

Formation en modélisation hydrogéologique Modélisation du transport de contaminants en solution

Formation professionnelle dispensée à
l'Université de Liège
04 - 15 septembre 2023

Prof A. Dassargues
Université de Liège, Département ArGEnCo
Geo³-Hydrogéologie et Géologie de l'Environnement



Modélisation du transport de produits dissous dans l'eau souterraine

- Différents types de concentrations
- Différents processus de transport et équations
 - * Transport par diffusion
 - * Transport par advection/convection
 - * Transport par dispersion
 - * Equation d'advection-dispersion: remarque
 - * Adsorption-désorption
 - * Dégradation
 - * Effet d'eau immobile
- Equations de transport
 - * Diffusion seule
 - * Advection seule
 - * Advection - dispersion
 - * Advection, dispersion et diffusion

Modélisation du transport de produits dissous dans l'eau souterraine

- Conditions aux frontières des modèles pour le transport de solutés
 - * Conditions de Dirichlet
 - * Conditions de Neumann
 - * Conditions mixtes
- Résolution des équations de transport
 - * Introduction
 - * Nombres de Peclet et de Courant
 - * Approche eulérienne
 - * Approche Eulérienne-Lagrangienne
 - * Méthodes des caractéristiques

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

3

Différents types de concentrations en polluant

➡ ... la concentration 'massique' ('massic concentration'):

$$C_i = \frac{m_i}{m_i + m_w}$$

pour le $i^{\text{ème}}$ polluant (-) ← m_i ← masse du $i^{\text{ème}}$ polluant (kg)
 ← $m_i + m_w$ ← masse de l'eau souterraine (kg)

➡

$$\begin{aligned} 1 \text{ ppm} &= 1 \text{ mg/kg} \\ 1 \text{ ppb} &= 1 \text{ } \mu\text{g/kg} \end{aligned}$$

... si le polluant n'a pas d'influence sur la masse du solvant alors on peut parler d'un produit dissous idéal (ou d'un traceur idéal) et :

➡ $C_i \cong \frac{m_i}{m_w} = \frac{m_i}{\rho \cdot V_w} = \frac{1}{\rho} \cdot C_i^v$ ← la concentration 'volumique' du $i^{\text{ème}}$ polluant (kg/m^3)

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

4

Différents types de concentrations en polluant

➔ ... la concentration 'volumique' ('volumic concentration'):

$$\rho C_i \cong \rho \frac{m_i}{m_w} = C_i^v \quad \rightarrow \quad \begin{matrix} \text{mg/l} \\ \mu\text{g/l} \end{matrix}$$

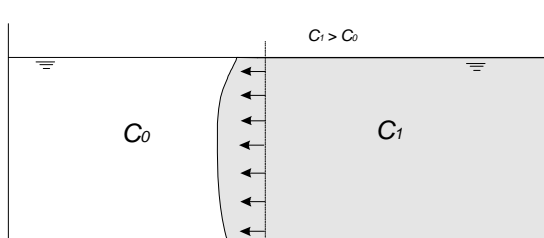
➔ ... quand ce n'est pas le cas :

$$\rho(C_i) C_i = \left[\rho(C_i) \frac{m_i}{m_w} = C_i^v \right]$$

Processus de transport

Transport par diffusion

➔ ... masse de substance dissoute allant des hautes concentrations vers les basses concentrations:



➔ loi de Fick

$$\begin{aligned} f_m &= -d_m \text{grad } C^v \\ &= -d_m \nabla C^v \end{aligned}$$

le flux massique de diffusion moléculaire par unité de surface (kg/(m².s))

le coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau (m²/s)

Transport par diffusion

- ➡ ■ processus isotrope (!)
- indépendant du mouvement de l'eau

la valeur de d_m dans l'eau : $1.10^{-9} - 2.10^{-9}$ (m²/s)

... dans un EVR ➡ 'coefficient de diffusion moléculaire effectif'

$$D_m = T \cdot d_m$$

$$f_m = -nD_m \text{grad } C^v = -nD_m \nabla C^v$$

$$f_m = -nD_m \text{grad}(\rho C) = -nD_m \nabla(\rho C)$$

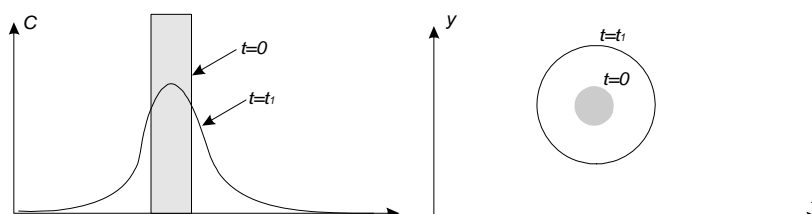
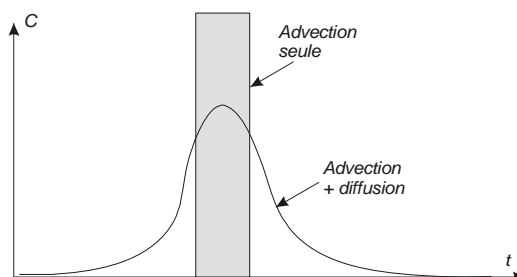
coefficient de 'tortuosité' du milieu poreux ('tortuosity coefficient') qui dépend de la 'résistance' du milieu par rapport au processus de diffusion

... est-ce un tenseur ?

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

7

Transport par diffusion



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

8

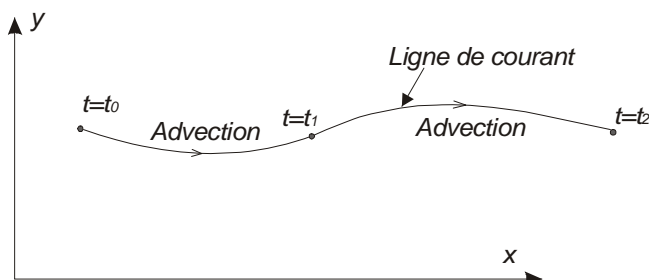
Transport par advection/convection

➡ ... mouvement de la substance dissoute à la même vitesse que l'eau = vitesse effective de l'eau souterraine

le flux massique d'advection par unité de surface ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$)

$$\begin{aligned} \rightarrow f_a &= q\rho C \\ f_a &= qC^v \end{aligned}$$

$$f_a = -K \cdot \nabla h C^v = -K \cdot \nabla h (\rho C)$$



$$v_a = q/n_{m\leftarrow} \text{ porosité effective de transport (-)}$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

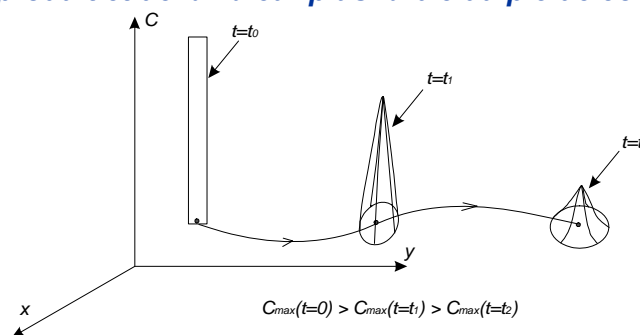
9

Transport par advection/convection

➡ ... si on injecte un traceur dans un champ de vitesse d'écoulement uniforme, la diffusion s'exerce dans toutes les directions

➡ le pic de concentration se déplace à la vitesse effective de l'eau

➡ la diffusion est seule responsable de l'étalement du produit et de la valeur plus faible du pic de concentration



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

10

Transport par dispersion

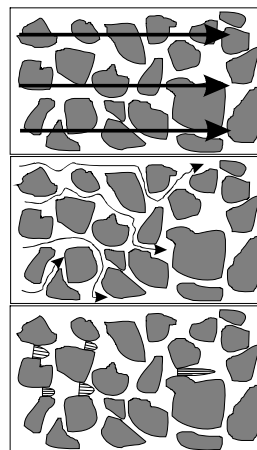
... lors de l'écoulement, les particules d'eau et de produit dissous peuvent s'éloigner de plus en plus les unes des autres par :

- différences de vitesses
- contournement des grains

➡ ce processus de dispersion existe parce que le trajet advectif (décrit par la théorie des EVR, macroscopique) n'est seulement qu'un trajet moyen des trajets microscopiques

➡ quels sont ces trajets à l'échelle microscopique ?

