

LGIH

Laboratoires de Géologie de
l'Ingénieur, d'Hydrogéologie
et de prospection
géophysique

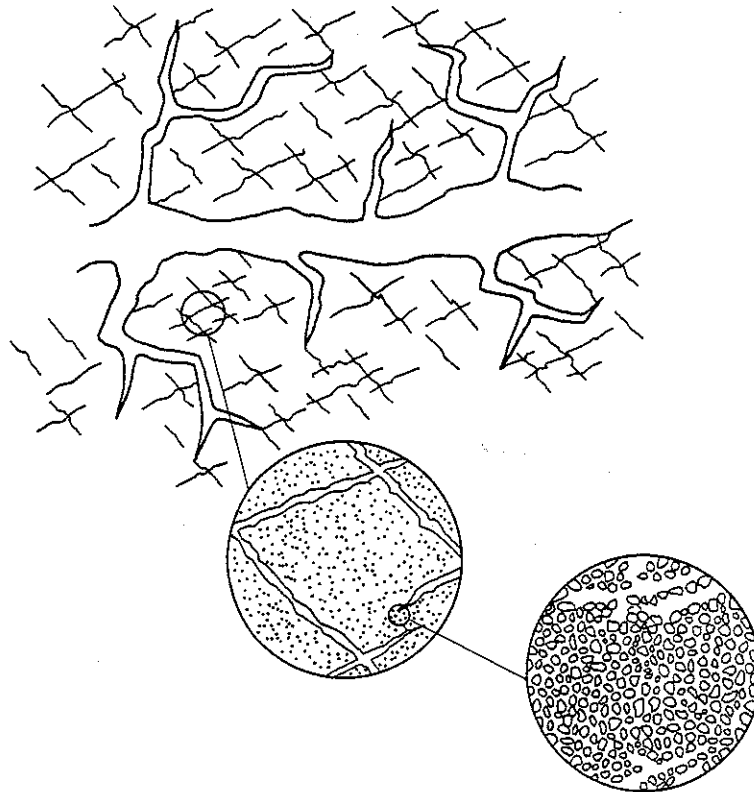
MSM

département de Mécanique
des matériaux, Stabilité des
constructions, et Mécanique
des structures

**ETUDE PHENOMENOLOGIQUE ET NUMERIQUE DE LA
PROPAGATION DE POLLUANTS MISCIBLES DANS UN
MILIEU A POROSITE MULTIPLE**

(application au transport des nitrates dans
l'aquifère crayeux du Crétacé de Hesbaye)

par
Pierre BIVER



Thèse présentée en vue de l'obtention du grade scientifique de
Docteur en Sciences Appliquées

JURY :

G. Fonder (Président), S. Cescotto et A. Monjoie (promoteurs), J.A Essers, A. Lejeune,
R. Charlier, A. Dassargues, (Université de Liège),
W. Kinzelbach (Université de Kassel),
L. Kiraly (Université de Neuchâtel),
G. de Marsily (Université Paris VI).

Année académique 1992-1993

Je dédie cet ouvrage à mon
grand-père agriculteur. Il
était homme de bonne volonté
et savait vivre en pleine
harmonie avec son environnement.

REMERCIEMENTS.

Suite à mes études d'ingénieur géologue, j'ai désiré acquérir une spécialisation et une expérience liées au vaste domaine que recouvre le mot environnement. Après 4 années de recherche concernant la migration des polluants, il est facile de s'apercevoir du caractère multidisciplinaire que ce type d'étude requiert. Il en résulte que, pour faire progresser un travail scientifique de ce genre, il faut unir des sciences, voisines ou très éloignées, par des collaborations actives et bien vécues.

J'espère que la synthèse que je présente ici sera le reflet de cet idéal et que, dans l'avenir, un nombre croissant de personnes seront à même d'offrir un tel échange. En ce qui me concerne, je tiens à remercier ceux qui ont été les principaux vecteurs de mon enthousiasme et qui m'ont permis d'arriver à ce résultat.

Je remercie bien évidemment les promoteurs de cette thèse, messieurs les professeurs S.Cescotto (département M.S.M.: Mécanique des matériaux, Stabilité des constructions, et Mécanique des structures) et A.Monjoie (L.G.I.H.: Laboratoires de Géologie de l'Ingénieur, d'Hydrogéologie et de prospection géophysique). L'un comme l'autre ont soutenu ce travail tout en préservant son double aspect (expérimental et numérique). Ils m'ont également fait bénéficier des infrastructures indispensables à sa réalisation.

Je remercie également l'I.R.S.I.A. (Institut pour l'encouragement de la Recherche Scientifique dans l'Industrie et l'Agriculture) d'avoir bien voulu placé en moi sa confiance en m'accordant, pendant 4 années consécutives, un mandat de boursier; ainsi que messieurs P.De Regger (Centre d'Etudes Nucléaires de Mol), P.Gerard (GECHEM), A.Hodiaumont (Compagnie Intercommunale Liégeoise des Eaux), A.Kogelnik et T.Michiels (Solvay & Cie) pour avoir bien voulu reconnaître le caractère appliqué de mes recherches.

Je tiens aussi à souligner le généreux soutien logistique de la Région Wallonne et des compagnies de distribution des eaux (la C.I.L.E.: Compagnie Intercommunale Liégeoise des Eaux et la S.W.D.E.: Société Wallonne de Distribution d'Eaux).

Mes remerciements les plus chaleureux vont toutefois aux collègues qui m'ont apporté leur aide tout au long de ce travail. Sans oublier les autres, je cite ici ceux qui me viennent en premier à l'esprit:

Au sein de l'équipe L.G.I.H.:

- Ph.Meus qui a su me faire profiter de son expérience en matière de traçages et qui m'a activement aidé sur le terrain.

- C.Schroeder et A.Dassargues qui m'ont prodigué de nombreux conseils au sujet de l'expérimentation en laboratoire et de l'élaboration d'un modèle conceptuel.
- C.Yernaux pour son aide quant à la réalisation pratique des essais de laboratoire.
- M.C.Halleux et J.M.Speetjens qui ont réalisé la quasi-totalité des analyses chimiques présentées dans cet ouvrage (je laisse le soin au lecteur d'évaluer l'énorme travail que cela représente).
- M.Bauduin pour son précieux travail de dactylographie.
- P.Docquier, A.Lauwers, et R.Thiry pour la finalisation de qualité qu'ils ont apportée à de nombreux documents.

Au sein de l'équipe M.S.M.:

- J.P.Radu et A.M.Habraken qui ont su me faire comprendre les arcanes du programme Lagamine.
- L.Grisard pour m'avoir rappelé de nombreuses notions enfouies bien loin dans ma mémoire.
- R.Charlier, X.C.Wang, et Y.Y.Zhu pour leurs nombreux conseils.

Il me faut également rappeler le rôle de J.Denoël, chef de travaux au L.M.P.C.(Laboratoire des Matériaux Polymériques et Composites), qui m'a sensibilisé aux méthodes de mesures microdiélectriques.

Je n'oublierai pas non plus les étudiants de dernière année (actuellement collègues) qui ont bien voulu réaliser leur travail de fin d'études dans le cadre de mes recherches. Je cite ici Mademoiselle N.Garcet et Messieurs O.Muller, S.Munhoven, X.Renard, et O.Valentini.

Enfin, j'ai une attention toute particulière pour ma femme et ma fille qui ont su m'attendre et me soutenir au cours de ces années.

P.Biver

RESUME:

Ce travail débute par le développement d'un formalisme mathématique déterministe pour décrire, en toute généralité, la propagation de polluants dans les eaux souterraines. Cette étude théorique permet de situer le problème posé (pollution miscible diluée) dans un cadre plus large, et de souligner les particularités d'un milieu à porosité multiple.

Dans un second temps, un outil numérique objectif est mis au point pour résoudre les équations de convection-dispersion avec effet d'eau immobile, dégradation, et adsorption. Parmi le grand nombre des procédés existants, deux méthodes par éléments finis en maillage fixe ont été programmées:

- la méthode F.U.P.G. basée sur un décentrage optimum dans le temps et l'espace,
- la méthode H.E.L.M. basée sur un processus eulérien-lagrangien avec traçage inverse des positions nodales.

Les deux schémas sont testés sur de nombreux problèmes de référence. Ensuite, ce modèle est appliqué à des situations pratiques pour étudier le comportement de solutés (nitrates notamment) dans l'aquifère crayeux du Crétacé de Hesbaye (Belgique). Des domaines de taille croissante sont étudiés (essais en laboratoire, traçages in situ). A chaque étape, les coefficients de transport miscible sont déterminés de façon objective, en tenant compte de la spécificité des tests. Ainsi, l'effet d'échelle peut être quantifié et il est possible d'envisager des scénarios prévisionnels.

Mots-clés: milieu multiporeux, convection-dispersion, décentrage, eulérien-lagrangien, colonne expérimentale, traçages, effet d'échelle, craie du Crétacé.

ABSTRACT:

In the first part of this study, a determinist mathematical approach is used to describe any kind of pollutant migration in groundwater. This theoretical background is focused on the miscible displacement and the particularities of the multiporous media are discussed.

Subsequently, an objective numerical tool is developed to solve the convection-dispersion equations including immobile water effect, degradation, and adsorption. A great deal of numerical techniques are available. Two finite element methods in fixed grids have been programmed:

- the F.U.P.G. method, using a space-time upwinded weighting function with optimized coefficients,
- the H.E.L.M. method, using the eulerian-lagrangian approach with reverse node tracking.

Those two schemes are tested on a large number of reference problems. This model is applied to study the behaviour of solutes (nitrates mainly) in the Cretaceous chalk of the Hesbaye area (Belgium). Several tests have been performed on domains of increasing size (laboratory tests, in situ tracer tests). For each interpretation, the particularities of experimentation have been taken into account, and miscible transport coefficients have been objectively determined. Hence, the medium is well characterized and the scale effect is quantified. This leads to previsionsal applications.

Keywords: multiporous medium, convection-dispersion, upwind, eulerian-lagrangian, experimental column, tracer tests, scale effect, Cretaceous chalk.

CONVENTIONS, ABBREVIATIONS, ET SYMBOLES.

Cet ouvrage comporte un nombre très élevé de symboles et d'abréviations. Nous avons essayé de garder une certaine homogénéité dans nos conventions d'écriture; nous pensons toutefois qu'une liste énumérative n'est pas inutile pour aider le lecteur. Signalons déjà que, dans les développements mathématiques, les lettres représentant des vecteurs sont surmontées d'une flèche (\vec{v} par exemple). Les tenseurs γ sont définis par une lettre soulignée en gras ($\underline{\gamma}$ par exemple) sauf lorsqu'il s'agit d'une matrice d'assemblage pour une structure discrétisée; dans ce dernier cas, nous utiliserons une notation entre crochets ($[M]$ par exemple). La convention de sommation sur les indices répétés (convention d'Einstein) ne sera pas utilisée. Les symboles en italique non repris dans la liste ci-dessous désignent les grandeurs microscopiques associées au symbole normal.

a) Abréviations.

C.I.L.E.	Compagnie Intercommunale Liègeoise des Eaux
E.V.R.	Elément de volume représentatif
erf	fonction d'erreur de Gauss
erfc	fonction d'erreur complémentaire de Gauss
F.U.P.G.	Full Upwind Petrov Galerkin method
H.E.L.M.	Hybrid Eulerian Lagrangian Method
I.R.S.I.A.	Institut pour l'encouragement de la Recherche Scientifique dans l'Industrie et l'Agriculture
L.G.I.H.	Laboratoires de Géologie de l'Ingénieur, d'Hydrogéologie, et de prospection géophysique
M.K.S.	Mètre Kilogramme Seconde
M.S.M.	département de Mécanique des matériaux, Stabilité des constructions, et de Mécanique des structures
O.T.F.	Optimal Test Function method
R.W.	Random Walk method
SE	sous éléments
S.U.P.G.	Streamline Upwind Petrov Galerkin method
S.W.D.E.	Société Wallonne de Distribution des Eaux

b) Symboles (unité en système M.K.S.).

$A(u)$	opérateur de dérivation traduisant l'équilibre de volume
$A_x(u)$	partie spatiale de $A(u)$
\vec{A}	vecteur de mouvement
A	somme des coefficients de dégradation et d'effet d'eau immobile (s^{-1})

A	indice désignant un grandeur apparente
a	activité d'un ion en solution (sans dimension)
al	dispersivité longitudinale dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux (m)
at	dispersivité transversale dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux (m)
B(u)	opérateur de dérivation traduisant l'équilibre de surface
<u>B</u>	tenseur de bruit
<u>C</u>	matrice de rotation de repère (sans dimension)
Cr _x	nombre de Courant associé à un élément unidimensionnel (sans dimension)
Cr	nombre de Courant associé à un élément bidimensionnel (sans dimension)
C	courbure d'une interface entre 2 fluides (m ⁻¹)
c	concentration volumique dans une phase fluide du milieu poreux (kg/m ³)
\dot{c}	dérivée temporelle moyenne de c sur le pas de temps (kg/m ³ /s)
\dot{c}^*	dérivée temporelle totale moyenne de c sur le pas de temps (kg/m ³ /s)
c*	concentration lagrangienne (kg/m ³)
c _{in}	concentration volumique dans le milieu au voisinage de la frontière du domaine modélisé (kg/m ³)
c _{out}	concentration volumique de l'ambiance au voisinage de la frontière du domaine modélisé (kg/m ³)
c _p	compressibilité volumétrique globale du milieu poreux saturé (Pa ⁻¹)
c _δ	concentration restituée suite à une injection de Dirac (kg/m ³)
<u>D</u>	tenseur de dispersion mécanique dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux (m ² /s)
<u>D_f</u>	tenseur de dispersion mécanique dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux, exprimé dans les axes de Frenet associés aux lignes de courant (m ² /s)
<u>D_g</u>	tenseur de dispersion mécanique dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux, exprimé dans les axes globaux (m ² /s)
<u>D_h</u>	tenseur de dispersion hydrodynamique dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux (m ² /s)
D _{hL}	dispersion hydrodynamique longitudinale (m ² /s)
D _{hT}	dispersion hydrodynamique transversale (m ² /s)
D _m	coefficient de diffusion moléculaire dans un fluide interstitiel d'un milieu poreux (m ² /s)

d	espacement des fissures d'un réseau (m)
d_m	coefficient de diffusion moléculaire dans un fluide libre (m^2/s)
div	somme des dérivées spatiales (./m)
E	ouverture moyenne des intersections de fissures (m), ou potentiel d'électrode (V)
\vec{e}	vecteur unitaire (sans dimension)
e	ouverture moyenne d'une fissure ou d'un réseau de fissures (m)
e_{inj}	épaisseur de la nappe sur laquelle est répartie l'injection d'un traceur (m)
e_{fiss}	épaisseur de la zone fissurée sur laquelle les flux d'eau et de traceur sont supposés uniformément répartis (m)
F	concentration massique dans la phase solide (sans dimension);
F_j	fonction additive de décentrage associée au noeud j (sans dimension),
F_m	concentration massique dans la phase solide provenant de l'eau mobile (sans dimension)
F_{im}	concentration massique dans la phase solide provenant de l'eau immobile (sans dimension)
F	constante de Faraday (Cb/môle)
r	indice relatif à la porosité de fissures
f	fréquence d'un phénomène cyclique (Hz)
\vec{F}	flux de diffusion moléculaire dans un fluide libre ($kg/m^2/s$)
\vec{F}_c	flux convectif dans un fluide interstitiel ($kg/m^2/s$)
\vec{F}_d	flux de dispersion mécanique dans un fluide interstitiel ($kg/m^2/s$)
\vec{F}_D	flux de dispersion hydrodynamique dans un fluide interstitiel ($kg/m^2/s$)
f_{Dmax}	flux de Darcy maximum observé sur un graphique (m^2/s)
\vec{F}_m	flux de diffusion moléculaire dans un fluide interstitiel ($kg/m^2/s$)
f_{max}	flux total maximum de polluant observé sur un graphique ($kg/m^2/s$)
\hat{f}_{ϕ_1}	fugacité du constituant i dans la phase ϕ
$f_{\phi_1}^{\phi_2}$	flux d'échange entre les phases ϕ_1 et ϕ_2 du milieu poreux ($kg/m^3/s$)
G	distribution de probabilité Gaussienne (sans dimension)
g	accélération de la pesanteur (m^2/s)
\vec{g}	vecteur de charges nodales pour le système global

$\vec{\text{grad}}$ vecteur des dérivées spatiales (./m)
H masse de fluide emmagasinée dans un volume unitaire de milieu poreux (kg/m^3)
h hauteur piézométrique du fluide en écoulement dans le milieu poreux (m)
H indice relatif aux noeuds cachés
I₁ fonction de Bessel modifiée d'ordre 1 (sans dimension)
I_c indice de continuité (sans dimension)
I_e intégration de l'équilibre en volume sur un élément fini ($\text{kg}/\text{m}^3/\text{s}$)
I_{zoom} indicateur de raffinement du maillage (sans dimension)
 $\vec{\text{I}}$ gradient de hauteur piézométrique (sans dimension)
i_m indice relatif au fluide ne participant pas à l'écoulement dans le milieu poreux
 $\underline{\text{J}}$ matrice jacobienne de la transformation des coordonnées locales de l'élément en coordonnées globales (sans dimension)
K coefficient de perméabilité du milieu poreux au fluide considéré (m/s)
[K] matrice de rigidité du système global
K' coefficient de perméabilité modifié pour tenir compte d'une variation de la concentration massique (m/s)
K_d coefficient de partitionnement entre phase fluide et phase solide pour l'adsorption linéaire (m^3/kg)
K_f coefficient de perméabilité d'une fissure soumise à un écoulement laminaire (m/s)
K_f' coefficient de perméabilité d'une fissure soumise à un écoulement turbulent (m/s)
K_m coefficient de perméabilité des épontes d'une fissure (m/s)
k perméabilité intrinsèque du milieu poreux (m^2)
k₁, k₂, k₃, k₄, k₅, k₆, k₇ coefficients de partitionnement pour l'adsorption non linéaire
k_i perméabilité effective du milieu poreux au fluide i (m^2)
k_{r*i*} perméabilité relative du milieu poreux au fluide i (sans dimension)
k_φ coefficient de dégradation dans une phase φ d'un milieu poreux (s^{-1})
K_{AB} constante d'équilibre chimique entre 2 substances dissoutes A et B (sans dimension)
k_{sat} perméabilité intrinsèque du milieu poreux saturé (m^2)

- L longueur caractéristique d'un changement significatif d'un paramètre moyen (m);
ou séparation des plateaux d'un condensateur (m),
chapitre III.
- \mathcal{L} transformée de Laplace
- L dimension caractéristique de la porosité (m)
- l taille du E.V.R. pour un modèle conceptuel (m)
- \dot{M} variation temporelle de la masse injectée lors d'un
essai de traçage (kg/s)
- \underline{M} tenseur de mobilité ($m^2 \cdot s / Pa$)
- M_0 nombre de mobilité (sans dimension), chapitre II;
ou masse injectée lors d'un traçage (kg), chapitre IV.
- M_r masse restituée lors d'un traçage (kg)
- [M] matrice de masse du système global
- m second index de distribution de la taille des pores
(sans dimension)
- m indice relatif au fluide en écoulement dans le milieu
poreux
- N_i^x fonction d'interpolation spatiale associée au noeud i
ou au mode i de la solution (sans dimension)
- N_n^t fonction d'interpolation temporelle associée au temps t_n
(sans dimension)
- N_f nombre de noeuds de la surface du domaine pour lesquels
une condition mixte agit (sans dimension)
- NPI nombre de points d'intégration d'un élément (sans
dimension)
- \vec{n} vecteur unitaire normal à une surface (sans dimension)
- n porosité totale du milieu poreux (sans dimension)
- n_e porosité efficace initiale du milieu poreux (sans
dimension)
- n_{eff} porosité efficace du milieu poreux (sans dimension)
- n_{im} porosité du milieu poreux accessible à l'eau
immobile (sans dimension)
- n indice relatif au fluide non mouillant, chapitre I;
indice désignant la composante normale;
ou indice relatif au temps t_n , chapitre II.
- $n+1$ indice relatif au temps t_{n+1}
- P terme de puits de polluant ($kg/m^3/s$)
- Pe_p nombre de Péclet physique (sans dimension)
- Pe_x nombre de Péclet numérique associé à un élément fini
unidimensionnel (sans dimension)
- p indice relatif à la porosité de pores

p pression interstitielle du fluide en écoulement dans le milieu poreux (Pa)
 p_b pression de bullage du fluide (Pa)
 p_v pression interstitielle moyenne des fluides occupant le volume des pores du milieu (Pa)
 p portion de la surface de contact fluide-solide qui concerne le fluide immobile (sans dimension)
 p_{cab} pression capillaire existant entre 2 fluides présents dans le milieu poreux (Pa)
 Q débit global (m^3/s)
 Q_i fonction multiplicative de décentrage associée au noeud i (sans dimension)
 Q_j quantité nodale injectée par unité de temps au noeud j (kg/s)
 q_{out} flux de matière traversant la surface de la zone modélisée ($kg/m^2/s$)
 q_t débit spécifique total (m/s)
 R constante des gaz parfaits ($J/°K/môle$)
 R_d coefficient de retard dans une phase, dû à l'adsorption (sans dimension)
 R_r rugosité relative d'une fissure ou d'un réseau de fissures (sans dimension)
 r distance radiale (m);
ou taux de restitution d'un traceur (sans dimension), chapitre IV.
 r_h rayon hydraulique des chenaux poreux (m)
 S coefficient d'emmagasinement d'une couche aquifère (sans dimension), chapitres I et IV;
ou frontière du domaine modélisé (m^2), chapitre II.
 S_e saturation réduite (sans dimension)
ou surface externe de l'élément fini (m^2)
 S_i saturation du milieu poreux en fluide i (sans dimension)
 S_r saturation résiduelle du milieu poreux (sans dimension)
 S_s coefficient d'emmagasinement spécifique du milieu poreux (m^{-1})
 s_i concentration massique du constituant i dans une phase du milieu poreux (sans dimension)
 s indice relatif au squelette poreux
 T transmissivité d'un aquifère (m^2/s)
ou température absolue ($°K$)
 T tortuosité d'un milieu poreux (sans dimension)
 t coordonnée temporelle globale (s)
 t_b épaisseur d'une couche bloquante de polarisation (m)

t_{sej}	terme surfacique élémentaire de l'équilibre pondéré (kg/m ³ /s)
t_{vej}	terme volumique élémentaire de l'équilibre pondéré (kg/m ³ /s)
\vec{u}	vitesse de filtration, débit spécifique, vitesse apparente, ou vitesse de Darcy pour le fluide en écoulement dans un milieu poreux (m/s)
u	inconnue fondamentale
\dot{u}	dérivée temporelle moyenne, sur le pas de temps, de l'inconnue fondamentale
\hat{u}	valeur approximée de l'inconnue fondamentale
V	volume du domaine modélisé (m ³)
V_e	volume de l'élément fini (m ³)
\vec{v}	vitesse réelle du fluide en écoulement (m/s)
\vec{v}_h	projection horizontale de la vitesse réelle du fluide en écoulement (m/s)
\vec{v}_{in}	vitesse de convection dans le milieu au voisinage de la frontière du domaine modélisé (m/s)
\vec{v}_{out}	vitesse de convection à l'ambiance, au voisinage de la frontière du domaine modélisé (m/s)
\vec{v}_{Din}	vitesse de filtration dans le milieu au voisinage de la frontière du domaine modélisé (m/s)
v_{Dmax}	vitesse de Darcy maximale observée sur un graphique (m/s)
\vec{v}_{Dout}	vitesse de filtration à l'ambiance, au voisinage de la frontière du domaine modélisé (m/s)
v	vitesse sismique (m/s)
W	fonction de Hantush (sans dimension)
W_j	fonction de pondération spatio-temporelle associée au noeud i et au pas de temps Δt (sans dimension)
W_j^x	fonction de pondération spatiale associée au noeud j (sans dimension)
W^t	fonction de pondération temporelle associée au pas de temps Δt (sans dimension)
W_N^t	fonction de pondération temporelle normée associée au pas de temps Δt (sans dimension)
w	indice relatif au fluide mouillant
x	première coordonnée spatiale globale (m)
x_i	fraction molaire du $i^{ème}$ constituant d'une phase X du milieu poreux (sans dimension)
\vec{x}_j	position convective inverse d'une particule tracée (m)
y	seconde coordonnée spatiale globale (m)
z	troisième coordonnée spatiale globale (m)

