

## D 1.2 Termes dispersifs

Equation advective-dispersive :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i c) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) = 0$$

Eq. (D.6)

- pondération en amont des concentrations
- différences centrales des coefficients de dispersion

Transport dispersif en direction x :

$$\begin{aligned} TD_{xx(j,k,l)} &= \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = \\ &= -\frac{1}{2} (D_{xx(j+1,k,l)} + D_{xx(j,k,l)}) \cdot (c_{j+1,k,l} - c_{j,k,l}) \cdot \frac{1}{\Delta x} - \\ &\quad -\frac{1}{2} (D_{xy(j+1,k,l)} + D_{xy(j,k,l)}) \cdot (c_{j,k+1,l} + c_{j+1,k+1,l} - c_{j,k-1,l} - c_{j+1,k-1,l}) \cdot \frac{1}{4\Delta x \Delta y} - \\ &\quad -\frac{1}{2} (D_{xz(j+1,k,l)} + D_{xz(j,k,l)}) \cdot (c_{j,k,l+1} + c_{j+1,k,l+1} - c_{j,k,l-1} - c_{j+1,k,l-1}) \cdot \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \end{aligned}$$

Eq. (D.7)

Les termes du transport dispersif sont ensuite incorporés dans les fonctions de pondération de la manière que le transport de masse peut être calculé dans un seul pas (Danish Hydraulic Institut, 1995).

## D 2 Traitement de l'écoulement et du transport polyphasique

### D 2.1 Etapes générales de la résolution numérique

Les équations du transport sont très dépendantes de la solution des équations de flux, en raison, de la vitesse et de la saturation de chaque phase, exprimés directement dans les équations du transport, et des coefficients de la dispersion.

Les équation du flux doivent donc être résolues en priorité par rapport aux équations du transport.

Les étapes de la résolution numérique d'un problème d'écoulement triphasique avec transfert de masse entre les phases sont indiquées dans le tableau ci-dessous :

A l'équilibre	Hors de l'équilibre
<b>1. Résolution des équations de flux</b> avec $(I_k^\alpha)^{l-1}$ et $(\rho_\alpha)^{l-1}$  on détermine $(h_\alpha)^l$	<b>1. Résolution des équations de flux</b> avec $(I_k^\alpha)^{l-1}$ et $(\rho_\alpha)^{l-1}$  on détermine $(h_\alpha)^l$
<b>2. Résolution de la «somme-équation» du transport.</b> avec = pas d'itération (schéma explicite)   on détermine $(C_p^k)^l$	<b>2. Résolution de la «somme-équation» du transport.</b> = résolution itérative (schéma implicite ou totalement implicite)  avec remise à jour des termes $(I_k^\alpha)$ et $(\rho_\alpha)$ à chaque étape  jusqu'au critère de convergence des équations de transport  on détermine $(C_p)^l$
<b>3. Calcul de <math>(I_k^\alpha)^l</math> et de <math>(\rho_\alpha)^l</math></b>	<b>3. <math>(I_k^\alpha)^l</math> et <math>(\rho_\alpha)^l</math> sont ceux déterminés à la dernière itération précédente</b>
<b>4. passage à l'étape l+1</b>	<b>4. passage à l'étape l+1</b>

Tab. D.1 : Calcul de la deuxième étape (transport)

On réitère cette opération jusqu'à ce que le critère de convergence des équations de flux soit satisfait.

Mise à jour de  $I_k^\alpha$  hors de l'équilibre :

• Quand on résout les équations de flux à l'étape I, on détermine  $(h_\alpha)^1$ . Pour cela, on se sert de la valeur de  $(I_k^\alpha)^{1-1}$ .

• On reprend ensuite les équations de flux et on les discrétise avec des différences finies (et non plus avec des éléments finis). Comme on connaît tous les termes de l'équation pour l'étape I (excepté bien sûr  $I_k^\alpha$ ), on peut déterminer  $(I_k^\alpha)^1$ . Il y a une différence entre  $(I_k^\alpha)^{1-1}$  et  $(I_k^\alpha)^1$  : ceci est due aux erreurs d'approximation. Hors de l'équilibre, lorsque l'on résout de manière itérative l'équation de transport, la mise à jour de  $I_k^\alpha$  consiste à ajouter, à chaque itération cette erreur à  $I_k^\alpha$ .

Mise à jour de  $\rho_\alpha$  :

En cours de simulation, la densité de chacune des phases va changer, ceci étant dû essentiellement aux transferts de masse au travers des limites de phase.

La mise à jour est quelque peu différente selon les phases considérées :

phase mouillante : 
$$\rho_m = \rho_m^o \left( 1 - \sum_k C_k^m \right) + \sum_k C_k^m$$
 Eq. (D.8)

phase non mouillante : 
$$\rho_n = \sum_k C_k^n$$
 Eq. (D.9)

phase gazeuse : 
$$\rho_g = \lambda h_g + \rho_g^o + \sum_k C_k^g$$
 Eq. (D.10)

**D.2.2 Discrétisation en espace : formulation pondération amont :**

Cette technique, décrite précédemment, est utilisée dans Mofat à la fois pour les équations de flux et l'équation de transport. Nous nous limitons par conséquent à développer les étapes pour une équation de flux.

Equation de flux pour la phase  $\alpha$  (compressible) :

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} (S_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}^\alpha \frac{\partial}{\partial x_j} (h_\alpha + \rho_{\alpha p} z) \right) + \frac{I_\alpha}{\rho_\alpha} \quad (1)$$
 Eq. (D.11)

Inconnue :  $h_\alpha$

### Maillage

On se donne un domaine rectangulaire  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^2$ , de frontière  $\Gamma$ . Mofat ne permet de travailler que sur un découpage du domaine composé de mailles rectangulaires, dont les côtés sont parallèles aux axes de coordonnées  $[x-z]$ .

$\Omega_h$  est le domaine discrétisé et  $K$  un rectangle du maillage,  $d$  est l'épaisseur d'un élément rectangulaire (i.e. dans la direction  $z$ ), et  $m$  sa longueur (i.e. dans la direction  $x$ ).

La formulation discrète s'appelle formulation par pondération amont.

#### D 2.2.1 Discrétisation des équations de flux

Cette méthode, très utilisée, résulte d'un couplage entre la technique de pondération amont et la méthode des éléments finis selon Galerkin.

Compte tenu du découpage du domaine imposé par le logiciel Mofat, les éléments finis considérés sont bien sûr rectangulaires. Ce sont des éléments finis (linéaires) de type  $Q^1$ , c'est-à-dire que les noeuds du maillage correspondent aux sommets de chaque rectangle.  $N_I$  sont les fonctions de base (symétriques) associées aux éléments finis  $Q^1$  et  $W_I$  les fonctions de pondération amont (non symétriques).

#### Détermination de la formulation variationnelle discrète

a) Selon la technique utilisée, les termes de l'équation (1) correspondant aux termes d'espace sont pondérés par les fonctions  $W_I$ , tandis que les termes de temps sont pondérés par les fonctions de base habituelles  $N_I$ .

On intègre ensuite l'équation sur le domaine  $\Omega_h$ .

$$\int_{\Omega_h} \varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} \alpha N_I d\Omega - \int_{\Omega_h} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K^{\alpha}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( h_{\alpha} + \frac{\rho_{\alpha}}{\rho_p} z \right) \right) W_I d\Omega = \int_{\Omega_h} \frac{I_{\alpha}}{\rho_{\alpha}} N_I d\Omega \quad \text{Eq. (D.12)}$$

#### Approximations

• On approxime  $h_{\alpha}$  en chaque point du domaine par sa décomposition suivant la base ( $N_J$ ) :

$$h_{\alpha}(x_i; t) = \sum_{J=1}^4 N_J(\xi; \eta) h_{\alpha J}(t) \quad \text{Eq. (D.13)}$$

- Comme la saturation est fonction de  $h_\alpha$ , on approxime également  $S_\alpha$  par :

$$S_\alpha(x_i;t) = \sum_{J=1}^4 N_J(\xi;\eta) S_{\alpha J}(t) \quad \text{Eq. (D.14)}$$

$(\xi;\eta)$  représente les coordonnées locales du point  $x_i$  dans le rectangle considéré.

Pour toutes les intégrales, le calcul sur le domaine se réduit au calcul sur chacun des rectangles de la manière suivante ( $G$  est une fonction quelconque de  $R^2$ ) :

$$\int_{\Omega_h} G d\Omega = \sum_{\text{tous les rectangles } K} \int_K G d\Omega \quad \text{Eq. (D.15)}$$

b) Calcul de  $\int_{K_h} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}^\alpha \frac{\partial}{\partial x_j} \left( h_\alpha + \frac{\rho_\alpha}{\rho_p} z \right) \right) W_I d\Omega :$

A l'aide de l'approximation de  $h_\alpha$  précédente, et de la formule de Green, on peut écrire :

$$\int_{K_h} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}^\alpha \frac{\partial}{\partial x_j} \left( h_\alpha + \frac{\rho_\alpha}{\rho_p} z \right) \right) W_I d\Omega = \int_{\partial K} W_I q_i n_i d\Gamma + \sum_J \int_K K_{ij}^\alpha \frac{\partial N_I}{\partial x_j} \frac{\partial N_J}{\partial x_i} d\Omega + \sum_J \int_K W_I \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K_{ij}^\alpha \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) d\Omega$$

Le calcul de  $\int_{\Omega_h} \varepsilon \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} N_I d\Omega :$

A l'aide de l'approximation de  $S_\alpha$ , on peut écrire :

$$\int_{K_h} \varepsilon \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} N_I d\Omega = \sum_J \frac{dS_{\alpha J}}{dt} \left( \int_K \varepsilon N_J N_I d\Omega \right) \quad \text{Eq. (D.16)}$$

On aboutit ainsi à une équation, qui, mise sous forme matricielle, peut s'écrire :

$$[A] \{h_\alpha\} + [B] \left\{ \frac{dS_\alpha}{dt} \right\} = \{F\} \quad \text{Eq. (D.17)}$$

où  $[A]$  est une matrice définie par :

$$[A]_{IJ} = \sum_{\text{rectangles } K} \int_K K_{ij}^\alpha \frac{\partial N_I}{\partial x_j} \frac{\partial N_J}{\partial x_i} d\Omega \quad \text{Eq. (D.18)}$$

[B] est une matrice définie par :

$$[B]_{IJ} = \sum_{\text{rectangles } K} \int_K \varepsilon N_J N_I d\Omega \quad \text{Eq. (D.19)}$$

et {F} est un vecteur défini par

$$\{F\}_J = \sum_{\text{rectangles } K} \left( \int_{\partial K} W_I q_i n_i d\Gamma + \int_K W_I \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K^{\alpha}_{ij} \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) d\Omega \right) \quad \text{Eq. (D.20)}$$

les termes frontières s'annulent (choix de l'espace d'approximation)

c) On évalue le tenseur  $K_{ij}$  selon une formule de quadrature de Gauss :

$$K^{\alpha}_{ij} = \sum_{g=1}^4 (K^{\alpha}_{ij})^g N_g \quad \text{Eq. (D.21)}$$

où on choisit naturellement comme points  $g$  les noeuds du rectangle.