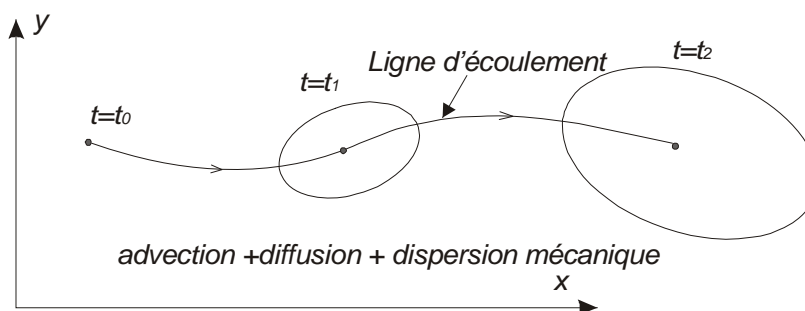
... pas important si ce n'est que cela contribue à la dispersion globale ou 'macrodispersion' dans le milieu



11

Transport par dispersion

- dispersion dans la direction de l'écoulement (dispersion longitudinale)
- dispersion orthogonale à la direction de l'écoulement (dispersion transversale)
- la dispersion longitudinale est supérieure à la transversale



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

12

Transport par dispersion

- ➔ ... le flux massique de dispersion traduit l'étalement du produit dissous autour de la position advective moyenne
- ➔ la présence d'hétérogénéités de grande échelle crée une augmentation de la dispersion
- ➔ dépendance de la dispersion par rapport à l'échelle
- ➔ processus anisotrope (même en milieu isotrope)

Transport par dispersion

... le flux massique de dispersion a été décrit par de nombreux auteurs en utilisant une loi de Fick :

$$f_d = -n_m \mathbf{D} \cdot \text{grad}(\rho C) = -n_m \mathbf{D} \cdot \nabla(\rho C)$$

$$f_d = -n_m \mathbf{D} \cdot \text{grad} C^v = -n_m \mathbf{D} \cdot \nabla C^v$$

tenseur de dispersion
mécanique (m²/s)

... l'équation qui est utilisée pour tenir compte de la dispersion dans un milieu isotrope :

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

dispersivité longitudinale (m)

dispersivité transversale (m)

norme de v_a

Transport par dispersion

➡ ... le tenseur D est donc dépendant de la vitesse d'advection

... dans des champs de vitesses d'écoulement uniformes et avec un 'référentiel de Frenet' (un des axes est parallèle au vecteur de la vitesse d'écoulement)

➡ une relation linéaire entre D et v_a

$$D = \begin{bmatrix} D_{xx} & & \\ & D_{yy} & \\ & & D_{zz} \end{bmatrix}$$

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

Transport par dispersion

➡ ... anisotropie du processus qui peut se superposer à l'anisotropie du milieu (en tenant compte ou pas des directions principales d'anisotropie)

➡ sans être parallèle aux axes principaux d'anisotropie :

$$D_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{m=1}^3 a_{ijklm} \frac{v_{a_k} v_{a_m}}{|v_a|}$$

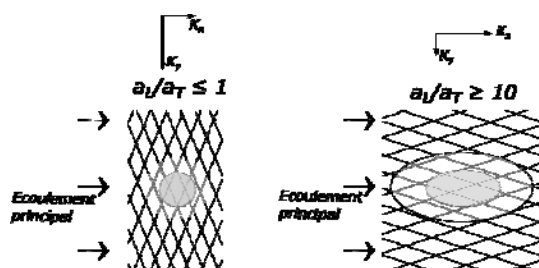
les 81 composantes de dispersivité d'un tenseur du 4^{ème} ordre

i, j indices des directions principales d'anisotropie du processus

k, m indices des directions principales d'anisotropie du milieu

Transport par dispersion

- ➔ ... en pratique, il est très difficile de déterminer des dispersivités longitudinales et latérales
- ➔ dans la plupart des cas: $3 \leq \frac{a_L}{a_T} \leq 10$
- ➔ ... dans le cas où ce rapport est inférieur à 3 ou supérieur à 10 (sur base d'essais de laboratoire et d'essais de traçage)
 - ➔ anisotropie du milieu poreux ou fissuré



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

17

Transport par dispersion

diffusion + dispersion mécanique = dispersion 'hydrodynamique'

$$f_h = -n_m(D_h) \cdot \text{grad } C^v = -n_m(D_h) \cdot \nabla C^v$$

$$f_h = -n_m(D_h) \cdot \text{grad } (\rho C) = -n_m(D_h) \cdot \nabla (\rho C)$$

➔ $D_h = D + D_m = D + D_m I$
 ↙ tenseur de dispersion hydrodynamique (m^2/s)

n_m a remplacé n pour la composante de diffusion, ce qui implique que la diffusion serait négligée dans l'eau immobile du milieu (cette hypothèse sera discutée plus loin dans la section sur l'effet d'eau immobile et cette 'diffusion matricielle')

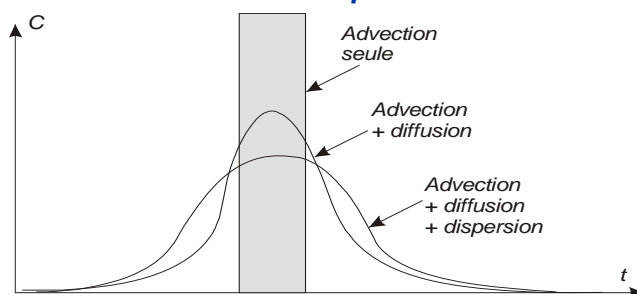
Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

18

Transport par dispersion

si on injecte un traceur dans un champ de vitesse d'écoulement uniforme, la dispersion s'exerce dans les directions longitudinale et transversale par rapport à la direction de l'écoulement

➡ l'effet sur une courbe de restitution ('breakthrough curve') en un point du milieu se traduit par une augmentation moins abrupte de la concentration en fonction du temps



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

19

Advection-dispersion : remarque

... équation du bilan en masse de polluant pour le transport par advection-dispersion:

➡
$$n_m \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\text{div}(f_a + f_h) = -\nabla \cdot (f_a + f_h)$$

➡
$$n_m \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\text{div}(qC^v - n_m(D_h) \cdot \text{grad } C^v) = -\nabla \cdot (qC^v - n_m(D_h) \cdot \nabla C^v)$$

en 1D (direction supposée de l'écoulement uniforme):

$$\frac{\partial C^v}{\partial t} = -v_a \frac{\partial C^v}{\partial x} + a_L v_a \frac{\partial^2 C^v}{\partial x^2} \quad \text{cond. aux limites:}$$

Injection instantanée et ponctuelle en $x = 0$

Solution analytique :

$$C^v(x, t) = \frac{C_0^v}{2} \text{erfc} \left[\frac{x - v_a t}{\sqrt{4a_L v_a t}} \right]$$

$$C^v(x, t) = \frac{C_0^v}{\sqrt{4\pi a_L v_a t}} \exp \left[-\frac{(x - v_a t)^2}{4a_L v_a t} \right]$$