- α coefficient de compressibilité volumique du squelette poreux (Pa^{-1}), chapitre I;
premier coefficient de décentrage (sans dimension), chapitre II;
ou taux d'implicité pour le flux convectif (sans dimension), chapitre II.
- α_f coefficient d'effet d'eau immobile pour la phase f (s^{-1})
- α_{opt} valeur optimale du premier coefficient de décentrage (sans dimension)
- α_T coefficient de transfert représentant l'effet différé d'une couche intermédiaire dans un modèle quasi tridimensionnel (sans dimension)
- α_d^* constante de transfert de l'eau mobile vers l'eau immobile (s^{-1})
- β coefficient de compressibilité du fluide (Pa^{-1}), chapitre I;
second coefficient de décentrage (sans dimension), chapitre II;
ou taux d'implicité pour le flux convectif (sans dimension), chapitre II.
- β, β' second couple de paramètres d'intégration temporelle (sans dimension)
- β_{opt} valeur optimale du second coefficient de décentrage (sans dimension)
- β_s variation relative de la masse volumique du fluide lors d'une variation unitaire de concentration massique (sans dimension)
- Δc écart entre les concentrations de 2 isovaleurs successives sur un graphique (kg/m^3)
- Δc_e écart maximum entre les concentrations nodales de l'élément (kg/m^3)
- Δc_v écart maximum entre les concentrations nodales du voisinage de l'élément (kg/m^3)
- Δc_{tot} variation de concentration sur l'ensemble de la zone modélisée du (kg/m^3)
- Δh écart entre les hauteurs piézométriques de 2 isovaleurs successives sur un graphique (m)
- ΔM masse injectée dans un essai de traçage (kg)
- Δt taille du pas de temps (s)
- Δx largeur de maille pour un problème unidimensionnel (m)
- Δl largeur de maille pour un problème bidimensionnel (m)
- δ fonction de Dirac (sans dimension)
- δ, δ' troisième couple de paramètres d'intégration temporelle (sans dimension)
- δt sous-intervalle de temps (s)

δu	variation arbitraire de l'inconnue fondamentale
δ_{ij}	symbole de Kronecker associé aux indices i et j (sans dimension)
ϵ	permittivité diélectrique absolue d'un milieu (F/m)
ϵ_0	permittivité diélectrique absolue du vide (F/m)
ϵ_r	permittivité diélectrique relative d'un milieu (sans dimension)
ϵ'	constante diélectrique d'un milieu sollicité par un courant alternatif, partie réelle (sans dimension)
ϵ'_r	permittivité diélectrique relaxée (sans dimension)
ϵ'_u	permittivité diélectrique non relaxée (sans dimension)
ϵ''	facteur de pertes diélectriques d'un milieu sollicité par un courant alternatif, partie imaginaire (sans dimension)
ϕ	proportion des vides du milieu poreux au accessible fluide en écoulement (sans dimension)
Γ_ϕ	quantité dégradée par unité de temps et par unité de masse dans une phase ϕ d'un milieu poreux (s^{-1})
η	seconde coordonnée spatiale locale associée à un élément fini (sans dimension)
κ	degré de séparation d'une fissure ou d'un réseau de fissures (sans dimension)
λ	constante de désintégration radioactive (s^{-1})
λ'	premier index de distribution de la taille des pores (sans dimension)
μ	viscosité dynamique du fluide (Pa.s)
μ'	viscosité dynamique modifiée pour prendre en compte une variation de concentration massique (Pa.s)
μ_0	viscosité dynamique initiale pour un état standard de pression, de concentration massique et de température (Pa.s)
μ_s	moyenne d'une distribution de probabilité (sans dimension)
ν	viscosité cinématique du fluide (m^2/s)
θ	angle polaire (sans dimension)
θ, θ'	premier couple de paramètres d'intégration temporelle (sans dimension)
θ_ϕ	proportion de volume occupée par une phase ϕ d'un milieu poreux (sans dimension)
θ_{ab}	angle de mouillabilité entre 2 fluides a et b (sans dimension)
ρ	masse volumique du fluide (kg/m^3)
ρ_a	résistivité diélectrique apparente d'un matériau ($\Omega.m$)

ρ_0	masse volumique initiale du fluide, pour un état de pression, de concentration massique, et de température (kg/m^3)
ρ_s	masse volumique du solide (kg/m^3)
σ	conductivité diélectrique d'un matériau (S/m)
σ_a	conductivité diélectrique apparente d'un matériau (S/m)
σ_s	écart type d'une distribution de probabilité (sans dimension)
σ_{ab}	tension interfaciale entre 2 fluides a et b (N/m)
τ	demi vie d'un radionuclide (s), chapitre I; coordonnée temporelle locale associée au pas de temps (sans dimension), chapitre II; temps caractéristique de relaxation (s), chapitre III; ou coordonnée d'intégration temporelle (s).
ω	pulsation d'une force électromotrice alternative (s^{-1})
ξ	première coordonnée spatiale locale associée à un élément fini (sans dimension)

TABLE DES MATIERES.

INTRODUCTION

CHAPITRE I: REPRESENTATION MATHEMATIQUE DES PHENOMENES PHYSICOCHIMIQUES SE PRODUISANT AU SEIN D'UN MILIEU POREUX.

I.1. INTRODUCTION.

I.2. THEORIE DETERMINISTE DES ECOULEMENTS MONOPHASIQUES EN MILIEU POREUX.

I.2.a) Notion de perméabilité et loi de Darcy.

I.2.b) Notion d'emmagasinement et de stockage de fluide en milieu poreux saturé.

I.2.c) Equation de diffusivité en nappe captive.

I.2.d) Equation de diffusivité en nappe libre.

I.2.e) Particularités des milieux fissurés à porosité multiple.

I.2.e.1) Ecoulement dans une fracture.

I.2.e.2) Perméabilité d'un massif fracturé.

I.2.e.3) Effet de drainance des pores.

I.3. THEORIE DETERMINISTE DU TRANSPORT MISCIBLE EN MILIEU POREUX.

I.3.a) Définition d'une substance miscible idéale.

I.3.b) Notion de diffusion moléculaire et loi de Fick.

I.3.c) Vitesse de convection et porosité efficace.

I.3.d) Notion de dispersion mécanique ou cinématique.

I.3.e) Description des phénomènes d'adsorption sur la surface solide.

I.3.f) Dégradation au sein d'une phase du système.

I.3.f.1) La désintégration radioactive.

I.3.f.2) La dégradation chimique.

I.3.f.3) Le déséquilibre chimique partiel.

- I.3.g) L'effet d'eau immobile.
- I.3.h) Equations de bilan du transport miscible.
- I.3.i) Particularités des milieux fissurés à porosité multiple.
 - I.3.i.1) Transport dans une fracture unique.
 - I.3.i.2) Prise en compte d'une porosité duale.
 - I.3.i.3) Anisotropie du transport en milieu fissuré.
 - I.3.i.4) Effet d'échelle dans un milieu fissuré.
- I.3.j) Particularités des substances miscibles non idéales.
 - I.3.j.1) perméabilité à une saumure.
 - I.3.j.2) Emmagasinement d'une saumure.
 - I.3.j.3) Equations de bilan.
 - I.4.j.4) Hypothèse de Boussinesq.
- I.4. THEORIE DETERMINISTE DE LA MIGRATION NON MISCIBLE EN MILIEU POREUX.
 - I.4.a) Définition d'une substance parfaitement immiscible.
 - I.4.b) Notion de mouillabilité.
 - I.4.c) Définition de la pression capillaire et hystérésis de saturation.
 - I.4.d) Notion de perméabilité relative.
 - I.4.e) Equations des écoulements biphasiques.
 - I.4.f) Particularités du milieu multiporeux.
 - I.4.f.1) Définition du mécanisme d'imbibition.
 - I.4.f.2) Application à un milieu fissuré.
 - I.4.f.3) Ecart par rapport à cette idéalisation.
 - I.4.f.4) Macroscopisation.

I.5. THEORIE DETERMINISTE UNIFIEE DES POLLUTIONS.

I.5.a) Définition d'une substance réelle.

I.5.b) Système complet régissant le comportement de substances partiellement miscibles entre elles.

I.6. DEFINITION DU MODELE MIS AU POINT.

CHAPITRE II: PROCEDES DE RESOLUTION DES EQUATIONS DE TRANSPORT MISCIBLE.

II.1. INTRODUCTION.

II.2. HISTORIQUE DES PROCEDES DE RESOLUTION DES EQUATIONS ELLIPTIQUES ET PARABOLIQUES.

II.2.a) Les méthodes analytiques ou pseudo-analytiques.

II.2.a.1) Transport unidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini.

II.2.a.2) Transport bidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini.

II.2.a.3) Transport unidimensionnel, injection en écoulement uniforme, dans un milieu infini.

II.2.a.4) Transport bidimensionnel, injection en écoulement uniforme, dans un milieu infini.

II.2.a.5) Transport bidimensionnel, injection instantanée, en écoulement convergent stabilisé, dans un milieu infini.

II.2.a.6) Transport bidimensionnel avec effet d'eau immobile, injection instantanée, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini.

II.2.b) Les méthodes par éléments finis.

II.2.b.1) Concepts de base.

1°) Discrétisation.

2°) Recherche de l'équilibre global.

II.2.b.2) Méthode de Bubnov-Galerkin.

II.2.b.3) Méthodes de Petrov-Galerkin.

1°) Problème unidimensionnel.

2°) Problème bidimensionnel.

II.2.b.4) Autres méthodes de décentrage.

1°) Méthode de la fonction de pondération optimale.

2°) Méthode de décentrage par principes pseudovariationnels.

II.2.b.5) Autres méthodes de résolution par éléments finis, en maillage fixe.

1°) Les méthodes mixtes eulériennes et lagrangiennes.

2°) Les méthodes spectrales.

3°) Les méthodes de Taylor-Galerkin.

4°) Les méthodes par transformée de Laplace.

II.2.c) Les méthodes par différences finies.

II.2.c.1) Concepts de base.

II.2.c.2) Méthode des différences finies "upstream".

II.2.c.3) Méthode des volumes finis.

II.2.d) Les méthodes Random Walk (R.W.).

II.2.d.1) Problème unidimensionnel.

II.2.d.2) Généralisation à 2 dimensions.

II.2.e) Autres procédés de résolution.

II.2.f) Synthèse et choix du procédé de résolution.

II.3. DEVELOPPEMENT, DANS UN CODE CLASSIQUE, DE NOUVEAUX ELEMENTS FINIS POUR LA RESOLUTION DES PROBLEMES DE TRANSPORT.

II.3.a) Introduction.

- II.3.b) Développement d'un élément fini F.U.P.G. 4 noeuds, pour un problème transitoire de transport bidimensionnel, en régime permanent d'écoulement, sans effet d'eau immobile.
- II.3.c) Développement d'un élément fini H.E.L.M. 4 noeuds pour le même problème.
- II.3.d) Tests des éléments créés sur quelques problèmes simples.
 - II.3.d.1) Tests unidimensionnels.
 - 1°) Convection-dispersion d'un front de polluant.
 - 2°) Convection-dispersion d'un pulse de polluant.
 - 3°) Représentation d'une dégradation pour ces 2 problèmes.
 - II.3.d.2) Tests bidimensionnels.
 - 1°) Injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme.
 - 2°) Injection continue, ponctuelle, dans un champ de convection uniforme.
 - 3°) Test de convection inclinée par rapport au maillage.
 - 4°) Injection continue, dans un champ convectif non uniforme.
 - II.3.d.3) Comparaison des 2 éléments.
 - II.3.d.4) Influence de la distorsion du maillage.
- II.3.e) Généralisation des éléments pour une sollicitation convective transitoire.
 - II.3.e.1) Problème découplé.
 - II.3.e.2) Problème couplé.
- II.3.f) Introduction de l'effet d'eau immobile dans les éléments créés.
 - II.3.f.1) Développements théoriques.
 - II.3.f.2) Tests unidimensionnels avec eau immobile.

II.3.f.3) Tests bidimensionnels avec eau immobile.

II.4. TRAITEMENT DES CONDITIONS AUX FRONTIERES POUR LES PROBLEMES DE TRANSPORT MISCIBLE.

II.4.a) Description des différents types de conditions frontières.

II.4.b) Modélisation de ces différentes conditions.

II.4.c) Tests de l'élément de frontière.

II.4.c.1) Drain soumis uniquement à une diffusion moléculaire.

II.4.c.2) Drain soumis à une diffusion moléculaire et à un courant convectif uniforme.

II.4.c.3) Drain soumis à une diffusion moléculaire et à un courant convectif faible au voisinage de l'ambiance.

CHAPITRE III: ETUDE EXPERIMENTALE EN LABORATOIRE D'UN PROCESSUS NATUREL DE MIGRATION: LE TRANSPORT DES NITRATES DANS LA CRAIE MULTIPOREUSE DE L'AQUIFERE DU CRETACE HESBIGNON.

III.1. INTRODUCTION.

III.1.a) Description qualitative du matériau étudié.

III.1.a.1) Echelle microscopique.

III.1.a.2) Echelle macroscopique.

III.1.a.3) Echelle mégascopique.

III.1.b) Description qualitative du comportement de la substance étudiée dans un tel milieu.

III.1.b.1) La convection.

III.1.b.2) La dispersion hydrodynamique.

III.1.b.3) L'effet d'eau immobile.

III.1.b.4) L'adsorption.

III.1.b.5) La dégradation.

III.2. METHODES DE DETECTION DES NITRATES.

III.2.a) Introduction.

III.2.b) Dosage par électrode spécifique.

III.2.c) Mesures par microdiélectrométrie.

III.2.c.1) Présentation de la méthode.

1°) Principe.

2°) Application à la détection des nitrates.

3°) Appareillage.

III.2.c.2) Tests du dispositif.

1°) Balayages de fréquence comparatifs.

2°) Cinétiques de diffusion.

III.2.c.3) Etalonnage des mesures.

III.3) CARACTERISATION DE LA CRAIE POREUSE.

III.3.a) Quantification de la diffusion dans les pores.

III.3.a.1) Mode opératoire.

III.3.a.2) Présentation des résultats.

III.3.a.3) Interprétation.

III.3.b) Influence de la circulation d'eau dans les pores.

III.3.b.1) Mode opératoire.

III.3.b.2) Présentation des résultats.

III.3.b.3) Interprétations.

III.3.c) Tentative de mise en évidence de l'adsorption sur la matrice poreuse.

III.3.c.1) Mode opératoire.

III.3.c.2) Présentation des résultats.

III.3.c.3) Interprétation.

III.3.d) Tentative de globalisation de comportement pour la craie poreuse en vue de quantifier son effet à l'échelle macroscopique d'un volume de craie fissurée.

III.3.d.1) Introduction.

III.3.d.2) Modèle théorique.

1°) A l'échelle microscopique.

2°) A l'échelle macroscopique.

III.3.d.3) Présentation des résultats.

III.3.d.4) Similitude avec l'expérimentation.

III.4. CARACTERISATION DE LA CRAIE FISSUREE.

III.4.a) Détermination de la porosité de fissures à l'échelle macroscopique.

III.4.a.1) Principe de la méthode.

III.4.a.2) Résultats.

III.4.b) Essai de dispersion sur une dalle de craie fissurée.

III.4.b.1) Mode opératoire.

1°) Description du dispositif.

2°) Préparation de l'échantillon.

III.4.b.2) Présentation des résultats de l'essai.

III.4.b.3) Interprétation de l'essai.

III.5. CONCLUSIONS.

CHAPITRE IV: ETUDE EXPERIMENTALE IN SITU DU TRANSPORT MISCIBLE EN MILIEU MULTIPOREUX.

IV.1. INTRODUCTION.

IV.1.a) Définition des traceurs.

IV.1.b) Définition des différents types d'essais.

IV.1.c) Visualisation du processus de transport lors des essais.

IV.1.d) Choix d'un site de référence.

IV.1.d.1) Contexte géologique et hydrogéologique.

IV.1.d.2) Equipement du site.

IV.1.d.3) Piézométrie naturelle des nappes.

IV.2. TRACAGES EN ECOULEMENT CONVERGENT SUR LE SITE DE BERTREE.

IV.2.a) Premier multitraçage dans la nappe phréatique du Landenien (février 1991).

IV.2.a.1) Description de l'essai de pompage.

IV.2.a.2) Modélisation de l'essai de pompage.

IV.2.a.3) Description des traçages.

IV.2.a.4) Modélisation des traçages.

IV.2.b) Second multitraçage dans la nappe phréatique du Landenien (avril 1991).

IV.2.b.1) Description de l'essai de pompage.

IV.2.b.2) Modélisation de l'essai de pompage.

IV.2.b.3) Description des traçages.

IV.2.b.4) Modélisation des traçages.

1°) Traçage au lithium.

2°) Traçage à l'uranine.

3°) Traçage au nitrate.

4°) Traçage à l'iodure.

IV.2.c) Premier multitraçage dans l'aquifère semi-captif du Crétacé (février 1992).

IV.2.c.1) Description de l'essai de pompage.

IV.2.c.2) Modélisation de l'essai de pompage.

IV.2.c.3) Description des traçages.

IV.2.c.4) Modélisation des traçages.

1°) Traçages à partir du piézomètre Pz10: nitrate, potassium, iodure.

2°) Traçages à partir du piézomètre
Pz12: lithium, sodium.

3°) Traçages à partir du piézomètre
Pz2: uranine.

IV.3. MULTITRACAGE EN ECOULEMENT NATUREL SUR LE
SITE DE BERTREE (août 1992).

IV.3.a) Conditions hydrodynamiques.

IV.3.b) Description des traçages.

IV.3.c) Modélisation des traçages.

IV.3.c.1) Traçages au lithium et au nitrate.

IV.3.c.2) Traçage à l'uranine.

IV.4. DEDUCTIONS LIEES A L'ENSEMBLE DES TRACAGES
REALISES SUR LE SITE DE BERTREE.

IV.4.a) Comparaison des 2 aquifères.

IV.4.b) Comparaison des tests en écoulement naturel
et en écoulement convergent.

IV.4.c) Influence des différents modes d'injection.

IV.4.d) Mode de résolution de l'équation de
transport.

IV.5. ETUDE DE LA VARIABILITE SPATIALE DES
PROPRIETES DE TRANSPORT DANS LA CRAIE.

IV.5.a) Description du site de Crisnée.

IV.5.b) Traçage en écoulement convergent sur le
site de Crisnée.

IV.5.b.1) Description de l'essai de pompage.

IV.5.b.2) Modélisation de l'essai de pompage.

IV.5.b.3) Description des traçages.

IV.5.b.4) Modélisation des traçages.

IV.5.b.5) Simulation complémentaire pour le
traçage au lithium.

IV.5.c) Comparaison du site de Crisnée avec le
site de référence (Bertrée) et conclusions
du chapitre.

CONCLUSIONS GENERALES.

1. OBJECTIFS ATTEINTS.
 - 1.a) Mécanismes du transport dans la craie de Hesbaye.
 - 1.b) Détermination des coefficients de transport pour la craie.
 - 1.c) Mise au point d'un logiciel d'interprétation.
2. PROLONGEMENTS DES TRAVAUX DANS LE DOMAINE NUMERIQUE.
3. PROLONGEMENTS DES TRAVAUX DANS LE DOMAINE EXPERIMENTAL.
 - 3.a) Expérimentation en laboratoire.
 - 3.b) Expérimentation in situ.
4. AUTRES RECHERCHES POSSIBLES.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.

ANNEXES.

1. ORGANIGRAMME DU PROGRAMME LAGAMINE.
2. DONNEES DE RESTITUTION.
3. EVALUATION DES TENEURS EN NITRATES POUR L'AQUIFERE DE HESBAYE.

INTRODUCTION

1. DEFINITION D'UN OBJECTIF.

L'étude de la migration des polluants représente un vaste sujet. Pour réaliser un travail de recherche approfondie, il convient de cibler un créneau spécifique. Dans le cadre de ce travail, nous nous intéresserons plus particulièrement aux substances miscibles. Nous tâcherons de représenter le transport de ces produits par un modèle suffisamment général.

L'élaboration d'un tel outil passe par les étapes définies ci dessous.

1.a) Définition d'un modèle conceptuel.

Cette étape permet de choisir une représentation mathématique pour les phénomènes physiques observés et de définir les coefficients associés aux équations correspondantes. Nous étudierons les représentations déterministes et nous envisagerons leur applicabilité à un milieu multiporeux.

1.b) Résolution des équations.

Une fois que le modèle conceptuel est établi, il convient de résoudre le problème de champ qui y correspond. Outre les méthodes analytiques de résolution qui ont l'avantage d'être simples et l'inconvénient d'avoir un domaine d'application restreint, il faut envisager des méthodes numériques plus souples.