Les intégrales écrites précédemment pour chaque rectangle  $K$  sont calculées ensuite par passage à l'élément de référence.

on peut alors écrire :

$$[A]_{IJ}|_K = |\text{jacobienne } 1| \sum_{g=1}^4 [U^x]^K_g (K^{\alpha}_{ijx})^g + |\text{jacobienne } 2| \sum_{g=1}^4 [U^x]^K_g (K^{\alpha}_{ijx})^g \quad \text{Eq. (D.22)}$$

où

$$|\text{jacobienne } 1| = \frac{m}{d} \quad \text{et} \quad |\text{jacobienne } 2| = \frac{d}{m} .$$

$$[B]_{IJ}|_K = \varepsilon |\text{jacobienne } 3| \quad \text{où} \quad |\text{jacobienne } 3| = \frac{md}{4}$$

$$\{F\}_J|_K = |\text{jacobienne } 4| \sum_{g=1}^4 [G]_g^K K^{\alpha}_{ij} \quad \text{où} \quad |\text{jacobienne } 4| = \frac{d}{2} .$$

---

### D 2.2.2 Discrétisation de l'équation de transport

La démarche qui consiste à déterminer la formulation variationnelle discrète associée à la «somme-équation» de transport est identique à la démarche précédente. Les termes frontières sont ici conservés et exprimés en fonction des coefficients de poids.

On aboutit à une équation que l'on peut écrire sous forme matricielle :

$$[P] \left\{ C_k^p \right\} + [M] \left\{ \frac{d}{dt} C_k^p \right\} = \{R\} \quad \text{Eq. (D.23)}$$

où

[P] et [M] sont des matrices

{R} est un vecteur

Les matrices [A] et [P] sont appelées des matrices de raideur («stiffness») et que les matrices [B] et [M] sont des matrices de masse.

Dans les deux équations, les matrices de masse ne sont pas diagonales : c'est pourquoi le logiciel Mofat prévoit, dans sa résolution numérique, de procéder à ce que l'on appelle «mass-lumping»; c'est un procédé qui permet de diagonaliser la matrice de masse afin de faciliter la résolution.

### D 2.3 Discrétisation des équations en temps / choix des schémas explicite, implicite

Pour les deux équations, l'approximation en temps se fait naturellement par les différences finies.

#### a) Equation de flux

Compte tenu de la forte non-linéarité du système des équations de flux (due principalement aux relations de pression/saturation), il est nécessaire d'adopter un schéma implicite ou totalement implicite.

Compte tenu de la résolution numérique générale (couplage équations de flux / équation de transport) qui consiste à résoudre en premier lieu, pour chaque étape, les équations de flux, Mofat utilise un schéma *totalement implicite*.

La pression sera donc déterminée de manière totalement implicite.

**b) Equation de transport**

La non-linéarité de l'équation de transport provient de la dépendance des coefficients de répartition sur la concentration ainsi qu'aux taux de transfert de masse

A l'état d'équilibre, les relations entre les concentrations sont linéaires : c'est pourquoi, pour les problèmes de transfert à l'équilibre, on aura à faire à un système linéaire, et l'on choisit à ce moment de prendre un schéma *explicite*.

En ce qui concerne les problèmes de transferts hors de l'équilibre, on aura à faire à un problème non linéaire. Compte tenu de la résolution numérique générale (qui implique que l'on connaît, lors de la résolution de la «somme-équation» de transport, la vitesse d'écoulement pour chaque phase), Mofat utilise un schéma *implicite*.

Le schéma utilisé par le logiciel (hors équilibre) se met sous la forme :

$$\left(\theta[P] + \frac{[M]}{\Delta t}\right)^{r+1} (C^p_k)^{r+1} = \left(\theta[P] + \frac{[M]}{\Delta t}\right)^{r+1} (C^p_k)^r + \{R\}^{r+\theta} \quad \text{Eq. (D.24)}$$

$$\text{où } \{R\}^{r+\theta} = \theta\{R\}^{r+1} + (1-\theta)\{R\}^r .$$

**D.2.4 Résolution des systèmes d'équations**

La méthode de Newton-Raphson est plus robuste par exemple que la méthode de Picard, dans le cas de problèmes fortement non linéaires, pour lesquels la méthode de Picard produit une convergence lente.

Néanmoins, la méthode de Picard bénéficie d'une mise en pratique plus simple et coûte moins cher que la méthode de Newton.

Newton-Raphson demande un effort de calcul important dû à l'inversion d'une matrice jacobienne à chaque itération.

**a) Equation de flux**

Le système à résoudre des équations de flux est un système fortement non linéaire, et le schéma adopté est totalement implicite : c'est pourquoi Mofat utilise la méthode de Newton-Raphson pour le résoudre.

Le système à résoudre peut s'écrire de la façon suivante :

$$f(x) = 0$$

Eq. (D.25)

où

$x$  est l'inconnue du système définie par :  $x = (h_p, h_n, h_g)$

$r$  est la fonction définie par :  $f = (f_p, f_n, f_g)$

$$[A]\{h_p\} + [B]\left\{\frac{dS_p}{dt}\right\} - \{F\} = f_p$$

$$[A]\{h_n\} + [B]\left\{\frac{dS_n}{dt}\right\} - \{F\} = f_n$$

$$[A]\{h_g\} + [B]\left\{\frac{dS_g}{dt}\right\} - \{F\} = f_g$$

Eq. (D.26)

### Critères de convergence

$$|(h_\alpha)^{1+1} - (h_\alpha)^1| \leq |(h_\alpha)^{1+1}| \tau + \tau_\alpha$$

Eq. (D.27)

où

$\tau$  est l'erreur de convergence autorisée

$\tau_\alpha$  est l'erreur de convergence absolue autorisée pour la phase  $\alpha$

Le critère de convergence doit être vérifié pour chaque point du maillage.

### b) Equation de transport

Le logiciel utilise la méthode de Picard pour résoudre la «somme-équation» de transport, bien sur dans le cas où on est hors de l'équilibre (sinon il n'y a pas de système à résoudre).

Le critère de convergence est le suivant :

$$|(C^p_k)^{1+1} - (C^p_k)^1| \leq |(C^p_k)^{1+1}| \varepsilon + \varepsilon_\alpha$$

Eq. (D.28)

où

$\varepsilon$  est l'erreur de convergence autorisée

$\varepsilon_\alpha$  est l'erreur de convergence absolue autorisée pour la phase  $\alpha$ .

## D 2.5 Gestion du pas de temps

### a) Equation de flux

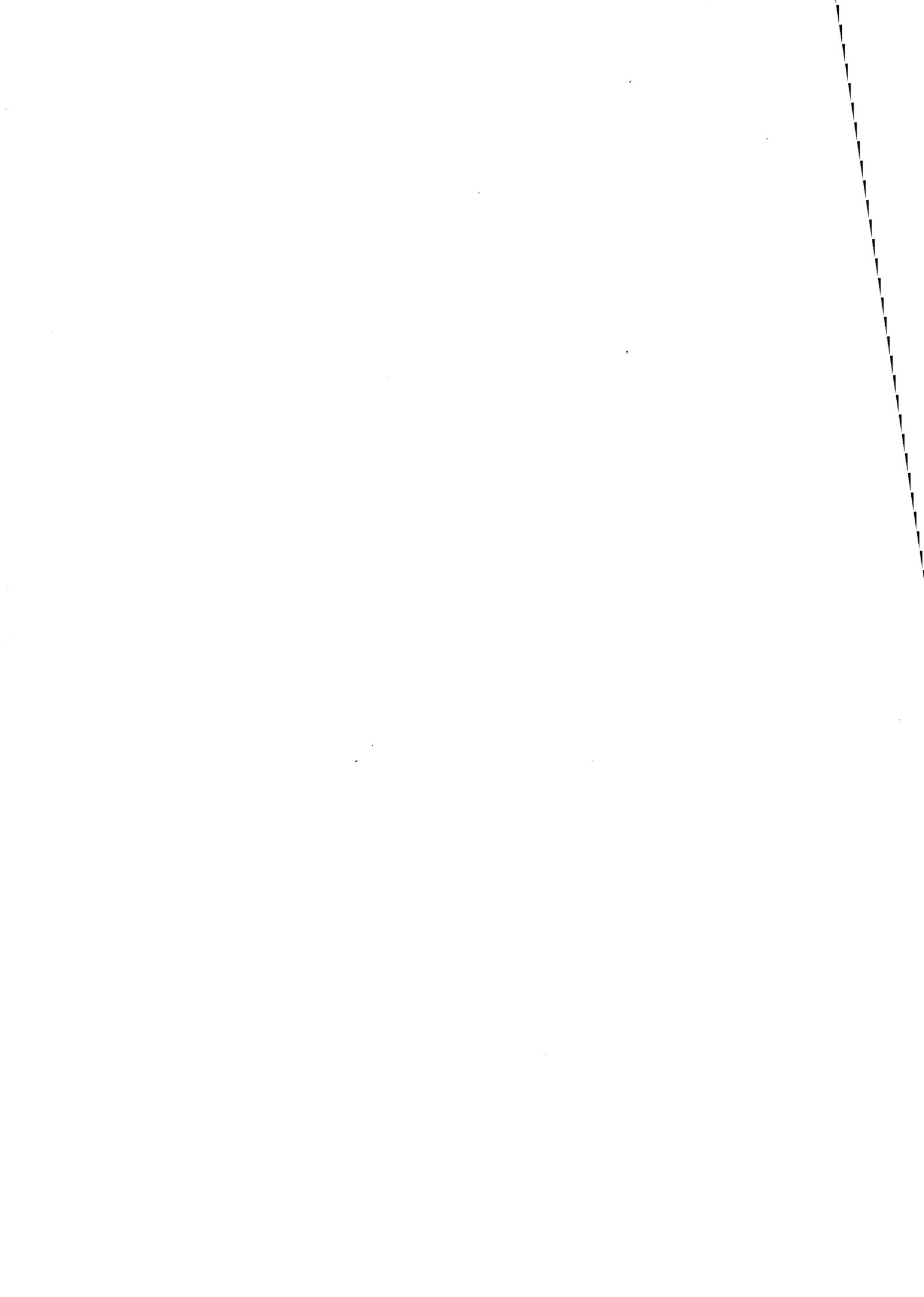
Le schéma adopté pour la résolution des équations de flux étant totalement implicite, il n'y a pas de condition sur le pas de temps par rapport au pas d'espace pour assurer la stabilité du schéma.

Le pas de temps dépend du nombre d'itérations nécessaires pour la convergence.

### b) Equation de transport

Le pas de temps pour la résolution numérique de la «somme-équation» de transport est identique au pas de temps utilisé pour résoudre les équations de flux.

Si l'on choisit le paramètre  $t$  dans l'intervalle  $[0,5 ; 1]$ , le schéma numérique adopté est inconditionnellement stable (on a pas de condition spécifique imposée au pas de temps par rapport au pas d'espace pour assurer la stabilité, et donc la convergence du schéma).