(Ogata and Banks 1961)

dispersion 'Gaussienne' avec: $\begin{cases} \mu \leftrightarrow v_a t \\ \sigma^2 \leftrightarrow 2a_L v_a t \end{cases}$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

20

Advection-dispersion : remarque

... il n'est pas possible de décrire avec précision et rigueur les limites exactes des zones polluées

➡ *il est malaisé de déterminer des temps d'arrivée*

la cause en est que la solution exacte à cette équation d'advection-dispersion est une courbe de Gauss (distribution statistique de loi normale)

... cela implique que des particules de polluant pourraient arriver en un temps infiniment petit à une certaine distance de la source de contamination ➡ *physiquement non réaliste !!!*

➡ *choix conventionnel d':*

- *une concentration minimum*
- *une masse injectée*

Adsorption-désorption

➡ *... la substance dissoute peut:*

- *donner lieu à des échanges cationiques*
- *précipiter et se dissoudre*
- *subir des processus d'oxydation et de réduction*
- *subir des réactions biologiques aérobie et/ ou anaérobie*

➡ *adsorptions 'chimique et biologique' à hautes températures (principalement irréversible)*

➡ *adsorptions 'physiques' à basses températures (principalement réversible)*

- ➡
- *dépendance par rapport à la température*
 - *la quantité de substance adsorbée à la surface des grains du milieu est fonction de la concentration dans la solution*

Adsorption-désorption

➔ ... en conditions isothermes dans l' EVR :

➔ relations d'équilibre

$$\bar{C} = K_d \cdot \rho \cdot C$$

la masse moyenne de polluant adsorbé par unité de masse de milieu sec (-), la 'concentration massique' à la surface des grains

concentration massique de produit dissous dans l'eau souterraine

le coefficient de partitionnement (m^3/kg)

K_d varie fort d'un type de milieu à un autre (valeurs supérieures pour les milieux argileux)

➔ les cations sont plus adsorbés que les anions
les cations bivalents sont plus adsorbés que les monovalents, ...

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

23

Adsorption-désorption

➔ ... autres relations isothermes et d'équilibres:

$$\bar{C} = b \cdot \rho \cdot C^m \quad (\text{Freundlich})$$

... coefficients et exposants à déterminer sur base de mesures et tests

$$\bar{C} = \frac{k_1 \cdot \rho \cdot C}{(1 + k_2 \cdot \rho \cdot C)} \quad (\text{Langmuir})$$

➔ ... relations isothermes mais de non-équilibre:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_3 \cdot \rho \cdot C \quad (\text{relation de déséquilibre de Langmuir})$$

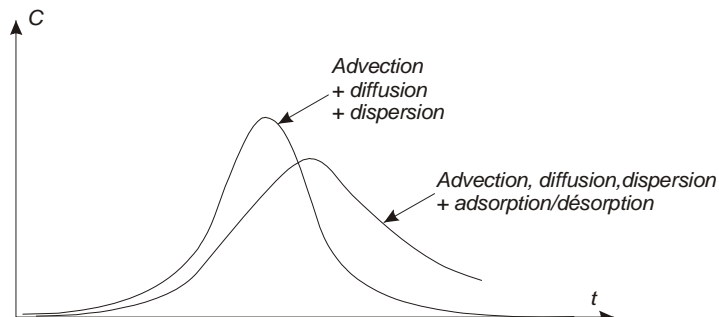
$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = k_r \cdot (k_4 \cdot C + k_5 - \bar{C}) \quad (\text{relation de déséquilibre de Lapidus})$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

24

Adsorption-désorption

➔ ... l'effet sur une courbe de restitution:



➔ ... on parle d'un 'facteur de retard' :

$$R = \left[1 + \left(\frac{\rho_b}{\theta} \right) \cdot K_d \right]$$

le taux d'humidité volumique du milieu ('water content in volume')

avec $\rho_b = \rho_s(1 - \theta)$ la densité sèche (partie sèche: 'bulk-density' du milieu (kg/m^3))

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

25

Adsorption-désorption

➔ ... l'effet sur l'équation de conservation du bilan de masse de soluté au sein de l'eau souterraine peut être exprimé par

$$-\rho_b \mathcal{R}_{w,s} \quad (\text{en } \text{kg}/\text{m}^3 \text{ s})$$

où $\mathcal{R}_{w,s}$ est le flux massique en $\text{kg}/(\text{kg s})$ de l'eau vers le solide

$$\rho_b = (1 - n)\rho_s = \text{'bulk-dry density' du milieu } (\text{kg}/\text{m}^3)$$

= masse du solide/ volume total

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

26

Dégradation

- ➔ ... des dizaines de réactions et parties de réactions
- ... conditions d'équilibre ou de non-équilibre
- ... des équilibres très différents localement, dépendant de la nature du milieu et de la vitesse d'écoulement

approximation grossière:

- disparition linéaire de la substance en solution
- disparition non-linéaire de la substance en solution

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda \cdot C$$

➔ constante de dégradation linéaire (s⁻¹)

coefficient de dégradation

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\Gamma \cdot (C)^m$$

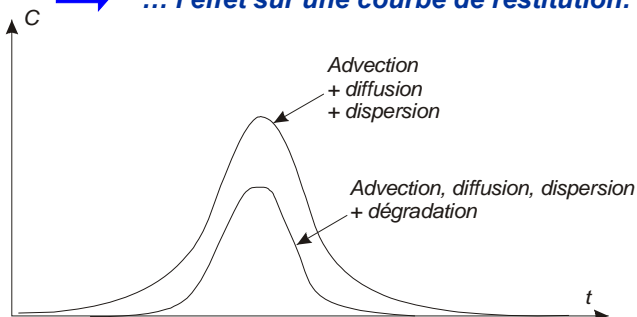
➔ l'exposant constant est dépendant de la stoechiométrie de la réaction

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

27

Dégradation

➔ ... l'effet sur une courbe de restitution:



... le terme de dégradation dans l'équation du bilan de masse de soluté au sein de l'eau souterraine:

$$-n\lambda\rho C \quad (\text{kg/m}^3\text{s})$$

la porosité totale n car la dégradation se produit aussi bien dans les eaux mobiles qu'immobles
le signe négatif car ce flux massique (de composé qui se dégrade) est soustrait de l'eau souterraine

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

28

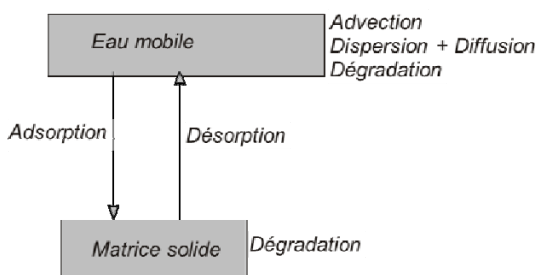
Equations de transport

➡ ... équation du bilan de masse de soluté au sein de l'eau souterraine :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_m C^v) = -\nabla \cdot f_a - \nabla \cdot f_d - \nabla \cdot f_m - \rho_b \mathcal{R}_{w,s} - n\lambda C^v + M^v$$

M^v est un terme d'apport (source) de masse de soluté extérieur (si > 0) ou de disparition (puits) (si < 0) en kg/m^3s

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_m C^v) = -\nabla \cdot (qC^v) + \nabla \cdot n_m (D \cdot \nabla C^v) + \nabla \cdot n (D_m \nabla C^v) - \rho_b \mathcal{R}_{w,s} - n\lambda C^v + M^v$$



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

29

Equations de transport

il est souvent supposé que la porosité totale n soit réduite à la porosité effective de transport n_m dans le flux massique de diffusion et pour la dégradation

➡ la diffusion et la dégradation ne sont considérées que dans l'eau mobile...

