d'une moyenne temporelle a toujours une incidence sur la fiabilité du bilan hydrique. Par exemple, une même valeur moyenne de P, résultant d'un mois de précipitations faibles et continues ou, au contraire, résultant de quelques précipitations intensives, va entraîner des intensités très différentes pour le ruissellement et l'infiltration. Le calcul de la moyenne temporelle de P crée un lissage par rapport à la réalité plus variable dans le temps. Si l'on considère les termes du bilan hydrique global de l'équation 2.1, on peut facilement comprendre qu'utiliser une moyenne temporelle pour P tend à produire : (1) une surestimation de l'évapotranspiration (ET) résultant de la quantité d'eau supposée disponible pour les processus d'évaporation pendant toute la période, (2) une sousestimation du ruissellement (R) résultant de la valeur relativement faible sur toute la période remplaçant quelques pics réels de précipitations, et (3) selon les conditions d'ET, une éventuelle surestimation de l'infiltration (I) car I = P - ET - R dans l'équation 2.1.

2.2.2 Moyennes spatiales

Comme mentionné précédemment, le réseau de pluviomètres est toujours très limité par rapport à la variabilité réelle des précipitations. Sur un bassin versant, les valeurs moyennes des mesures discrètes disponibles doivent tenir compte de la densité variable du réseau de mesures, du type d'utilisation du sol, de la topographie, de l'orientation des versants par rapport aux vents dominants locaux apportant les pluies et d'autres facteurs pouvant avoir une influence. Néanmoins, il est étonnant de constater que des procédures relativement simples de calcul de la moyenne spatiale sont encore adoptées dans ce contexte de calcul de bilan hydrique. Cela affecte la précision de ces évaluations hydrologiques globales. Dans la pratique, les techniques les plus courantes utilisent des moyennes pondérées, comme les **polygones de Thiessen**. Dans cette méthode, le bassin versant est divisé en sous-domaines autour de chacun des *n* points de mesure. Les polygones de Thiessen sont dessinés autour de chacun des points, et les poids (ω_i) respectifs sont déterminés par le rapport :

$$\omega_i = a_i/A$$
 avec $i = 1, \dots n$ et $\sum_{i=1}^n a_i = A$ (2.6)

où les a_i représentent les aires des sous-domaines (polygones), A est la surface de l'ensemble du bassin versant, et i est l'indice de chaque polygone (autour de chaque point de mesure). La moyenne spatiale (\hat{P}) est calculée par :

$$\hat{P} = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^{n} a_i P_i \tag{2.7}$$

où les P_i représentent les valeurs mesurées des précipitations aux n points de mesure. D'autres techniques basées sur des méthodes d'ajustement de surface ou d'interpolation peuvent être appliquées. La surface calculée représente donc un modèle lissé de la variabilité spatiale des valeurs P mesurées. À partir d'une carte présentant les courbes d'égales valeurs de précipitation (appelées **isohyètes**), une moyenne surfacique de Ppeut être évaluée sur tout le bassin. Cela peut se faire, par exemple, en considérant les isohyètes successives comme des limites de sous-domaines à l'intérieur du bassin versant, où chaque sous-domaine se voit attribuer une valeur P égale à la moyenne entre les valeurs des isohyètes limites [8]. mesures) des précipitations (incluant également tous les dépôts) $[ML^{-3}]$; et C_{gw} est la concentration en *Cl* dans les eaux souterraines en zone non saturée ou en zone saturée. Cette méthode a été initialement divulguée par Schoeller ([91], [92]), puis développée par Eriksson & Khunakasem [93].

Cette méthode est considérée comme fournissant des estimations fiables à long terme de R_{gw} (e.g. [94]), en particulier dans les zones arides et semi-arides où d'autres méthodes sont particulièrement difficiles à appliquer. La méthode peut être appliquée non seulement en utilisant le profil de Cl dans la zone non saturée, mais aussi en utilisant les concentrations en Cl mesurées dans la partie supérieure de la zone saturée.

Il existe une abondante documentation sur les hypothèses implicites et explicites requises pour l'application de cette méthode (e.g. [87], [89] et [95]) : a) le chlorure est supposé être un traceur conservatif dont la seule source est atmosphérique (i.e. les dépôts combinés secs et pluvieux, sans source ni disparition de chlorure dans la matrice rocheuse) ; b) il n'y a pas d'influence du ruissellement dans la zone de recharge (ou bien son influence devrait être explicitement prise en compte) ; c) l'apport atmosphérique et le flux de recharge sont considérés uniformes et constants dans le temps (i.e. un profil de chlorure constant dans la zone non saturée) ; d) un écoulement vertical de type « piston » est supposé dans la zone non saturée.

En pratique, si aucune mesure directe de C_{P+D} n'est disponible, une relation empirique exprimant la dépendance de la teneur en Cl de l'eau de pluie en fonction de la distance à l'océan est exprimée sous la forme [96] :

$$C_{P+D} = 35, 45 \left(\frac{0,99}{d^{0,25}} - 0, 23 \right)$$
 (2.24)

où *d* est la distance jusqu'à la côte en km et C_{P+D} est exprimé en mg/L. Par contre, si des mesures de C_{P+D} sont disponibles, une concentration moyenne pondérée de chlorure dans les précipitations (humides et sèches) peut être calculée en utilisant [97] :

$$C_{P+D} = \frac{\sum_{i=1}^{n} P_i C_{pi}}{\sum_{i=1}^{n} P_i}$$
(2.25)

où *n* est le nombre d'échantillons, P_i est la valeur des précipitations mesurées au point d'échantillonnage *i*, et C_{pi} est la concentration mesurée en *Cl* (incluant les processus secs et humides) dans l'échantillon *i*.