## **ANNEXE E : COMPARAISON DES MODÈLES LES PLUS COURANTS POUR LE TRANSPORT HYDRODISPERSIF ET L'ÉCOULEMENT POLYPHASIQUE**

### **E 1 Modélisation de l'écoulement et du transport en solution**

#### **MIKE SHE (LHF/DHI) module WMGW/AD**

But du modèle	Simulation du cycle hydrologique entier dans sa phase terrestre Module WMGW: simulation des écoulements de l'eau dans la zone non saturée et la zone saturée. Module WMAD: transfert de la matière dissoute advectif/dispersif
Méc. physiques	Écoulement en zone saturée et non-saturée
Mod. numériques	Différences finies
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- structure modulaire pour coupler des différents modules</li><li>- Pre/postprocesseur ayant certaines fonctionnalités des SIG et des bases de données :<ul style="list-style-type: none"><li>* digitalisation et interpolation/ajustement du maillage/ contours/transformation des données en données représentatives</li><li>* comparaison des résultats des modèles avec des couches des données géographiques</li><li>* interprétation géologique</li><li>* visualisation de variables en 1,2,3 dimensions, cartes, coupes, perspectives, champs de vecteurs, animation</li></ul></li><li>- Possibilité d'étudier une large gamme d'échelles</li><li>- source de pollution localisée ou diffuse</li><li>- la discrétisation est spécifiée par l'utilisateur</li><li>- description des variations verticales dans le sol par des couches à épaisseurs variables</li><li>- fonctions statistiques</li></ul>
Param. d'entrée	<ul style="list-style-type: none"><li>- perméabilité <math>k</math></li><li>- coefficient d'emmagasinement <math>S</math>/ porosité</li></ul>

---

Param. de sortie      - niveau piézométrique  
                             - flux  
                             - débit d'emmagasinement

Autres modules :

dans WM :            \* interception/évapotranspiration  
                             \* ruissellement et écoulement fluvial  
                             \* échange nappe/rivière  
                             \* fonte des neiges

Module AD : transfert de matière advectif-dispersif

                             \* DP : double porosité

Module CN : azote et croissance des plantes

Module GC : processus géochimiques

Module SE: érosion du sol

Module IR: irrigation

Couplage avec d'autres modèles :

                             \* bases de données et SIG  
                             \* interprétation des données de la télédétection  
                             \* modèles de climat

Environnement      UNIX

### Groundwater modelling system-GMS (BOSS)

But du modèle	Simulation des écoulements souterrains en zone saturée et non-saturée.
Méc. physiques	Représentation des puits, rivières, évapotranspiration, recharge aquifère hétérogène
Mod. numériques	Eléments finis
Perf. particulières	<p>Concept modulaire: modules pour</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- la caractérisation de la site : pour construire 3DTINS et la représentation des données de forage : stratigraphie, coupes</li> <li>- génération du maillage pour interpolation, iso-surfaces, coupes et modélisation aux différences finis</li> <li>- génération du maillage pour des éléments finis</li> <li>- géostatistique : différentes méthodes d'interpolation</li> <li>- postprocessing et graphique : <ul style="list-style-type: none"> <li>* iso-surfaces de la concentration du polluant</li> <li>* vue plan et 3D, effet d'ombre</li> <li>* animation : vecteurs, iso-surfaces, frange de couleur et contours à partir du module géostatistique</li> <li>* coupes du terrain en mouvement, visualisation 3D</li> <li>* scannerisation des iso-surfaces</li> </ul> </li> <li>- partage d'information commune entre différents types des données et modèles</li> <li>- version PC : entrée des données géogr. en 3D a partir de AUTO-CAD</li> </ul>
Param. d'entrée	<ul style="list-style-type: none"> <li>- lecture des données du régime transitoire</li> <li>- Perméabilité</li> <li>- Coefficient d'emménagement/ porosité</li> </ul>
Autres modules	<p>Soutient MODFLOW3D, FEMWATER3D</p> <p>MODFLOW Analysis Module avec interface pour MODFLOW</p> <p>FEMWATER Analysis Module avec interface pour FEMWATER</p>
Environnement	<p>Version PC : 80486 + Coproc., 16 MB RAM</p> <p>Version UNIX : existe pour SUN SparcStation</p>

---

**NEWSAM (Ledoux, 1975-92)**

But du modèle	simulation de la charge hydraulique et du temps de transfert
Méc. physiques	écoulement en aquifère multicouche libre, captif et semi-perméable transport en solution convectif
Discrétisation	mailles carrés emboîtées
Mod. numériques	différences finies
Param. d'entrée	géométrie de l'aquifère, porosité, perméabilité, transmissivité,
Param. de sortie	charge
Autres modules	pré-processeur pour établir le maillage zone non-saturée : modèle des réservoirs écoulement en réseau hydrographique échange nappe-rivière
Environnement	UNIX

## E 2 Modules spécialisés pour l'écoulement polyphasique et la dépollution des sols

### Abriola et Pinder (1985)

But du modèle	Écoulement triphasique et transport de deux espèces organiques
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"><li>- flux : eau, HC</li><li>- capillarité</li><li>- transport du contaminant dans les phases eau, HC, gaz</li><li>- diffusion moléculaire</li><li>- dispersion cinématique</li><li>- cinétique d'échange de masse de la phase organique</li></ul>
Mod. numériques	<ul style="list-style-type: none"><li>- différences finies</li><li>- simulation en 1D</li><li>- schéma implicite dans le temps</li><li>- résolution du système d'équations par Newton-Raphson</li></ul>
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- deux espèces dans la phase organique : une soluble et volatile (LNAPL), une inerte (DNAPL)</li><li>- compressibilité du sol et de la phase aqueuse</li></ul>
Param. de sortie	<ul style="list-style-type: none"><li>- saturation des phases liquides eau et huile</li><li>- concentration de l'espèce organique dans toutes les phases</li></ul>

---

**Mofat (Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory)**

But du modèle	Écoulement triphasique et transport des liquides organiques multi-composantes
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"><li>- flux : eau, HC (LNAPL, DNAPL), phase gazeuse cinétique ou instantané (<math>p = \text{const}</math>)</li><li>- flux de gaz: problème de flux entièrement en 3 phases</li><li>- zone non saturée et saturée</li><li>- transport convectif et dispersif dans les phases eau, HC, gaz</li><li>- transfert de masse entre la phase solide et les phases liquides en regardant le régime équilibre et non-équilibre</li><li>- dépendance de la masse volumique en fonction des composants</li><li>- relations de capillarité basées sur van Genuchten</li><li>- hystérésis dans la perméabilité des HC par piégeage des liquides</li></ul>
Mod. numériques	<ul style="list-style-type: none"><li>- éléments finis quadrangulaires</li><li>- résolution des équations à chaque noeud seulement pour les phases où il y a un changement de la pression ou de la saturation</li><li>- simulation en sections verticales en 2D</li></ul>
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- coordonnées cartésiennes et radiales</li><li>- limitation du calcul aux mailles où il y a des changements notables</li><li>- jusqu'à cinq composants partitionables</li><li>- flux de l'eau, HC avec régime permanent de l'eau et HC/eau</li></ul>
Param. de sortie	<ul style="list-style-type: none"><li>- séries temporelles et cumulatives</li><li>- tracé des contours de saturation et concentration des composants</li></ul>
Autres modules	<ul style="list-style-type: none"><li>- estimation des propriétés du sol par un module dédié</li><li>- Interfaçage avec les modules graphiques standard</li></ul>
Environnement	PC 8 Mo RAM

## **Airflow (Scientific Software Group)**

But du modèle	<ul style="list-style-type: none"><li>- simulation de l'extraction de la vapeur dans le sol</li><li>- évaluation du rendement pour des situations différentes</li><li>- conception des systèmes d'extraction</li></ul>
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"><li>- 3 phases: eau, NAPL, air</li><li>- répartition hétérogène des propriétés du milieu, des NAPL</li><li>- NAPL: résiduel, lentilles, concentrés (pool); volatilité différente</li><li>- régime permanent et transitoire</li><li>- transfert de matière entre les trois phases:</li><li>- équilibre, contrôle par la cinétique, diff. isothermes de sorption</li></ul>
Mod. numériques	
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- entrée des données par interface graphique</li><li>- postprocesseur pour sortie graphique</li></ul>
Param. d'entrée	
Param. de sortie	<ul style="list-style-type: none"><li>- contours d'isobares, de concentration, matière résiduelle</li><li>- vecteurs de vitesse</li><li>- lignes de courant</li><li>- matière totale récupérer,</li><li>- graphes de percée pour les composantes, etc ...</li></ul>
Autres modules	
Environnement	PC, 4 MB Ram

---

## Armos (Scientific Software Group)

But du modèle	<ul style="list-style-type: none"><li>- simulation du flux spatial des LNAPL</li><li>- optimisation des systèmes pour la récupération des produits</li></ul>
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"><li>- capillarité du sol</li><li>- HC résiduels dans le sol (van Genuchten)</li></ul>
Mod. numériques	résolution itérative sans bandes
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- distribution verticale non-uniforme des HC</li><li>- estimation des propriétés du sol et des fluides</li><li>- plusieurs forages</li><li>- recharge/infiltration distribué</li><li>- base de données graphique pour gestion des données, mise au point du modèle: finesse et édition du maillage, calibration, sortie: vs. temps, contours</li><li>- estimation des conditions limites/ initiales a partir des données d'observation</li><li>- options pour le flux de l'eau, des HC avec reg. permanent HC et eau</li></ul>
Param. d'entrée	<ul style="list-style-type: none"><li>- niveaux initiaux de l'eau et des HC</li><li>- propriétés physiques des HC (masse spécifique, viscosité, tension superficielle)</li><li>- pression de capillarité (courbe granulométrique, SOILPROP, essais de terrain)</li></ul>
Param. de sortie	<ul style="list-style-type: none"><li>- contours: prédiction de l'épaisseur des hydrocarbures dans le sol, niveau des fluides</li><li>- flux des HC/ de l'eau</li><li>- séries temporelles : matière récupérer totale, etc.</li></ul>
Autres modules	<ul style="list-style-type: none"><li>- entrée a partir de SOILPROP (capillarité)</li><li>- sortie pour SPILLTRANS (transport dissous)</li></ul>
Environnement	PC 8 MB RAM

## Venting (Scientific Software Group)

But du modèle	<ul style="list-style-type: none"> <li>- estimation de la récupération des hydrocarbures de la zone non saturée par extraction sous vide</li> <li>- évaluation des effets de la composition du nuage de polluant, de la température et la taux de pompage sur la récupération</li> <li>- guidelines pour la planification de la récupération in situ</li> </ul>
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"> <li>- flux gazeux constant à température constante</li> <li>- changement de phase liquide/gaz et partitionnement à partir de la thermodynamique d'équilibre et de la thermodynamique du non-équilibre (facteur du rendement pour la venting)</li> </ul>
Mod. numériques	différences finies
Perf. particulières	<p>systèmes de puits unique et puits multiples  jusqu' à 200 composantes des HC  fichier de librairie des compositions des HC</p>
Param. d'entrée	<ul style="list-style-type: none"> <li>- taux de flux de la phase gazeuse ou : perméabilité pour la phase gazeuse et vacuum</li> <li>- facteur de rendement pour le venting</li> <li>- fractions de masse initiales</li> <li>- pour chaque composante : pression de vapeur, température de volatilization, masse moléculaire</li> </ul>
Param. de sortie	séries temporelles de la récupération des HC totale et de la composition des résidus
Autres modules	
Environnement	PC 640 Ko RAM