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_m C^v) = -\nabla \cdot n_m (v_a C^v) + \nabla \cdot n_m (D_h \cdot \nabla C^v) - \rho_b \mathcal{R}_{w,s} - n_m \lambda C^v + M^v$$

Adsorption-désorption et dégradation:

un bilan massique de soluté fixé sur la matrice solide est à considérer :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_b \bar{C}) = \rho_b \mathcal{R}_{w,s} - \lambda \rho_b \bar{C}$$

$$\rho_b \mathcal{R}_{w,s} = \lambda \rho_b K_d C^v + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_b K_d C^v) \dots \text{si adsorption linéaire}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_m C^v) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_b K_d C^v) = -\nabla \cdot n_m (v_a C^v) + \nabla \cdot n_m (D_h \cdot \nabla C^v) - \lambda \rho_b K_d C^v - n_m \lambda C^v + M^v$$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

30

Equations de transport

en divisant par n_m et en regroupant

$$\rightarrow \left(1 + \frac{\rho_b}{n_m} K_d\right) \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_a C^v) + \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - \left(1 + \frac{\rho_b}{n_m} K_d\right) \lambda C^v + \frac{M^v}{n_m}$$

→ le coefficient de retard est défini comme le facteur multipliant $\frac{\partial C^v}{\partial t}$

$$R = \left(1 + \frac{\rho_b}{n_m} K_d\right) \quad (\text{cfr slide 34})$$

$$\rightarrow R \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_a C^v) + \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - R \lambda C^v + \frac{M^v}{n_m}$$

Remarques:

- si (dans des couches de très faible perméabilité), la vitesse d'écoulement a été calculée en utilisant la porosité totale plutôt que la porosité effective de transport, on trouve une définition similaire du coefficient de retard en utilisant n à la place de n_m
- si on divise 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

Equations de transport

Discussion du terme source/puits:

$$\rightarrow M^v = q_s C_s^v$$

q_s est le flux volumique par unité de volume du milieu poreux (s^{-1})

vers ($q_s > 0$) ou en dehors ($q_s < 0$) de l'EVR considéré

C_s^v est la concentration associée à ce flux (kg/m^3)

→ si $q_s < 0$, automatiquement $C_s^v = C^v$ car l'eau souterraine sortante quitte le domaine avec une concentration égale à celle de l'EVR considéré

$$\rightarrow R \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_a C^v) + \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - R \lambda C^v + \frac{M^v}{n_m}$$

$$\nabla \cdot (v_a C^v) = C^v \nabla \cdot v_a + v_a \cdot \nabla C^v$$

si eau souterraine supposée incompressible (comme

précédemment), les seules variations internes (à l'EVR) de v_a ne

peuvent être due qu'à des sources ou puits internes: $C^v \nabla \cdot v_a = C^v q_s$

$$\rightarrow R \frac{\partial C^v}{\partial t} = -v_a \cdot \nabla C^v + \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - R \lambda C^v - \frac{q_s}{n_m} (C^v - C_s^v)$$

Equations de transport

$$R \frac{\partial C^v}{\partial t} = -v_a \cdot \nabla C^v + \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - R\lambda C^v - \frac{q_s}{n_m} (C^v - C_s^v)$$

Remarques : 1) si $C_s^v = C^v$ (eau souterraine sortante)

➔ le dernier terme égal à zéro, ce qui signifie qu'il n'affecte pas les concentrations

2) si une injection d'eau se produit avec une concentration inférieure à la concentration locale ($C_s^v < C^v$)

➔ on obtient une dilution des concentrations locales de soluté

3) Si une injection d'eau se produit avec une concentration supérieure à la concentration locale $C_s^v > C^v$, on obtient une augmentation locale dans le domaine (source de pollution)

Effet d'eau immobile

➔ ... une partie de l'eau souterraine n'est pas très mobile par rapport à l'eau très mobile dans le milieu poreux et/ou fissuré

➔ diffusion entre l'eau mobile et l'eau immobile

➔ relation linéaire:

$$f_m^{im} = \alpha_d^m (\rho C - \rho_{im} C_{im})$$

eau souterraine mobile

eau souterraine immobile

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

Effet d'eau immobile

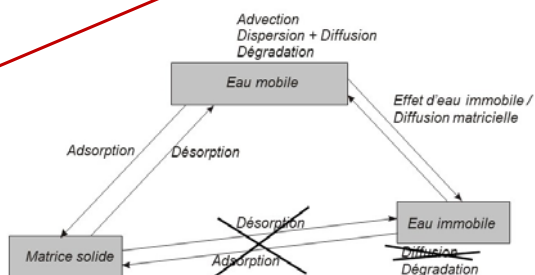
➔ diffusion entre l'eau mobile et l'eau immobile

➔ ... une équation de conservation de la masse de soluté dans l'eau immobile doit être considérée pour obtenir le gain ou la perte de masse de soluté dans l'eau mobile à chaque pas de temps

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_{im} C_{im}^v) = f_m^{im} - \lambda n_{im} C_{im}^v$$

en négligeant la diffusion dans l'eau immobile et l'adsorption-désorption entre l'eau immobile et la matrice solide

peut être ajouté à l'équation de conservation de soluté dans l'eau mobile



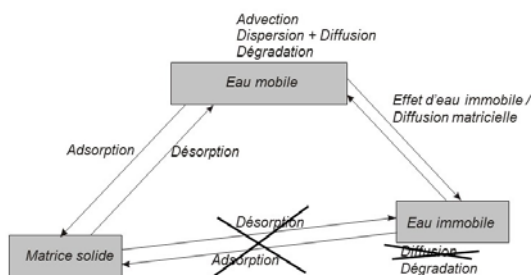
Effet d'eau immobile

➔ $\frac{\partial}{\partial t} (n_{im} C_{im}^v) = f_m^{im} - \lambda n_{im} C_{im}^v$

➔ $R \frac{\partial C^v}{\partial t}$

$$= -\mathbf{v}_a \cdot \nabla C^v + \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla C^v) - R\lambda C^v + f_m^{im} - \frac{q_s}{n_m} (C^v - C_s^v)$$

équation de conservation de soluté dans l'eau mobile



Effet d'eau immobile

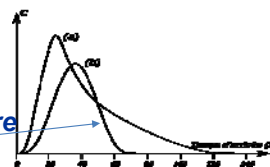
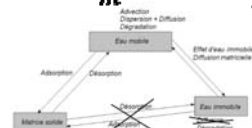
$$R \frac{\partial C^v}{\partial t} = -\mathbf{v}_a \cdot \nabla C^v + \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla C^v) - R\lambda C^v + f_m^{im} - \frac{q_s}{n_m} (C^v - C_s^v)$$

Remarques

- 1) solution couplée
- 2) dépend de ce que l'on définit comme étant de l'eau mobile et immobile dans le milieu géologique saturé

- 3) si on choisit une valeur plus élevée que la porosité effective de transport (e.g. semblable à la porosité de drainage), la vitesse d'advection calculée devient une vitesse moyenne sur l'EVR plus faible qui inclut une partie plus importante d'eau quasi-immobile

➔ le transport de soluté n'est alors décrit que par l'équation advection-dispersion-diffusion (ADE) sans représenter de manière adéquate les arrivées tardives de soluté de la courbe de restitution



Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

37

Transport réactif de soluté

- ... un terme supplémentaire dans l'équation de conservation
- ... mais une équation de conservation pour chaque soluté

$$R_i \frac{\partial C_i^v}{\partial t} = -\mathbf{v}_{a_i} \nabla C_i^v + \nabla \cdot (\mathbf{D}_h \cdot \nabla C_i^v) - R_i \lambda_i C_i^v - \frac{q_s}{\theta_i} (C_i^v - C_{s_i}^v) + \frac{1}{\theta_i} \sum_{j=1}^{N_s} S_{ij} (C_1^v, \dots, C_n^v)$$

$$i = 1, \dots, N_s$$

où S_{ij} est le terme de source/puits représentant l'effet des réactions ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$)