Les mesures de C_{gw} dans l'équation 2.23 ont également fait l'objet de nombreuses discussions. Souvent, on les obtient en échantillonnant dans des puits de surveillance classiques ou dans des puits d'approvisionnement en eau, ou éventuellement (dans le meilleur des cas) en échantillonnant un intervalle de profondeur bien déterminé dans un puits équipé d'un dispositif d'échantillonnage multiniveau (voir chapitre 7) [98]. Comme mentionné précédemment, C_{gw} peut également être mesuré dans la zone non saturée, en supposant un profil de chlorure simplifié sous la profondeur maximale d'évapotranspiration (figure 2.10). En effet, si C_{gw} en zone non saturée est uti-lisée dans l'équation 2.23, la méthode ne pourra pas tenir compte de la recharge par écoulements préférentiels dans les macropores et les fissures. En utilisant des modèles

d'un volume de contrôle (figure 4.24) par unité de volume de milieu poreux et par unité de temps. Pour un écoulement d'eau souterraine saturé, on écrit :

$$-div(\rho q) = -\nabla \cdot (\rho q) = -\rho q' \tag{4.47}$$

où $div(q) = \nabla \cdot q = (\partial q_x / \partial x_{f} \partial q_y / \partial y_{f} \partial q_z / \partial z)$ en milieu 3D saturé (figure 4.24), q' (s⁻¹) [T⁻¹] est le flux d'eau qui est injecté (q' > 0) ou pompé (q' < 0) par unité de volume de milieu poreux. Le terme q' exprime la « source/disparition » (*source/sink term*) d'eau imposée par l'extérieur au système étudié, aussi appelé terme de « sollicitation » dans l'équation d'écoulement.

En faisant entrer la loi de Darcy (4.28) dans l'équation 4.47, on trouve l'équation d'écoulement 3D suivante :

$$\nabla \cdot (\rho \ \mathbf{K} \cdot \nabla h) + \rho q' = 0 \tag{4.48}$$

et

$$\nabla \cdot \left(\rho \; \frac{\mathbf{k}}{\mu} \cdot \left(\nabla p + \rho g \nabla z\right)\right) + \rho q' = 0 \tag{4.49}$$



Figure 4.24 – Conservation de la masse d'eau souterraine pour un volume de milieu géologique saturé en régime permanent.

Les différents termes de ces équations sont exprimés en kg/(m^3 s) [$ML^{-3}T^{-1}$], exprimant la masse d'eau par volume de milieu poreux par seconde. L'équation 4.47 écrite en notation indicielle est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \rho q_i' = 0 \tag{4.50}$$

Notons que cette équation peut s'écrire sous différentes formes. La plus courante étant :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + q' = 0$$
(4.51)

alors le premier terme du membre de droite de l'équation 4.61 peut s'écrire :

$$n\frac{\partial\rho}{\partial t} = n\frac{\partial\rho}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} = n\rho\beta_{w}\frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.64)

Si on prend l'hypothèse que la contrainte totale est constante (i.e. $d\sigma = 0$; cf. chapitre 6) et en exprimant la dérivée temporelle de l'équation 4.57, on trouve :

$$\frac{\partial \sigma'}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial t} \tag{4.65}$$

Par ailleurs, on peut se rappeler que :

$$n = \frac{V_p}{V} \quad \text{et} \quad (1-n) = \frac{V_s}{V} \tag{4.66}$$

où V_p et V_s sont respectivement les volume des pores et du solide au sein de l'EVR. Le deuxième terme du membre de droite de l'équation 4.61 peut être développé :

$$\rho \frac{\partial n}{\partial t} = \rho \frac{(V_p + V_s) \frac{\partial V_p}{\partial t} - V_p \frac{\partial (V_p + V_s)}{\partial t}}{V^2}$$
(4.67)

et simplifié en utilisant les équations 4.66, et si la compressibilité du solide est négligée $(\partial V_s / \partial t \cong 0)$, alors :

$$\rho \frac{\partial n}{\partial t} = \rho \frac{V_s \frac{\partial V}{\partial t}}{V^2} = \rho \frac{(1-n)}{V} \frac{\partial V}{\partial t} = \rho \frac{(1-n)}{V} \frac{\partial V}{\partial \sigma'} \frac{\partial \sigma'}{\partial t}$$
(4.68)

En utilisant l'équation 4.65, et la définition de la compressibilité volumique du milieu poreux saturé (équation 4.58), on obtient :

$$\rho \frac{\partial n}{\partial t} = \rho (1 - n) \alpha \frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.69)

Avec les équations 4.64 et 4.69, l'équation 4.61 peut désormais s'écrire :

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} = \rho \left\{ n\beta_w + (1-n)\alpha \right\} \frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.70)

Le premier terme disparaît si la compressibilité de l'eau est négligée ($\beta_w \cong 0$) par rapport à la compressibilité volumique du milieu.

En entrant cette variation de stockage d'eau dans l'équation de conservation, et en exprimant de surcroît que le débit spécifique de Darcy est ici en fait un débit relatif par rapport à un solide en mouvement, l'équation 4.55 peut être réécrite comme suit :

$$\nabla \cdot \rho(\boldsymbol{q}_r + n\boldsymbol{v}_s) - \rho q' = -\rho \left\{ n\beta_w + (1-n)\alpha \right\} \frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.71)

4.10 Variation d'emmagasinement en conditions saturées

où v_s est la vitesse du solide (considérée à l'échelle de l'EVR), q_r est le débit spécifique relatif, et $(q - nv_s) = q_r$. La vitesse du solide est une variable supplémentaire du problème qui est éliminée de l'équation en exprimant l'équation de conservation de la masse de solide comme suit :

$$-\nabla \cdot \rho_s (1-n) \mathbf{v}_s = \frac{\partial \{(1-n)\rho_s\}}{\partial t}$$
(4.72)

où ρ_s est la densité du solide (kg/m³) [ML⁻³]. Si cette dernière peut être considérée constante (i.e. la compressibilité du solide β_s est négligeable) et en utilisant l'équation 4.69, l'équation de conservation de la masse de solide est écrite :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v}_s = \alpha \frac{\partial p}{\partial t} \tag{4.73}$$