---

## Spilltrans (Scientific Software Group)

But du modèle	<ul style="list-style-type: none"><li>- Transport dissout dans les nappes libres</li><li>- HC libres ou résiduels</li></ul>
Méc. physiques	<ul style="list-style-type: none"><li>- estimations des propriétés du sol et propriétés chimiques</li><li>- source par dissolution des HC libres</li><li>- transport convectif et dispersif</li><li>- adsorption</li><li>- dégradation du 1<sup>er</sup> ordre</li><li>- volatilisation</li><li>- épuisement de la source par leaching, transport vers la nappe et volatilisation</li></ul>
Mod. numériques	supporte des maillages rectangulaires, carrés, triangulaires
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"><li>- simulation jusqu'à cinq composants</li><li>- base des données : * relationale<ul style="list-style-type: none"><li>* gestion des paramètres de transport, nappe, concentrations dissouts, données de forage</li><li>* importation du format DXF</li><li>* croisement entre localisation des mesures, données, contours et plots du gradient</li></ul></li><li>- modules graphiques</li><li>- spécification du champ de vitesses en fonction du temps</li><li>- recharge et pompage distribué (spatial)</li></ul>
Param. d'entrée	vélocité des flux distribution des HC en phase libre
Param. de sortie	
Autres modules	import des vitesses et distribution des HC par SPILLCAD, ARMOS
Environnement	PC 8 Mb RAM

## Spillcad (Scientific Software Group)

But du modèle	<ul style="list-style-type: none"> <li>- estimations pour les sites pollués par des HC</li> <li>- planification des mesures de dépollution à partir des différentes alternatives</li> <li>- évaluation des effets de l'emplacement des forages et du débit de pompage</li> </ul>
Perf. particulières	<ul style="list-style-type: none"> <li>- base de données graphiques : <ul style="list-style-type: none"> <li>* entrée des données, séries temporelles</li> <li>* tracé des résultats des modèles, contours</li> <li>* contour des données de forages d'observation et des données de carottage</li> <li>* évaluation des tendances et relations entre mesures pour des graphes XY</li> </ul> </li> <li>- modules intégrés: <ul style="list-style-type: none"> <li>* WELLVOL : - estimation du volume du produit libre à partir du niveau du fluide observé</li> <li>* SOILVOL : - estimation du volume de sol contaminé d'une concentration <math>c &gt; [x]</math> <ul style="list-style-type: none"> <li>- masse totale d'une composante</li> <li>- volume des HC résiduels</li> </ul> </li> <li>* QFREE : - calcul du niveau piézométrique à partir du taux de pompage ou de recharge <ul style="list-style-type: none"> <li>- détermination de l'emplacement du forage de fixation des HC</li> <li>- estimation de la quantité récupérable pour différents systèmes</li> </ul> </li> <li>* PLUME : - simul. du transfert de polluants dissouts <ul style="list-style-type: none"> <li>- solution analytique en 3D pour des sources multiples</li> <li>- estimat. rapide du risque d'exposition pour les sites</li> </ul> </li> <li>* PATHLINE : - lignes de courant pour l'eau et les HC <ul style="list-style-type: none"> <li>- calcul de la vitesse et du temps de transfert</li> <li>- estimation du temps pour arriver à la asymptote pour récupérer le produit</li> </ul> </li> </ul> </li> </ul>
Param. de sortie	<ul style="list-style-type: none"> <li>- estimation quantitative du volume de polluant et du sol pollué</li> <li>- propagation du produit pur et dissout</li> </ul>
Environnement	PC 8 Mb RAM

Les tableaux suivants donnent un bref résumé, d'autres modèles d'écoulement polyphasique d'après [Tardy, 1995].

<i>auteurs</i>	<i>schémas</i>	<i>phénomènes étudiés</i>
<b>MOREL-SETOUX &amp; BILLICA</b>	<i>différences finies</i>	<i>écoulement biphasique (gaz incompressible)</i>
<b>TOUMA &amp; VAUCLIN</b>	<i>différences finies (schéma implicite)</i>	<i>écoulement biphasique [ eau-air ] (deux phases compressibles)</i>
<b>MORIDIS &amp; REDDELL</b>	<i>différences finies (schéma centré implicite)</i>	<i>écoulement biphasique [ eau-air ] (deux phases compressibles)</i>
<b>KALUARACHCHI &amp; PARKER</b>	<i>éléments finis (schéma décentré amont implicite: «upstream weighted finite element formulation» )</i>	<i>écoulement biphasique [huile-eau] (sans transfert de masse)</i>

Tab. E.1 : Modèles d'écoulements biphasiques

<i>auteurs</i>	<i>schémas</i>	<i>phénomènes étudiés</i>
<b>FAUST</b>	<i>différences finies (schéma décentré amont)</i>	<i>écoulement triphasique (air à pression constante)</i>
<b>FORSYTH</b>	<i>volumes finis (schéma décentré amont implicite)</i>	<i>écoulement triphasique ( air à pression constante)</i>
<b>PINDER &amp; ABRIOLO</b>	<i>volumes finis (schéma décentré amont implicite)</i>	<i>écoulement triphasique compositionnel (transfert de masse instantané)</i>
<b>FORSYTH &amp; SHAO</b>	<i>volumes finis (schéma implicite)</i>	<i>écoulement triphasique compositionnel (transfert de masse instantané)</i>
<b>H.W. DORGARTEN</b>	<i>éléments finis (schéma implicite)</i>	<i>écoulement triphasique compositionnel (transfert avec une cinétique)</i>

Tab. E.2 : Modèles d'écoulements triphasiques

## **ANNEXE F : RÉALISATION DU COUPLAGE ENTRE SIG ET MODÈLE HYDRODISPERSIF**

### **F 1 Données d'entrée pour le logiciel de simulation**

1. Digitalisation des éléments nécessaires comme données d'entrée pour le logiciel de simulation, p.ex. piézométrie, substratum et topographie. Il y a deux possibilités selon le matériel dont on dispose :

a) à l'aide d'une table à digitaliser :

- digitalisation d'une carte à l'aide d'un tableau à digitaliser avec un logiciel approprié et géoréférenciation. Fichier résultat p.ex. chtss1.dxf.
- transformation du fichier (p.ex. \*.dxf) dans un format lisible par le SIG, p.ex. par DXFARC (p. ex. chtss1/).

b) dans le SIG

- scannérisation d'une carte contenant l'élément souhaité et sauvegarde dans un format graphique (p.ex. \*.tif).
- affichage comme arrière-plan dans le SIG.
- création d'une couverture dans le SIG où on digitalise l'élément souhaité

### **2. Géoréférenciation**

- on prend au moins trois points de la couverture où on connaît les coordonnées du monde réel par rapport aux coordonnées de l'image

### **3. Création de la topologie**

- à partir des isolignes du fichier digitalisé (p.ex. chtss1/)

### **4. Création du modèle numérique de terrain**

- création d'un modèle numérique de terrain en tant que triangulated irregular network à partir des isolignes tinbuilder (p.ex. tinsub/).
- création d'un modèle numérique de terrain en tant que lattice en spécifiant la taille des mailles à partir du TIN par tinlattice, p.ex. latsub/

### **5. Création d'un fichier lisible par le logiciel de simulation**

- transformation du format, p.ex. création d'un fichier ASCII à partir du lattice p.ex. par gridascii (p.ex. latsubascii)

---

## F 2 Données de sortie du logiciel de simulation

### 1. Transformation des fichiers résultats de la simulation

- transformation du fichier 'resultats de la simulation' de la forme du logiciel de simulation dans une forme lisible pour le SIG. Si les deux sont en format ASCII, il convient pour la distinction d'attribuer une extension au fichier du logiciel de simulation et une pour le fichier transformé en forme du SIG) (p.ex. pollu3.t2 -> pollu3.arc)
- transformation du fichier 'resultats de simulation' en forme lisible pour le SIG en un fichier en format raster (en mailles carrés) à l'aide de la fonction. (p.ex. asciigrid pollu3.arc. On obtient le workspace pollu3/).
- passage du fichier des concentrations 'resultats de simulation' en format raster au format 'vecteur d'isolignes' en choisissant l'intervalle des isovaleurs. (p.ex. latticecontour pollu3 pollulat1/. On obtient le workspace pollulat1/).

### 2. Préparation des couvertures cartographiques :

- scannage d'une image qui contient les informations cartographiques, auxquelles on veut se référer, dans un format graphique (\*.tif, p.ex.), le géoréférencier (p.ex. par register et rectify), et l'afficher comme arrière-plan pour la digitalisation.
- création d'une couverture dans le SIG pour chaque élément auquel on s'intéresse : p.ex.  
pour le modèle numérique de terrain : courbes de niveau, points cotés  
pour les installations techniques : routes, voies ferroviaires, égouts, captages  
pour les ressources en eau : plans d'eau, nappes
- digitalisation de ces éléments dans les couvertures correspondantes, p.ex. altimetrie/, points\_cotes/ trafic/ captage/ rhone/
- La construction du modèle numérique de terrain en spécifiant la taille des mailles avec l'outil correspondant (p.ex. topogrid). Etant donné que la précision numérique du traitement de l'altimétrie est limitée, il peut s'avérer nécessaire d'ajouter des points-cotés à la couverture altimétrique construite dans le pas antérieur (p.ex. mnt1/).

### 3. Croisement des fichiers cartographiques avec les fichiers 'résultat de simulation'

- Le croisement du fichier 'resultats de simulation' en format d'isolignes avec la couverture à laquelle on s'intéresse, comme pour exemple : le modèle numérique de terrain, les voies routières, ferroviaires, les puits d'alimentation en eau potable, peut s'effectuer avec une commande de superposition des couvertures.
- Affichage de la nouvelle couverture avec la fonction (Maptools par exemple). Souvent, il faut définir un contour pour délimiter les bordures d'affichage, (par exemple contour -> cadre).