θ_i est la fraction volumique spécifique de l'eau souterraine de l'EVR où se trouve le composé i

Il y a autant d'équations que de composés considérés dans le système de réaction : N_s , qui sont couplées par les termes $S_{ij}(C_1^v, \dots, C_n^v)$

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

38

Conditions aux frontières pour le transport

Par analogie complète avec le problème d'écoulement, il existe trois types de conditions aux frontières qui peuvent être imposées pour un problème de transport de polluant dissous dans les eaux souterraines:

- **concentration imposée (condition de Dirichlet)**
- **dérivée première de la concentration imposée (condition de Neumann)**
- **relation imposée entre la concentration et sa dérivée première (condition de Cauchy)**

Concentration imposée (condition de Dirichlet)

La concentration est spécifiée sur la frontière:

$$C(x, y, z, t) = g'(x, y, z, t)$$

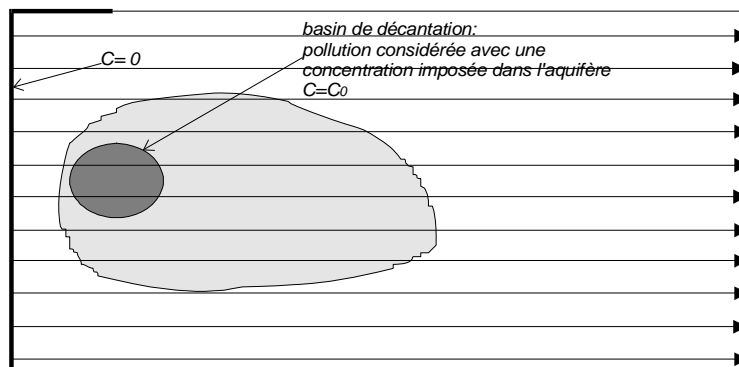
g' peut varier dans l'espace et le temps (une valeur par nœud concerné et par pas de temps)

Dans certains cas, une concentration non nulle peut être utilisée pour simuler une pollution continue (de longue durée) Cependant, pour des raisons numériques, ce type de spécification induit une dispersion numérique (artificielle) importante

➡ un gradient important en concentration est calculé engendrant automatiquement une dispersion artificielle

Concentration imposée (2)

Un cas classique de ce type de condition consiste à imposer une concentration nulle sur la frontière concernée:



→ il est dangereux d'utiliser une condition aux frontières de ce genre lorsque de grandes variations de C sont à prévoir en réponse à des sollicitations importantes (pollutions, etc.)

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

41

Dérivée première de la concentration imposée (condition de Neumann)

La dérivée première de la concentration est spécifiée sur la frontière concernée:

$$\frac{\partial C}{\partial n}(x, y, z, t) = g''(x, y, z, t)$$

g'' le gradient de concentration normal à la frontière concernée, peut varier dans l'espace et le temps (une valeur par nœud concerné et par pas de temps)

→ ... une manière de spécifier le flux massique de diffusion-dispersion (dispersion hydrodynamique) sur la frontière:

En pratique, ce type de condition est utilisé le plus souvent avec une valeur nulle pour le flux massique de diffusion-dispersion à travers la frontière: $g''=0$

→ la composante advective du flux massique est calculée sur la frontière

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

42

Dérivée première de la concentration imposée (2)

... imposer le flux massique de diffusion-dispersion à travers la frontière:

$$\underline{n} \cdot (-n_e \cdot \rho \cdot \underline{D}_h \cdot \underline{\text{grad}} C) = q''_{m,n}(x, y, z, t)$$

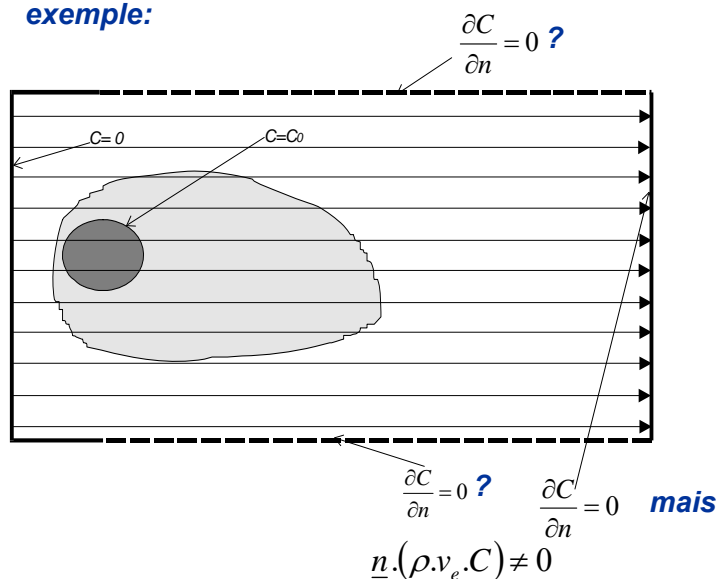
$$-n_e \cdot \rho \cdot D_{h,n} \cdot \frac{\partial C}{\partial n}(x, y, z, t) = q''_{m,n}(x, y, z, t)$$

$q''_{m,n}$ flux massique de diffusion-dispersion imposé sur la frontière concernée ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$)

$D_{h,n}$ composante normale à la frontière du tenseur de dispersion hydrodynamique

Dérivée première de la concentration imposée (3)

exemple:



Relation imposée entre la concentration et sa dérivée première (condition de Cauchy)

Une combinaison (relation linéaire) de la concentration et de sa dérivée première est spécifiée sur la frontière concernée:

$$a \cdot \frac{\partial C}{\partial n}(x, y, z, t) + b \cdot C(x, y, z, t) = g'''(x, y, z, t)$$

g''' **peut varier dans l'espace et le temps**
(une valeur par nœud concerné et par pas de temps)

 **une combinaison des flux massiques d'advection et de diffusion-dispersion est imposée**

Relation imposée entre la concentration et sa dérivée première (2)

advection + diffusion-dispersion :

$$\underline{n} \cdot (\underline{\rho} \cdot \underline{v}_e \cdot C - n_e \cdot \underline{\rho} \cdot \underline{D}_{h,n} \cdot \underline{\text{grad}} C) = q'''_{m,n}(x, y, z, t)$$

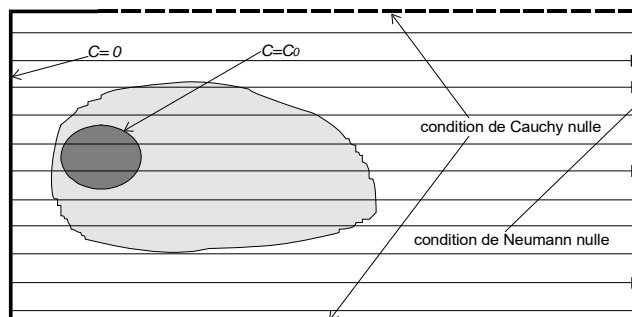
$$\underline{\rho} \cdot \underline{v}_{e,n} \cdot C(x, y, z, t) - n_e \cdot D_{h,n} \cdot \frac{\partial C}{\partial n}(x, y, z, t) = q'''_{m,n}(x, y, z, t)$$

$q'''_{m,n}$ **flux massique total imposé (advection + diffusion-dispersion) normal à la frontière concernée (kg/(m².s))**

... principalement utilisée pour imposer un flux massique total nul sur une frontière:

$$g'''=0$$

Relation imposée entre la concentration et sa dérivée première (3)



... équivalent à une condition d'écoulement à flux nul associée à une condition de transport de Neumann nulle: pas de flux advectif ni de flux de diffusion-dispersion

➔ convient parfaitement pour une frontière imperméable.