En remplaçant $\nabla \cdot \mathbf{v}_s$ dans l'équation 4.71 par sa valeur ci-dessus, on obtient :

$$\nabla \cdot \rho(\boldsymbol{q}_{r}) - \rho q' = -\rho \left\{ n\beta_{w} + n\alpha + (1-n)\alpha \right\} \frac{\partial p}{\partial t} = -\rho(\alpha + n\beta_{w}) \frac{\partial p}{\partial t}$$
(4.74)

et en transformant $\partial p / \partial t = \rho g \partial h / \partial t$:

$$\nabla \cdot \rho(\boldsymbol{q}_r) - \rho q' = -\rho^2 g(\alpha + n\beta_w) \frac{\partial h}{\partial t}$$
(4.75)

Et finalement, en utilisant la définition du coefficient d'emmagasinement spécifique comme exprimée par l'équation 4.56, on obtient :

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta_w) \tag{4.76}$$

Il faut noter que plusieurs hypothèses ont été nécessaires pour obtenir cette relation : (1) conditions isothermes, (2) composition uniforme de l'eau souterraine, (3) principe de Terzaghi et définition de la compressibilité volumique, (4) contrainte totale constante, et (5) compressibilité du solide négligeable par rapport à la compressibilité volumique du milieu poreux. Le plus souvent, la compressibilité de l'eau β_w est également supposée négligeable par rapport à la compressibilité volumique du milieu, de sorte que le coefficient d'emmagasinement spécifique en m⁻¹ [L⁻¹] peut être écrit directement en relation avec la compressibilité volumique en (Pa⁻¹) [M⁻¹LT²] :

$$S_s = \rho g \alpha \tag{4.77}$$

Cette relation montre que S_s dépend directement de la compressibilité volumique du milieu poreux (α). Le tableau 4.5 fournit des valeurs indicatives de celle-ci pour différentes lithologies. Attention que la compressibilité évolue avec l'état de contrainte effective (σ') dépendant de la pression d'eau interstitielle (p), de sorte qu'il existe un couplage complet entre les phénomènes d'écoulement et stockage d'eau souterraine, et l'état de contrainte-déformation géomécanique au sein de l'EVR de milieu poreux saturé. Ce couplage pourrait être encore renforcé en prenant également en compte la variation de la perméabilité due à la consolidation. Jusqu'à présent, cette variation a

7 Introduction à la qualité des eaux souterraines et à l'hydrochimie

Les concepts de base de l'hydrochimie sont des points de départ pour l'étude et l'évaluation de la qualité des eaux souterraines. D'excellents livres sur ce sujet sont disponibles, notamment : Pankow [1], Deutsch [2], Appelo et Postma [3] et Atteia [4].

Dans une molécule d'eau, la distribution spatiale des charges électriques n'est pas symétrique, induisant des propriétés polaires. L'eau est donc un excellent solvant pour de nombreuses autres substances ioniques et polaires. L'eau de recharge percolant dans la zone partiellement saturée des sols et des couches peu profondes et devenant ainsi de l'eau souterraine qui s'écoule ensuite dans la zone saturée, réagit chimiquement avec les gaz, les minéraux et les composés organiques du milieu sur tout son parcours. La composition d'une eau souterraine à un endroit donné à un moment précis peut dépendre de multiples facteurs, mais les principaux sont : (a) la nature et les caractéristiques chimiques des minéraux et des gaz présents dans les roches rencontrées, et (b) le temps de résidence des eaux souterraines, car il détermine si un équilibre chimique peut être atteint entre les minéraux et les eaux souterraines dans les pores et les fissures. Des solutés sont également introduits par les activités humaines. Les processus chimiques sont complexes et peuvent être induits, stimulés ou retardés par de nombreux facteurs, comme les réactions dépendantes de l'action de micro-organismes. Dans certains environnements géologiques très spécifiques, l'eau souterraine naturelle (i.e. non affectée par la contamination humaine) peut ne pas convenir à la consommation humaine ou, au contraire, être considérée comme présentant des avantages pour la santé de certaines personnes. Cette grande variabilité des conditions chimiques des eaux souterraines résulte de la variabilité géologique de la composition des roches, de la variabilité de la composition des précipitations, de la variabilité des parcours et des temps de résidence dans le sous-sol et de la multitude des contaminants provenant des activités humaines.

7.1.1 Phases et constituants

Il est important de faire la distinction entre les phases et les constituants. Dans les problèmes d'eau souterraine, une **phase** est une partie ou une région chimiquement définie de l'espace poreux qui est physiquement séparée des autres phases par une interface (i.e. phase solide, phase aqueuse, phase gazeuse et NAPL = phase liquide non aqueuse). Dans un EVR d'un milieu poreux et/ou fracturé, la quantification de chaque phase est exprimée en utilisant des rapports de volumes ou des rapports masse/volume (figure 7.1 et tableau 7.1).



Figure 7.1 – Modèle conceptuel pour la quantification de chaque phase à l'aide de rapports de volumes ou de rapports masse/volume dans un EVR.

deux dispersivités principales qui sont : a_L et a_T , respectivement les dispersivités longitudinale et transversale, exprimées en m[L] ([15], [16]) :

$$D_{ij} = (a_L - a_{\mathbf{T}}) \frac{v_{a_i} v_{a_j}}{|v_a|} + a_T |v_a| \delta_{ij}$$
(8.13)

où des notations indicielles sont utilisées et *i* et *j* = 1, 2 ou 3, δ_{ij} est le symbole de Kronecker avec $\delta_{ij} = 1$ si i = j et $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$, $|v_a| = \sqrt{(v_{a_1}^2 + v_{a_2}^2 + v_{a_3}^2)}$. Cette équation peut également être développée en fonction de trois dispersivités, en différenciant a_{TH} , et a_{TV} , respectivement les dispersivités transversales horizontale et

différenciant a_{TH} , et a_{TV} , respectivement les dispersivités transversales horizontale et verticale ([17], [11] et [2], parmi de nombreux autres). Une forme à quatre composantes a été proposée également, où les dispersivités longitudinale et transversale varient selon l'angle d'écoulement [18]. Pour un milieu isotrope 3D où l'axe des x est toujours orienté dans la direction de la vitesse (figure 8.6), le tenseur de dispersion mécanique D peut être simplifié comme suit :