### 4. Traitement quantitatif par application des fonctions d'analyse spatiale.

**ANNEXE G : DONNEES ANALYSEES POUR LA VALIDATION DES MODELES**

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Informations générales							
Schéma récapitulatif des opérations menées	g1		3.12.90-14.05.93		g	propre	
Schéma récapitulatif des opérations menées	g2		3.12.90-14.05.93		g	chb	
Schéma récapitulatif des opérations de fin de dépollution	g3		21.02. - 14.05.93			chb	
Organigr. clôture des opérations	g4					chb	
Informations cartographiques							
Puits d'alimentation en eau potable	ca1	pln/ pls			g	chb	
Localisation des puits des particuliers	ca2	lu			g	chb	
Localisation des puits et piézomètres	ca3	lu	25.11.92		g	chb -> ps	
Implantation des sondages et piézomètres	ca4	lu	16.12.90		g	chb, dce a29	

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Implantation des sondages, piézomètres et sondages électriques	ca5	lu			g	dce a6	
Emplacement des forages	ca6	lu			g	chb	
Dispositif expérimental du pilote de venting	ca7	lu			g	chb	
Forages de dépollution, phase définitive	ca8	lu	27.10.92		g	tu	
Puits de venting - Phase test	ca9	lu			g	chb -> gc	avec rayons d'influence
Puits de venting - Phase définitive	ca10	lu			g	chb -> gc	
Localisation des rejets des eaux pompés en nappe	ca11	lu			g	chb	
Réseau d'assainissement	ca12	lu			g	chb	
Points de contrôle de la qualité de l'air	ca13	lu			g	chb	
Points de contrôle de la stabilité du terrain	ca14	lu			g	chb	
Zone de réception du chantier	ca15	lu			g	chb	
Périmètre d'insalubrité	ca16	lu	19.06.91		g	chb	

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Implantation des ouvrages de reconnaissance	ca17	lu			g	brgm	
Structure de l'aquifère							
Substratum granitique	a1	lu		30	g	dce a5,p2/ a6,p11	à partir des mesures géophysiques
Substratum granitique niveau > 132.5 m	a1a	lu			g	chb	
Extension des limons initialement saturés	a2	lu			g	brgm	
Lentille argileuse	a2a	lu			g	chb	
Carottes géologiques I	a3	lu/ s1-s8	12.12.90	8	g	dce a6 a7,p4	sondages à la pelle mécanique. produit flottant présent [o/n] ?
Carottes géologiques II	a4	lu : p1-p10 p12/p20/ p23-p27	16.- 21.12.90 ; 22.02.- 25.04.91	17	g	chb -> dce	pour essai de pompage : fixation et récupération. produit flottant présent [o/n] ?
Carottes géologiques III	a5	lu : no. 1-12	03.- 04.91	12	g	cpgf	forage des piézomètres / qualité
Localisation des coupes géologiques	a6	lu		3 coupes	g	chb	
Coupe géologique ("coupe 1")	a7	lu			g	chb	
Coupe géologique ("coupe 2")	a8	lu			g	chb / brgm	

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Coupe géologique ("coupe 3")	a9	lu			g	chb / brgm	
Coupe géologique	a10	lu p26/ p25/p24			g	brgm	
Coupe géologique (préssumé)	a11	lu : p6-p10- p20-p3			g	chb -> dce	
Sondages électriques	a12	lu		3	d	dce a6 a4,p5	3 diagrammes (30)
Sondages électriques	a13	pls		12	n	rt5	resistivités
Propriétés hydrauliques du terrain							
Courbe granulométrique	h1	lu : p32/ 33		2	d	dce a2	
Perméabilité saturée	h2	lu : p32/ 33		2	n	dce a2	c1 : k vertical + k horizontal c2 : k vertical
Perméabilité à partir des essais d'infiltration	h3	lu : sect.1: pr. S2/p10 sect.2: pr. p6		2	n	dce a6, p9 a5	
Transmissivité	h4	lu : s2/ p10 p12/ p23		2	n	dce a5 a7, gr3	
Coefficient d'emmagasinement	h5	lu : p12/ p23		2	n	dce a5	
Teneur en eau	h6	lu : p32/ p33		2	n	dce a2	
Poids volumique humide	h7	lu : p32/ p33		2	n	dce a2	
Poids volumique sec	h8	lu : p32/ p33		2	n	dce a2	
Profil d'humidité	h9			8	g	dce a2	1 <sup>ère</sup> valeur : teneur naturelle
Météorologie							

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Précipitation	m1	ch	1981-1990		n	gc -> mf	moyenne par 10 j sur 10 ans
	m2	ch	03.08.91 - 04.04.92		n	brgm -> ps	
	m2a	ch	03.08.91 - 04.04.92		g	brgm -> ps	
Température	m3	pb	1981-1990		n	gc -> mf	moyennes par 10 j sur 10 ans
Piézo-métrie							
	p1	lu : pe1, p4, p5, p7, p9, p10, p12, p15, p23, s2, s6, w4-7, w9-10, w12	14.12.90 - 15.04.91	1/ jour	n + g	brgm -> ps	
	p2	lu : s2-s8, pe1-pe4, p1-p10	14.12.90 - 06.01.91	1/ jour	n	dce a7	essai de pompage
	p2 a	lu	16.12.90 - 14.01.91	4	g	dce a7	essai de pompage à p 10. 1ere valeur : sans pompage
	p2 b	lu	15.12.90 - 14.01.91	1/ jour	g	brgm	essai de pompage
	p3	lu	14.03.91 - 06.05.91	2	g	dce a6	pompage de fixation à : p10/12/23
	p4	lu	18.06. - 23.09.91 + 16.12.91 - 16.04.93	24	n	brgm/ gc -> ps	mesures hebdomadaires
	p4 a	lu	29.07.91 - 18.11.91	15	g	dce a2	mesures hebdomadaires
	p4b	lu	16.12.91 - 24.08.92	6/ 7 puits	g	brgm -> ps	

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
	p4c	lu	03.03./ 16.03./ 16.04.93		g	brgm/ chb -> ps	
	p5	lu : p12, p23, p24, p25, p32, ve13, ve14	22. - 26.04.93	7 puits	n	brgm -> ps	essai final - essai de pompage
	p6	lu	27. - 30.04.93 + 03. - 06.05.93	16 puits	n	brgm -> ps	essai final - battement de la nappe
	p7	lu	26.01. - 16.03.93	4	n	brgm -> ps	captage nord
	p8	pls	03.- 04.91	30	n/g	cpgf	plaine sud + profil à travers un cours d'eau
<b>Pompage</b>							
	po1	lu	12.90 - 14.05.93		g	chb	
	po2	lu	15.12.90 - 14.01.91	30 S2, p10	g	dce a7	
	po3	lu	18.06. - 23.09.91 + 16.12.91 - 16.04.93	24 x 6 puits	n	brgm/ gc -> ps	
	po4	lu	05.04. - 14.04.93	1 p.jour x10puits	n	chb	pompages de rabattement
<b>HC infiltrés</b>							
	il	lu	4.12.90	9 wa- gons	n	dce a7	estimations : m <sup>3</sup> infiltrés par wagon, zone de deversement
<b>HC dissouts dans la nappe</b>							
	d1 a	lu : rej. A: p23/25	01.91 - 01.93		g	chb	

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
	d1	lu : rej. A: p23/25 rej. B: p12/27/ 30	01.01.91 - 01.02.93		n	chb	
	d1a	lu : rej. A: p23/25 rej. B: p12/27/ 30	01.01.91 - 01.02.93		g	chb	
	d1b	lu : rej. A: p23/25 rej. B: p12/27/ 30	09.12.91 - 10.08.92		g	brgm -> ps	
	d2	lu : p1-p9	04.- 05.02.91	8	n chr	dce a6	hc totaux
	d3	lu : pe1; p2/ 4/5/8	12.02.91	5	n chr	dce a6	composants hc/ dosés par la méthode TEKMAR
	d4	lu : pe2/3/4; p2/4/8/ 10/11/ 12/23	04.- 05.04.91	9	n	dce a6	composants hc/ dosés par la méthode TEKMAR
	d5a	lu : p1 - p10	18.02.91		n	brgm	HC P.E.H. (?)
	d5b	lu : p1 - p10	18.02.91		n	brgm	HC C.O.T.
	d6	lu : p3/23/ 25/27, s2	06./08./ 09.92		n	chb -> brgm, ch21 -> ineris	composants hc chromato- grammes
	d7	lu	08.02.93	10	n	chb/ ineris	composants hc
	d7a	lu	08.02.93	10	g	chb/ ineris	carte des teneurs (8)
	d8	lu	21.- 25.02.93	60	n	chb/ ps	
	d8a	lu	21.- 25.02.93	60	g	chb/ ps	carte des teneurs (9)
	d9	lu	21.02. - 12.05.93	8t x 60p	n	chb	tableau récapitulatif/ contrôle final

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
	d9 a	lu	08.03.93	10	n	chb	
	d9 b	lu	04.93		g	chb	
	d10	lu		109 p	n	chb	après arrêt
	d11	pls	08.02.91	11	n	rt5/ snef	valeurs ~ 0 (hc détectés dans 3 puits)
	d12	pls - puits P. Gorge	21.- 30.05.91	10	n	rt10	valeurs ~ 0
	d13	pls - puits P. Gorge	01./ 06.92	1	n	brgm	MTBE, Chlorés
	d14	pln - puits Chan-son	06.91 - 16.11.92	15	n	brgm	
	d15	pln - puits Chan- son (pré- sumé)	29.08.91 - 22.05.92	10	n	brgm	Totaux, Chlorés, HAP
	d16	pln - puits Chanson	08.91 - / 11.92	14	n	brgm	Totaux, Chlorés, HAP
	d17	lu	04./16./ 21.11.92	7	n	brgm	
<b>HC dissout dans l'eau de surface</b>							
	ds1	contre - canal				dce a6	
	ds2	rhône	12.- 27.12.			dce a7	
<b>HC sur-nagésants</b>							
	s1	lu : pe1, p4, p5, p7, p9, p10, p12, p15, p23, s2, s6, w4-7, w9-10, w12	14.12.90 - 15.04.91	1 / jour	n + g	brgm -> ps	
	s2	lu : s2-s8, pe1-pe4, p1-p10	14.12.90 - 06.01.91	1 / jour	n	a7	données incompatibles avec s1

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
	s3	lu	18.06. - 23.09.91 + 16.12.91 - 16.04.93	1 / semaine	n	brgm -> ps	
	s4	lu : 24, 25, 26, 27	10.01. - 10.04.92		n	brgm	
	s5	lu : 58a, 60a, 60b, 62a, 62b, p26	02.11. - 28.12.92	~ 1 / jour	n	tv	
	s5	lu : 60a, 61a, p26	05.01.93	1	n	tv	
<b>HC sur- nagésants recupérés</b>							
	sr1	lu	12.90 - 12.92		g	chb	
<b>Teneur en gaz dans la ZNS</b>							
	n1	lu	13.- 15.03.91	?	g	dce a4/ a5/a6	DRAEGER-I 1+2 m de profondeur
	n2	lu	02.- 03.05.91 + 15.- 17.05.91	81	n + g	dce a4/ rt8/rt9	DRAEGER-II + III "mai91" 1/2/ 3 m de profondeur
	n3	lu	03.- 04.06.91		n + g	chb	DRAEGER-IV 1/2 m
	n4	lu	16.- 17.07.91		n + g	chb	DRAEGER-V 2 m
	n5	lu	28.- 29.08.91	20	n + g	brgm, rt12	DRAEGER-VI pendant l'essai de biolixiviation (a2,p4) 2 m de profondeur
	n6	lu	12.09. - 13.09.91	18	n	brgm	DRAEGER- Remblai
	n7	lu	02.- 04.12.91	?	n + g	dce	DRAEGER-VII - 10 j après l' essai de venting - zone argileuse - mesure à 2 m