A cet égard, les équations de transport ont, lors de leur intégration numérique, un comportement plus complexe que les équations d'écoulement; et les méthodes numériques traditionnelles se révèlent insuffisantes. Pour cette raison, de nouveaux procédés ont été développés.

En ce qui nous concerne, nous tâcherons de faire le point sur les résolutions par éléments finis qui utilisent des maillages fixes. Nous programmerons 2 méthodes, que nous jugeons efficaces, dans un logiciel de pointe, le code LAGAMINE.

1.c) Détermination des coefficients.

Les bases théoriques du modèle étant connues, il faut alors déterminer les données à introduire pour envisager un scénario réel. Les données géométriques et les informations sur le champ inconnu sont nécessaires pour calibrer le modèle. Plus importantes encore sont les valeurs des coefficients de transport relatifs aux équations. Celles-ci sont définies pour un milieu déterminé et une substance donnée.

Par conséquent, il convient de faire un choix quant à l'application envisagée. Nous étudierons le transport des nitrates dans l'aquifère crayeux et multiporeux du Crétacé de Hesbaye. Le cadre de ce problème est défini dans les sections suivantes. Signalons, dès maintenant, que les coefficients obtenus pour les nitrates peuvent, en première approximation, servir à modéliser le transport d'autres sels se propageant dans le même milieu.

L'élaboration de ce modèle permet d'envisager des applications pratiques essentielles, à savoir:

- la détermination objective de périmètres de protection pour les ouvrages de captage,
- la définition de zones à risques et l'étude du comportement régional pour un aquifère multiporeux.

2. DEFINITION DU CONTEXTE GEOLOGIQUE ET HYDROGEOLOGIQUE.

En Belgique, la craie est presque exclusivement présente dans les formations datant du Crétacé. Durant cette période, le mouvement transgressif des mers sur le socle primaire pénéplané après l'orogénèse hercynienne, a induit des conditions favorables à ce type de sédimentation sur quasi l'ensemble du territoire belge.

La répartition géographique actuelle des dépôts crayeux est le résultat de ces mouvements transgressifs, du paléorelief existant à l'époque, et de l'érosion postérieure à la sédimentation. La stratigraphie des horizons crayeux, allant du Turonien jusqu'au Maastrichtien, peut être très variable d'une région à l'autre, en fonction des conditions paléogéographiques locales. Des épaisseurs très importantes de craie existent notamment dans certaines régions, suite à des phénomènes tectoniques particuliers, comme dans le bassin de Mons (Monjoie 1993)

La figure 1 illustre l'épaisseur des sédiments marins du Crétacé ainsi que les principales zones d'affleurement.

La craie constitue une excellente roche réservoir à double porosité. Environ 20% de l'eau souterraine exploitée en Belgique provient des aquifères crayeux (Derijcke 1987).

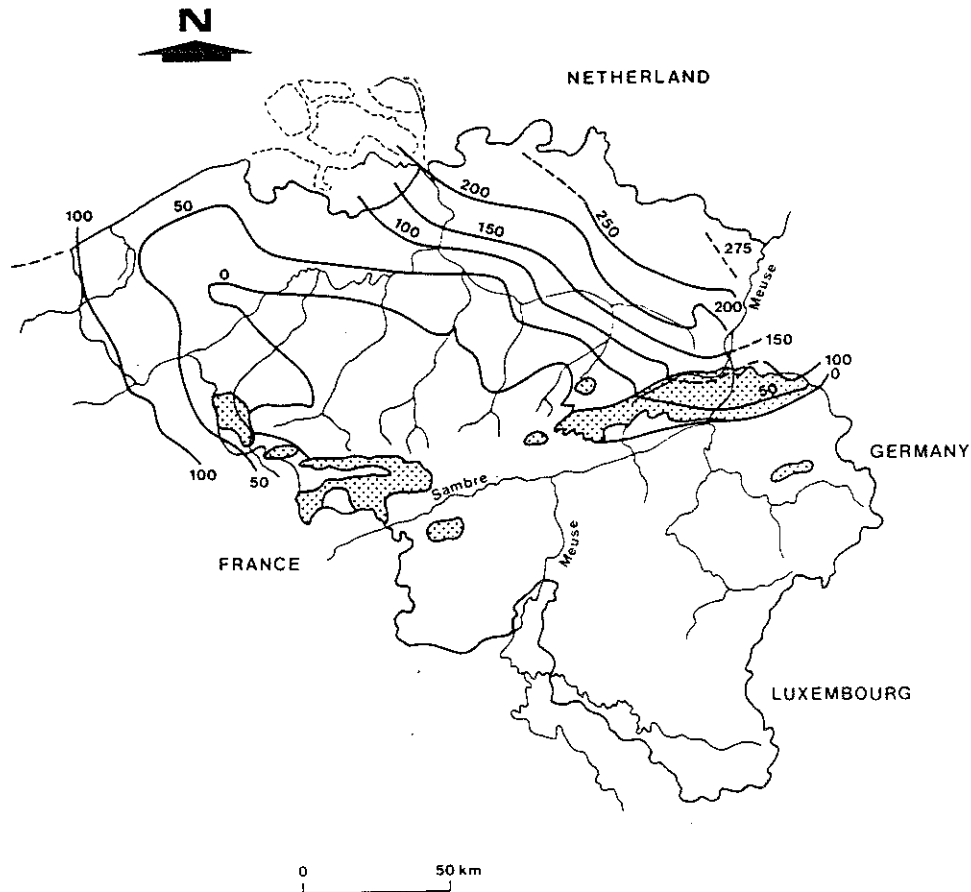


figure 1: courbes isopaques et zones d'affleurement des dépôts crayeux du Crétacé en Belgique.

Dans le Nord du pays, ces aquifères sont captifs sous la couverture tertiaire. A l'Est, en Hesbaye et dans le pays de Herve, les craies sont subaffleurantes et des conditions de nappe libre prévalent. Toutefois, il existe des couches superficielles d'alluvions limoneuses et de dépôts tertiaires qui jouent un rôle de filtre pour les eaux de percolation et qui créent localement des conditions de nappe semi-captive, voire captive.

L'aquifère de Hesbaye est situé près de Liège (figure 2), au Nord-Ouest de Liège. Il fournit l'alimentation en eau de la région liégeoise pour plus de $60.000 \text{ m}^3/\text{jour}$. Le bassin hydrologique correspond à une zone de 350 km^2 . La réalimentation de l'aquifère, par infiltration efficace, a été estimée à 175-275 mm par an; et le seuil de surexploitation n'est pas atteint (Monjoie 1967).

On distingue essentiellement 2 niveaux aquifères séparés par un banc de craie indurée appelé "hard ground".

- La craie blanche du Campanien (niveau "inférieur"), compacte, d'épaisseur comprise entre 20 et 50 mètres. Elle est assez fracturée en certains endroits ce qui entraîne l'existence de quelques axes drainants préférentiels. Son coefficient de perméabilité (K) varie entre $1 \cdot 10^{-5}$ et $5 \cdot 10^{-4}$ m/s, son emmagasinement (S) se situe entre 0.01 et 0.12.

- Les craies du Maastrichtien (niveau "supérieur"), de 10 à 15 mètres d'épaisseur, moins compactes et parfois de couleur grise, plus exposées à l'altération et à la déconsolidation. Leurs paramètres hydrodynamiques sont les suivants: $2 \cdot 10^{-4} \leq K \leq 5 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$ et $0.03 \leq S \leq 0.15$.

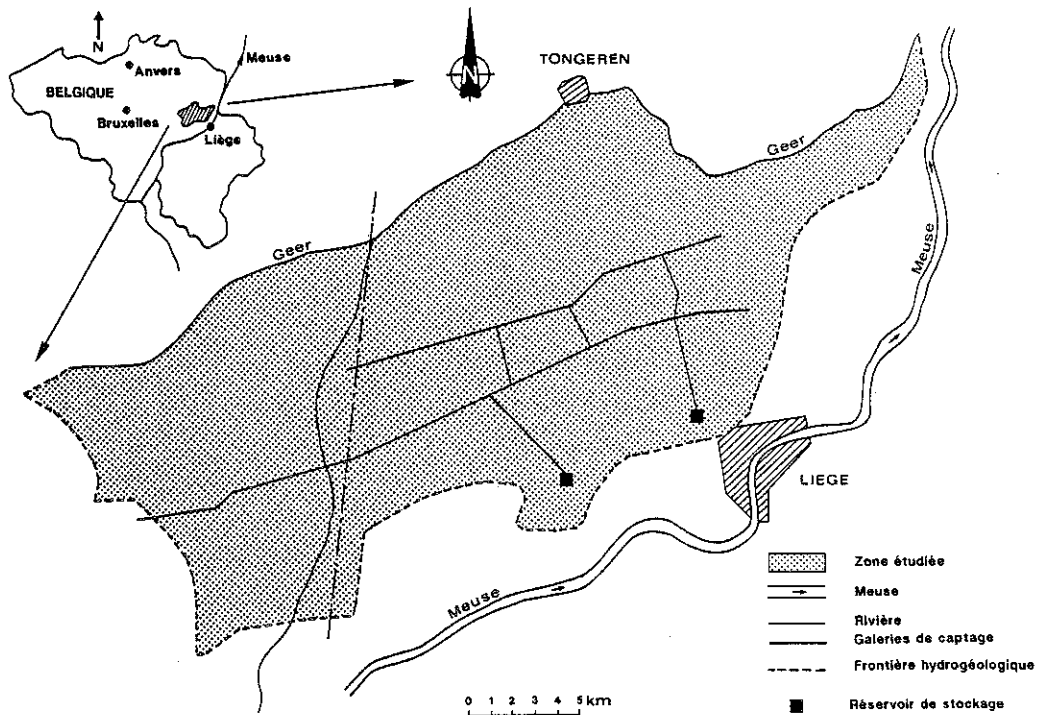


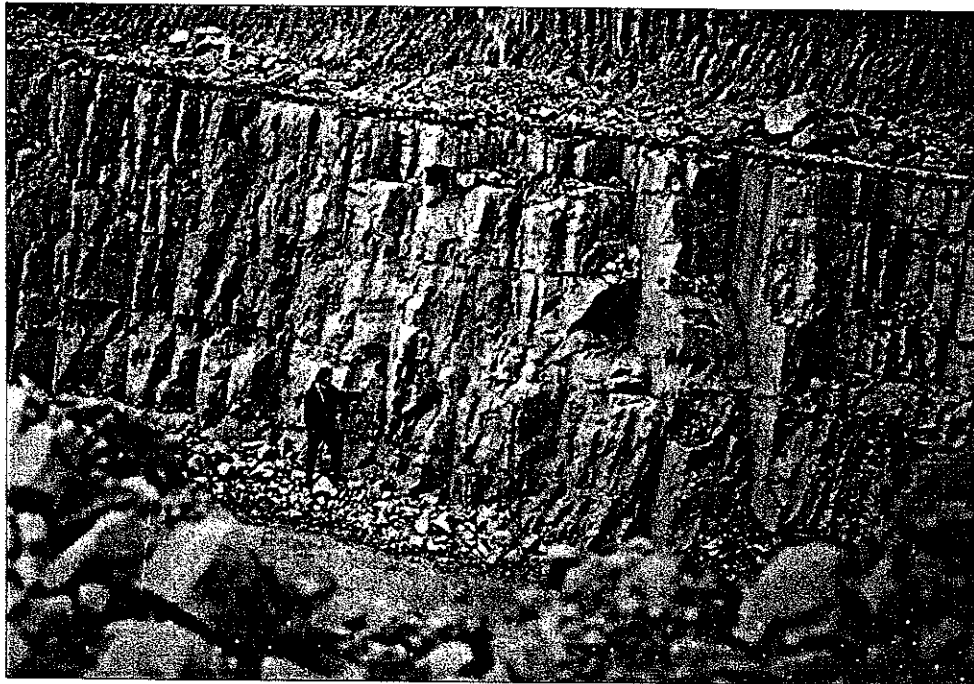
figure 2: Plan de situation de la nappe aquifère de Hesbaye

L'emmagasinement de ces niveaux est important car nous sommes en condition de nappe libre; par conséquent, les porosités de pores et de fractures peuvent toutes deux intervenir dans le processus de saturation. Par contre, la perméabilité est essentiellement régie par l'intensité de la fracturation et la circulation rapide des eaux dans les fissures.

Des affleurements de ces 2 types de craie ont été photographiés (figure 3). On y constate l'expression d'une fissuration très importante pour la craie maastrichtienne. Pour la craie campanienne, elle est davantage liée à des réseaux de diaclases. On remarquera également l'hétérogénéité plus grande de la craie maastrichtienne dans laquelle on peut trouver des bancs chargés de rognons de silex.



a) craie maastrichtienne (Boirs)



b) craie campanienne (Lixhe)

figure 3: affleurements de craie dans le pays de Herve

3. DEFINITION DU PROBLEME QUALITATIF.

Du point de vue chimique, l'eau extraite de la nappe de Hesbaye est d'excellente qualité, hormis les teneurs en nitrites et en nitrates qui frôlent localement et épisodiquement les normes imposées par la Région Wallonne (100 ppb pour les nitrites et 50 ppm pour les nitrates). Nous envisageons ici les différents aspects de la problématique liée à ces teneurs.

3.a) Précautions liées à la toxicité des composés nitrés.

En temps que tels, les nitrates ne sont pas toxiques. Toutefois, lorsqu'ils sont ingérés par l'organisme, ils peuvent être transformés.

On identifie tout d'abord, une transformation nitrate-nitrite, sous une action enzymatique anaérobie. Les nitrites ainsi libérés peuvent alors oxyder l'hémoglobine du sang pour former la méthémoglobine. Ce nouveau composé est moins apte à capter l'oxygène au niveau des poumons; l'organisme est moins oxygéné.

Ces mécanismes agissent de manière très modérée chez la plupart des individus, et il faudrait ingérer de l'eau avec des teneurs élevées (10 à 20 fois la norme) pour qu'ils représentent un danger. Il n'en va pas de même pour les nourrissons. La transformation nitrate-nitrite se fait avec un meilleur rendement dans l'organisme du bébé. Ce dernier peut, en ingérant de l'eau à plus de 90 ppm, contracter la "maladie bleue" associée à un appauvrissement en oxygène de l'organisme.

Il semblerait toutefois que cette maladie ait disparu en Belgique, mais on peut se demander si ce n'est pas dû à une utilisation plus répandue de l'eau minérale dans le mode d'alimentation des nourrissons.

L'autre transformation chimique importante des nitrites dans l'organisme se produit en présence d'acides aminés (dans l'estomac par exemple). Il s'agit de la formation de nitrosamines, substances considérées comme potentiellement cancérigènes. Des études sur de petits animaux tendent même à prouver que ces substances pourraient engendrer, dans des cas extrêmes, des modifications au niveau des chaînes d'A.D.N. (Acide Désoxyrhybo-Nucléique) qui déterminent l'hérédité. Toutefois en ce qui concerne l'homme, l'action des nitrosamines est mal connue.

Bien entendu, les risques que nous venons de décrire sont accrus si on absorbe directement des nitrites ou des nitrosamines.

Pour toutes ces raisons, l'O.M.S. (Organisation Mondiale de la Santé) préconise de limiter l'ingestion de composés nitrés, tant via l'eau de distribution que par les aliments solides (viandes, légumes, ...). Pour l'eau, elle conseille des seuils en nitrates de l'ordre de 45 ppm.

Signalons encore un dernier effet des nitrates qui concerne les eaux de surface. Dans les cours d'eau, la principale action des nitrates est de favoriser une croissance des populations d'algues dans les zones à faible circulation. La dégradation de ces algues donne à l'eau un goût désagréable dont on ne peut se débarrasser par les procédés standards d'épuration.

3.b. Origine des nitrates en Hesbaye.

Nous avons signalé que les teneurs en nitrates de l'eau captée en Hesbaye avoisinaient par endroit les 50 ppm. Ces teneurs représentent une moyenne sur les couches profondes de l'aquifère dans lesquelles se situent les galeries de captage.

En fait, dans les couches supérieures, plus fissurées et plus proches de la surface, les quantités de nitrates peuvent être plus élevées (jusqu'à 200 ppm). En fait, on constate, au cours du temps, une croissance régulière du "background" régional avec des teneurs localement très importantes.

L'origine de ces apports est expliquée essentiellement par le contexte d'agriculture intensive de la région. L'épandage d'engrais azotés, pour améliorer le rendement de certaines cultures, y est une pratique courante. En outre, de fortes concentrations sont observées près des villages. La raison en est l'existence de nombreux puits perdus et de porcheries industrielles dont les lisiers sont fortement nitrates. Entrent également en ligne de compte, le stockage, sans précautions, des fumiers, et les vidanges aléatoires de cuves à purin.

Des efforts sont actuellement entrepris pour limiter ces apports. Mais, les nappes aquifères sont des systèmes possédant une forte inertie et il est important d'en comprendre les évolutions futures et de connaître leur temps de régulation. En particulier, pour la Hesbaye, il convient de voir comment les transports verticaux et horizontaux se combinent pour déterminer l'évolution des concentrations en nitrates lorsqu'on progresse vers les couches profondes de l'aquifère.

Enfin, remarquons que, dans les couches superficielles de limons désaturés, d'importants phénomènes biochimiques et chimiques (actions bactériennes et végétales, adsorption,...) régissent la corrélation entre les quantités déversées et les quantités effectivement infiltrées verticalement jusqu'à l'aquifère. Par contre, dans les couches de craie saturée, le transport est multidimensionnel et la corrélation spatiale est moins immédiate. Les actions chimiques y sont supplantées par des phénomènes plus physiques que nous allons étudier en détail.

CHAPITRE I

REPRESENTATION MATHÉMATIQUE DE PHÉNOMÈNES PHYSICOCHEMISTIQUES ISOTHERMES SE PRODUISANT AU SEIN D'UN MILIEU POREUX

I.1. INTRODUCTION.

Lorsqu'on désire simuler les processus physicochimiques de l'hydraulique souterraine et du transport en milieu poreux, on se propose en fait de résoudre un problème de champ. Il s'agit de déterminer, à partir de conditions initiales et de conditions-limites appropriées, les variations spatiales et temporelles de grandeurs fondamentales (pression, concentration, saturation) dont on déduit, à posteriori, des grandeurs dérivées (flux vectoriels, emmagasinement de matière).

En posant les équations qui régissent le problème envisagé, on fait appel à des hypothèses et à des concepts dont la validité doit être discutée et mise à l'épreuve. On élabore ainsi un modèle conceptuel.

Cette première étape se révèle fondamentale pour la fiabilité des résultats. En aucun cas, un modèle ne peut être une "boîte noire" dont on ne connaîtrait pas le fonctionnement. Il ne suffit pas de calibrer des résultats, encore faut-il que la relation entre ceux-ci soit l'image du processus physicochimique observé dans la nature; sans quoi le modèle ne peut servir d'outil interprétatif.

Nous nous proposons, dans ce premier chapitre, d'énumérer un ensemble de représentations mathématiques, de définir les concepts qui y sont liés, et de préciser leurs conditions de validité.

Un premier choix doit être fait quant au type d'équation descriptive:

- le milieu poreux peut être envisagé dans son entière complexité en calculant les paramètres de distribution statistique des inconnues fondamentales. On parle alors de théorie stochastique. La théorie de la percolation et les représentations du milieu poreux par des fractals s'apparentent à ce type de méthodes.
- le milieu poreux peut être considéré comme un continuum homogène. Les propriétés en un point de ce nouveau milieu équivalent sont représentatives d'un ensemble de chenaux répartis plus ou moins régulièrement sur un certain volume: l'élément de volume représentatif du modèle (E.V.R.). Cette hypothèse de continuité va de pair avec l'élaboration de lois macroscopiques nécessitant la détermination de coefficients à cette même échelle. Dans ce second cas, on parle de théorie déterministe.

Dans ce travail, les théories déterministes (qui sont les plus répandues) seront privilégiées car elles utilisent directement les coefficients représentatifs de l'échelle à laquelle on travaille. Toutefois, puisque le milieu étudié possède une porosité multiple, il convient d'avoir à l'esprit la taille de l'E.V.R. nécessaire pour appréhender chaque type de porosité.

Rappelons ici quelques définitions de l'E.V.R.¹ (Bear et Bachmat, 1990):

- l'E.V.R. est un élément de volume dans lequel la phase solide du milieu poreux est présente dans les mêmes proportions que sur une large plage du domaine étudié;
- l'E.V.R. est un élément de volume pour lequel les équations déterministes établies sont valables;
- l'E.V.R. est l'élément de volume minimum nécessaire pour déterminer les coefficients intervenant dans ces équations;
- l'E.V.R. est l'échelle à laquelle le modèle devient moins précis.

¹ Une évaluation de la taille de l'E.V.R. peut être donnée comme suit (Bear et Bachmat, 1967):

$$\begin{aligned} l &>> r_h \\ l &<< L \end{aligned} \quad (I.1)$$

avec r_h = rayon hydraulique des chenaux poreux
= volume des vides / surface spécifique

L = longueur caractéristique du domaine sur lequel un changement significatif de la valeur moyenne des paramètres peut se produire

Soit le milieu poreux et fissuré représenté ci-dessous.