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} D_{xx} & & \\ & D_{yy} & \\ & & D_{zz} \end{bmatrix}$$
(8.14)

et $D_{xx} = a_L v_{a_x}$, $D_{yy} = a_T v_{a_x}$, $D_{zz} = a_T v_{a_x}$, avec $v_{a_y} = v_{a_z} = 0$

Lorsqu'elle est mesurée à l'échelle du laboratoire, a_L est représentative de la dispersion à l'échelle des pores conduisant le plus souvent à des valeurs comprises entre 10^{-4} et 10^{-2} m. Lors d'essais sur le terrain, des hétérogénéités à plus grande échelle existent à une échelle en tout cas supérieure au volume choisi comme représentatif, le concept fickien de dispersion conduit à une macrodispersivité longitudinale (a_L) supérieure d'au moins deux ordres de grandeur (e.g. [19] et [20]). Dans ce cas, a_L est souvent considéré comme dépendant de l'échelle mais limité apparemment par une valeur asymptotique. Il existe une littérature abondante sur ce sujet pour tenter d'exposer et de déduire des relations d'*upscaling* pour les dispersivités (parmi d'autres [21], [22], [23], [24] et [25]). La principale difficulté réside dans la fiabilité des valeurs issues de multiples essais sur le terrain effectués dans des conditions hydrogéologiques extrêmement diverses. On peut remarquer que si de grandes hétérogénéités sont présentes à l'échelle de l'aquifère, la macrodispersion devrait dépendre du temps, mais cette dépendance temporelle peut être moins forte lorsque l'échelle de corrélation de la macrodispersion a une valeur finie ou, en d'autres termes, si la macrodispersion a atteint sa valeur asymptotique [26].

Une réévaluation récente et rigoureuse de nombreux résultats antérieurs [19] a permis de conclure que les macrodispersivités sont spécifiques à la formation géologique considérée. Le calcul du transport de solutés doit donc être basé sur une caractérisation réaliste de l'aquifère local et en particulier de la distribution spatiale des conductivités hydrauliques. Une loi d'*upscaling* locale devrait être considérée comme spécifique au site ou à la formation géologique [19]. La macrodispersion à l'échelle des essais de terrain pourrait également être fortement influencée par des variations transitoires du débit non résolues sur le terrain [27].

Encart 8.4 – Approche *random walk* pour le transport de soluté par advection-dispersion

L'équivalence est supposée entre l'équation de Langevin [47] (décrivant le mouvement advectif de particules non interactives et une vitesse aléatoire non corrélée en « bruit de fond ») et l'équation d'advection-dispersion [48]. Le processus aléatoire est défini dans le temps et l'espace : le mouvement des particules se produit avec un incrément spatial variable ΔL (longueur de transition) et un incrément de temps variable $\Delta \tau$ (temps de transition). Les propriétés fondamentales du transport sont régies par le comportement asymptotique de la fonction couplée de distribution de probabilités spatio-temporelle (*PDF*) $p(\Delta L, \Delta \tau)$ [49]. Comme mentionné par Russian *et al.* [50], « le milieu hétérogène ou les propriétés hétérogènes d'écoulement de celui-ci sont cartographiés sur la base de la distribution couplée de la longueur et du temps de transition, ce qui produit une image moyenne d'ensemble du transport ». Le comportement asymptotique désigne le comportement à longue distance ou à long terme.

Cette technique est connue sous le nom de marche aléatoire continue dans le temps (*CTRW – Continuous Time Random Walk*) (e.g. [51] et [52]). Cependant, ces méthodes classiques de marche aléatoire avec suivi de particules sont encore souvent mises en œuvre avec des pas de temps discrets (discrétisation du temps en « pas de temps ») et avec des incréments spatiaux variables qui dépendent du champ de vitesse et du bruit aléatoire (cf. chapitre 13).

Les méthodes *CTRW* ont permis de simuler des comportements de transport « anormaux » (i.e. non fickiens) à différentes échelles dans des milieux hétérogènes (e.g. [53], [54]). Le transport de soluté peut donc être considéré comme « spatialement anormal » et/ou « temporellement anormal ». Ce sujet fait actuellement l'objet de développements rapides et de nouvelles techniques similaires à l'approche *CTRW* ou l'améliorant font leur apparition, par exemple, la marche aléatoire dans le domaine temporel (*TDRW* – *Time Domain Random Walk*) où les temps de transition sont distribués exponentiellement [50].

poreux, nous n'aurions besoin que des processus d'advection et de diffusion pour décrire le transport. En effet, pour que la macrodispersion puisse être considérée comme fickienne, il faut une distance (ou un temps de parcours) qui n'est probablement jamais atteint dans de nombreux systèmes hétérogènes naturels [38]. Comme le résume Molz [39], le concept d'advection-diffusion a été illustré (e.g. [40]), mais les problèmes de mesures et de simulations ont conduit à développer davantage l'approche stochastique de macrodispersion proposée par Gelhar et Axness [36].