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
	n8	lu	03./ 05./ 06./ 07./ 08. 91		n + g	brgm/ rt12	évolution dans l'espace à 2 m
	n9	lu	18.07. - 03.10.91	8j x 6	n	brgm	
	n10	lu	02.- 04.03.93	5 prof. x 8 points	n	chb -> ps	
	n11	lu	08. - 09.03.93	5 points	n	chb -> is	analyse détaillée de l'air du sol
<b>Exploitmétrie</b>							
	e1	lu	10.06.91 - 06.07.92	27 x 1 / sem.	n	chb	unité ?
<b>Analyses des sols</b>							
	so1	lu	06./ 08.92	8 + 4	n	chb -> brgm, ch21 -> is	
	so2	lu	01.- 05.03.93	12	n	chb -> is	
<b>HC récupérés par venting</b>							
	nr1	lu	15.05. - 30.09.92		g	chb -> gc	hc récupérés cumulés
	nr2	lu	15.05.92 - 19.02.93		g	chb	
	nr2 a	lu	15.05.92 - 19.02.93		g	chb	
<b>Propriétés physico-chimiques des HC</b>							
Analyse de base du produit pur	pc1	lu : pe1	22.01.91		n	dce a6	
Analyse des gaz	pc1	lu : p12/23	13.06.91		n	rt10	qq cm au- dessus des hc repompés

Paramètre mesuré	Numérotation	Localisation	Date	Nombre de mesures	Disponibilité	Source	Remarques
Teneur à saturation dans l'eau	pc3	lu : pe1	12.02.91		n	dce a6	étude du contact eau/hc. mêmes valeurs que dans hc dissouts
Evolution des proportions relatives des composés	pc4	lu : p2/4/8	12.02.- 05.04.91		n	dce a6	
Explosivité de l'essence	pc5				n	chb	
Toxicité du benzène	pc6					chb	

---

Abréviations :

col. 3 : localisation

lu	: localisation de l'accident
pb	: autre localité
pln	: plaine nord
pls	: plaine sud
pe	: puits existants
p	: puits nouveaux
pz	: piezomètres
ve	: puits de venting
c	: cannes de mesure de pression

col. 6 : disponibilité

chr	: chromatogramme
d	: diagramme
n	: données numériques
g	: données graphiques

col. 7 : source

a	: annexe du CCTP (cahier des clauses techniques particuliers)/ du DCE (Dossier de consultation des entreprises), 1991.
brgm	: BRGM
ch8	: compte-rendu de chantier no. 8
ch21	: compte-rendu de chantier no. 21
chb	: Chambon, Ludovic : Travail de Fin des Etudes à l'ENTPE
dce	: dossier de consultation des entreprises
gc	: géoclean
is	: INERIS
mf	: météo france
ps	: pollution service
rt	: rapport technique concernant l'accident de Chavanay
cpgf	: CPGF Horizon : Etude No. 3811b : Etude des risques de pollution du puits de "Petit Gorge" suite à l'accident ferroviaire de [lieu de l'accident]
tsm	: Technique, Sciences, Méthodes, Nr. 9, sept. 1993, pp. 429-439
tv	: document TERRAVAC

## LEXIQUE

### 1) Mathématiques - Analyse numérique

#### **Conditions aux limites :**

Ce sont des valeurs imposées pour la variable cherchée, imposées régulièrement aux limites de la zone d'étude et si besoin est, à l'intérieur (par exemple, pompage, source du polluant).

- Type I : *Condition de Dirichlet* : Cette CL correspond au potentiel qui est imposé. Dans le cas d'une simulation hydrodynamique, la charge  $h$  est imposée. Dans le cas d'une simulation de transport, la concentration  $c$  du polluant est imposée.
- Type II : *Condition de von Neumann* : Cette CL correspond aux gradients des valeurs, c.a.d. les flux sont imposés. Dans le cas d'une simulation hydrodynamique, le gradient de la charge  $dh/dn$ , est imposé. Dans le cas d'une simulation de transport, on fait la supposition que le polluant ne change pas de concentration en sortant du domaine, c'est-à-dire, absence du flux dispersif en traversant la limite.
- Type III : *Condition de Fourier* : Condition mixte, c'est-à-dire, une combinaison de différentes composantes est prescrite. Dans le cas d'une simulation hydrodynamique, une valeur  $h + \alpha \cdot dh/dn$  est imposée, cette condition apparaît par exemple à la surface de contact entre une nappe et une rivière. Dans le cas d'une simulation de transport, un flux du polluant ( $\phi \cdot c$ ) est imposé.
- En hydrogéologie, on fait en plus la distinction entre la condition de surface libre et la surface de suintement.

#### **Conditions initiales :**

Etat du système à  $t = 0$ . On donne une valeur pour la variable cherchée à chaque maille du domaine discrétisé.

#### **Consistance :**

Elle dépend de la régularité de la fonction  $v$ . (i.e. si  $v$  est continue, de classe  $C1, C2...$ ). Un schéma est consistant pour la norme  $\| \cdot \|$  sur  $[0..T]$  lorsque la solution  $v$  satisfait la condition

$$v^{n+1} = Qv^n + k\tau^n$$

$$\text{où } \|\tau^n\| \leq \tau(h, k)$$

avec  $\tau(h, k) \rightarrow 0$  quand  $h \rightarrow 0$  et  $k \rightarrow 0$

Un schéma peut être consistant pour une norme mais pas pour une autre.

#### **Convergence :**

Le schéma est dit convergent lorsque :

$$\|u^n - v^n\| \rightarrow 0 \text{ quand } h \rightarrow 0 \text{ et } k \rightarrow 0$$

Le théorème de Lax assure que si le schéma est à la fois constant et stable, alors il converge.

---

**Diffusion numérique :**

Ce phénomène consiste à rendre la solution approchée régulière là où la solution exacte présente des discontinuités.

**Divergence :**

L'opérateur mathématique div est défini comme suit :

$$\text{div} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}$$

**Formulation faible d'un problème :**

Formulation sous la forme d'une intégrale avec comme noyau d'intégrale une distribution. Ce type de formulation admet un plus grand nombre de solutions que la formulation forte. On utilise cette formulation pour les éléments finis.

**Formulation forte d'un problème :**

Formulation par une équation aux dérivées partielles. On utilise cette formulation pour les différences finies et les volumes finis.

**Gradient :**

L'opérateur mathématique grad qui est défini comme suit :

$$\vec{\text{grad}} = \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \right)$$

**Ordre d'un schéma :**

L'ordre d'un schéma est directement lié à la précision du schéma: plus l'ordre d'un schéma est élevé, plus le schéma est précis.

Le schéma est dit d'ordre (p,q) lorsque  $\|\tau^n\| \leq C(h^p + k^q)$

**Stabilité :**

Un schéma est stable lorsqu'il n'amplifie pas des petites perturbations initiales.

Il existe différents types de stabilité :

- Un schéma est stable lorsqu'il existe deux constantes  $\beta$  et  $\mu$  telle que

$$\forall nk \leq T \quad \|u^n\| \leq M e^{\beta t} \|u^0\|$$

- Un schéma est dit inconditionnellement stable lorsqu'il est stable pour tout h et pour tout k.
- Un schéma est dit conditionnellement stable lorsqu'il est stable sous la condition

$$\frac{k}{h^\alpha} \leq c$$

où c est une constante

## 2) Mécanique des fluides

### ***Coodronnées Euleriennes :***

La forme Eulerienne, est la dérivée partielle de la grandeur mesurée, par exemple de la concentration

$$\frac{\partial c}{\partial t}$$

elle indique le taux de changement en un point fixé dans l'espace. On resout l'équation avec un maillage fixe comme les différences finis ou les éléments finis.

### ***Coodronnées Lagrangiennes :***

La forme Lagrangienne ou la dérivée substantielle

$$\frac{\delta c}{\delta t} = \frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}$$

indique le taux de changement de la concentration  $c$  le long d'une ligne de courant du fluide. On a ainsi un maillage qui se déforme ou un système de coordonnées en mouvement. La méthode des caractéristiques est une méthode de résolution de l'équation. En utilisant cette approche, il est possible de suivre le chemin des particules («Particle tracking»).

---

### 3) Hydrogéologie

#### **Charge (hydraulique) $h$ :**

C'est le potentiel qui engendre un courant. Il est composé de trois termes :  $z$  pour la cote,  $p/\rho g$  pour la pression et  $u^2/2g$  pour la vitesse. En général, dans une nappe, on néglige le terme de vitesse. Unité : [m].

#### **Conductivité (hydraulique) $k$ :**

C'est l'aptitude d'un milieu fissuré de faire écouler l'eau. C'est le paramètre correspondant à la perméabilité pour un milieu poreux d'interstices [m/s].

#### **Convection :**

C'est le mécanisme du flux de masse par entraînement avec un courant.

#### **Diffusivité :**

1) valeur  $T/S$  [ $m^2/s$ ] d'une nappe captive : Cette valeur correspond à la vitesse de propagation d'un signal dans l'aquifère.

2) le coefficient de la diffusion  $D$  en [ $m^2/s$ ] est obtenu dans le cas d'un sol non saturé lorsqu'on met en relation les flux et le gradient de la teneur en eau. Le moteur de ce flux est le potentiel de la succion.

#### **Diffusion :**

C'est le mécanisme du flux de masse par mouvement microscopique (brownien), qu'on peut observer s'il y a un gradient de concentration. Elle est décrite par la loi de Fick.

#### **Diffusion apparente :**

C'est le tenseur qu'on obtient par addition du coefficient de diffusion moléculaire et du tenseur de dispersion cinématique

#### **Diffusion effective :**

C'est le tenseur de diffusion moléculaire qu'on obtient à partir du coefficient en eau libre en prenant en compte les propriétés de la matrice du milieu poreux : c'est-à-dire, la teneur en eau, le tenseur de tortuosité, le facteur de mobilité, le facteur dû au compactage (Moszkowicz et al., 1997).

#### **Dispersion :**

C'est le mécanisme du flux de masse dû à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques.

#### **Dispersion $D$ , coefficient/tenseur de :**

Pour un milieu isotrope et des concentrations en direction d'écoulement, c'est le coefficient qui relie le gradient de concentration du polluant au flux de masse dispersif, en analogie avec le coefficient de diffusion [ $m^2/s$ ].

**Dispersivité  $\alpha$ , coefficient/tenseur de :**

Pour un milieu isotrope et des concentrations en direction d'écoulement, c'est le coefficient qui relie le coefficient de dispersion à la vitesse d'écoulement [m].

**Perméabilité  $k$  :**

C'est le coefficient de proportionnalité entre le gradient de la charge hydraulique et la vitesse de Darcy. C'est la capacité (facilité) du milieu poreux de faire écouler l'eau [m/s].