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2023

47

Résolution numérique des équations de transport

... jamais simple

➔ Dérivées partielles du 1^{er} et 2nd ordre dans la même équation (parabolique, elliptique et hyperbolique)

- ➔
 - dispersion numérique
 - oscillations
 - plus de mémoire
 - plus de CPU

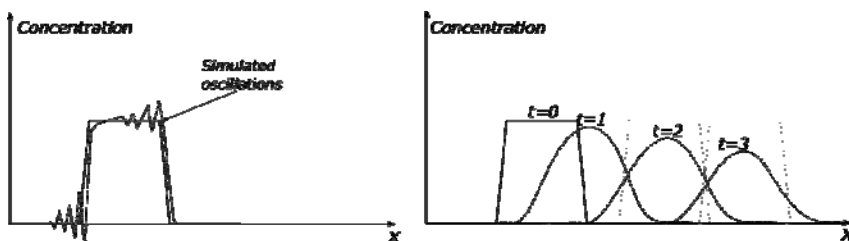
- Introduction
- Nombres de Pe et Cr
- Méthodes Euleriennes
- Méthodes Euleriennes-Lagrangiennes

Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

48

Introduction

... modélisation du transport → très exposée à des erreurs et imprécisions numériques



→ ... développement de beaucoup de méthodes différentes

Techniques de résolution

... en utilisant les méthodes classiques, des problèmes numériques apparaissent, lorsque le terme d'advection n'est pas négligeable !

→ ... les principes généraux des techniques de résolution basés essentiellement sur la méthode des différences finies sont décrits ci-après. Beaucoup de ces méthodes ou tout au moins les principes sont identiques pour les méthodes basées sur les éléments finis

- approche 'Eulérienne' ... avec décentrage amont
- approche 'Lagrangienne'
- approche mixte 'Eulérienne-Lagrangienne'

Nombres adimensionnels de Peclet et Courant

- *Peclet* = rapport entre advection et dispersion

$$Pe = \frac{v_a \Delta x}{D}$$

→ simplifié en $Pe = \frac{v_{ax} \Delta x}{a_L v_{ax}} = \frac{\Delta x}{a_L}$

$\Delta x < 2a_L$ pour éviter les oscillations

(Price et al. 1966)

- *Courant* = rapport entre trajet advectif durant un pas de temps et la dimension des cellules

$$Cr = \frac{v_a \Delta t}{\Delta x}$$

- → $Cr < 1$ permet de transférer de l'information d'une cellule à la suivante sans perdre de l'information

(Daus and Frind 1985, Rausch et al. 2005)

Méthode des différences finies avec décentrage amont (approche Eulérienne)

... méthodes Eulériennes ne sont pas applicables pour :

$$Pe \geq 1 \quad \text{et} \quad Cr \geq 1$$

- beaucoup de problèmes numériques
- un décentrage amont pour éviter la dispersion numérique et les oscillations:

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx (1 - \alpha) \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x} + \alpha \frac{C(x - \Delta x) - C(x)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{(1 - \alpha)C(x + \Delta x) - C(x) + \alpha C(x - \Delta x)}{\Delta x}$$

avec $\alpha \in [0, 1]$ le coefficient de décentrage amont

Si $\alpha = 1$ le décentrage amont est complet

Méthode eulérienne TVD (1)

TVD pour 'Total Variation Diminishing'

... basée sur un schéma de Différences Finies du 3^{ème} ordre:

→ polynôme du 3^{ème} ordre pour approximer la concentration en un endroit du domaine

Hypothèses:

- 1D svt x
- v uniforme et constante sur 3 cellules
- Δx est constant

$$C(x, t + \Delta t) = C(x - v_a \Delta t, t)$$

$$C \text{ entre } i \text{ et } i+1 = \frac{C_i + C_{i+1}}{2} + Cr \frac{C_i + C_{i+1}}{2} - (1 - Cr^2) \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{6}$$



avec $Cr = \frac{v_a \Delta t}{\Delta x}$ nombre de Courant

Méthode eulérienne TVD (2)

Entre i et $i+1$

$$C \text{ entre } i \text{ et } i+1 = \frac{C_i + C_{i+1}}{2} + Cr \frac{C_i + C_{i+1}}{2} - (1 - Cr^2) \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{6}$$

Idem: même schéma entre $i+1$ et $i+2$

Les concentrations des nœuds $i-1, i, i+1$ et $i+2$ sont nécessaires pour obtenir la concentration au nœud $i+1$

Le plus souvent: un schéma explicite est choisi pour la méthode TVD: toutes les concentrations sont prises à la fin du pas de temps précédent

→ ceci exige que $Cr < 1$

Méthode eulérienne TVD (3)

La composante dispersive et les autres termes de l'équation de transport sont calculés avec une méthode de Différences finies implicite

Donc:

- 1) le terme advectif est calculé par TVD**
- 2) les autres termes par une méthode classique**

Il peut y avoir des oscillations... si gradients de concentrations très élevés

Un 'limitateur de flux' est utilisé vérifiant si:

$$C_i < C_{\text{entre } i \text{ et } i+1} < C_{i+1}$$

Si ce n'est pas le cas, on revient à un schéma de décentrage complet

Méthode eulérienne TVD (4)

Méthode TVD:

- plus précise que méthode FD centrée;**
- plus précise que décentrage amont;**
- plus d'efforts numériques (interpolations de C entre nœuds) et vérifications du 'limitateur de flux';**
- dispersion numérique réduite mais toujours existante;**

➡ souvent bon compromis

Approche Eulérienne - Lagrangienne

$$\rightarrow \frac{\partial C^v}{\partial t} = - \frac{v_a}{R} \cdot \nabla C^v + \frac{1}{R} \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - \lambda C^v - \frac{q_s}{R n_m} (C^v - C_s^v) \quad \text{PDE}$$

forme Lagrangienne (par rapport à un système d'axe se déplaçant à la vitesse v_a/R) :

$$\frac{dC^v}{dt} = \frac{1}{R} \nabla \cdot (D_h \cdot \nabla C^v) - \lambda C^v - \frac{q_s}{R n_m} (C^v - C_s^v) \quad \text{ODE}$$

$$\frac{dC^v}{dt} = \frac{\partial C^v}{\partial t} + \frac{v_a}{R} \cdot \nabla C^v$$

... la dérivée absolue de C^v décrit la variation le long de la ligne de courant advective

Approche Eulérienne - Lagrangienne (2)

... en appliquant un algorithme de différences finies:

$$\frac{dC^v}{dt} \approx \frac{C_m^{t+\Delta t} - C_m^{t*}}{\Delta t}$$

$$\rightarrow C_m^{t+\Delta t} = C_m^{t*} + \Delta t \cdot \left[\frac{1}{R} \text{div}(\underline{D}_h \cdot \text{grad} C^v) - \lambda C^v - \frac{q'}{n_e R} (C^v - C^{v*}) \right]$$

$$\rightarrow C_m^{t+\Delta t} = C_m^{t*} + \Delta t \cdot \text{RHSC} = C_m^{t*} + \Delta C_m^{t*}$$

avec $C_m^{t+\Delta t}$ concentration moyenne pour la cellule m à l'instant $t + \Delta t$

C_m^{t*} concentration moyenne pour la cellule m à l'instant $t + \Delta t$ qui n'est calculée qu'à partir de l'advection (écrite comme si elle se rapportait à un instant intermédiaire)

RHSC pris à l'instant t (schéma explicite) ou à l'instant $t + \Delta t$ (schéma implicite)

Approche Eulérienne - Lagrangienne (3)

... on peut calculer la valeur de $C_m^{t^*}$ par une méthode Lagrangienne :

- la méthode des caractéristiques
(*'Method Of Characteristics' MOC*)
- la méthode modifiée des caractéristiques
(*'Modified Method Of Characteristics' MMOC*)
- la méthode hybride des caractéristiques
(*'Hybrid Method Of Characteristics' HMOC*)

Méthode des caractéristiques (MOC)

... il s'agit d'une technique de 'particle tracking' conventionnel pour résoudre le problème advectif sans dispersion numérique !