De nos jours, avec les nouvelles techniques de mesure à haute résolution, combinées à des géostatistiques à points multiples (e.g. [41], [42]) et/ou l'analyse stochastique guidée par les faciès, il est de plus en plus courant de montrer que la connaissance des champs de conductivité hydraulique à petite échelle (= diminution radicale de l'EVR) associée à une bonne description de la « connectivité » des pores et/ou microfractures peuvent grandement améliorer les résultats [43]. Dans ces dernières conditions, même les ap-

sorbée peut ne pas se décomposer (e.g. en raison d'une accessibilité limitée pour les microbes), donc la forme de cette équation serait légèrement différente. Si l'équation 8.47 est divisée par *R*, on peut observer que la migration de tout soluté s'adsorbant dépend du rapport v_a/R , qui est en effet plus lent que v_a . Jusqu'à présent, le terme source/puits était représenté par M^{ν} en kg/m³s[ML⁻³T¹]. En fait, on peut distinguer deux types de source/puits : (a) source/puits de masse de soluté lié à un débit d'eau souterraine échangé avec l'extérieur du domaine pour lequel l'équation de conservation est exprimée ; (b) source/puits de masse de soluté non associé à un débit (i.e. résultant de réactions chimiques et d'effets d'eau immobile, cf. paragraphes suivants). À ce stade, si l'on néglige les source/puits associés aux réactions chimiques et aux effets d'eau immobile, le terme source/puits s'écrit :

$$M^{\nu} = q_s C_s^{\nu} \tag{8.48}$$

où q_s est leflux volumique par unité de volume du milieu poreux (s⁻¹)[T⁻¹] s'écoulant vers ($q_s > 0$) ou en dehors ($q_s < 0$) de l'EVR considéré, et C_s^{ν} est la concentration associée à ce flux (kg/m³) [ML⁻³]. Notons que si $q_s < 0$, automatiquement $C_s^{\nu} = C^{\nu}$ car l'eau souterraine sortante quitte le domaine avec une concentration égale à celle de l'EVR considéré.

D'autre part, l'expansion du terme d'advection dans l'équation 8.47 donne :

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}_{a}C^{\nu}) = C^{\nu}\nabla \cdot \mathbf{v}_{a} + \mathbf{v}_{a} \cdot \nabla C^{\nu}$$
(8.49)

Si le fluide (eau souterraine) est supposé incompressible (comme précédemment), les seules variations internes (à l'EVR) de v_a ne peuvent être dues qu'à des sources ou puits internes de sorte que :

$$C^{\nu}\nabla \cdot \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}} = C^{\nu}q_{s} \tag{8.50}$$

En introduisant cette valeur dans l'équation 8.49 et en combinant les équations 8.49, 8.48 et 8.47, l'équation de conservation massique de soluté s'écrit :

$$R\frac{\partial C^{\nu}}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}} \cdot \nabla C^{\nu} + \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{h}} \cdot \nabla C^{\nu}) - R\lambda C^{\nu} - \frac{q_s}{n_m} (C^{\nu} - C_s^{\nu})$$
(8.51)

L'écoulement des eaux souterraines doit être connu avant de résoudre cette équation. Notons que si la concentration associée au terme de source/puits C_s^{ν} est égale à la concentration locale C^{ν} , le dernier terme de l'équation 8.51 est égal à zéro, ce qui signifie qu'il n'affecte pas les concentrations [4]. C'est généralement le cas pour les débits d'eau souterraine sortant de l'EVR à la concentration locale. Par contre, si une eau plus concentrée est injectée $(C_s^{\nu} > C^{\nu})$, cette source de contamination produira des concentrations croissantes dans le volume considéré. Enfin, pour être complet, si une injection d'eau se produit avec une concentration inférieure à la concentration locale $(C_s^{\nu} < C^{\nu})$, on obtient une dilution des concentrations locales de soluté.

Par ailleurs, si nous voulons prendre en compte des termes de sources/puits de masse de soluté qui ne sont associés à aucun flux d'eau mais qui résultent d'un effet d'eau immobile et/ou de réactions chimiques, des termes supplémentaires doivent être exprimés et introduits dans le membre de droite de cette équation 8.51.

Des conditions de gradient forcé et surtout des conditions d'écoulement convergent radialement vers un puits de pompage fournissent des porosités effectives de transport réalistes pour ces conditions de pompage prévalant lors de l'essai de traçage (encart 8.7), mais rendent difficile la déduction d'une dispersivité transversale et peuvent biaiser la dispersivité longitudinale (sous-évaluation de a_L [106]).

Les configurations les plus classiques sont soit à deux puits avec un puits d'injection et un puits de pompage, soit avec des puits multiples autour d'un seul puits de pompage [110] (encart 8.6). Pour un meilleur contrôle du panache de traceur, des piézomètres d'observation peuvent être disposés suivant des plans perpendiculaires à l'écoulement entre les puits d'injection et de pompage (figure 8.25). Que l'injection et le pompage soient effectués dans des puits entièrement crépinés ou entre obturateurs (*packers*), les piézomètres de surveillance à doubles crépines (i.e. permettant des mesures séparées dans les parties inférieure et supérieure de l'aquifère) sont souvent préférés dans un aquifère stratifié pour obtenir plus de détails sur la distribution verticale du panache.

Encart 8.7 – Porosités effectives de transport et valeurs de macrodispersivité à l'échelle d'un essai de traçage

Une base de données régionale a été constituée en Wallonie (Belgique) à partir des données recueillies lors d'essais sur le terrain effectués dans le cadre de la délimitation des zones de protection (voir encart 8.6). En général, ces études ont été réalisées par différents acteurs, notamment des sociétés de consultance, des équipes universitaires et des compagnies d'eau. Des données provenant de plus de 150 sites ont été recueillies et traitées statistiquement [114]. Les principaux paramètres de la base de données sont les valeurs de K, n_m et a_L , telles que calibrées sur les essais de traçages multi-traceurs utilisant des modèles déterministes de transport (*ADE*). Les essais de traçage ont été effectués en gradient forcé correspondant aux conditions de production maximale du puits de pompage. Sur la base d'une simple analyse statistique, les valeurs moyennes de la porosité effective de transport (n_m) et de la macrodispersivité (a_L) divisées par la longueur caractéristique de l'essai de traçage (i.e. la distance d'essai) sont présentées dans le tableau ci-dessous. Les valeurs présentées ont été obtenues pour des calcaires fissurés du Paléozoïque (45 essais) et des craies fissurées du Mésozoïque (47 essais).

	n _m %		a _L /L	
	Craies	Calcaires	Craies	Calcaires
Moyenne				
arithmétique	1,872	2,092	0,285	0,302
Moyenne				
géométrique	0,575	0,956	0,178	0,201
Médiane	0,800	1,200	0,233	0,240

L est la distance d'essai (i.e. distance entre le point d'injection et le puits de pompage), (données de [114]).