**Porosité cinématique  $\omega_c$  :**

C'est la partie du milieu qui contribue à l'écoulement de l'eau, donc  $\omega_f$  moins l'eau liée qui résiste au déplacement.

**Porosité de drainage  $\omega_d$  :**

C'est la partie du milieu qui se vide sous l'impact de la pesanteur, donc  $\omega_f$  moins l'eau lié qui résiste à la pesanteur. Elle dépend du temps de l'expérience pour vider l'échantillon.

**Porosité totale  $\omega_t$  :**

C'est la partie du milieu qui n'est pas occupée par les grains

**Resistance transversale  $e.\rho$  :**

C'est la résistivité multipliée par l'épaisseur  $e$  de l'aquifère [ $\Omega.m^2$ ].

**Resistivité  $\rho$  :**

C'est la résistance électrique d'un milieu, multipliée par la distance entre les électrodes. L'eau étant un conducteur électrique, elle dépend de la porosité du milieu [ $\Omega.m$ ].

**Tortuosité  $\tau$ , tenseur de :**

Pour un milieu isotrope, c'est le facteur qui exprime la différence entre les coefficients de diffusion du milieu saturé et la zone non-saturée. La tortuosité traduit le fait que le chemin nécessaire pour traverser le milieu augmente. Pour deux phases, elle est définie selon :

$$\tau = \frac{\frac{\partial p_c}{\partial S} \cdot k_{r_1}(S_1) \cdot k_2(1 - S_1)}{k_{r_1} + k_{r_2}}$$

**Transmissivité  $T$  :**

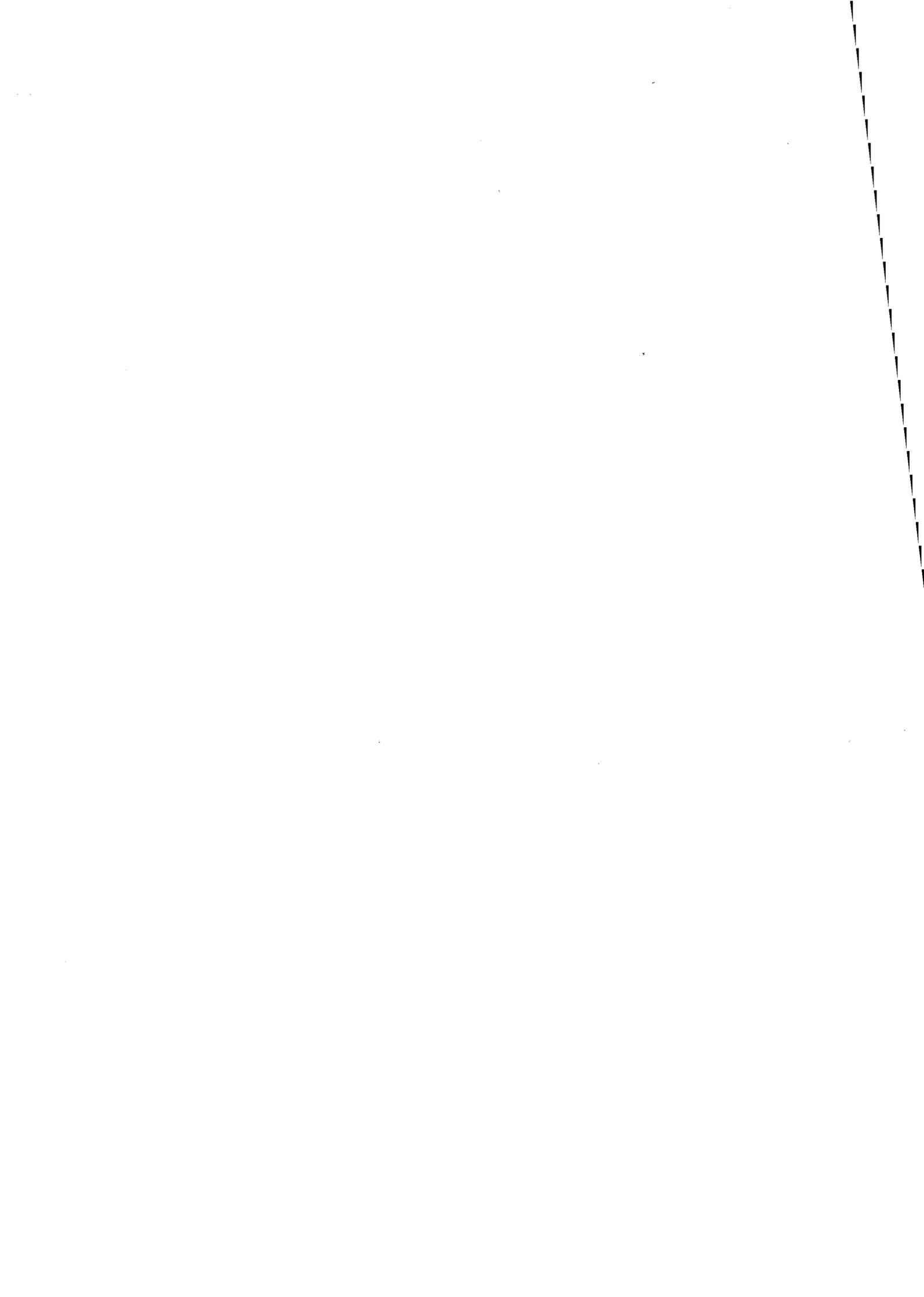
C'est la perméabilité  $k$  fois l'épaisseur  $e$  de l'aquifère [ $m^2/s$ ].



- A**
- Adsorption ..... 186
  - Agriculture ..... 26
  - Aide à la décision ..... 25, 49
  - Analyse spatiale ..... 89–94
    - fonction focale ..... 93, 125
    - fonction locale ..... 93
    - fonction zonale ..... 93, 125
  - Approche
    - compositionnel ..... 81
    - écoulement polyphasique ..... 81
    - Eulerien ..... 79
    - hydrodispersif ..... 64
    - Lagrangien ..... 79
    - polyphase-multiespèce ..... 67
    - transport multi-espèce ..... 81
  - Aquifère alluviale ..... 40
    - géologie ..... 39
    - paramétrage ..... 43
  - Arbre ..... 51
    - d'événement ..... 53
    - de défaillance ..... 51
    - des causes ..... 51
- B**
- Barrière hydraulique ..... 36
  - Base des données
    - construction de la ..... 91–92
    - gestion de la ..... 92
    - spécification de la ..... 91
  - Biolithiviation ..... 37
- C**
- Cadre législatif ..... 25
  - Calage
    - nappe en deux dimensions ..... 44
  - Calibrage. voir Calage
  - Cartographie ..... 49
  - Charge hydraulique ..... 62
  - Chromatographie ..... 186
  - Cinétique
    - des transferts ..... 69
  - Coefficient
    - de repartition ..... 186
  - Concept géorelationnel ..... 92
  - Condition
    - aux limites ..... 111
    - Initiale ..... 111
  - Convection ..... 64
  - Courbes de succion ..... 81
  - Couverture ..... 91
    - raster ..... 92
    - TIN ..... 92
    - vecteur ..... 91
- D**
- DBO5 ..... 26
  - DCO ..... 26
  - Décharges ..... 26, 28
  - Déchets
    - stockage ..... 26
  - Dégradation
    - microbiologique ..... 187
  - Dépollution ..... 35, 37
    - essais pilote ..... 35
  - Desorption ..... 186
  - Diagnostic
    - problème de ..... 51
  - Différences finies ..... 80, 194
  - Diffusion
    - effective ..... 64
    - moléculaire ..... 64, 126
    - numérique ..... 104
  - Discrétisation
    - dans l'espace ..... 194–199
    - dans le temps ..... 200
    - en espace ..... 80
  - Dispersion ..... 167
    - apparente ..... 66, 180
    - cinématique ..... 64, 65
  - Dispersivité
    - échelles de ..... 115–124, 139–141
    - locale ..... 115
    - longitudinale ..... 66
    - macro- ..... 115
    - transversale ..... 66
  - Dissolution ..... 126
  - DNAPL ..... 27
  - Données
    - cohérence ..... 125
    - durée de vie ..... 125
    - géographiques ..... 90–91
    - gestion ..... 125
    - linéaires ..... 90
    - point ..... 90
    - posttraitement ..... 125
    - précision ..... 125
    - prétraitement ..... 125, 128–129
    - raster ..... 91
    - surfaciques ..... 90
- E**
- Eau potable
    - alimentation en ..... 26, 34
  - Echelle
    - du temps ..... 27, 127
    - spatiale ..... 27
    - spatio-temporelle ..... 27
  - Écoulement
    - biphasique ..... 62
    - monophasique ..... 63
    - polyphasique. voir triphasique
    - polyphasique/multi-espèce ..... 81
    - préférentiel ..... 74
    - triphasique ..... 67

Elément		
fini .....	80, 195–199	
thématique .....	90	
Equation		
d'écoulement polyphasique-multiespèce	71	
de diffusivité .....	63	
de Fokker-Planck .....	140	
de Richards .....	63	
elliptique .....	193	
hyperbolique .....	193	
parabolique .....	193	
Equation aux dérivées partielles .....	193	
résolution numérique .....	193–206	
Equilibre local .....	186	
Erreur		
source d' .....	93, 113, 135–136	
Espèce .....	67	
propre .....	68	
Extraction sous vide .....	35, 37	
F		
Facteur de retard .....	186	
Fonction delta de Dirac .....	195	
Formulation		
faible .....	193	
forte .....	193, 194	
Fractal .....	74	
G		
Gestion		
d'accident .....	35–38, 131	
H		
HAP .....	29	
Homogénéisation .....	78	
Hydrocarbures .....	29	
composantes .....	35	
dissouts .....	35, 37, 75	
écrémage .....	35, 36	
flottants .....	35, 37, 74	
piégés .....	127	
sous phase gazeuse .....	37	
totaux .....	37	
Hystérésis .....	82	
I		
Information		
attributaire .....	91	
descriptive .....	91	
qualitative .....	83–87	
spatiale .....	51, 90	
spatio-temporelle .....	51	
temporelle .....	51	
Instabilité .....	104	
Installations mobiles .....	26	
Interface .....	67	
Isotherme .....	186	
L		
Lentilles		
d'argile .....	74	
graveleuses .....	74	
LNAPL .....	27, 29	
Localisation par points .....	195	
Loi		
de Fick .....	64	
sur l'Eau .....	30	
M		
Maillage .....	125	
adaptatif .....	141	
Matière en suspension .....	27	
Mesures		
d'urgence .....	35, 53	
du polluant .....	37	
géophysiques .....	75	
Méthode		
de Gauss-Seidel .....	202	
de Jacobi .....	202	
de Newton-Raphson .....	203–204	
de Picard .....	204	
Galerkin Standard .....	195	
Milieu		
à porosité d'interstices .....	116	
à porosité des fissures .....	116	
hétérogène .....	74, 116, 123	
Mines .....	26	
Miscibilité .....	68	
Modèle		
conceptuel .....	77	
hydrodispersif .....	95	
numérique .....	79	
polyphasique .....	96	
Modélisation mathématique .....	77	
N		
Nappe		
battement .....	41, 127	
polluée .....	28	
rabattement .....	36	
Nombre de Peclet .....	65	
Non-linéarité .....	104	
Normes .....	30	
P		
Perméabilité .....	62, 164	
intrinsèque .....	63	
rapport d'anisotropie .....	43	
relative .....	82	
Phases .....	67	
infiltration des hydrocarbures .....	69	
Points de repère .....	92	
Polluant		
biologique .....	26	
chimique .....	26	