- ➔ ■ Un 'set' initial de particules est disposé au hasard ou de façon bien précise dans le domaine simulé
- une concentration et une position sont liées à chacune des particules
- en utilisant un petit pas de temps, les particules sont véhiculées dans la direction de l'écoulement
- à la fin de chaque pas de temps, une concentration moyenne dans chaque cellule peut être calculée sur base du nombre de particules comptées à cet instant dans la cellule concernée :

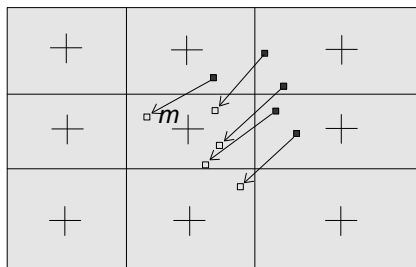
$$C_m^{t^*}$$

Méthode des caractéristiques (2)

$$\rightarrow C_m^{t*} = \frac{1}{NP} \cdot \sum_{l=1}^{NP} C_l^t$$

avec NP le nombre de particules dans la cellule m

C_l^t la concentration de la $l^{\text{ème}}$ particule à l'instant t



Après détermination de C_m^{t*} dans toutes les cellules, une concentration pondérée peut être calculée:

$$C_m^{t\#} = \omega \cdot C_m^{t*} + (1 - \omega) \cdot C_m^t$$

entre 0 et 1

Méthode des caractéristiques (3)

cette $C_m^{t\#}$ est ensuite utilisée dans le terme $RHSC$ avec un schéma d'intégration temporel explicite pour pouvoir déterminer :

$$\Delta C_m^{t*}$$

$$\rightarrow \Delta C_m^{t*} = \Delta t \cdot RHSC(C_m^{t\#})$$

$$\rightarrow C_m^{t+\Delta t} = C_m^{t*} + \Delta t \cdot RHSC = C_m^{t*} + \Delta C_m^{t*}$$

- ■ quasi aucune dispersion numérique
- mais ■ temps de calcul très long et grands besoins en mémoire si de nombreuses particules sont utilisées en 3D
- dans certaines circonstances, grosses erreurs dans la conservation de la masse

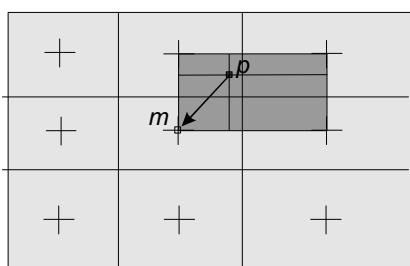
Méthode modifiée des caractéristiques (MMOC)

Au lieu de garder en mémoire la localisation et la concentration relatives à l'ensemble des particules, chaque particule est suivie à contre-courant:

➔ méthode plus efficace

- ➔ à l'instant $t + \Delta t$, une particule fictive est placée sur un nœud (ou point central) de la cellule. La particule est suivie à contre-courant (vers l'amont) afin de retrouver sa position à l'instant t .
- ➔ la concentration interpolée à cet endroit est utilisée pour déterminer C_m^{t*}

Méthode modifiée des caractéristiques (2)



➔ $C_m^{t*} = C^t(x_p, y_p, z_p)$

avec x_p, y_p, z_p les coordonnées du point atteint par suivi amont le long de la ligne de courant advective après Δt

$C^t(x_p, y_p, z_p)$ la concentration en ce point, à l'instant t ; cette valeur est souvent calculée par interpolation des concentrations aux points nodaux

Méthode modifiée des caractéristiques (3)

- ➔ ■ **seulement une particule par cellule**
- **moins de temps de calcul**
- **moins de place mémoire**
(si le schéma d'interpolation est simple)

mais ... éventuellement, dispersion numérique
(provenant du schéma d'interpolation d'ordre inférieur)

➔ **interpolations d'ordres supérieurs**

mais ... le temps de calcul augmente ainsi que les erreurs de conservation de la masse

Méthode hybride des caractéristiques (HMOC)

- ➔ **Cette méthode est développée pour bénéficier des avantages respectifs des méthodes MOC et MMOC.**
- ➔ **En fonction du gradient de concentration local, un choix automatique est fait entre MOC et MMOC.**
- ➔ **Pour les gradients abrupts, le terme d'advection est résolu par une technique MOC mais dans les autres zones du domaine, l'advection est calculée par une procédure MMOC.**

References

- Anderman, E., Hill, M. and E. Poeter. 1996. Two-dimensional advective transport in ground-water flow parameter estimation, *Ground Water* 34(6) : 1001-1009.
 - Anderson, M.P., Woessner, W.W. and R.J. Hunt. 2015. *Applied groundwater modeling – Simulation of flow and advective transport*. Academic Press Elsevier.
 - Bachmat, Y. and J. Bear. 1986. Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media, part 1 : The continuum approach *Transport in Porous media* (1) 213-240.
 - Baliga, B.R. and S.V. Patankar. 1983. A control volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer, *Numerical Heat Transfer* 6(3) : 245-261.
 - Batlle-Aguilar, J., Brouyère, S., Dassargues, A., Morasch, B., Hunkeler, D., Hohener, P., Diels, L., Vanbroekhoeven, K., Seuntjens, P. and H.Halen. 2009. Benzene dispersion and natural attenuation in an alluvial aquifer with strong interactions with surface water. *Journal of Hydrology* 361: 305-317.
 - Bear, J. and A.H.D. Cheng. 2010. *Modeling groundwater flow and contaminant transport*. Springer.
 - Bear, J. and A. Verruijt. 1987. *Modeling groundwater flow and pollution*. Dordrecht: Reidel Publishing Company.
 - Brouyère, S., Orban, P., Wildemeersch, S., Couturier, J., Gardin, N. and Dassargues, A., 2009. The Hybrid Finite Element Mixing Cell Method: A New Flexible Method for Modelling Mine Groundwater Problems. *Mine Water & the Environment* 28(2): 102-114.
 - Carabin, G. and A. Dassargues. 1999. Modeling groundwater with ocean and river interaction. *Water Resources Research* 35(8): 2347-2358.
 - César E, Wildemeersch S., Orban P., Carrière S., Brouyère S. and Dassargues A., 2014. Simulation of spatial and temporal trends in nitrate concentrations at the regional scale in the Upper Dyle basin, Belgium. *Hydrogeology Journal* 22: 1087 – 1100.
 - Cheng, R.T., Casulli, V. and S.N. Milford. 1984. Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates. *Water Resources Research* 20(7) : 944-952.
 - Chung, T. 2002. *Computational fluid dynamics*. Cambridge University Press.
 - Cooley, R.L. 2004. *A theory for modeling groundwater flow in heterogeneous media*. USGS Professional Paper 1679.
 - Cox, R.A. and T. Nishikawa. 1991. A new Total Variation Diminishing scheme for the solution of advective-dominant solute transport, *Water Resources Research* 27(10) : 2645-2654.
 - Dagan, G. 1989. *Flow and transport in porous formations*, New York: Springer.
 - Dassargues A., 2018. *Hydrogeology: groundwater science and engineering*, 472p. Taylor & Francis CRC press.
 - Dassargues A. 2020. *Hydrogéologie appliquée : science et ingénierie des eaux souterraines*, 512p. Dunod. Paris.
 - Dassargues, A., Goderniaux, P., Daoudi, M. and Ph. Orban. 2011. Measured and computed solute transport behaviour in the saturated zone of a fractured and slightly karstified chalk aquifer, In Proc. H2Karst, 9th *Conference on Limestone Hydrogeology*, eds. Bertrand C., Carry N., Mudry J., Pronk M. and F. Zwahlen: 111-114.
- Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