- [134] Hermans, T., Wildemeersch, S., Jamin, P., Orban, P., Brouyère, S., Dassargues, A. and F. Nguyen. 2015. Quantitative temperature monitoring of a heat tracing experiment using cross-borehole ERT. *Geothermics* 53: 14-26.
- [135] Suckow, A. 2014. The age of groundwater Definitions, models and why we do not need this term. *Applied Geochemistry* 50: 222-230.
- [136] Bethke, C.M. and T.M. Johnson. 2008. Groundwater age and groundwater age dating. Annu. Rev. Earth Planet. Sci. 36: 121-152.
- [137] Goode, D.J. 1996. Direct simulation of groundwater age. *Water Resources Research* 32: 289-296.
- [138] Molson, J.W. and E.O. Frind. 2012. On the use of mean groundwater age, life expectancy and capture probability for defining aquifer vulnerability and time-of-travel zones for source water protection. *Journal of Contaminant Hydrology* 127: 76-87.
- [139] Jury, WA. 1982. Simulation of solute transport using a transfer function model. Water Resources Research 18(2): 363-368.
- [140] Frind, E.O., Mohammed, D. and J.W. Molson. 2002. Delineation of three-dimensional capture zones in a complex aquifer. *Ground Water* 40(6): 586-598.
- [141] Frind, E.O., Molson, J.W. and D.L. Rudolph. 2006. Well vulnerability: a quantitative approach for source water protection. *Ground Water* 44(5): 732-742.
- [142] Cornaton, F.J. 2004. *Deterministic models of groundwater age, life expectancy and transit time distributions in advective-dispersive systems*. Ph. D. thesis, University of Neuchâtel, Switzerland.
- [143] Varni, M, and J. Carrera. 1998. Simulation of groundwater age distributions. Water Resources Research 34(12): 3271-3281.
- [144] Harvey, C.F and S.M. Gorelick. 1995 Temporal moment generating equations: modeling transport and mass transfer in heterogeneous aquifers. *Water Resources Research* 31: 1895-1912.
- [145] Engdahl, N.B., McCallum, J.L. and A. Massoudieh. 2016. Transient age distributions in subsurface hydrologic systems. *Journal of Hydrology* 543: 88-100.
- [146] Engdahl, N.B. 2017. Transient effects on confined groundwater age distributions: Considering the necessity of time-dependent simulations. *Water Resources Research* 53: 7332-7348.
- [147] de Dreuzy, J.R. and T.R. Ginn. 2016. Residence times in subsurface hydrological systems, introduction to the Special Issue. *Journal of Hydrology* 543: 1-6.
- [148] Ginn, T.R. 1999. On the distribution of multicomponent mixtures over generalized exposure time in subsurface flow and reactive transport: foundations, and formulations for groundwater age, chemical heterogeneity, and biodegradation. *Water Resources Research* 35(5): 1395-1407.
- [149] Solder, J.E., Stolp, B.J., Heiweil, V.M. and D.D. Susong. 2016. Characterization of mean transit time at large springs in the Upper Colorado River Basin, USA: a tool for assessing groundwater discharge vulnerability. *Hydrogeology Journal* 24: 2017-2033.
- [150] Batlle-Aguilar, J., Banks, E.W., Batelaan, O., Kipfer, R., Brennwald, M.S. and P.G. Cook. 2017. Groundwater residence time and aquifer recharge in multi-

9.2 Pressions capillaires



Figure 9.1 – Vue schématique microscopique de la distribution spatiale de l'eau pour un milieu géologique poreux passant de l'état presque sec à presque saturé :
(a) de l'eau seulement dans les pores et interstices les plus étroits ; (b) un film d'eau autour des grains solides ; (c) un écoulement partiel localisé ; (d) un écoulement partiel continu.

de l'EVR qui est censée décrire avec précision la pression physique de l'eau dans tous les pores de l'EVR. La phase air étant supposée parfaitement continue et à la pression atmosphérique, la pression capillaire est exprimée par :

$$p_c(S_w) = p_c(\theta) = -p \tag{9.3}$$

En utilisant l'équation de Bernoulli (équation 4.16), on peut aussi l'écrire en fonction de la « hauteur de pression » (h_p) ou hauteur manométrique. La **hauteur d'eau capillaire** ou la **hauteur de succion** (h_c) est définie :

$$\psi = h_c = p_c / \rho g = -h_p = -p / \rho g = z - h$$
(9.4)

La pression capillaire est considérée comme une valeur non négative, mais lorsque la continuité entre le milieu saturé et partiellement saturé est prise en compte dans d'autres équations, la variable principale sera la pression d'eau (ou la hauteur manométrique) qui prend donc des valeurs négatives dans la zone vadose. En d'autres termes, plus la teneur en eau diminue, plus la pression capillaire augmente et plus la hauteur manométrique devient négative [2]. Cette pression d'eau négative pourrait être interprétée comme la pression nécessaire pour extraire l'eau du milieu partiellement saturé. Cette pression négative peut être mesurée à l'aide de **tensiomètres** généralement constitués d'un tube rempli d'eau avec une coupelle en céramique poreuse à une extrémité. Un vide partiel peut être créé dans le tube à l'aide d'une pompe manuelle pour soustraire l'air. L'eau dans le tube est expulsée par les conditions de pression régnant dans le milieu partiellement saturé, ce qui augmente le vide à l'intérieur du tube et qui est mesuré par le capteur de pression. Au bout d'un certain temps, la pres-sion d'eau dans le tensiomètre est considérée comme étant en équilibre avec la pression régnant dans le milieu non saturé.

Pour un milieu géologique donné, il est important d'obtenir de l'information sur les **courbes de rétention d'eau** (i.e. équivalentes aux courbes de pression capillaire (ou de hauteur de succion) - teneur en eau (ou humidité)) (figure 9.2) ou, à l'inverse, à la courbe de pression capillaire (ou hauteur de succion) - saturation.