- conservatif ..... 27, 73  
 miscible ..... 64  
 nonaqueux. voir non-soluble  
 non-conservatif ..... 27  
 non-miscible ..... 67  
 non-soluble ..... 27  
 nuage ..... 140  
 radioactive ..... 26  
 soluble ..... 26  
 suivi ..... 35  
 Pollution ..... 25  
   accidentelle ..... 27, 28, 49–58  
   aux hydrocarbures ..... 25, 31  
   chronique ..... 27, 28  
   diffuse ..... 27  
   dissoute ..... 109–113, 115–124  
   non-soluble ..... 103–108  
   ponctuelle ..... 27  
 Précipitation ..... 187  
 Prévion ..... 53  
 Problème  
   direct ..... 78  
   invers ..... 78  
  
 R  
 Raisonnement  
   spatio-temporel ..... 125  
 Réaction  
   biochimique ..... 187  
   chimique ..... 187  
   irréversible ..... 187  
   réversible ..... 186  
 Relation  
   de van Genuchten ..... 72, 106  
   entre pression et teneur en eau ..... 62  
 Ressources en eau  
   protection ..... 30  
 Retention ..... 186  
 Risque ..... 25, 32  
   arborescence ..... 51–53  
   prévion ..... 53  
  
 S  
 Saturation en une phase ..... 71  
 Seepage velocity ..... 64, 166  
 Sharp Interface Model ..... 141  
 Sites pollués ..... 28, 29  
 Sol  
   pollué ..... 28  
 Solubilisation ..... 187  
 Solvants  
   halogénés ..... 29  
   non-halogénés ..... 29  
 Structure  
   autosimilaire ..... 74  
   d'un sol ..... 72  
   du milieu ..... 74–75  
 Succion ..... 62  
  
 Suivi des particules ..... 79  
 Système  
   d'Information Géographique ..... 125–132  
   de projection ..... 91  
   des coordonnées ..... 91  
   mouillé à la phase aqueuse ..... 70  
   mouillé à la phase organique ..... 70  
 Systèmes d'équations  
   décomposition ..... 202  
   factorisation ..... 201  
   linéaires ..... 201–202  
   non-linéaires ..... 203–204  
  
 T  
 Teneur en une phase ..... 71  
 Texture ..... 83, 85–86  
 Topologie ..... 91, 92  
 Tortuosité ..... 64  
 Traçage  
   distance de ..... 115  
 Transfert  
   entre phases ..... 69  
 Transport  
   hydrodispersif ..... 109  
   paramétrage ..... 111  
   monophasique ..... 64  
   polyphasique ..... 81  
   réactif ..... 73  
  
 V  
 Volume Élémentaire Représentatif ..... 68  
 Volumes finis ..... 80  
  
 Z  
 Zone  
   non-saturée ..... 62, 64, 103–108  
   saturée ..... 63, 64, 109–113  
   vulnérable ..... 28



- A**
- Abbott, M.B. .... 110  
 Abriola, L.M. .... 147, 223  
 Anderson, M. .... 116  
 Anderson, M.P. .... 43  
 Anker, W. .... 83, 99  
 Appelo, C.A.J. .... 66, 115
- B**
- Bachmat, Y. .... 79  
 Barczewski, B. .... 82  
 Bear, J. .... 66, 79, 82  
 Bhattacharya, P.K. .... 75  
 Bonnet, M. .... 78  
 Bourgeat, A. .... 78  
 Bourgois, J. .... 83  
 Brakensieck, D.L. .... 85  
 Busch, K.F. .... 78
- C**
- Cara, M. .... 75  
 Carnahan, B. .... 104  
 Chaouche, M. .... 68  
 Charbeneau, R.J. .... 64  
 Côme, J.M. .... 73  
 Crès, F.N. .... 84
- D**
- Daniel, D.E. .... 64  
 Dhatt, G. .... 80  
 Dieulin, A. .... 66, 74  
 Dubourgier, H.C. .... 25, 28
- F**
- Fetter, C.W. .... 66, 70  
 Forbus, K.D. .... 85  
 Frind, E.O. .... 72, 81, 82
- G**
- Garcia, M. .... 141  
 Gaujois, D. .... 25  
 Gelhar, L.W. .... 115, 116  
 Genuchten, M.T. van .... 72  
 Goubier, R. .... 29  
 Graillet, D. .... 83, 84, 99  
 Guswa, J.H. .... 43  
 Guy, B. .... 187
- H**
- Henley, E.J. .... 51  
 Hernandez, D. .... 83  
 Hutinet, T. .... 85  
 Huyakorn, P.S. .... 104, 108, 195
- I**
- Imbert, T. .... 28
- J**
- Jégou, S. .... 82  
 Joskowicz, L. .... 85  
 Jungert, E. .... 83
- K**
- Katyal, A.K. .... 105  
 Klotz, D. .... 116  
 Kobus, H. .... 82, 116  
 Kueper, B.H. .... 72, 81, 82  
 Kumamoto, H. .... 51
- L**
- Laat, P.J.M. de .... 63  
 Lallemand-Barres, P. .... 115  
 Lambert, H.E. .... 51  
 Laurent, F. .... 93, 99  
 Laurent, J.P. .... 85  
 Le Blanc, D.R. .... 43  
 Lenormand, R. .... 68  
 Luckner, L. .... 78  
 Lucquin, B. .... 197
- M**
- Mardon, J.C. .... 204  
 Marie, C.M. .... 68  
 Marsily, G. de .... 43, 66  
 Mikelic, A. .... 77, 78  
 Miller, J. .... 25  
 Moszkowicz, P. .... 26, 30, 186  
 Mouton, C. .... 53  
 Musy, A. .... 63
- N**
- Neuman, S.P. .... 115, 116  
 Nilkuha, K. .... 108
- P**
- Page, B. .... 85  
 Paret, C. .... 32  
 Patra, H.P. .... 75  
 Peaudecerf, P. .... 115  
 Pinay, O. .... 25, 27  
 Pinder, G.F. .... 104, 195, 223  
 Pironneau, O. .... 197  
 Postma, D. .... 66, 115  
 Ptak, T. .... 116  
 Puppe, F. .... 85
- R**
- Rawls, W.J. .... 85  
 Refsgaard, A. .... 110  
 Robert, P. .... 31  
 Russel, T.F. .... 79, 139

S

Sacks, E.P. ....	85
Sanchez, F. ....	187
Saxton, K.E. ....	85
Schaefer, W. ....	73
Scheidegger, A.E. ....	66, 116
Schmid, G. ....	82
Schreiber, A.M. ....	51
Shackelford, C. D. ....	64
Sibony, M. ....	204
Soerensen, H.R. ....	99
Su, N. ....	140

T

Tannenberg, P. de ....	28
Tardy, P. ....	230
Taylor, R. ....	80
Teutsch, G. ....	116
Tiemer, K. ....	78
Touboul, E. ....	68
Touzot, G. ....	80

V

Verrujt, A. ....	66
Vescovi, M.R. ....	85
Vested, H.J. ....	110, 112

W

Watson, H.A. ....	51
Wheeler, M.F. ....	79
Wild, A. ....	86
Wittmer, F. ....	106
Woessner, W.W. ....	43

Y

Yeh, T.C. ....	82
----------------	----

Z

Zeiliguer, A.M. ....	72, 85
Zelfani, M. ....	83
Zheng, C. ....	79, 109
Zienkiewicz, O.C. ....	80



## RESUME

Ce travail de thèse est destiné à l'élaboration d'une méthodologie d'analyse des risques issus des pollutions accidentelles par hydrocarbures. Cette méthodologie s'appuie sur l'intégration d'outils de modélisation des phénomènes complexes de pollution des eaux souterraines par les LNAPL ("Light Non Aqueous Phase Liquids").

En zone non saturée, il s'agit de représenter un écoulement polyphasique puisque les phases air, eau et huile coexistent. La modélisation de la propagation d'une pollution polyphasique se heurte aux limites dues aux nombreuses incertitudes introduites par les phénomènes de non-linéarité. Néanmoins, les échelles spatiales et temporelles sont plus petites qu'en zone saturée. De ce fait, l'erreur introduite pour l'estimation des risques est moins importante.

En zone saturée, la propagation de la pollution se fait sous forme dissoute. Nous effectuons la simulation par approche hydrodispersive. Dans cette zone, la direction de propagation est essentiellement horizontale. Il est donc nécessaire de disposer d'un outil d'analyse spatiale pour estimer les risques de propagation. Pour obtenir une erreur homogène sur tout le trajet de propagation d'une pollution ponctuelle, il faut prendre en compte l'influence de l'échelle à laquelle les coefficients de dispersivité sont déterminés.

A l'aide d'un système d'information géographique, les paramètres d'un site d'application test sont introduits dans les modèles hydrodynamiques. L'interprétation des résultats s'effectue par analyse spatiale pour représenter l'évolution spatio-temporelle de la propagation de la pollution.

**Mots Clés :** hydrogéologie, milieu poreux, zone non saturée, zone saturée, hydrocarbures, transport en solution, écoulement polyphasique, modélisation/simulation, système d'information géographique, analyse spatiale.

## ABSTRACT

This PhD-thesis work is intended for the elaboration of a methodology for risk analysis of accidental hydrocarbon pollution. This methodology is based on the integration of modelling tools for complex phenomena of subsurface pollution by LNAPL (Light Non Aqueous Phase Liquids).

In unsaturated zone, polyphase character of hydrocarbon pollution is evident while air, water and oil phases coexist. Modelling of multiphase pollution propagation is limited by numerous uncertainties introduced by phenomena of nonlinearity. Nevertheless, spatial and temporal scale is smaller than in saturated zone. By this, the introduced error for risk estimation of this kind of model is more limited.

In saturated zone, pollution is spreading in dissolved form: For this, we use simulation approach hydrodispersive modelling. In this zone, essential transfer direction is horizontal. By this, necessity is imposed to dispose of a spatial analysis tool for risk estimation. For homogenisation of error over the whole distance of a pointwise pollution, influence of the scale where dispersivities have been determined, has to be taken into account.

By Geographic Information System, we introduce spatial parameters into hydrodynamic models. Model results are interpreted by spatial analysis to represent spatio-temporal evolution of pollution propagation.

**Key Words :** hydrogeology, porous medium, unsaturated zone, saturated zone, hydrocarbons, dissolved substance transport, multiphase flow, modelling/simulation, geographic information system, spatial analysis.