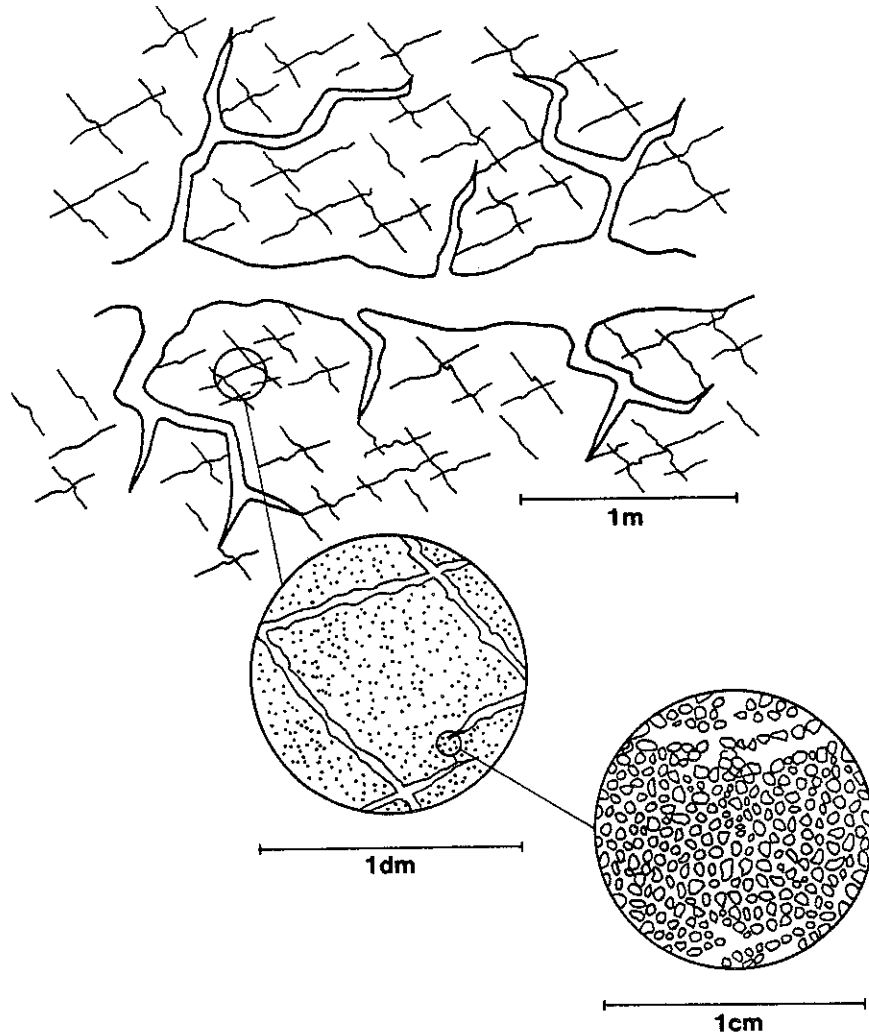


figure I.1: représentation schématique d'un milieu multiporeux.

D'après ces définitions de l'E.V.R., il est clair qu'une carotte de quelques cm suffit pour étudier la porosité de pores, que le comportement dans des fissures secondaires peut être évalué en laboratoire si la taille de l'échantillon est de l'ordre du mètre et que, pour aborder l'effet des fissures principales, un essai in situ est nécessaire (entre 2 piézomètres distants de quelques dizaines de mètres). Finalement, si, par endroits, le milieu se trouve karstifié ou s'il est fracturé par de nombreux joints et failles ouvertes, la taille de l'E.V.R. peut devenir similaire à celle de l'aquifère et la précision du modèle correspondant est nulle. Par conséquent, pour ce dernier type d'éventualité, les modèles déterministes peuvent être mis en échec, à moins de représenter explicitement tous les joints avec des coefficients qui leur sont propres.

I.2. THEORIE DETERMINISTE DES ECOULEMENTS MONOPHASIQUES EN MILIEU POREUX.

Dans cette section, les lois fondamentales de l'hydraulique souterraine sont rappelées brièvement. Ensuite, l'accent sera mis sur les particularités liées à un milieu multiporeux. Rappelons qu'il s'agit d'un problème de champ ayant pour inconnue fondamentale la pression interstitielle du fluide (p en Pascal) et que les coefficients qui caractérisent le milieu à l'échelle du E.V.R. sont la perméabilité (k en m^2) et l'emménagement spécifique (S_s en m^{-1}).

I.2.a) Notion de perméabilité et loi de Darcy.

La loi de Darcy a été établie pour la première fois par son auteur en 1856. Cette loi de comportement relie la vitesse de filtration du fluide dans le milieu poreux aux causes réelles de son déplacement, à savoir le gradient de pression interstitielle et la gravité. Microscopiquement, elle correspond aux frictions entre le solide et le fluide et au contournement du squelette poreux par ce dernier. Pour un milieu isotrope, elle s'écrit:

$$\vec{u} = - k/\mu \cdot (\vec{\text{grad}} p + \rho \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z) \quad (\text{I.2})$$

où \vec{u} = vecteur vitesse de filtration
ou débit spécifique (m/s)

p = pression interstitielle (Pa)

z = altitude par rapport à un niveau de référence (m)

k = perméabilité intrinsèque du milieu poreux (m^2)

μ = viscosité dynamique du fluide (Pa.s)

$\rho \cdot g$ = poids volumique du fluide (N/m^3)

Cependant, dans la nature, on peut observer des milieux anisotropes (stratification, famille de joints, ...). En toute généralité, la perméabilité doit, par conséquent, être représentée par un tenseur d'ordre 2.

On écrit :

$$\vec{u} = - \underline{k}/\mu \cdot (\vec{\text{grad}} p + \rho \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z) \quad (\text{I.3})$$

avec \underline{k} = tenseur de perméabilité

$$= \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{12} & k_{22} & k_{23} \\ k_{13} & k_{23} & k_{33} \end{bmatrix} \quad \text{dans des axes quelconques}$$

$$= \begin{bmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{bmatrix} \quad \text{dans les axes d'orthotropie}$$

I.2.b) Notion d'emménagement et stockage de fluide en milieu poreux saturé.

Lorsqu'on envisage un écoulement transitoire, une certaine masse de fluide peut être stockée au sein du milieu poreux.

Elle s'écrit $\frac{\partial(n.\rho)}{\partial t}$ où $n.\rho$ est la masse de fluide présente dans un volume unitaire de milieu poreux (ρ est la masse volumique du fluide en kg/m^3 et n la porosité totale accessible au fluide, sans dimension).

Développons cette expression :

$$\frac{\partial(n.\rho)}{\partial t} = n.\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho.\frac{\partial n}{\partial t} \quad (\text{I.4})$$

Le premier terme de (I.4) est lié à la compressibilité du fluide. Si on suppose que l'équation d'état de ce dernier est indépendante de la température (gradient géothermique négligeable) et de sa composition chimique (concentrations en substances dissoutes sans influence sur la densité), on a :

$$\rho = \rho(p, c, T) = \rho(p) \quad (\text{I.5})$$

$$\begin{aligned} \text{il vient donc : } n.\frac{\partial\rho}{\partial t} &= n.\frac{\partial\rho}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\ &= n.\beta.\rho.\frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{I.6})$$

$$\text{en définissant } \beta = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial\rho}{\partial p} = \text{coefficient de compressibilité du fluide (Pa}^{-1}\text{)}$$

Le second terme de (I.4) est lié à la déformabilité² du squelette poreux. Il peut être démontré (Dassargues, 1991) que :

$$\rho.\frac{\partial n}{\partial t} = \rho.\alpha.\frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{I.7})$$

si on néglige la déformabilité du solide dont est composé la matrice, avec α = coefficient de compressibilité volumique du squelette poreux (Pa^{-1}).

Finalement, il est possible de définir le coefficient d'emménagement spécifique S_s qui relie la quantité emmagasinée à la cause qui lui a donné naissance (ici une variation de pression uniquement) :

$$S_s = \rho.g.(n.\beta + \alpha) = \frac{\partial(n.\rho.g)}{\partial t} / \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{I.8})$$

² Cette démonstration implique que la vitesse de filtration soit considérée comme relative par rapport au solide, ce qui est logique lorsque le milieu peut se déformer.

I.2.c) Equation de diffusivité en nappe captive.

Jusqu'à présent, nous nous sommes bornés à décrire les lois comportementales de l'écoulement monophasique. Pour résoudre le problème de champ, il convient d'établir une équation de bilan en masse (dérivée du principe de continuité de la matière): l'équation de diffusivité.

soit l'équation de continuité:

$$\operatorname{div} (\rho \cdot \vec{u}) + \frac{\partial (\rho \cdot n)}{\partial t} = 0 \quad (\text{I.9})$$

En y introduisant la loi de Darcy sous sa forme généralisée (I.3) et la loi d'emménagement (I.8), il vient:

$$\operatorname{div} [\rho \cdot g \cdot \underline{k} / \mu \cdot (\vec{\operatorname{grad}} p + \rho \cdot g \cdot \vec{\operatorname{grad}} z)] = S_s \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{I.10})$$

$$\text{ou encore: } \operatorname{div} [\underline{K} \cdot (\vec{\operatorname{grad}} p + \rho \cdot g \cdot \vec{\operatorname{grad}} z)] = S_s \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{I.11})$$

avec $\underline{K} = \rho \cdot g \cdot \underline{k} / \mu =$ tenseur des coefficients de perméabilité (m/s) qui dépend de la nature du fluide (contrairement à \underline{k})

Dans cette équation, la seule inconnue est la pression interstitielle. Si la masse volumique du fluide est constante sur le domaine étudié, mais seulement dans ce cas, il est possible de transformer ce bilan massique en un bilan volumique.

$$\begin{aligned} \text{on écrit: } \operatorname{div} \{ \underline{K} \cdot \vec{\operatorname{grad}} [p/(\rho \cdot g) + z] \} &= S_s \cdot \frac{\partial}{\partial t} [p/(\rho \cdot g) + z] \\ \Leftrightarrow \operatorname{div} (\underline{K} \cdot \vec{\operatorname{grad}} h) &= S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{I.12})$$

h étant la hauteur piézométrique (en m) du point considéré, somme d'un terme de pression $p/(\rho \cdot g)$ et d'un terme potentiel z .

Cette formulation est souvent utilisée car, lorsque le milieu est isotrope, il est aisé de tracer les lignes de courant perpendiculaires aux isopièzes ($h = \text{cte}$).

Il faut encore remarquer que, dans les nappes captives, en vertu de la relation I.8, l'effet transitoire existe uniquement à cause des compressibilités du fluide en mouvement et du squelette poreux. En d'autres termes, il s'agit là d'un processus responsable de la déformation d'un massif qui n'est pas toujours détectable par les tassements qu'elle provoque.

I.2.d) Equation de diffusivité en nappe libre.

Lorsque la nappe n'est pas captive, il se produit, à sa surface libre, un phénomène de saturation ou désaturation du milieu poreux. Pour en tenir compte globalement, il faut modifier les lois de comportement et y introduire des variations importantes lorsque la pression interstitielle devient négative (suction capillaire).

La quantité emmagasinée passe de 0 à n_{e_0} (n_{e_0} étant la porosité comblée par le fluide lors de la phase de saturation). La perméabilité passe de 0 à k dans les mêmes délais.

Définissons la fonction $H_m(p)$ comme suit (fig. I.2) :

$$\begin{aligned} H_m(p) &= 0 & \forall p < 0 \\ H_m(p) &= S_s \cdot p + \rho \cdot g \cdot n_{e_0} & \forall p \geq 0 \end{aligned} \quad (I.13)$$

Cette fonction peut représenter l'évolution de la masse emmagasinée dans un volume unitaire de milieu poreux lorsqu'on néglige l'épaisseur de la frange capillaire.

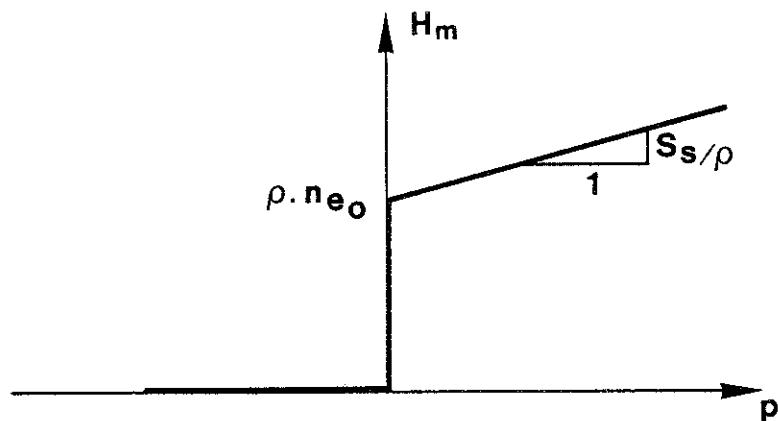


figure I.2: évolution théorique de la quantité emmagasinée (kg/m^3) en fonction de la pression interstitielle (Pa).

Le coefficient d'emmagasinement spécifique généralisé devient $\frac{\partial H}{\partial p}$.

Le tenseur de perméabilité modifié s'écrit $\underline{k} = \underline{k}_{\text{sat}} \cdot H / (\rho \cdot g \cdot n_{e_0})$,

$\underline{k}_{\text{sat}}$ étant le tenseur de perméabilité du milieu saturé.

il vient donc :

$$\text{div} [H/n_{e_0} \cdot \underline{k}_{\text{sat}} \cdot (\vec{\text{grad}} p + \rho \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z)] = \frac{\partial H}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad (I.14)$$

Ecrive telle quelle, cette équation présente une singularité, à savoir que la limite pour p tendant vers 0 de $\frac{\partial H}{\partial p}$ tend vers l'infini.

Elle n'est donc pas utilisable telle quelle. Physiquement, il est aisé de comprendre que la saturation ou la désaturation du milieu ne peut se faire instantanément et qu'il existe des états intermédiaires, à saturation partielle, définissant la frange capillaire. Le comportement de cette zone est régi par les équations des écoulements polyphasiques avec toutefois une particularité: la phase gazeuse (l'air) subit des mouvements négligeables et son équation bilantaire n'est pas à considérer.

Retenons que, tant que la pression interstitielle diminue, la perméabilité du milieu poreux au fluide n'est pas nulle et une certaine quantité d'eau est extraite du milieu par désaturation. Lorsque le milieu arrive à une saturation résiduelle (S_{rw}), la perméabilité s'annule. La pression interstitielle négative qui s'établit au cours de cette évolution correspond à la pression capillaire p_c et représente l'énergie nécessaire pour supprimer les interfaces air-fluide. Pour décrire ce type d'actions, il convient d'utiliser une fonction H_m modifiée (fig. I.3.a); les variations de S_s et de k qui en sont déduites sont également représentées (fig. I.3.b et I.3.c).

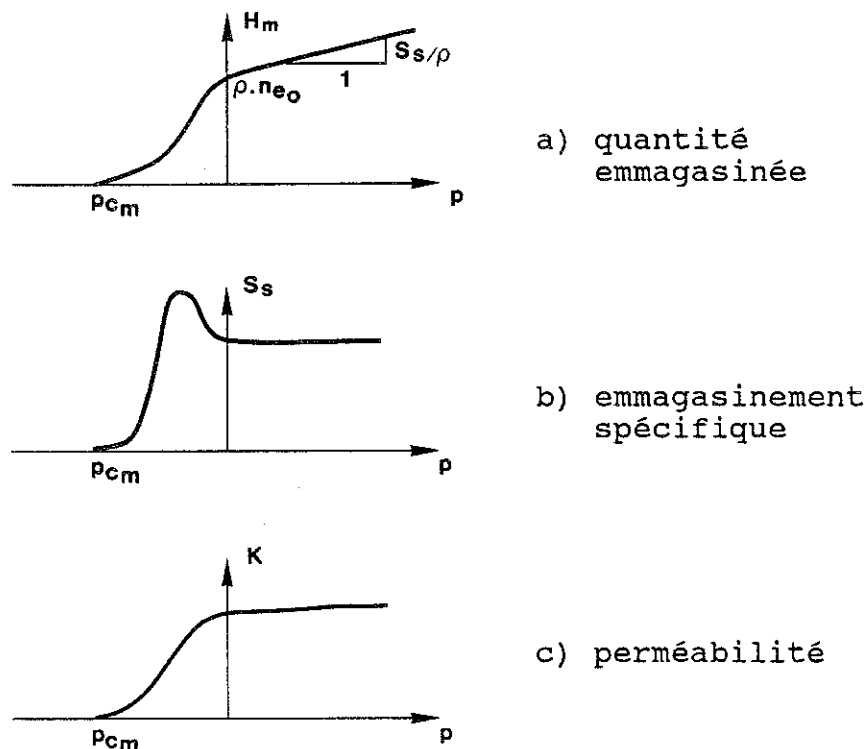


figure I.3: variations des paramètres d'écoulement dans la frange capillaire.

³ Lorsqu'un tel schéma est utilisé dans un modèle numérique, des problèmes "d'overflow" apparaissent (Charlier et Radu, 1988)

Quelques exemples de variation de perméabilité dans la frange capillaire sont illustrés à la figure I.4 (Dassargues, 1991).

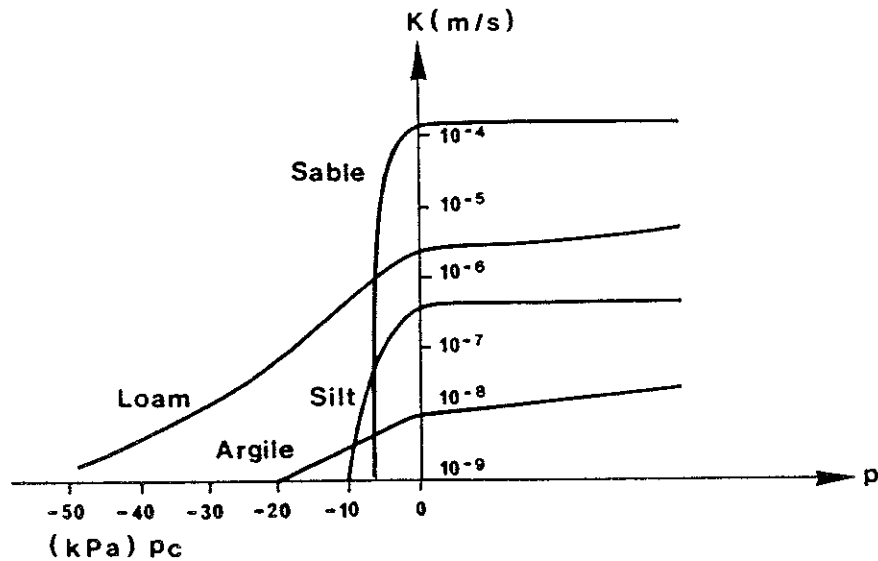


figure I.4: évolution du coefficient de perméabilité de quelques sols en fonction de la pression interstitielle.

Charlier et Radu (1988) proposent une formulation analytique de la quantité emmagasinée mais cette fois en unité volume (H_v sans dimension):

$$H_v = n_{e_0} \cdot \left\{ \frac{1}{\Pi} \cdot \arctg \left[\frac{(p-\beta)}{\alpha} \right] + \frac{1}{2} \right\} + \langle p \rangle \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \langle p-\beta \rangle = p-\beta & \forall p > 0 \\ \langle p-\beta \rangle = 0 & \forall p \leq 0 \end{cases} \quad (I.15)$$

Cette fonction est dessinée figure I.5, pour différentes valeurs de α (en Pa). Son principal avantage est de surmonter les problèmes de convergence numérique.

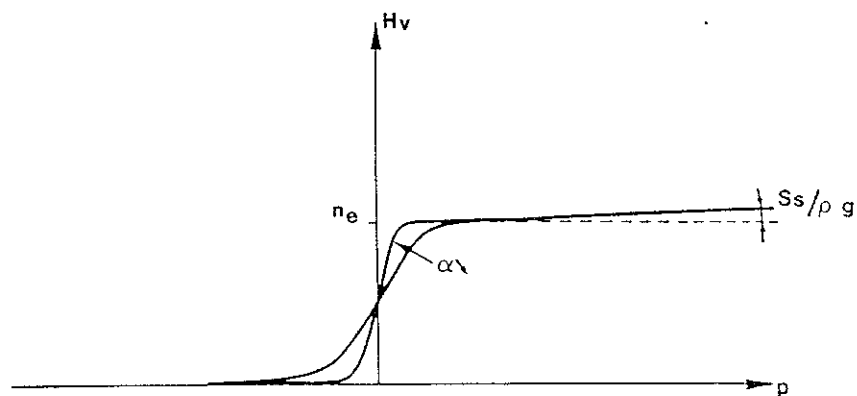


figure I.5: formulation analytique de la quantité d'eau emmagasinée en fonction de la pression interstitielle (Charlier et Radu 1988).

Des expressions polynomiales sont proposées par Dassargues (1991). Il constate que l'évolution de H_m en fonction de p doit être au moins cubique (pour posséder un point d'inflexion).

Enfin, il faut ajouter que l'hypothèse d'un emmagasinement spécifique constant lorsque la nappe devient captive peut être discutée si le milieu devient plus compressible. Dans ce cas, un comportement logarithmique peut être évalué à partir d'essais oedométriques par exemple (Biver, 1988 et Dassargues, 1991).

I.2.e) Particularités des milieux fissurés à porosité multiple.

Lorsqu'un milieu est affecté de fissures, la taille de l'E.V.R. nécessaire pour pouvoir poser des équations déterministes augmente; à moins d'identifier explicitement chaque fissure. Pourtant, l'étude détaillée à une échelle inférieure à l'E.V.R. n'est pas dépourvue d'intérêt lorsqu'on connaît la difficulté du problème inverse lié à une expérience in situ.⁴ Ces observations permettent, en effet, de valider les hypothèses d'un modèle conceptuel.

I.2.e.1) Ecoulement dans une fracture.

Les travaux de Louis (1968) ont permis de distinguer 5 types de régime d'écoulement dans une fissure en fonction de la rugosité relative (R_r) de la fracture et de son nombre de Reynolds Re (figure I.6). Il est alors possible de déterminer la perméabilité d'une fissure élémentaire par les relations suivantes:

$$K_f = \frac{\kappa \cdot g \cdot e^2}{12 \cdot \nu \cdot C} \quad (I.16a)$$

$$K'_f = 4 \cdot \kappa \cdot \sqrt{g \cdot e} \cdot \log(1.9/R_r) \quad (I.16b)$$

- avec K_f = coefficient de perméabilité de la fracture pour un écoulement laminaire (m/s)
 K'_f = coefficient de perméabilité de la fracture pour un écoulement turbulent (m/s)
 κ = degré de séparation de la fracture (rapport de la surface ouverte à la surface totale)
 g = accélération gravifique (m^2/s)
 e = ouverture moyenne de la fracture (m)
 ν = viscosité cinématique du fluide (m^2/s)
 = $1.67 \cdot 10^{-6} m^2/s$ pour de l'eau à $10^\circ C$
 C = $1 + 8.8 (R_r)^{1.5}$
 R_r = rugosité relative de la fracture

⁴ On entend par problème inverse, la calibration d'un modèle sur des résultats mesurés pour déterminer les coefficients associés au domaine étudié. Les coefficients ainsi quantifiés ne sont valables que si le modèle conceptuel de départ est correct.