References (2)

- Daus, A.D. and E.O. Frind. 1985. An alternating direction Galerkin technique for simulation of contaminant transport in complex groundwater systems, *Water Resources Research* 21(5) : 653-664.
 - de Marsily, G. 1986. *Quantitative hydrogeology : groundwater hydrology for engineers*. San Diego: Academic Press.
 - Derouane, J. and A. Dassargues, A. 1998. Delineation of groundwater protection zones based on tracer tests and transport modelling in alluvial sediments, *Environmental Geology* 36(1-2): 27-36.
 - Deutsch, C.V. and A.G. Journel. 1998. *GSLIB geostatistical software library and user's guide*. New-York :Oxford University Press.
 - Diersch, H.-J.G. 2014. *Feflow – Finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media*. Springer.
 - Doherty, J. 2005. *PEST – Model-independent parameter estimation – User manual – 5th Edition*. Watermark Numerical Computing.
 - Ewing, R.E., Russell, T.F. and M.F. Wheeler. 1983. Simulation of miscible displacement using mixed methods and a modified method of characteristics. In *SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers, 12241. Dallas (TX).
 - Fioren, M.N. 2013. We speak for the Data, *Groundwater* 51(2): 157.
 - Fitts, Ch. R. 2002. *Groundwater science*. Academic Press.
 - Fletcher, C. 1988. *Computational techniques for fluid dynamics*. Vol.1 and Vol.2, New York: Springer.
 - Garder Jr, A.O., Peaceman, D.W. and A.L. Pozzi Jr. 1964. Numerical calculation of multidimensional miscible displacement by the method of characteristics, *Society of Petroleum Engineers Journal* 4(01), 26-36.
 - Gillham, R.W., Sudicky, E.A., Cherry, J.A. and E.O. Frind. 1984. An advection–diffusion concept for solute transport in heterogeneous unconsolidated geologic deposits. *Water Resources Research* 20(3): 369-374.
 - Goderniaux, P., Wildemeersch, S., Brouyère, S., Therrien, R. and A. Dassargues. 2015. Uncertainty of climate change impact on groundwater reserves, *Journal of Hydrology* 528: 108-121.
 - Gómez-Hernández, J.J. 2006. Complexity. *Ground Water* 44(6) : 782-785.
 - Hallet, V. and A. Dassargues. 1998. Effective porosity values used in calibrated transport simulations in a fissured and slightly karstified chalk aquifer, In *Groundwater Quality 1998*, eds. M. Herbert and K. Kovar, Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA), C36: 124-126.
 - Hoffmann R., Goderniaux P., Jamin P., Orban Ph., Brouyère S. and A. Dassargues. 2021. *Differentiated influence of the double porosity of the chalk on solute and heat transport*. In *The Chalk Aquifers of Northern Europe*. Farrell, R. P., Massei, N., Foley, A. E., Howlett, P. R. and West, L. J. (eds), Geological Society, London, Special Publications, 517, <https://doi.org/10.1144/SP517-2020-170>
 - Huyakorn, P.S. and G.F. Pinder. 1983. *Computational methods in subsurface flow*. Academic Press.
 - Huysmans, M. and A. Dassargues. 2005. Review of the use of Peclet numbers to determine the relative importance of advection and diffusion in low permeability environments, *Hydrogeology Journal* 13(5-6): 895-904.
 - Huysmans, M. and A. Dassargues. 2006. Stochastic analysis of the effect of spatial variability of diffusion parameters on radionuclide transport in a low permeability clay layer, *Hydrogeology Journal* 14 : 1094-1106.
- Formation en modélisation hydrogéologique, Université de Liège, Septembre 2022

References (3)

- Huysmans, M. and A. Dassargues. 2007. Equivalent diffusion coefficient and equivalent diffusion accessible porosity of a stratified porous medium, *Transport in porous media* 66: 421-438.
- Jamin, P., Dolle, F., Chisala, B., Orban, Ph., Popescu, I.C., Hérivaux, C., Dassargues, A. and S. Brouyère. 2012. Regional flux-based risk assessment approach for multiple contaminated sites on groundwater bodies, *Journal of Contaminant Hydrology* 127(1-4): 65-75.
- Konikow, L.F. and J.D. Bredehoeft. 1978. *Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water*. Washington : US Government Printing Office.
- Konikow, L.F. and J.M. Mercer. 1988. Groundwater flow and transport modelling, *Journal of Hydrology* 100(2) : 379-409.
- Leonard, B.P. and H.S. Niknafs. 1990. Cost-effective accurate coarse-grid method for highly convective multidimensional unsteady flows, In: *Computational Fluid Dynamics Symposium on Aeropropulsion*. NASA Conference Publication 3078.
- Leonard, B.P. and H.S. Niknafs. 1991. Sharp monotonic resolution of discontinuities without clipping of narrow extrema, *Computer & Fluids* 19(1) : 141-154.
- Molz, F. 2015. Advection, dispersion and confusion. *Groundwater*, published online, DOI: 10.1111/gwat.12338
- Molz, F.J., Widdowson, M.A. and L.D. Benefield. 1986. Simulation of microbial growth dynamics coupled to nutrient and oxygen transport in porous media, *Water Resources Research* 22(8) : 1207-1216.
- Orban, P., Brouyère, S., Battle-Aguilar, J., Couturier, J., Goderniaux, P., Leroy, M., Malozewski, P. and Dassargues, A., 2010. Regional transport modelling for nitrate trend assessment and forecasting in a chalk aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology* 118: 79-93.
- Payne, F.C., Quinnan, A. and S.T. Potter. 2008. *Remediation hydraulics*. Boca Raton: CRC Press/ Taylor & Francis.
- Peeters, L., Haerens, B., Van Der Sluys, J. and Dassargues, A., 2004. Modelling seasonal variations in nitrate and sulphate concentrations in a threatened alluvial aquifer, *Environmental Geology* 46(6-7): 951-961.
- Prommer, H., Barry, D. A. and C. Zheng. 2003. MODFLOW/MT3DMS-based reactive multi-component transport modelling. *Ground Water* 42(2): 247-257.
- Rentier, C., Bouyère, S. and A. Dassargues. 2002. Integrating geophysical and tracer test data for accurate solute transport modelling in heterogeneous porous media. In *Groundwater Quality 2001*. Eds. S.F. Thornton and S.E. Oswald, IAHS Publication 275: 3-10.
- Rausch, R., Schäfer, W., Therrien, R. and Chr. Wagner. 2005. *Solute transport modelling – An introduction to models and solution strategies*. Berlin-Stuttgart: Gebr.Borntraeger Verlagsbuchhandlung Science Publishers.
- Wildemeersch, S., Brouyère, S., Orban, P., Couturier, J., Dingelstadt, C., Veschkens, M. and Dassargues, A., 2010. Application of the Hybrid Finite Element Mixing Cell method to an abandoned coalfield in Belgium. *Journal of Hydrology* 392 (3-4): 188-200.
- Wildemeersch, S., Goderniaux, P., Orban, P., Brouyère, S. and A. Dassargues. 2014. Assessing the effects of spatial discretization on large-scale flow model performance and prediction uncertainty. *Journal of Hydrology* 510: 10-25.