9 Écoulement et transport en milieu partiellement saturé



Figure 9.2 – Courbes de rétention schématiques typiques (i.e. courbe de pression capillaire) pour des milieux poreux mal trié et bien trié.

Des courbes typiques sont illustrées à la figure 9.2 pour des milieux poreux mal trié et bien trié. En conditions saturées, la teneur en eau maximum est atteinte et considérée égale à la porosité totale $\theta = \theta_s = n$ et $S = S_{ma} = x_s$ 1, négligeant l'air piégé. Au fur et à mesure que la succion augmente, la teneur en eau reste proche de la saturation totale. Pour obtenir une désaturation significative, une augmentation de la succion au-dessus d'une valeur seuil est nécessaire. Ce seuil de pression est appelé **pression d'entrée d'air** et dépend de la taille des pores. Dans un profil vertical du milieu, ces conditions se produisent dans la **frange capillaire** (cf. chapitre 2). Ensuite, la désaturation effective correspond au drainage du milieu dans des conditions de succion croissante (i.e. une diminution de la pression d'eau), et ce drainage est plus rapide pour les pores de grandes dimensions que pour les pores étroits. Pour des valeurs de succion plus élevées, la dérivée de la courbe de rétention tend vers l'infini (i.e. ligne asymptotique verticale). Par conséquent, une augmentation supplémentaire de la succion ne modifie pas de manière significative la **teneur en eau résiduelle** (θ_r), correspondant à la **saturation résiduelle** (S_r).

Pour des raisons pratiques, la teneur en eau et la saturation en eau sont souvent normalisées par rapport à leur plage de variation totale dans le milieu considéré :

$$\Theta = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \tag{9.5}$$

9.4 Contamination et transport en conditions partiellement saturées

où tous les termes sont en kg/m³s [ML⁻³T⁻¹]. Cette équation est similaire à l'équation 8.54, à l'exception que θ_m a remplacé n_m . Maintenant, pour l'eau immobile, l'équation 8.53 de-vient (i.e., en tenant compte de la diffusion et de la dégradation dans l'eau immobile) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_{im}C_{im}^{\nu}) = f_m^{im} - \lambda\theta_{im}C_{im}^{\nu}$$
(9.23)

où $f_m^{im} = \alpha_d^m (C^v - C_{im}^v)$ (équation 8.52).

Ces équations (9.22 et 9.23) peuvent être écrites pour le transport 1D vertical de solutés dans une zone partiellement saturée :

$$R\frac{\partial C^{\nu}}{\partial t} = -\frac{q_z}{\theta_m}\frac{\partial C^{\nu}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta_m D_{h_m}(\theta_m)\frac{\partial C^{\nu}}{\partial z}\right) - R\lambda C^{\nu} -\alpha_d^m (C^{\nu} - C_{im}^{\nu}) - \frac{q_s}{\theta_m}(C^{\nu} - C_s^{\nu})$$
(9.24)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_{im}C_{im}^{\nu}) = \alpha_d^m(C^{\nu} - C_{im}^{\nu}) - \lambda\theta_{im}C_{im}^{\nu}$$
(9.25)

où les indices m et im se réfèrent à l'eau mobile et à l'eau immobile.

9.4.2 Contamination et écoulement multiphasique

La présente discussion se limitera au cas d'une contamination en zone non saturée par un produit *NAPL*, de sorte que trois phases occupent le volume poreux : l'air, l'eau et le *NAPL*. Les mêmes principes (en termes de pressions capillaires et de phases mouillantes) que ceux décrits ci-dessus (section 9.2) sont applicables à ce système à trois phases : une phase mouillante, une phase de mouillabilité intermédiaire et une phase non mouillante. Dans la plupart des cas, l'eau est le liquide le plus mouillant, et le *NAPL* et l'air sont considérés comme les liquides non mouillants (figure 9.5). Les saturations de ces trois phases, décrivant leur abondance relative dans le volume poreux, sont liées par la relation :

$$S_w + S_a + S_{NAPL} = 1 \tag{9.26}$$

Comme décrit précédemment (section 8.3), les mouvements du produit *NAPL* dépendent fortement de sa densité. Un *DNAPL* (*Dense Non-Aqueous Phase Liquid*) est plus dense que l'eau et a tendance à couler dans le milieu poreux saturé et la zone partiellement saturée. Un *LNAPL* (*Light Non-Aqueous Phase Liquid*) est plus léger que l'eau et a tendance à flotter au-dessus de la zone saturée. La plupart des combustibles hydrocarbonés peuvent être considérés comme des *LNAPL*, tandis que la plupart des hydrocarbures chlorés sont des *DNAPL* [23].

Sauf lorsqu'un produit *NAPL* n'est présent que de façon très sporadique à très faible saturation, cette phase est considérée (comme les autres phases) comme un continuum à travers les multiples pores/fractures du milieu. La prédiction des différents écoulements de fluides devient difficile [24], et les approches simplificatrices (qui dépassent le

lique importante et flux important d'eau souterraine), un important flux thermique est transporté par les eaux souterraines. Les conditions hydrogéologiques propres au site, et donc le flux d'eau souterraine, sont parmi les principaux facteurs pour évaluer l'efficacité et l'impact [55].

11.3.3 Systèmes géothermiques peu profonds ouverts

Les systèmes ouverts (*ATES*) sont caractérisés par l'utilisation directe des eaux souterraines comme fluide caloporteur. Ils sont classiquement utilisés avec des doublets de puits de pompage et de réinjection des eaux souterraines pour le chauffage et la climatisation/refroidissement saisonniers (*geocooling*). Les contextes hydrogéologiques idéaux impliquent (figure 11.5) une conductivité hydraulique élevée avec un gradient piézométrique faible pour limiter les flux d'eaux souterraines, et par conséquent le déplacement du panache de différence de température dans l'aquifère. L'emplacement du doublet de puits peut être optimisé en fonction des opérations d'injection/pompage et de la période de variation considérée (i.e. le plus souvent saisonnière) pour maintenir un bilan énergétique équilibré.