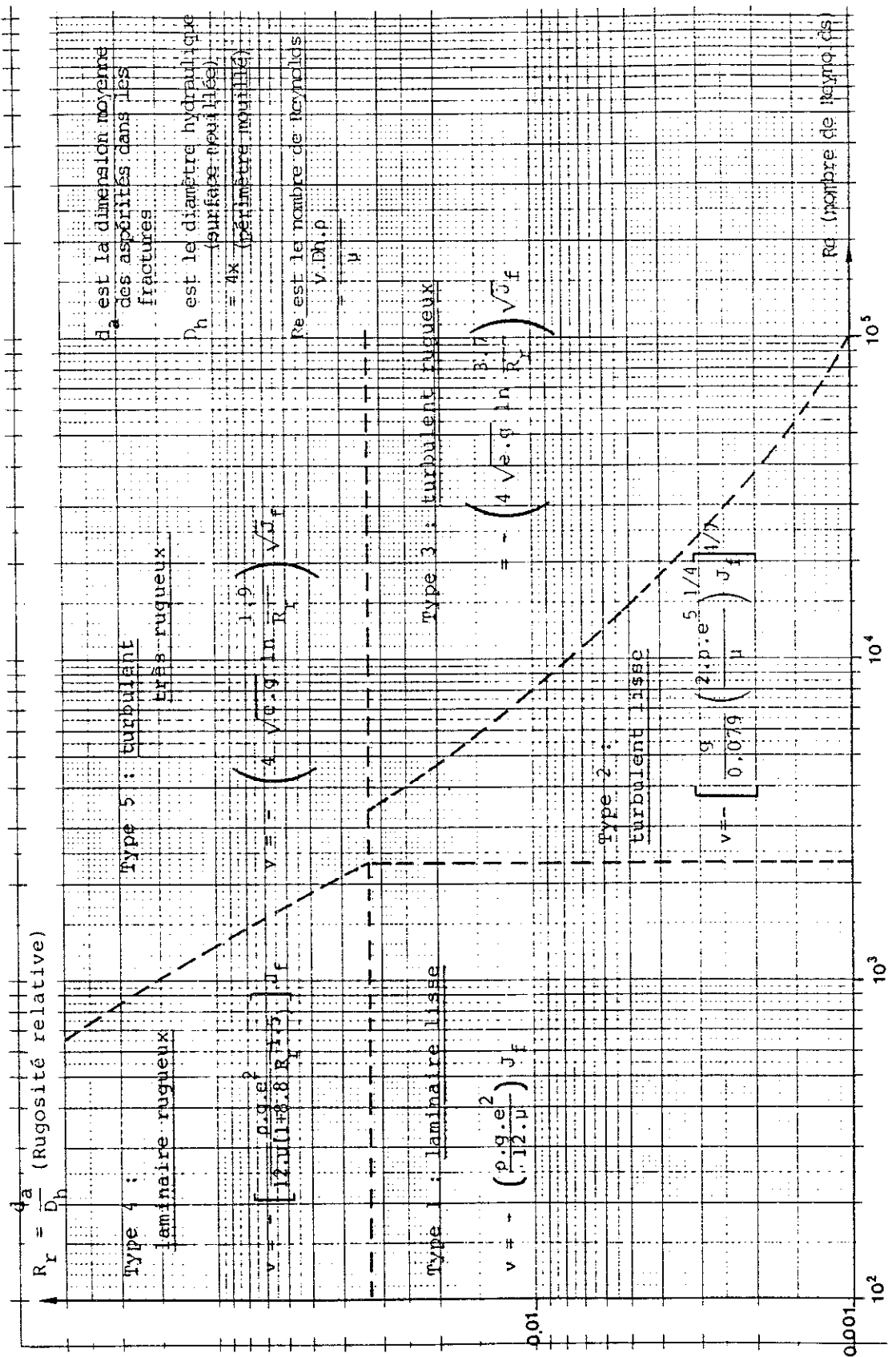


figure I.6: définition des 5 types d'écoulement dans une fissure.

I.2.e.2) Perméabilité d'un massif fracturé.

A partir des relations (I.16), il est possible de déterminer la perméabilité équivalente d'un massif affecté d'un réseau de fractures continues (fig. I.7). Elle a pour expression:

$$K = K_f \cdot e/d + K_m \quad (I.17)$$

avec K_f = coefficient de perméabilité des fissures (m/s)
 K_m = coefficient de perméabilité de la matrice poreuse (m/s)
 e = ouverture des fissures (m)
 d = espacement des fissures (m)

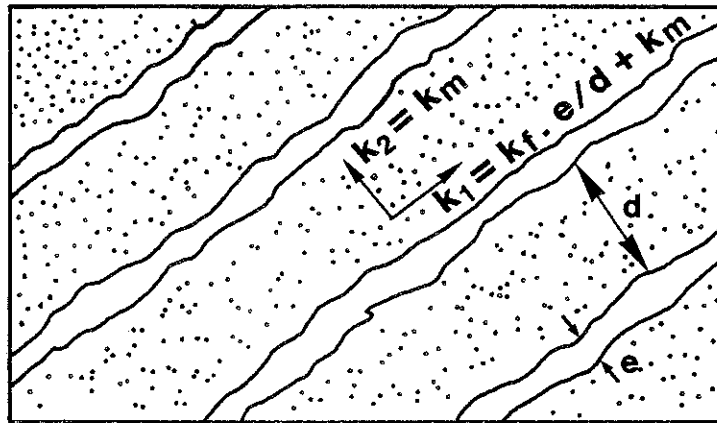


figure I.7: perméabilité d'un massif affecté par un réseau de fissures continues.

Dans le cas d'un régime laminaire (condition souvent réalisée en hydraulique souterraine), lorsque la perméabilité de la matrice est négligeable par rapport à la perméabilité des fissures, il vient (Lamb 1932, Louis 1968):

$$K = \frac{\kappa \cdot g \cdot e^3}{12 \cdot \nu \cdot d} \quad (I.18)$$

Il est clair que la relation (I.18) est valable dans la direction déterminée par le réseau de fracture. En ce qui concerne la direction perpendiculaire, le coefficient de perméabilité se limite à K_m . Un tel massif présente donc une anisotropie certaine. L'expression plus générale permettant de déterminer le tenseur complet s'énonce comme suit:

$$K_{ij} = \frac{\kappa \cdot g \cdot e^3}{12 \cdot \nu \cdot d} \cdot (\delta_{ij} - n_i \cdot n_j) \quad (I.19a)$$

où n_i est la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur normal aux fissures, dans les axes globaux servant à définir le tenseur

δ_{ij} est le symbole de Kronecker
 = 1 si $i=j$
 = 0 si $i \neq j$

Souvent, les massifs rocheux sont affectés par plusieurs réseaux de fissures. Il devient alors difficile, sur base d'une loi cubique en fonction de l'ouverture e des fissures, d'obtenir des valeurs de perméabilité cohérentes avec les porosités observées. Kiraly (1978) mentionne ce phénomène. Il émet l'hypothèse suivant laquelle la perméabilité est plutôt liée aux réseaux d'intersections de fissures en argumentant que les circulations d'eaux s'y font préférentiellement. Il propose une loi (également anisotrope) en fonction de la 4^{ème} puissance de l'ouverture E de ces intersections:

$$K_{ij} = \frac{g \cdot \Pi \cdot E^4 \cdot F}{128 \cdot \nu} \cdot m_i \cdot m_j \quad (I.19b)$$

où m_i est la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur unitaire tangent aux conduits d'intersection (\vec{m})

F est la densité des conduits sur une surface perpendiculaire à \vec{m}

Finalement, il convient de souligner que les fissures d'un réseau peuvent également être discontinues et non régulièrement orientées. Dans ce cas, les relations théoriques pour évaluer les coefficients de perméabilité sont difficiles à trouver et seuls des essais in situ permettent de conclure quant à une éventuelle anisotropie. En effet, lorsque les fractures sont distribuées de façon très irrégulière, il peut arriver que, statistiquement, le milieu ait un comportement isotrope.

I.2.e.3) Effet d'échelle.

En pratique, un réseau de fractures n'est pas parfaitement régulier. Les paramètres géométriques des fissures possèdent chacun un écart-type. Leur approximation par une valeur moyenne ne devient tolérable que sur un domaine suffisamment grand, qui détermine l'E.V.R. nécessaire pour appliquer les relations (I.19). La taille du domaine échantillonné et l'irrégularité de distribution des fractures influent donc sur les valeurs des composantes du tenseur.

Sagar et Runchal (1982) envisagent, par une théorie statistique, l'influence de tels phénomènes. Ils développent également l'expression d'un tenseur de perméabilité pour un milieu affecté de plusieurs réseaux de fissures et déterminent les conditions nécessaires à l'obtention d'un tenseur symétrique et orthotrope.

Une autre cause importante de l'effet d'échelle est la présence de réseaux de fissures emboîtés, c'est-à-dire organisés en entités hiérarchisées. Il en résulte que, suivant la taille du domaine investigué, la perméabilité est déterminée par l'un ou l'autre de ces réseaux (pour plus de détails, voir Kiraly 1978)

I.2.e.4) Effet de drainance des pores.

Un dernier phénomène propre aux milieux de porosité multiple mérite d'être énoncé. Lorsque l'écoulement envisagé est transitoire, les dépressions se transmettent plus facilement dans les fissures que dans la matrice poreuse.

Par conséquent, il existe un effet d'emménagement à 2 vitesses. Des théories peuvent être développées pour en tenir compte. Toutefois, il est possible que cet effet devienne négligeable lorsque le contraste entre perméabilité de pores et perméabilité de fissures augmente.

I.3. THEORIE DETERMINISTE DU TRANSPORT MISCIBLE EN MILIEU POREUX.

Bon nombre de substances introduites, volontairement ou non, dans les eaux du sous-sol, s'y propagent sous une forme dissoute. Il s'agit de substances miscibles. Dès que l'on s'intéresse à un produit de ce type, il doit être identifié et quantifié (par une analyse chimique ou tout autre mode de détection, direct ou indirect). On parle alors de composant. La quantité dosée dans la phase qui contient ce composant devient une nouvelle inconnue fondamentale et on définit un nouveau problème de champ. Il ⁵importe donc d'établir une nouvelle équation déterministe.

Dans cette section, les processus de transport pour une substance miscible idéale sont décrits et mis en équation. Puis, les aspects liés aux milieux multiporeux et aux substances miscibles non idéales sont envisagés.

I.3.a) Définition d'une substance miscible idéale.

La quantité d'un constituant présent dans le mélange fluide qui baigne le milieu poreux se chiffre, en toute généralité, par la fraction molaire x_i qu'il constitue:

$$x_i = \frac{n_i}{n_i + n_s} \quad (I.20)$$

avec n_i = nombre de molécules du constituant i
 n_s = nombre de molécules du solvant

$$= \sum_{j=1}^{N-1} n_j \quad \text{si le solvant est composé de } N-1 \text{ substances } j$$

Connaissant le poids moléculaire de chaque espèce constitutive, on peut définir une concentration massique s_i

$$s_i = \frac{m_i}{m_i + m_s} \quad (I.21)$$

⁵Bear (1990) définit un composant comme la portion d'une phase formée d'une espèce chimiquement identifiable; une phase comme la part d'un système, chimiquement définie, séparée des autres par une frontière physiquement définie (interface). En ce sens, le squelette poreux et le fluide interstitiel sont les 2 phases du système considéré dans cette section et le constituant étudié est susceptible de s'y retrouver.

avec m_i = masse dissoute du constituant i
 m_s = masse du solvant

Cette concentration massique est sans dimension. Plus couramment, en ce qui concerne les eaux souterraines, on la définit en part par million (ppm) ou en part par billion (ppb).

Une substance est dite diluée idéale lorsque, pour le domaine de variation de concentration envisagé, l'approximation suivante est valable:

$$S_i = \frac{m_i}{m_i + m_s} \approx \frac{m_i}{m_s} = \frac{m_i}{\rho_s \cdot V_s} = \frac{C_i}{\rho_s} \quad (\text{I.22})$$

où V_s = volume du solvant (m^3)
 ρ_s = masse volumique du solvant dont la variation est supposée négligeable (kg/m^3)
 C_i = concentration volumique du soluté i (kg/m^3)

De cette définition, découle la conséquence que le volume, l'enthalpie, et la capacité calorifique des solutions idéales sont des fonctions linéaires de leur composition (Blanpain, 1989).

D'autres unités sont souvent utilisées pour la concentration volumique (mg/dm^3 ou mg/l et $\mu\text{g}/\text{dm}^3$ ou $\mu\text{g}/\text{l}$). En utilisant ce type d'unité pour la concentration, on suppose implicitement qu'on a affaire à une solution diluée idéale. C'est le cas de nombreuses substances dissoutes dans les eaux souterraines (nitrates, métaux lourds, phosphates, ...).

I.3.b) Notion de diffusion moléculaire et loi de Fick.

Considérons un système binaire idéal au repos, composé d'un solvant et d'un soluté unique en concentration modérée. Si la composition du mélange n'est pas homogène, le soluté a tendance à se déplacer pour restaurer un état d'équilibre caractérisé par un minimum d'énergie. Fick quantifia le premier ce phénomène par la loi suivante:

$$\vec{f} = - d_m \cdot \text{grad } c \quad (\text{I.23})$$

où d_m est le coefficient de diffusion moléculaire au sein du solvant (m^2/s)⁶.

En d'autres termes, il existe un flux vectoriel \vec{f} dirigé suivant le plus grand contraste de concentration en soluté (c). Ce phénomène existe, indépendamment de tout mouvement du fluide et se manifeste également, dans le milieu poreux, à l'échelle de l'E.V.R. On peut donc définir un flux macroscopique de diffusion moléculaire

$$\vec{f}_m = - D_m \cdot \text{grad } c \quad (\text{I.24})$$

⁶ Pour les systèmes dilués, d_m vaut $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

D_m représente alors le coefficient de diffusion moléculaire dans le milieu poreux (m^2/s). Il est relié à d_m par une relation linéaire ($D_m = T.d_m$) dont le facteur de proportionnalité est la tortuosité T qui traduit un effet de résistance à la diffusion provoqué par la distorsion des chenaux entre les pores du milieu.

I.3.c) Vitesse de convection et porosité efficace.

Au paragraphe I.2.a, nous avons défini, par la loi de Darcy, la vitesse moyenne de filtration \vec{u} au travers un E.V.R. de milieu poreux. Cette vitesse est fictive puisqu'elle est obtenue en considérant le milieu poreux comme un continuum. La vitesse moyenne réelle à laquelle se déplace l'eau interstitielle du E.V.R. est obtenue en considérant que la section de passage de l'eau est limitée à la proportion de vides accessibles à l'écoulement. Celle-ci est définie par la porosité efficace n_e .

$$\text{Il vient: } \vec{v} = \vec{u}/n_e \quad (\text{I.25})$$

C'est à la vitesse moyenne \vec{v} , appelée vitesse de convection, que sera charrié le composant présent dans le fluide à la concentration c . On définit un flux convectif par:

$$\vec{f}_c = c.\vec{v} = c.\vec{u}/n_e \quad (\text{I.26})$$

Ce mode de transfert est important dans les aquifères et, pour le quantifier, il est nécessaire d'évaluer correctement la porosité efficace n_e . Elle diffère de la porosité totale n puisqu'une proportion du fluide adhère au solide et ne participe pas à l'écoulement. La figure I.8 illustre cette différence pour des granulométries croissantes.

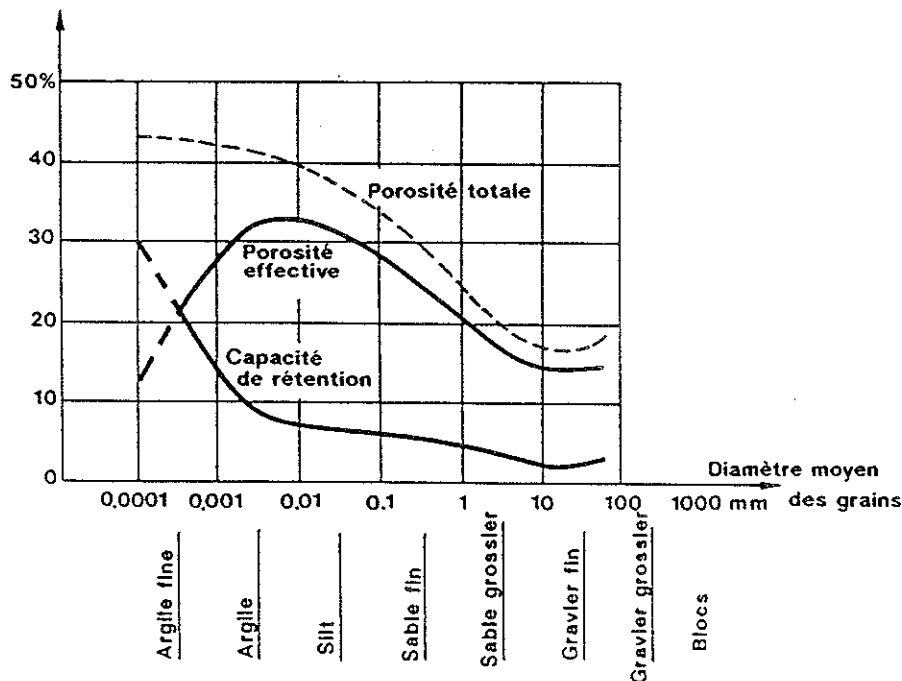


figure I.8: diagramme d'Eckis montrant l'influence de la granulométrie sur les composantes de la porosité (Castany 1967, Monjoie 1981).

I.3.d) Notion de dispersion mécanique ou cinématique.

Dans le cadre d'une théorie macroscopique déterministe, le trajet convectif moyen pris en compte pour le fluide ne représente aucun des trajets microscopiques qui suivent les chenaux et contournent les grains de solide. Or, si on s'intéresse à un composant du fluide, ce sont précisément ces trajets qui sont empruntés par les particules de la substance. Comme celles-ci doivent être dénombrées, on doit les considérer comme distinguables des autres particules du mélange fluide. Par conséquent, il faut, au niveau macroscopique, ajouter au flux convectif \vec{f}_c une correction pour tenir compte de la distribution réelle de la substance miscible.

Soient: - G la valeur d'une grandeur microscopique
 - \bar{G} sa moyenne sur un E.V.R.
 - G^0 l'écart de cette valeur par rapport à \bar{G}

on peut écrire: $G = \bar{G} + G^0$

par définition de l'E.V.R. on a: $\overline{G^0} = 0$
 $\bar{G} = \bar{G} = G$ (grandeur macroscopique)

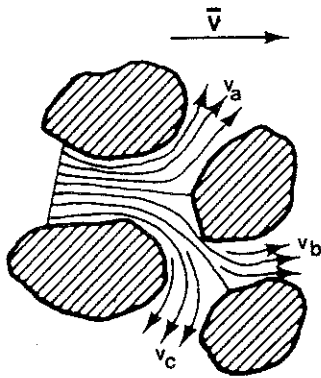
Appliquons ce principe de macroscopisation au flux convectif microscopique $\vec{v}.c$, on obtient:

$$\begin{aligned} \overline{\vec{v}.c} &= \overline{(\vec{v} + \vec{v}^0).(\bar{c} + c^0)} \\ &= \overline{\vec{v}.\bar{c}} + \overline{\vec{v}^0.\bar{c}} + \overline{\vec{v}.c^0} + \overline{\vec{v}^0.c^0} \\ &= \overline{\vec{v}.\bar{c}} + \overline{\vec{v}^0.c^0} \\ &= \text{flux convectif moyen } \vec{f}_c + \text{terme correctif} \\ &= \vec{v}.c + \vec{f}_d \end{aligned} \quad (\text{I.27})$$

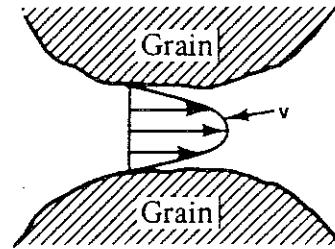
Le terme correctif est appelé flux de dispersion mécanique car il traduit un étalement de la substance miscible par rapport à sa position convective moyenne.

Microscopiquement, elle correspond à des actions mécaniques telles que le contournement des grains solides (figure I.9.a) ou la variation de vitesse au sein même d'un chenal poreux (figure I.9.b). Pour décrire ce nouveau flux, de nombreux auteurs (Nikolaevski 1959, Scheidegger 1961, Bear 1969,...) ont proposé une loi "de type Fickien":

$$\vec{f}_d = - \underline{D}.\overrightarrow{\text{grad}} c \quad (\text{I.28})$$



a) contournement des grains solides



b) distributions des vitesses dans un chenal.

figure I.9: causes de la dispersion mécanique:
(Bear et Veruijt, 1987).

D est un tenseur d'ordre 2 appelé tenseur de dispersion mécanique (m^2/s). Etant donné son origine hydrodynamique, il est possible de le relier à la vitesse de convection. Pour un milieu isotrope, on se positionne dans des axes de Frenet (f) liés à la vitesse moyenne de convection (figure I.10); souvent, une relation linéaire est envisagée:

$$\underline{D}_f = \begin{bmatrix} a_L \cdot |\vec{v}| & 0 & 0 \\ 0 & a_T \cdot |\vec{v}| & 0 \\ 0 & 0 & a_T \cdot |\vec{v}| \end{bmatrix} \quad (\text{I.29})$$

avec $|\vec{v}|$ = norme de la vitesse moyenne de convection (m/s)
 a_L = dispersivité longitudinale (m)
 a_T = dispersivité transversale (m)

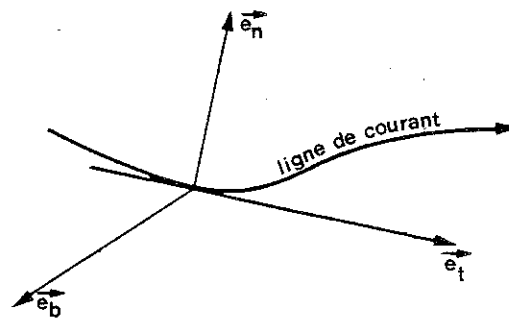


figure I.10: axes de Frenet liés à la vitesse moyenne de convection.

L'expression dans les axes cartésiens globaux (g) s'obtient alors par la règle de rotation des tenseurs:

$$\underline{D}_g = \underline{C}^T \cdot \underline{D}_f \cdot \underline{C} \quad (\text{I.30})$$

où \underline{C} est la matrice de rotation; avec C_{ij} , la $j^{\text{ème}}$ coordonnée, dans le repère cartésien (g), de l'axe \vec{e}_i du repère de Frenet (f).

Le tenseur ainsi obtenu est symétrique mais ne possède généralement aucune composante nulle. Il permet de représenter le résultat macroscopique dû à l'hétérogénéité des vitesses locales d'écoulement \vec{v} . Il modélise un étalement de la substance qui est différent dans le sens de la vitesse moyenne de convection et perpendiculairement à celle-ci (figure I.11).

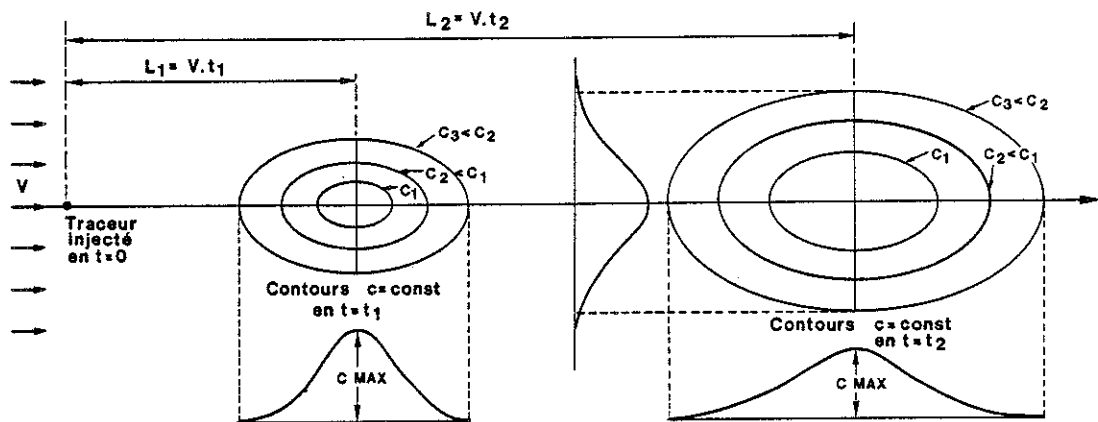


figure I.11: étalement d'un pulse de substance miscible sous l'action de la dispersion mécanique.

D'une manière plus générale, lorsque le milieu est anisotrope, la relation entre la dispersion mécanique et la vitesse de convection exige un formalisme plus complexe.

On écrit :

$$D_{ij} = \sum_k \sum_m a_{ijklm} \cdot v_k \cdot v_m / |\vec{v}| \quad (\text{I.31})$$

où les a_{ijklm} sont les composantes de dispersivité du milieu, formant un tenseur d'ordre 4.

Souvent, les effets de la dispersion mécanique et de la diffusion moléculaire sont regroupés en un seul terme, soit :

$$\begin{aligned}\vec{f}_D &= \vec{f}_m + \vec{f}_d \\ &= - D_m \cdot \text{grad } c - \underline{D}_h \cdot \text{grad } c \\ &= - \underline{D}_h \cdot \text{grad } c\end{aligned}\quad (\text{I.32})$$

où \underline{D}_h est appelé tenseur de dispersion hydrodynamique (m^2/s).

Pour un milieu isotrope et dans des axes de Frenet, on a :

$$\underline{D}_h = \begin{bmatrix} D_{hL} & 0 & 0 \\ 0 & D_{hT} & 0 \\ 0 & 0 & D_{hT} \end{bmatrix} \quad (\text{I.33})$$

avec D_{hL} = dispersion hydrodynamique longitudinale (m^2/s)
 D_{hT} = dispersion hydrodynamique transversale (m^2/s)

Certains auteurs (Ogata, Bear, Banks, Biggar, De Josselin, pour ne citer que les principaux) préfèrent cette formulation. Ils suggèrent en effet que les phénomènes de diffusion moléculaire et de dispersion mécanique ne sont pas dissociables à l'échelle macroscopique. Ceci peut se comprendre en imaginant que, si les vitesses microscopiques de convection \vec{v} produisent un contraste de concentration, la diffusion moléculaire agit pour minimiser ce déséquilibre.

Dans la pratique, de nombreuses expériences montrent que la dispersion n'est pas une fonction parfaitement linéaire de \vec{v} . Souvent, on utilise des expressions de la forme :

$$D_{hL}/D_m = C_1 \cdot (Pe_p)^{m_1} \quad (\text{I.34a})$$

$$D_{hT}/D_m = C_2 \cdot (Pe_p)^{m_2} \quad (\text{I.34b})$$

où - m_1 et m_2 sont des exposants constants dont la valeur se situe entre 1 et 1.2

- $Pe_p = L \cdot |\vec{v}| / D_m$ est le nombre adimensionnel de Péclet pour le problème physique.
 avec L une dimension caractéristique de la porosité

La figure (I.12) montre les points expérimentaux qui ont permis de déterminer ce type de relations pour la dispersion longitudinale. Bear (1987) mentionne toutefois que pratiquement toutes ces expériences ont été réalisées sur des milieux poreux non consolidés et encore moins indurés.

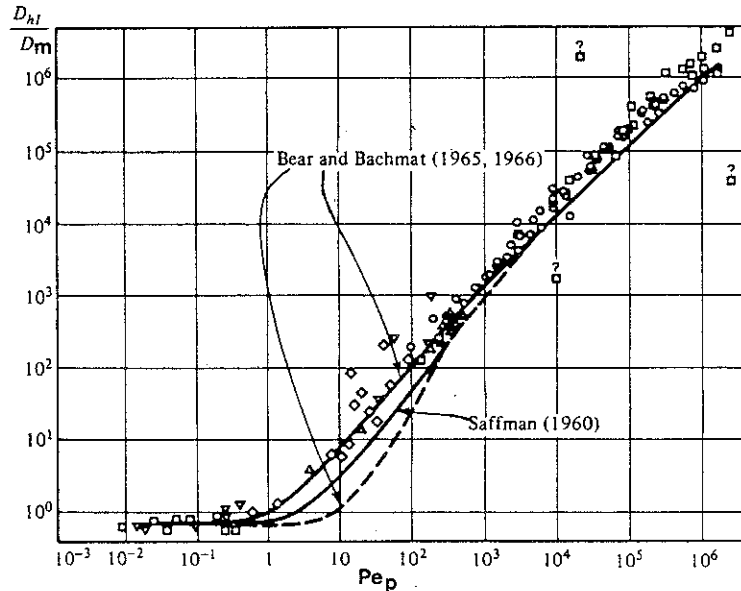


figure I.12: relation entre la dispersion hydrodynamique et le nombre de Peclet physique (Pe_p).

Enfin, très peu de travaux concernent la dispersion transversale. Toutefois, pour un milieu isotrope, il est admis que le rapport α_L/α_T varie entre 5 et 100.

I.3.e) Description des phénomènes d'adsorption sur la surface solide.

Tout système évolue vers un état d'équilibre caractérisé par une énergie minimale. Pour cette raison, le polluant a tendance à se fixer sur le solide pour minimiser la tension superficielle de ce dernier et donc son énergie de surface. Ce phénomène porte le nom d'adsorption (Momigny, 1982). Dès qu'il entre en jeu, le solide ne peut plus être considéré comme inerte et une nouvelle inconnue fondamentale est nécessaire pour quantifier la quantité adsorbée. On définit F comme le rapport de la masse adsorbée à la masse totale du solide (il s'agit donc d'une concentration massique).

On distingue 2 types d'adsorption:

- L'adsorption chimique qui met en jeu des liens chimiques entre les molécules adsorbées et les molécules de solide. Elle possède une certaine irréversibilité.

- L'adsorption physique qui inclut des phénomènes de capillarité, de condensation et éventuellement des attractions électriques comme les forces de Van Der Waals. Vu la nature des actions qui la gouvernent, son irréversibilité est moindre.

L'adsorption chimique met en jeu des énergies plus grandes et se développe surtout à température élevée; tandis que l'adsorption physique, moins énergétique, est surtout importante à basse température.

Il en résulte que l'adsorption est un phénomène⁷ dépendant de la température impliquant des relations isothermes⁷.

On distingue :

- des relations d'équilibre :

- $F = K_d \cdot c$ isotherme linéaire (I.35a)
avec $K_d =$ coefficient de partitionnement (m^3/kg)

- $F = k_1 \cdot c^m$ isotherme de Freundlich (I.35b)

- $F = \frac{k_2 \cdot c}{1 + k_3 \cdot c}$ isotherme de Langmuir (I.35c)

- des relations hors équilibre pour des phénomènes transitoires dont la réversibilité n'est pas immédiate :

- $\frac{\partial F}{\partial t} = k_4 \cdot c$ Langmuir (I.36a)

- $\frac{\partial F}{\partial t} = k_5 \cdot (k_6 \cdot c + k_7 - F)$ Lapidus (I.36b)

Ce sont ces expressions⁸ qui permettent de représenter le flux d'échange f_f^s du fluide vers le solide.

I.3.f) Dégradation au sein d'une phase du système.

Il existe un certain nombre de processus responsables de la disparition d'une substance dans un mélange. Dans ce paragraphe, nous en décrirons essentiellement trois.

⁷ Il serait hâtif de conclure qu'aux faibles températures rencontrées dans les eaux souterraines, l'adsorption est essentiellement physique. En effet, certains milieux poreux comme les argiles présentent une grande capacité d'adsorption dont la réversibilité n'est pas immédiate.

⁸ Cette liste n'est pas exhaustive.

Pour des systèmes particuliers qui diffèrent radicalement des applications que nous envisagerons, on s'en référera à des littératures spécialisées où sont décrites des actions chimiques très spécifiques.

I.3.f.1) La désintégration radioactive.

Lorsque la substance étudiée est un radionuclide instable, elle est caractérisée par une demi-vie τ .

On définit alors la quantité dégradée par unité de temps et par unité de masse (Γ_ϕ) en utilisant l'équation (I.37).

$$\Gamma_\phi = \lambda \cdot s_\phi \quad (\text{I.37})$$

avec $\lambda = 1/\tau$ (s^{-1})

s_ϕ = concentration massique de la substance dans la phase ϕ considérée.

Si aucun transfert ou mouvement de polluant n'a lieu, le bilan massique de la substance se réduit alors à l'équation bien connue de la désintégration radioactive simple :

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\lambda \cdot s \text{ qui a pour solution: } s = s_0 \cdot \exp(-\lambda \cdot t) \quad (\text{I.38})$$

I.3.f.2) La dégradation chimique.

La désintégration radioactive n'est que le cas particulier d'un processus plus général représenté par

$$\Gamma_\phi = k_\phi \cdot (s_\phi)^m \quad (\text{I.39})$$

avec k_ϕ = coefficient de dégradation dans la phase ϕ

m = exposant constant lié à la stœchiométrie

Il s'agit de la transformation d'une espèce chimique en une autre plus stable dans le milieu poreux environnant. Ce type de réaction chimique, non limitée à un équilibre, peut résulter d'un changement dans les conditions de pression et de température, d'une action bactérienne, d'une précipitation, ou encore de la présence dans le milieu d'un oxydant ou d'un réducteur puissant.

I.3.f.3) Le déséquilibre chimique partiel.

Cette troisième éventualité n'est plus une dégradation complète et un équilibre chimique s'établit entre plusieurs substances pouvant migrer suivant des processus similaires. Il convient alors de considérer 2 systèmes bilantaires, couplés entre eux par la stœchiométrie de l'équilibre chimique.

Exemple : pour $A \rightleftharpoons B$, on a $s_A/s_B = K_{AB}$: constante d'équilibre chimique.

Pour ces systèmes à composants multiples, Rubin (1983) propose des procédés systématiques pour réduire le nombre des équations à résoudre.

I.3.g) Effet d'eau immobile.

Au paragraphe I.3.c), la notion de porosité efficace ne a été introduite. Il a été également expliqué qu'une certaine proportion de la phase fluide ne participait pas à l'écoulement. Ce fluide, dit immobile, occupant une proportion θ_{im} du volume ($\theta_{im} = n - n_e$), n'est cependant pas inerte vis-à-vis du transport d'une substance miscible. En effet, la diffusion moléculaire peut y avoir lieu.

Si on se place au niveau microscopique (figure I.13), cette portion du fluide est néanmoins animé d'un mouvement très lent. Ce n'est que par la pensée qu'elle peut être isolée et considérée comme une phase à part entière (hypothèse dont la validité pratique est excellente). Une fois cette distinction admise, il faut quantifier la substance miscible dans la nouvelle phase.

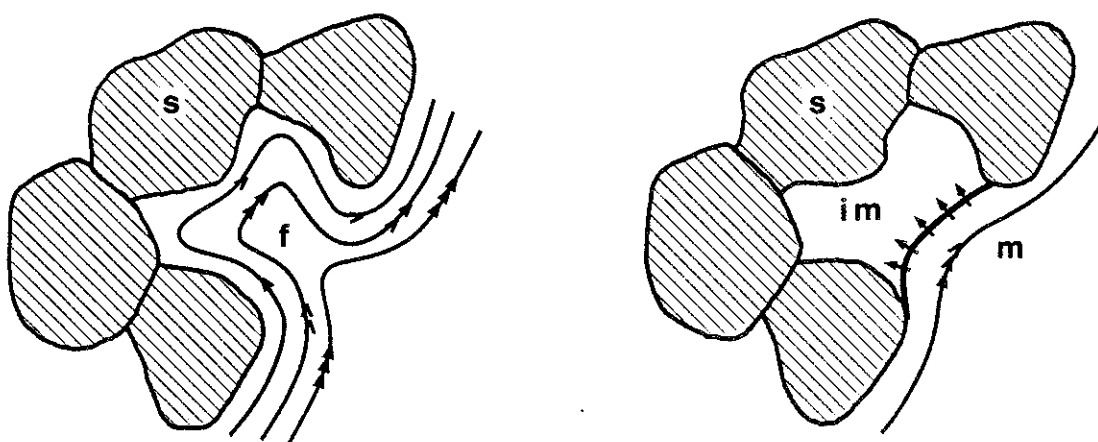


figure I.13 : représentation de l'eau immobile comme une phase distincte.

On distinguera la concentration dans ce fluide immobile c_{im} de la concentration dans le fluide mobile c_m . La diffusion moléculaire dans ces zones à faible circulation peut alors être interprétée macroscopiquement comme un flux d'échange de la phase m vers la phase im.

On peut écrire (Bear, 1987):

$$f_m^{im} = \alpha_d^* \cdot (C_m - c_{im}) \quad (I.40)$$

avec α_d^* = constante de transfert du fluide en mouvement vers le fluide immobile (s^{-1})

Ce coefficient dépend essentiellement du coefficient de diffusion moléculaire mais peut aussi varier avec la faible vitesse de convection qui existe dans ces portions de milieu poreux. En outre, la relation linéaire (I.40) peut se révéler trop simple, particulièrement lorsque la quantité de fluide supposé immobile s'accroît fortement; dans ce cas α_d^* ne sera pas considéré comme un coefficient constant.

I.3.h) Equations de bilan du transport miscible.

Pour résoudre un problème de transport miscible, il faut (d'après les paragraphes précédents) déterminer les variations de trois inconnues fondamentales c_m , c_{im} et F . Trois équations de bilan sont donc nécessaires.

On écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_m \cdot c_m) + \text{div} [\theta_m \cdot (c_m \cdot \vec{v} - D_h \cdot \text{grad } c_m)] = \theta_m \cdot \rho_m \cdot \Gamma_m - f_{im}^m + f_m^s \quad (\text{I.41a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_{im} \cdot c_{im}) = \theta_{im} \cdot \rho_m \cdot \Gamma_{im} + f_{im}^m + f_{im}^s \quad (\text{I.41b})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_s \cdot \rho_s \cdot F) = \theta_s \cdot \rho_s \cdot \Gamma_s - f_m^s - f_{im}^s \quad (\text{I.41c})$$

L'équation (I.41a) est le bilan de masse du constituant miscible dans le fluide en mouvement (indice m), l'équation (I.41b) est le bilan de masse dans le fluide peu mobile (indice im), et l'équation (I.41c) est le bilan de masse dans le solide (indice s).

θ_x est la porportion volumique occupée par la phase x.

f_{xy}^y est le flux d'échange de x vers y déterminé à partir d'une loi comportementale particulière (isotherme d'adsorption par exemple).

Γ_x est la quantité dégradée par unité de temps et par unité de masse dans la phase x.

Dans ce système, \vec{v} , vitesse moyenne de convection, n'est pas considérée comme une inconnue. Il s'agit d'une grandeur dérivée de la pression interstitielle du fluide par la loi de Darcy:

$$\theta_m \cdot \vec{v} = - \frac{k}{\mu} \cdot (\text{grad } p + \rho \cdot g \cdot \text{grad } z) \quad (\text{I.42})$$

Par conséquent, avant d'envisager le problème du transport miscible, il convient d'avoir résolu l'équation de diffusivité du fluide pour connaître l'évolution spatiale et temporelle de la vitesse de convection.

Rappelons les conditions de validité d'un tel système :

- 1°) les seuls processus envisagés sont ceux décrits à la figure I.14;
- 2°) le composant doit être une substance diluée idéale sans influence sur la densité du fluide;
- 3°) le milieu doit être saturé en fluide. Si ce n'est pas le cas, tous les coefficients de transfert doivent être considérés comme dépendant de la saturation du milieu poreux.

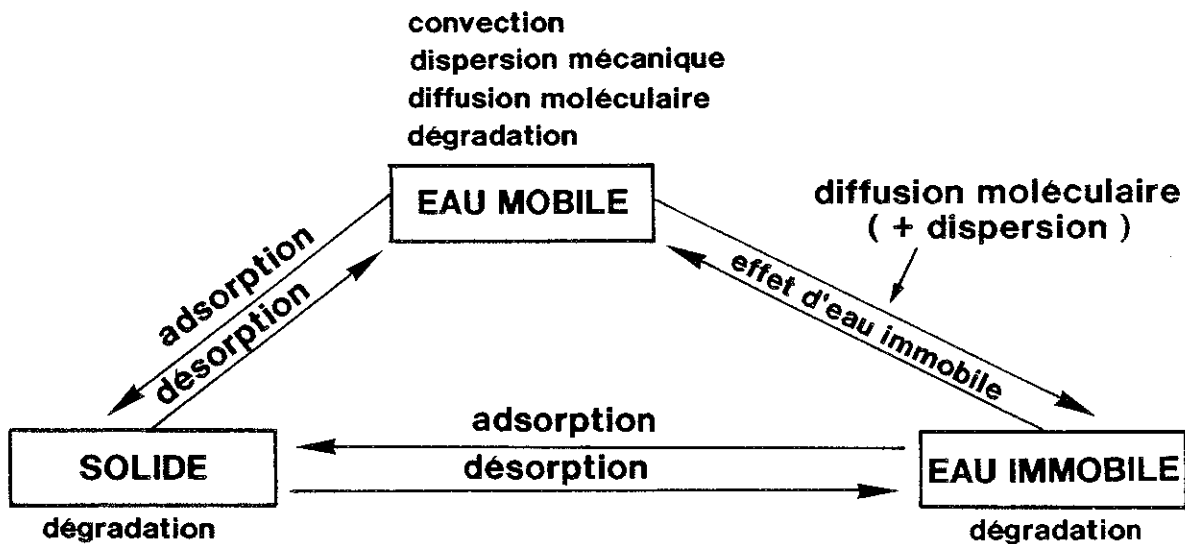


figure I.14: processus de transport au sein et entre chaque phase.

Il est possible de développer les équations (I.41) moyennant une série d'hypothèses supplémentaires.

On considère :

- 1°) une adsorption linéaire sur le solide. Cette adsorption se faisant partiellement via le fluide mobile et partiellement via le fluide immobile, on a :

$$F = F_m + F_{im} = K_d \cdot (1-p) \cdot C_m + K_d \cdot p \cdot C_{im} \quad (I.43)$$

où p désigne la portion de la surface de contact fluide-solide qui concerne le fluide immobile

F_m est la quantité adsorbée par l'intermédiaire de l'eau mobile

F_{im} est la quantité adsorbée par l'intermédiaire de l'eau immobile

- 2°) une dégradation également linéaire dans chaque phase :

$$\Gamma_{im} = - k_{im} \cdot C_{im} / \rho_m \quad (I.44a)$$

$$\Gamma_m = - k_m \cdot C_m / \rho_m \quad (I.44b)$$

$$\Gamma_s = - k_s \cdot F \quad (I.44c)$$

ρ_m étant la masse volumique du fluide

- 3°) un effet d'eau immobile lui-aussi linéarisé ($\alpha_d^* = cte$);

- 4°) une dispersion hydrodynamique donnée par (I.33), ce qui suppose que la diffusion moléculaire et la dispersion mécanique sont distinguables, mais aussi que le milieu est isotrope.

En appliquant les relations (I.43) et (I.44c), l'équation (I.41c) peut se scinder en un double bilan:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\theta_s \cdot \rho_s \cdot K_d \cdot (1-p) \cdot c_{im}] + \theta_s \cdot \rho_s \cdot k_s \cdot K_d \cdot (1-p) \cdot c_{im} = f_m^s \quad (I.45a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\theta_s \cdot \rho_s \cdot K_d \cdot p \cdot c_{im}] + \theta_s \cdot \rho_s \cdot k_s \cdot K_d \cdot p \cdot c_{im} = f_{im}^s \quad (I.45b)$$

à condition de supposer que f_{im}^s dépend uniquement de c_{im} et f_m^s , uniquement de c_m .

(I.45a) dans (I.41a) donne :

$$\begin{aligned} R_{dm} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + A_m \cdot C_m - \alpha_m \cdot c_{im} + \frac{S_s}{\rho_m \cdot g \cdot \theta_m} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \cdot C_m \\ + v_x \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} + v_z \cdot \frac{\partial C_m}{\partial z} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{hxx} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} + D_{hxz} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial z} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{hxy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} + D_{hyz} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial z} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{hxz} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_{hyz} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} + D_{hzz} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial z} \right) = 0 \quad (I.46a) \end{aligned}$$

(I.45b) dans (I.41b) donne:

$$R_{dim} \cdot \frac{\partial c_{im}}{\partial t} + A_{im} \cdot c_{im} - \alpha_{im} \cdot C_m = 0 \quad (I.46b)$$

avec: $R_{dm} = 1 + \theta_s / \theta_m \cdot \rho_s \cdot (1-p) \cdot K_d$
 = coefficient de retard dans le fluide mobile
 $R_{dim} = 1 + \theta_s / \theta_{im} \cdot \rho_s \cdot p \cdot K_d$
 = coefficient de retard dans le fluide immobile
 $A_m - \alpha_m = k_m + (R_{dm}-1) \cdot k_s$
 = coefficient de dégradation dans le fluide mobile
 $A_{im} - \alpha_{im} = k_{im} + (R_{dim}-1) \cdot k_s$
 = coefficient de dégradation dans le fluide immobile
 $\alpha_m = \alpha_d / \theta_m$
 = coefficient d'échange pour le fluide mobile
 $\alpha_{im} = \alpha_d / \theta_{im}$
 = coefficient d'échange pour le fluide immobile

$$D_{hxx} = [a_T \cdot (v_y^2 + v_z^2) + a_L \cdot v_x^2] / |\vec{V}|$$

$$D_{hyy} = [a_T \cdot (v_x^2 + v_z^2) + a_L \cdot v_y^2] / |\vec{V}|$$

$$D_{hzz} = [a_T \cdot (v_x^2 + v_y^2) + a_L \cdot v_z^2] / |\vec{V}|$$

$$D_{hxy} = (a_L - a_T) \cdot v_x \cdot v_y / |\vec{V}|$$

$$D_{hyz} = (a_L - a_T) \cdot v_y \cdot v_z / |\vec{V}|$$

$$D_{hxz} = (a_L - a_T) \cdot v_x \cdot v_z / |\vec{V}|$$

On remarquera que, pour obtenir le système I.46, les expressions du gradient et de la divergence sont développées à 3 dimensions. Les fractions volumiques θ_x et la fraction surfacique p sont considérées constantes (ce qui est autorisé si le milieu est saturé et si la variation du régime d'écoulement n'influe pas sur ces proportions). Enfin, la divergence de la vitesse de convection est déterminée à partir de l'emménagement d'après l'équation de diffusivité (I.10) en considérant la masse volumique comme constante (au vu de la dilution). L'équation bilantaire du solide, quant à elle, sera remplacée par la relation (I.43) qui permet de déduire directement F de C_m et C_{im} .