Idéalement, un système ATES devrait perdre le moins d'énergie thermique possible via le panache de différence de température en aval, car cela peut induire des effets secondaires sur les écosystèmes dépendant des eaux souterraines. En particulier, dans les zones urbaines, la surexploitation et l'utilisation potentiellement conflictuelle des ressources thermiques et des eaux souterraines peuvent rapidement devenir délicates, et donc doivent être étudiées de manière détaillée et intégrée. Ces études doivent être basées sur une compréhension approfondie du système souterrain et sur des données fiables pour les valeurs des paramètres principaux et leur hétérogénéité [57]. De nouvelles recherches sur des techniques de caractérisation efficaces sont en cours ([58], [59], [60], [8], [25] entre autres) et impliquent, par exemple, différentes techniques hydrogéophysiques combinées à des tests de traçages impliquant des solutés et de la chaleur (figure 11.7). Par exemple, pour évaluer le potentiel d'un système ATES saisonnier dans un aquifère sableux peu profond de la région bruxelloise (Belgique), il a été conclu [61] qu'avec une conductivité hydraulique (K) supérieure à 1×10^{-4} (m/s), une vitesse de l'eau souterraine (y) inférieure à 5×10^{-4} (m/s) est requise pour que les conditions soient favo-rables. Il faut également pomper les eaux souterraines que dans la zone au-dessus ou alors en dessous du front d'oxydo-réduction existant au sein de l'aquifère pour éviter le colmatage dû aux précipitations de Fe(OH)₃. Évidemment chaque situation étant spé-cifique, les valeurs seuils citées ci-dessus dépendent fortement de la demande de puis-sance considérée et des conditions propres au site.

Il est parfois ardu de prévoir l'efficacité des systèmes *ATES*, notamment en ce qui concerne un bilan thermique neutre dans l'aquifère. Le flux de chaleur extrait devrait être équilibré sur une base annuelle, principalement par le flux thermique transporté par les eaux souterraines. Les conditions hydrogéologiques spécifiques à un site sont donc le principal facteur d'évaluation de l'efficacité et des impacts d'un système géothermique *ATES*, et ce dans une mesure encore plus grande que pour un système *BTES*. Lors de l'évaluation d'un système ouvert *ATES*, des variations à court terme du stockage et de la récupération d'énergie (c'est-à-dire avec des périodes de temps plus courtes que les changements saisonniers) peuvent également être considérées. Par exemple, un système *ATES* pourrait être envisagé pour le stockage et la

12.3 Conditions initiales et conditions aux limites



Figure 12.11 – Exemples de conditions de Cauchy ou de 3^e type et mise en évidence des problèmes liés à ces conditions dans certaines circonstances.

vation sont collectées, chacune d'entre elles caractérisée par une distance (entre les deux points d'observation) et une direction [132]. Si on considère que la variable Y prend une valeur en chaque point de coordonnées généralisées x, une quantification de la corrélation spatiale est exprimée par le **variogramme**, défini comme la moitié de la variance de la différence de valeur entre deux points situés à une distance d l'un de l'autre :

$$\gamma(\boldsymbol{d}) = \frac{1}{2} Var \big[Y(\boldsymbol{x}) - Y(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{d}) \big] = \frac{1}{2} E \Big[\big(Y(\boldsymbol{x}) - Y(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{d}) \big)^2 \Big]$$
(12.53)

Cette expression mesure en fait le « degré de dissimilitude » entre les valeurs ponctuelles, les points étant considérés par paires. Il s'agit d'une approche bi-variée.

La fonction de **covariance** *C*(*d*) est définie par :

$$C(\boldsymbol{d}) = E\left[\left(Y(\boldsymbol{x}) - m\right)\left(Y(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{d}) - m\right)\right]$$
(12.54)

où *m* est la moyenne ou espérance mathématique des mesures $E[Y(\mathbf{x})] = E[Y(\mathbf{x} + \mathbf{d})]$. Si $|\mathbf{d}| = \mathbf{0}$ alors la covariance est égale à la variance $Var(Y) = E[(Y(\mathbf{x}) - m)^2]$. En utilisant l'équation 12.54, l'équation 12.53 peut être écrite :

$$\gamma(\boldsymbol{d}) = Var(\boldsymbol{Y}) - C(\boldsymbol{d}) \tag{12.55}$$

Notons que, contrairement à la variance, la covariance contient des informations sur la corrélation spatiale. En pratique, le variogramme, tel qu'exprimé dans l'équation 12.53, est estimé sur la base de toutes les données disponibles avec le **variogramme expéri**mental :

Estimation de
$$\gamma(\boldsymbol{d}) = \frac{1}{2n(\boldsymbol{d})} \sum_{i=1}^{n(\boldsymbol{d})} \left[y(\boldsymbol{x}_i) - y(\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{d}) \right]^2$$
 (12.56)

où n (d) est le nombre de paires trouvées pour une distance (lag) d, $y(x_i)$ est la donnée mesurée au point de coordonnées x_i . Comme les données d'observation sont distribuées de façon irrégulière, la valeur du variogramme expérimental est approximative pour différentes plages de distance. Un variogramme théorique est ensuite ajusté au variogramme expérimental, ce qui permet d'évaluer le variogramme pour toutes les distances possibles. Un variogramme montre les principales caractéristiques suivantes (figure 12.21) :

- la longueur de corrélation, également appelée *range*, est la distance à laquelle on s'attend à ne plus observer la moindre corrélation : dans le variogramme, cela correspond à la distance à laquelle un plateau est atteint (le cas échéant);
- le seuil (*sill*) est la valeur du variogramme pour ce plateau (s'il existe), dans ce cas, il peut être considéré comme égal à la variance des valeurs de l'échantillon puisque la covariance *C*(*d*) devient nulle dans l'équation 12.55 ;
- l'effet de pépite explique le fait que pour une petite distance *d* un saut est souvent observé dans les variogrammes expérimentaux, alors que théoriquement la valeur du variogramme à *d* = 0 est nulle.