I.3.i) Particularités des milieux fissurés à porosité multiple.

Tout comme pour l'écoulement, la validité des équations déterministes du transport miscible doit être discutée quand on veut les étendre à un milieu multiporeux.

I.3.i.1) Transport dans une fracture unique.

Le comportement d'une substance miscible dans une fracture est très variable suivant le régime d'écoulement qui existe dans celle-ci. Pour de grandes vitesses d'écoulement dans des fissures courtes et larges, on constate que la substance suit les lignes de courant. Ce comportement peut être globalisé par une loi de dispersion mécanique. Par contre, pour de faibles vitesses d'écoulement dans des fissures longues et étroites, les concentrations s'homogénéisent latéralement par l'action de la diffusion moléculaire. Les travaux de Miller et Allman (1986) ont permis de préciser ces constatations en élaborant un diagramme synthétique des régimes de transport dans une fissure (figure I.15).

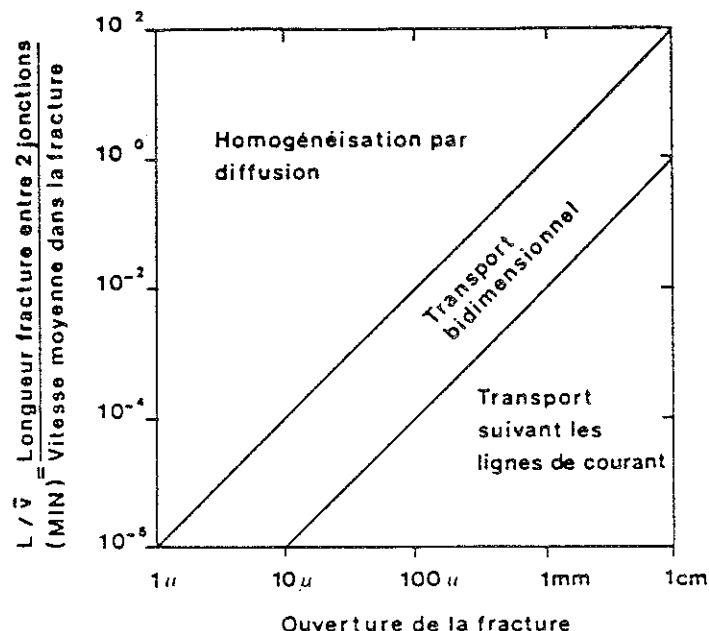


figure I.15: diagramme de Miller et Allman (1986) distinguant les différents régimes de transport dans une fracture unique.

I.3.i.2) Prise en compte d'une porosité duale.

Si en plus d'être fissuré, le milieu est affecté d'une porosité de pores, il existe un transfert aux épontes de la fissure. Lapidus et Amundson (1952) suggèrent qu'un tel comportement soit représenté par un effet d'eau immobile (équation I.46a pour les fissures, I.46b pour les pores, voir p.27).

Dans ce cas, la porosité efficace du milieu (θ_m) peut être approximée par la porosité de fissure (n_f). Louis (1968) donne une expression de celle-ci pour un massif possédant N directions de fissurations en supposant que les fissures sont continues.

$$\begin{aligned}
 n_f &= \sum_{i=1}^N \frac{e_i}{d_i} - \sum_{i,j=1}^N \frac{e_i \cdot e_j}{d_i \cdot d_j} + \prod_{i=1}^N \frac{e_i}{d_i} \\
 &= \sum_{i=1}^N n_i - \sum_{i,j=1}^N n_i \cdot n_j + \prod_{i=1}^N n_i
 \end{aligned}
 \tag{I.47}$$

avec: n_i = porosité du massif affecté uniquement par la $i^{\text{ème}}$ famille de joints
 e_i = ouverture des joints de cette famille
 d_i = espacement des joints de cette famille

Une telle façon de procéder peut se révéler excellente pour certains milieux comme le montre le diagramme de Saffman (1960, figure I.16), élaboré à partir des points expérimentaux de la figure I.12. Ce diagramme permet de distinguer différents régimes de transport en fonction du nombre de Péclet physique (Pe_p).

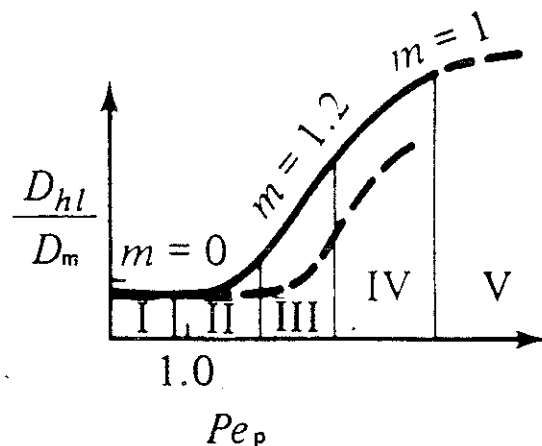


figure I.16: diagramme de Saffman. Délimitation des principaux régimes de transport.

On constate que, pour des pores de faible dimension caractéristique, le nombre de Péclet est bas et la dispersion hydrodynamique se limite à une diffusion moléculaire (domaine I). Par ailleurs, si le nombre de Péclet correspondant aux fissures est suffisamment élevé, la diffusion dans celles-ci devient négligeable et la dispersion se résume à une action mécanique (domaine IV).

I.3.i.3) Anisotropie du transport dans un milieu fissuré.

Il est possible qu'un milieu multiporeux soit anisotrope en raison de l'orientation privilégiée des fissures. Dans ce cas, deux coefficients (a_1 et a_2) ne sont plus suffisants pour décrire la dispersion mécanique des fissures.

En particulierisant la formule I.31 (p 19), Bear (1987), dérive une expression de la dispersion mécanique pour un milieu anisotrope avec une symétrie axiale :

$$\begin{aligned} a_{ijkl} = & a_1 \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{km} \\ & + a_2 \cdot (\delta_{ik} \cdot \delta_{jm} + \delta_{im} \cdot \delta_{jk}) \\ & + a_3 \cdot (\delta_{ij} \cdot e_k \cdot e_m + \delta_{km} \cdot e_i \cdot e_j) \\ & + a_4 \cdot (\delta_{ik} \cdot e_j \cdot e_m + \delta_{jk} \cdot e_i \cdot e_m + \delta_{im} \cdot e_j \cdot e_k + \delta_{jm} \cdot e_i \cdot e_k) \\ & + a_5 \cdot e_i \cdot e_j \cdot e_k \cdot e_m \end{aligned} \quad (I.48)$$

où \vec{e} est un vecteur unitaire dirigé suivant l'axe de symétrie
 a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 sont cinq dispersivités indépendantes nécessaires pour évaluer la dispersion mécanique.

En pratique, une anisotropie devra être envisagée lorsqu'elle est détectée pour l'écoulement, lorsque les résultats ne peuvent être calibrés ou encore lorsque la dispersivité transversale résultant d'une calibration est du même ordre de grandeur, voire plus grande que la dispersivité longitudinale. Ceci peut se comprendre par un schéma simple (figure I.17) décrivant le trajet des particules de la substance transportée dans un milieu affecté d'une anisotropie due à un double réseau de fractures.

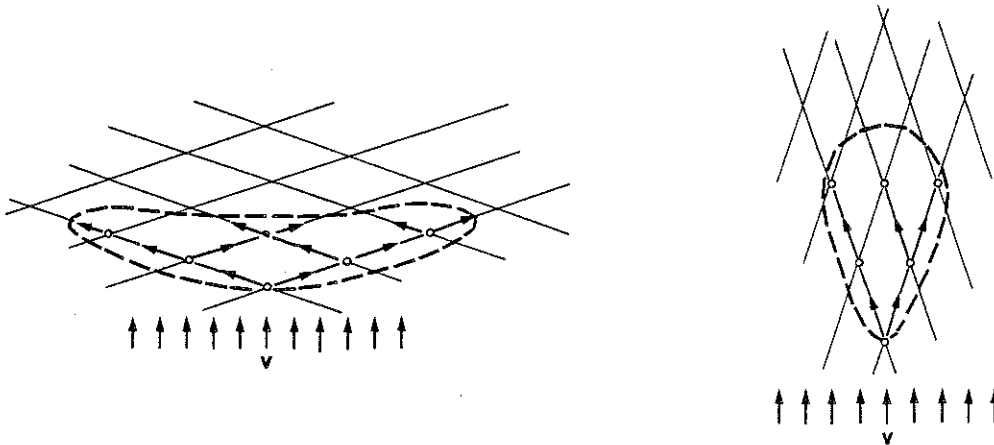


figure I.17: transport dans un massif fissuré anisotrope.

I.3.i.4) Effet d'échelle dans un milieu fissuré.

De nombreuses expériences in situ et en laboratoire (Porel 1988, Bear 1990) montrent que, lorsque la taille du domaine investigué augmente, les dispersivités croissent d'un et même parfois de deux ordres de grandeur. Certains auteurs attribuent cette variation à un séjour plus prolongé des substances dissoutes dans le milieu testé. Ils donnent donc un caractère transitoire au tenseur de dispersivité (et pas seulement au tenseur de dispersion mécanique via la vitesse de convection).

En ce qui concerne nos applications, nous préférons l'explication de Bear (1990) qui attribue ces variations à la prise en compte, dans le domaine étudié, d'une succession de porosités hiérarchisées (voir figure I.1 p.3).

Dans ce cas, les équations développées restent valables mais il importe de choisir un E.V.R. en fonction du modèle qu'on désire réaliser (plusieurs centaines de m^3 pour un modèle régional). On parle alors de théorie à l'échelle mégascopique car les coefficients découlent de plusieurs homogénéisations successives (averaging en anglais). Il est parfois nécessaire de recourir à ces notions mégascopiques dans des milieux géologiques non fissurés mais constitués de dépôts très hétérogènes (Plumb et Whitaker, 1988), par exemple des sables à stratifications entrecroisées.

Citons enfin les auteurs (Sachez, Villa, et Carrera 1991) qui prétendent que, dans certains cas, l'effet d'échelle n'est pas borné et que l'élément de volume représentatif n'existe pas. Ils préfèrent donc imaginer un milieu poreux stochastique (fractal ou autre) et envisager le transport de manière plus locale.

Pour toutes ces raisons, nous envisagerons l'influence de la taille du domaine investigué sur les coefficients de transport; et à chaque valeur nous associerons l'échelle à laquelle elle a été déterminée.

I.3.j) Particularités des substances miscibles non idéales.

Un certain nombre de substances peuvent être dissoutes en grande quantité dans l'eau souterraine (à cause de leur haut produit de solubilité). C'est le cas notamment des sels marins qui peuvent atteindre des concentrations massiques de l'ordre de 35 % dans l'eau de mer, 100 % dans des saumures percolant à travers les gisements de sel, et même 200 % dans certaines eaux géothermales. Il est évident que, dans de telles conditions, les propriétés du fluide peuvent se trouver considérablement modifiées et que l'hypothèse de solution diluée idéale n'est plus valable.

Nous expliquons ici comment généraliser la théorie du transport pour ce type de substance. Pour de plus amples informations, le lecteur se référera à la synthèse de Munhoven (1992).

I.3.j.1) perméabilité à une saumure.

De hautes concentrations en soluté peuvent faire varier la viscosité dynamique μ d'un fluide. Comme cette dernière intervient dans l'expression du coefficient de perméabilité, elle modifie la vitesse⁹ de convection et il faut en tenir compte dans la loi de Darcy.

⁹Microscopiquement, on peut comprendre que les forces de frictions globalisées par la loi de Darcy dépendent de

$$\text{On écrit : } n_e \cdot \vec{v} = - \underline{k}/\mu(s) \cdot [\text{grad } p + \rho(s) \cdot g \cdot \text{grad } z] \quad (\text{I.49})$$

Pour l'eau salée, par exemple, on a approximé la variation de la viscosité dynamique en fonction de la concentration massique par:

$$\mu(s) = \mu_0 \cdot (1 + 1.85 s + 4.10 s^2 + 44.5 s^3)$$

s désignant la concentration massique en sel

I.3.j.2) Emmagasinement d'une saumure.

L'équation d'état d'une saumure n'est pas similaire à celle d'une solution diluée idéale. En effet, la concentration influe sur la masse volumique de la saumure.

En conditions isothermes, on a:

$$\rho = \rho_0 \cdot [1 + \beta_s \cdot (s-s_0) + \beta \cdot (p-p_0)] \quad (\text{I.50})$$

par développement de Taylor limité au premier terme

$$\text{avec: } \beta_s = \frac{1}{\rho_0} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial s} \right)_{p=\text{cte}}$$

$$\beta = \frac{1}{\rho_0} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{s=\text{cte}}$$

10

Dès lors, le calcul de l'emmagasinement s'en trouve modifié :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n \cdot \rho) &= n \cdot \frac{\partial \rho}{\partial s} \cdot \frac{\partial s}{\partial t} + n \cdot \frac{\partial \rho}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \rho(s) \cdot \frac{\partial n}{\partial t} \\ &= n \cdot \rho_0 \cdot \beta_s \cdot \frac{\partial s}{\partial t} + n \cdot \rho_0 \cdot \beta \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \rho(s) \cdot \alpha \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(n \cdot \rho \cdot g) &= n \cdot \rho_0 \cdot g \cdot \beta_s \cdot \frac{\partial s}{\partial t} + [n \cdot \rho_0 \cdot g \cdot \beta + \rho(s) \cdot g \cdot \alpha] \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\ &= n \cdot \rho_0 \cdot g \cdot \beta_s \cdot \frac{\partial s}{\partial t} + S_s(s) \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{I.51})$$

$$\text{avec } S_s(s) = n \cdot \rho_0 \cdot g \cdot \beta + \rho(s) \cdot g \cdot \alpha$$

On observe un terme lié à la variation temporelle de la concentration et un terme lié à la variation temporelle de la pression interstitielle.

I.3.j.3) Equations bilantaires.

D'après les relations (I.49) et (I.51), on peut écrire, pour une saumure, une équation de diffusivité en nappe captive modifiée :

$$\begin{aligned} S_s(s) \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + n \cdot \rho \cdot g \cdot \beta_s \cdot \frac{\partial s}{\partial t} = \\ \text{div} \{ \rho(s) \cdot g \cdot \underline{k}/\mu(s) \cdot [\text{grad } p + \rho(s) \cdot g \cdot \text{grad } z] \} \end{aligned} \quad (\text{I.52a})$$

la viscosité du fluide en écoulement.

¹⁰ Pour de l'eau salée, β_s est estimé à 0.6923, β à $4.5 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$.

L'équation de transport quant à elle s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n.s) + \text{div} [n.(s.\vec{v} - \underline{D}_h.\vec{\text{grad}} s)] = n.\rho(s).\Gamma \quad (\text{I.52b})$$

en supposant négligeable l'effet du solide et de l'eau immobile.

(I.52) est un système de 2 équations à 2 inconnues couplées entre elles. Il convient donc, pour des substances non idéalement diluées, de résoudre simultanément le bilan d'écoulement et le bilan de transport.

Il est aisé d'introduire le terme d'adsorption dans ce bilan. Il n'en est pas de même pour l'effet d'eau immobile car, en vertu de la relation I.50, son équation d'état sera différente et l'expression de l'emmagasinement s'en trouvera encore modifiée.

I.3.j.4) Hypothèse de Boussinesq.

De nombreux auteurs (Oberbeck, 1879, Gartling et Hickok 1985, Hassanizadeh et Leijnse 1988, Galeati 1992, Munhoven 1992) ne considèrent pas le système (I.52) dans son entière complexité. Ils suggèrent que la variation de la masse volumique (ρ) avec la concentration massique (s) n'est effective que pour la loi de Darcy de sorte que le bilan en masse du fluide peut être ramené au bilan en volume suivant:

$$c_p.\frac{\partial p}{\partial t} = \text{div} [\underline{k}/\mu'.(\vec{\text{grad}} p + \rho(s).g.\vec{\text{grad}} z)] \quad (\text{I.53})$$

ou, en terme de hauteur piézométrique :

$$S_s.\frac{\partial h}{\partial t} = \text{div} \{ \underline{K}'.[\vec{\text{grad}} h + \beta_s.(\rho-\rho_0).\vec{\text{grad}} z] \} \quad (\text{I.54})$$

avec $c_p = n.\beta + \alpha \quad (\text{Pa}^{-1})$
 $S_s = \rho.g.c_p \quad (\text{m}^{-1})$
 $h = p/(\rho_0.g) + z$
 $\mu' = \mu(s).\rho_0/\rho(s) = \text{viscosité dynamique modifiée (Pa.s)}$
 $\underline{K}' = \rho(s).g/\mu(s).\underline{k} = \text{tenseur modifié des coefficients de perméabilité (m/s)}^{11}$

En prenant en compte ce système simplifié, on fait appel à l'hypothèse de Boussinesq généralisée. Si, en plus, μ' et \underline{K}' sont considérés comme indépendants de la concentration massique, on parle de l'hypothèse de Boussinesq classique.

¹¹ L'équation I.54 démontre que, lorsque la substance miscible n'est pas diluée idéale, les flux de fluides ne sont plus perpendiculaires aux équipotentielles.

Munhoven (1992) démontre que cette approximation est valable pour des variations raisonnables de salinité. Il donne, sur base d'une analyse d'erreur, les valeurs indicatives suivantes:

$$\begin{aligned} \Delta p_{\max} &\leq 3 \cdot 10^8 \text{ Pa (soit environ 3000 atmosphères)} \\ \Delta S_{\max} &\leq 50 \text{ ‰ (soit plus que l'eau de mer)} \end{aligned} \quad (\text{I.55})$$

En ajoutant à cette hypothèse celle de l'incompressibilité du milieu et, on obtient, dans le cas d'une nappe captive, une équation similaire à celle de Laplace pour le bilan en volume du fluide (I.56a) et un bilan de masse classique pour la substance (I.56b).

$$\text{div} \{ \underline{K}' \cdot [\text{grad } p + \rho(s) \cdot g \cdot \text{grad } z] \} = 0 \quad (\text{I.56a})$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} (s \cdot \vec{v} - \underline{D}_h \cdot \text{grad } s) = \rho(s) \cdot \Gamma \quad (\text{I.56b})$$

Il convient de bien comprendre que, comme le système est couplé, l'équation (I.56a) reste transitoire, mais seulement en raison de la variation de concentration massique de la substance. Par conséquent, ce système est un peu trop restrictif en ce qui concerne l'écoulement puisque l'effet d'emménagement de fluide y est totalement absent. Pour ce qui est du transport, cette formulation est suffisante si on introduit également l'adsorption et l'effet d'eau immobile [équations (I.46) dans lesquelles on remplace c par s].

I.4. THEORIE DETERMINISTE DE LA MIGRATION NON MISCIBLE EN MILIEU POREUX.

Il arrive souvent qu'une substance mise, accidentellement ou naturellement, en contact avec l'eau souterraine ne puisse s'y mélanger. Elle forme alors une phase distincte qui possède une vitesse d'écoulement et une pression interstitielle qui lui sont propres. Dans ce cas, l'interaction entre l'eau et la substance relève moins des propriétés de mélange (convection, dispersion) que de phénomènes capillaires. Ces processus sont pris en compte dans la théorie des écoulements polyphasiques qui est développée dans cette section.

I.4.a) Définition d'une substance parfaitement immiscible.

Une substance est parfaitement immiscible à une autre lorsqu'elle forme une phase distincte dont la composition ne fait pas intervenir cette autre.

Les phases non solides se partagent alors le volume des vides présents dans le milieu poreux (figure I.18).

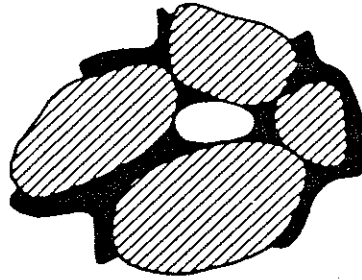


figure I.18: partage de la porosité entre plusieurs phases.

$$\text{On écrit: } n = \sum_i \theta_i = \sum_i S_i \cdot n = n \cdot \sum_i S_i$$

$$\text{soit } \sum_i S_i = 1 \quad (\text{I.57})$$

où S_i est la saturation du milieu poreux pour la substance i , grandeur significative à l'échelle de l'E.V.R.

θ_i la portion de volume occupée par la phase i

La quantification macroscopique de chacun des fluides (donc des substances si elles sont parfaitement immiscibles), peut alors se faire en déterminant la saturation du milieu poreux pour chacune d'elle. On s'assure qu'elles ont toutes été prises en compte en vérifiant la relation (I.57).

I.4.b) Notion de mouillabilité.

Lorsque deux corps immiscibles sont en contact, il existe une tension à leur interface dite tension interfaciale. Cette tension se traduit par le fait qu'il faut exercer un travail mécanique pour les séparer. Soient a , b , c , trois phases différentes, σ_{ab} , σ_{bc} , σ_{ca} , les tensions interfaciales existant respectivement entre a et b , b et c , c et a .

D'après la figure I.19 a, l'équilibre est réalisé au point commun des 3 phases si

$$\sigma_{ab} \cos \theta_{ab} + \sigma_{bc} \cos \theta_{bc} = \sigma_{ca} \quad (\text{I.58})$$

Lorsque $\sigma_{ab} + \sigma_{bc} > \sigma_{ca}$, l'égalité ne peut être vérifiée et l'équilibre n'aura pas lieu. Le déséquilibre se traduit par la disparition d'une des phases (la lentille b , mue par la résultante des 3 tensions interfaciales, se déplace en un autre endroit).

Supposons que a et b soient 2 fluides et que c soit un solide peu déformable.

$$\text{alors, } \theta_{bc} = 0 \text{ et } \sigma_{ab} \cdot \cos \theta + \sigma_{bc} = \sigma_{ca} \quad (\text{I.59})$$

θ est l'angle de mouillabilité de a par rapport à b .

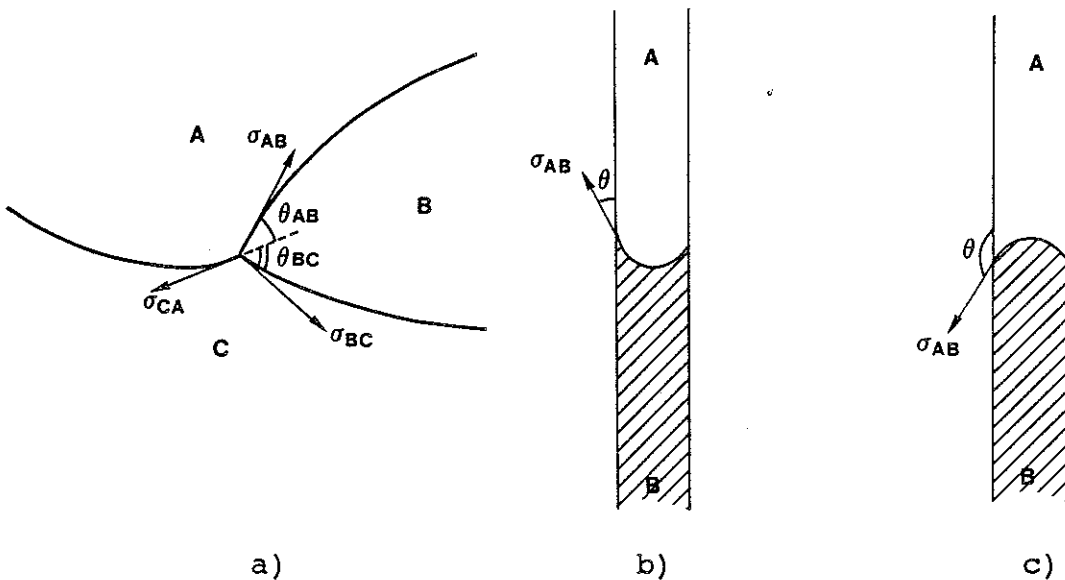


figure I.19: notion de mouillabilité:
 a) définition de la tension interfaciale
 b) et c) définition de l'angle de mouillabilité

Le fluide le plus mouillant est celui qui a tendance à adhérer au solide; par conséquent, on dira (d'après les figures 19b et 19c) que a est non mouillant par rapport à b si $\theta < 90^\circ$; inversement, a est mouillant par rapport à b si $\theta > 90^\circ$.

Il est donc clair que cette notion est relative; par exemple, l'huile est un fluide non mouillant par rapport à l'eau mais mouillant par rapport à l'air. Dans les développements qui vont suivre, le fluide mouillant sera noté w (de l'anglais "wetting"), l'autre n ("non wetting").

I.4.c) Définition de la pression capillaire et hysteresis de saturation.

La pression capillaire est la discontinuité de pression existant lors du passage de l'interface entre 2 fluides immiscibles w et n. Elle résulte de la tension interfaciale entre les 2 fluides.

$$\text{On écrit : } p_c = p_n - p_w = C \cdot \sigma_{nw} \quad (\text{I.60})$$

avec σ_{nw} = tension interfaciale entre n et w (N/m)
 C = courbure de l'interface n-w (m^{-1})

De cette définition, il découle que p_c est non nulle lorsque l'interface n-w n'est pas plan. C'est le cas à proximité d'une surface solide et donc a fortiori dans les chenaux d'un milieu poreux.

Les paramètres dont dépendent la pression capillaire sont:

- les saturations (S_n et S_w)
- la nature des fluides en contact et du solide poreux (par l'intermédiaire de l'angle de mouillabilité et de la tension interfaciale σ_{nw})
- la dimension caractéristique des pores et leur facteur de forme (ce fait peut être démontré par une expérience simple qui consiste à mesurer des hauteurs d'ascension capillaire dans des tubes étroits de forme et de section différente (figure I.20))
- les forces de pesanteurs $(\rho_n - \rho_w) \cdot g$.

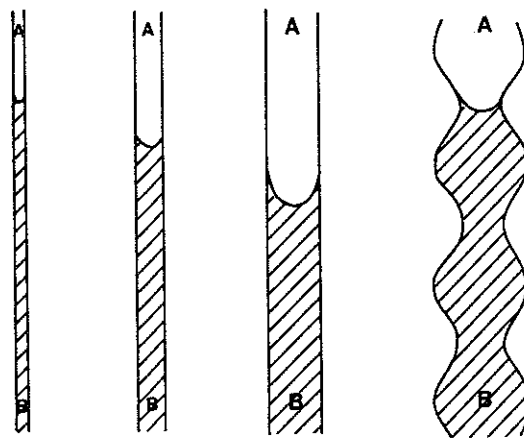


figure I.20: ascension capillaire dans des tubes de section et de forme différentes.

Finalement, une relation du type $p_c = f(S_w) = f(1-S_n)$ peut être envisagée pour définir p_c (Marle, 1978). Cette relation sera valable pour des fluides et un milieu poreux déterminé.

La figure I.21 illustre l'allure de la fonction f pour 2 types de milieu. Ce graphique démontre que, lorsqu'on chasse le fluide mouillant w par un fluide non mouillant n (drainage), il est impossible d'en extraire la totalité. Une certaine quantité de fluide w persiste dans le milieu poreux par adhésion au solide sous forme de ménisques (la pression capillaire devient alors élevée puisque la courbure des interfaces $n-w$ est maximale par rapport au solide). On chiffre cette quantité par la saturation résiduelle en fluide mouillant S_{rw} .

De la même manière, par l'opération inverse (imbibition), il est possible de définir S_{rn} qui correspond à des gouttelettes individualisées qui restent piégées dans le milieu poreux (la pression capillaire devient macroscopiquement nulle puisque les gouttes piégées sont sphériques et que l'interface $n-w$ n'a pas de relation avec le solide).

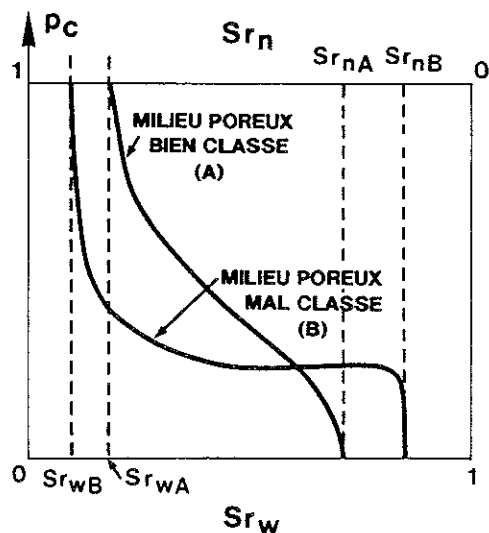
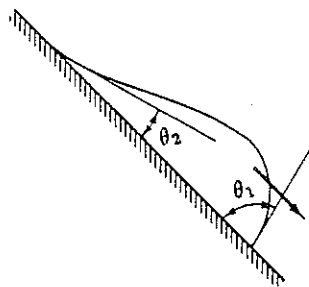


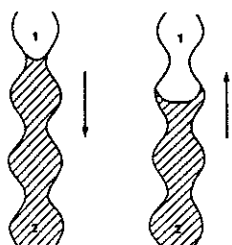
figure I.21: courbe de pression capillaire dans un milieu poreux (Bear 1990).

Enfin, une restriction supplémentaire devra être faite quant au sens de variation de la saturation (drainage ou imbibition). On constate en effet 2 relations différentes suivant la nature du fluide chassant l'autre. Ce phénomène porte le nom d'hystérésis de pression capillaire.

Cette irréversibilité est compréhensible si on se réfère à l'exemple simple d'une goutte d'eau glissant sur la surface d'une vitre (figure I.22 a). S'il n'existait pas d'hystérésis, la goutte serait circulaire. La forme dissymétrique qu'elle possède résulte du fait que la pression capillaire est différente suivant que l'eau pousse l'air ou que l'air pousse l'eau. Une autre manifestation de cet hystérésis est exprimée par la stabilisation du niveau d'eau dans un tube capillaire de section variable (figure I.22 b).



a) expérience de la goutte d'eau



b) expérience du tube capillaire de section variable

figure I.22: manifestations physiques de l'hystérésis de pressions capillaires.

I.4.d) Notion de perméabilité relative.

Lorsqu'il existe 2 fluides immiscibles en écoulement dans un milieu poreux, les perméabilités effectives du milieu poreux à chacun d'eux peuvent être définies. Dans ce but, la loi de Darcy est étendue aux 2 fluides simultanément en mouvement.

$$\text{On écrit : } \vec{u}_w = \frac{k_w}{\mu_w} \cdot (\vec{\text{grad}} p_w + \rho_w \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z) \quad (\text{I.61a})$$

$$\vec{u}_n = \frac{k_n}{\mu_n} \cdot (\vec{\text{grad}} p_n + \rho_n \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z) \quad (\text{I.61b})$$

avec \vec{u}_f = vitesse de filtration ou débit spécifique du fluide f (m/s)

$\frac{k_f}{\mu_f}$ = tenseur de perméabilité effective du milieu poreux au fluide f (m²)

μ_f = viscosité dynamique du fluide f (Pa.s)

p_f = pression agissant sur le fluide f (Pa)

$\rho_f \cdot g$ = poids volumique du fluide f (N/m³)
f étant w ou n.

Ces grandeurs ne sont pas additives ($\frac{k_n}{\mu_n} + \frac{k_w}{\mu_w} < \frac{k}{\mu}$); elles expriment les actions capillaires sous une vue globalisée à l'échelle du E.V.R.

Lorsque le milieu est isotrope, mais seulement dans ce cas, les tenseurs $\frac{k_n}{\mu_n}$ et $\frac{k_w}{\mu_w}$ se résument à des scalaires et il est possible de définir les perméabilités relatives à chacun des deux fluides :

$$k_{rw} = \frac{k_w}{k} \quad \text{et} \quad k_{rn} = \frac{k_n}{k} \quad (\text{I.62})$$

Les paramètres dont dépendent les perméabilités relatives sont:

- la saturation (S_n ou S_w)
- la nature des fluides et du solide poreux (via l'angle de mouillabilité θ)
- accessoirement, le rapport des viscosités des fluides, le rapport de leur masse volumique, les forces de pesanteur et le régime d'écoulement.

En première approche, on envisage (tout comme pour la pression capillaire p_c) une évolution en fonction de la saturation, valable pour des fluides donnés et un milieu poreux déterminé.

Les fonctions typiques de perméabilités relatives sont reprises à la figure I.23. Un effet d'hystérésis se remarque aussi sur ce type de courbes. Ses causes sont identiques à celles de l'hystérésis de pression capillaire. La présence de saturations résiduelles y est également constatée. A saturation résiduelle, seul le fluide le plus abondant est en écoulement. Sa perméabilité relative est maximale; la perméabilité relative de l'autre s'annule puisqu'il est bloqué (sous forme de ménisques ou de gouttelettes piégées) dans le milieu poreux.

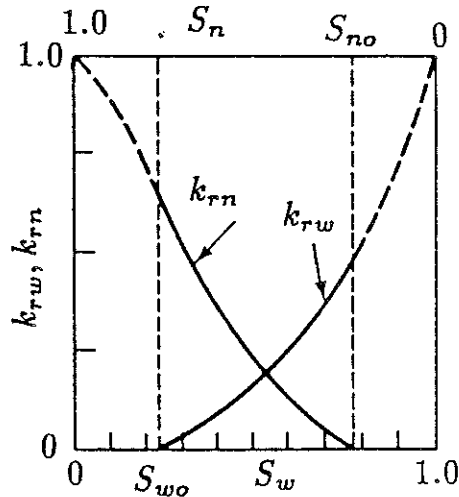


figure I.23: courbes typiques de perméabilité relative (Bear 1990).

I.4.e) Equations des écoulements biphasiques.

Pour résoudre le problème de propagation d'une substance immiscible, il faut déterminer les variations de 2 inconnues fondamentales S_n et S_w qui déterminent les proportions de chaque phase dans le milieu poreux. Les bilans de masse de chacune des phases sont les 2 équations correspondantes.

On écrit, pour un milieu indéformable ($n = \text{cte}$) :

$$\text{div} [\rho_w \cdot \underline{k}_w / \mu_w \cdot (\vec{\text{grad}} p_w - \rho_w \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z)] + n \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\rho_w \cdot S_w) = 0 \quad (\text{I.63a})$$

$$\text{div} [\rho_n \cdot \underline{k}_n / \mu_n \cdot (\vec{\text{grad}} p_n - \rho_n \cdot g \cdot \vec{\text{grad}} z)] + n \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\rho_n \cdot S_n) = 0 \quad (\text{I.63b})$$

Ces 2 équations se révèlent insuffisantes car elles comportent des inconnues supplémentaires: les pressions interstitielles des 2 fluides p_w et p_n et leur masses volumiques ρ_w et ρ_n .

Les 4 équations supplémentaires correspondantes sont :

- la fonction de pression capillaire: $p_n - p_w = p_c(S_w) \quad (\text{I.63c})$

- l'équation de partage de la porosité: $S_w + S_n = 1 \quad (\text{I.63d})$

- les équations d'état des 2 fluides: $\rho_w = \rho_w(S_w) \quad (\text{I.63e})$

$\rho_n = \rho_n(S_n) \quad (\text{I.63f})$

Il est possible de réécrire ce système sous une autre forme. Définissons p_v comme la pression interstitielle moyenne des fluides occupant le volume des pores.

microscopiquement il vient : $p_v = (p_w + p_n) / 2 \quad (\text{I.64a})$

macroscopiquement on a : $p_v = S_w \cdot p_w + S_n \cdot p_n \quad (\text{I.64b})$

En sommant I.63a et I.63b, en y introduisant I.63d, I.64a, et I.64b, on obtient :

$$n \cdot \frac{\partial}{\partial t} \cdot [S_w \cdot p_w + (1-S_w) \cdot p_n] = \text{div} [(\rho_w \cdot \underline{M}_w + \rho_n \cdot \underline{M}_n) \cdot \vec{\text{grad}} p_v] \\ - 0.5 \text{ div} [(\rho_w \cdot \underline{M}_w - \rho_n \cdot \underline{M}_n) \cdot \vec{\text{grad}} p_c] \\ + g \cdot \text{div} [(\rho_w^2 \cdot \underline{M}_w + \rho_n^2 \cdot \underline{M}_n) \cdot \vec{\text{grad}} z] \quad (\text{I.65})$$

où $\underline{M}_w = \frac{k_w}{\mu_w}$ sont les tenseurs de mobilité des 2 phases
 $\underline{M}_n = \frac{k_n}{\mu_n}$

I.65 est appelée équation de pression; elle est jointe aux équations I.63d, I.63e et I.63f pour former un système réduit à 4 inconnues (p_v, S_w, ρ_w, ρ_n) mais qui ne permet plus de déterminer les variations individuelles de p_n et p_w . Bear (1990) montre qu'il est possible de réduire davantage encore ce système moyennant les hypothèses suivantes :

- le milieu est isotrope: dans ce cas M_w et M_n sont des scalaires définis par $M_w = k \cdot k_{rw} / \mu_w$ (I.66a)
 $M_n = k \cdot k_{rn} / \mu_n$ (I.66b)
- les fluides sont incompressibles : en conséquence, les équations d'états I.63e et I.63f se simplifient, ρ_w et ρ_n deviennent constants et leur variations ne sont plus à considérer.

Il vient alors de (I.65) :

$$n \cdot \frac{\partial S_w}{\partial t} = \text{div} (G_w \cdot \vec{\text{grad}} S_w) - \left(\frac{\partial F_w}{\partial S_w} \cdot \vec{q}_t \right) \cdot \vec{\text{grad}} S_w + \text{div} (H_w \cdot \vec{\text{grad}} z) \quad (\text{I.67})$$

avec $F_w = M_{eff} / M_n$ où $1/M_{eff} = 1/M_w + 1/M_n$
 $G_w = - M_{eff} \cdot \frac{\partial p_c}{\partial S_w}$
 $H_w = (\rho_w - \rho_n) \cdot g \cdot M_{eff}$
 $\vec{q}_t = \vec{q}_n + \vec{q}_w =$ débit spécifique total obtenu en sommant les 2 lois de Darcy I.61a et I.61b.

L'équation (I.67) peut être interprétée comme une équation de transport miscible (I.41 p.25) où:

S_w joue le rôle de la concentration,

G_w celui de la diffusion,

$\frac{\partial F_w}{\partial S_w} \cdot \vec{q}_t$ celui de la vitesse de convection,

n étant le coefficient de retard

et $\text{div} (H_w \vec{\text{grad}} z)$ un terme de source.

C'est pourquoi, elle est appelée équation de transport pour la saturation en fluide mouillant.

Toutefois, il convient de remarquer que :

- les fonctions F_w , G_w et H_w dépendent toujours de la saturation S_w et par conséquent, l'équation I.67 est extrêmement non linéaire et plus difficile à résoudre que l'équation transport miscible linéarisée;
- \vec{q}_t doit être considéré comme connu et il convient donc d'obtenir ses variations par la résolution d'une équation complémentaire de I.67, couplée à cette dernière, et analogue à une équation de diffusivité. Bien que nous sachions que \vec{q}_t est un vecteur non divergentiel ($\text{div } \vec{q}_t = 0$), ceci n'est pas toujours facile¹². En pratique, il est parfois plus simple de résoudre simultanément deux équations de diffusivité couplées par des relations ou intervient la saturation S_w .

Enfin, mentionnons que les variations p_c , k_{rw} et k_{rn} en fonction de la saturation S_w peuvent être évaluées par les relations analytiques, ce qui facilite les opérations de dérivations. Par exemple, Brooks et Corey (1966) proposent, d'après leurs observations sur des roches consolidées, les expressions suivantes:

$$p_c = p_b / \beta_{nw} / (S_e)^{1/\lambda} \quad \text{pour } p_c \geq p_b \quad (\text{I.68a})$$

$$k_w = k_{sat} \quad \text{pour } p_c < p_b \quad (\text{I.68b})$$

$$= k_{sat} \cdot [p_b / (\beta_{nw} \cdot p_c)]^m \quad \text{pour } p_c \geq p_b$$

avec p_b = pression de bullage du fluide w (valeur minimale de la pression capillaire lorsque le milieu arrive à saturation en w) (Pa)

k_{sat} = perméabilité à saturation (m^2)

λ = premier index de distribution de la taille des pores

m = second index de distribution de la taille des pores

$\beta_{nw} = \rho_w / \rho_n$

$S_e = (S_w - S_n) / (1 - S_{wr})$ = saturation réduite

S_{wr} = saturation résiduelle en w.

I.4.f) Particularité du milieu multiporeux.

A une échelle plus petite que celle du E.V.R., le milieu fissuré doit être regardé comme un milieu hétérogène. Dans un tel milieu, la propagation d'une substance immiscible est contrôlée par le mécanisme d'imbibition.

¹² Notamment à cause des conditions aux frontières pour ce vecteur et de la nécessité d'exprimer ses composantes à partir d'un scalaire.

I.4.f.1) Définition du mécanisme d'imbibition (Marle, 1978).

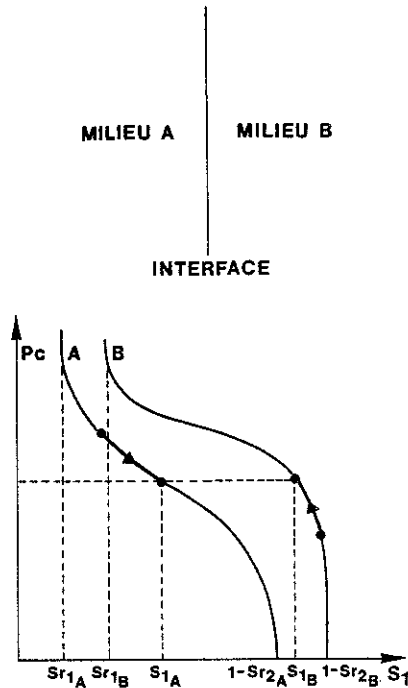
Soit un interface entre 2 milieux A et B. Envisageons 2 fluides n (le non mouillant) et w (le mouillant) s'y propageant. Supposons que les courbes de pression capillaire des 2 milieux soient connues (figure I.24a).

$$\text{si } p_c^A > p_c^B,$$

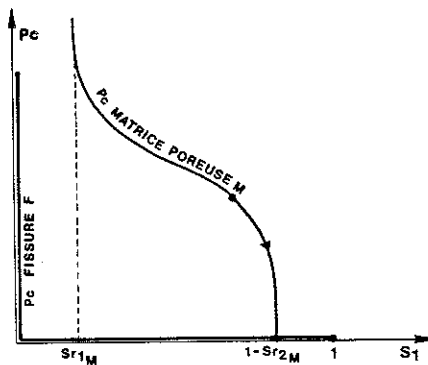
$$\text{comme } p_c = p_n - p_w,$$

$$\text{on a } p_n^A > p_n^B \text{ ou } p_w^A < p_w^B .$$

Il existe donc un gradient de pression à travers la frontière S_{AB} et le fluide n s'écoule de A vers B tandis que le fluide w s'écoule de B vers A. Ce phénomène a lieu jusqu'à un rééquilibre des pressions interstitielles et est appelé imbibition.



a) 2 milieux poreux différents



b) double porosité (pores et fissures)

figure I.24: contrastes de pression capillaire dans un milieu hétérogène.

I.4.f.2) Application à un milieu fissuré.

Si le milieu A devient une fissure, $S_{rw} = S_{rn} = 0$ et les fluides sont miscibles en toutes proportions dans la fissure. Ils forment alors une émulsion dont la circulation est peu influencée par la capillarité. Les courbes de pression capillaire associées respectivement à la fissure f et à la matrice poreuse m sont décrites figure I.24b. En conséquence, lorsqu'un des 2 fluides arrive à saturation résiduelle dans les pores, l'autre peut migrer vers la fissure et s'y mélanger au premier.

I.4.f.3) écarts par rapport à cette idéalisation.

La courbe de pression capillaire de la fissure présentée figure I.24b est idéale. En pratique, il existe une saturation résiduelle non nulle même dans une fissure. En effet, il est possible que le fluide mouillant ait tendance à s'immiscer le long des parois de la fissure pour s'immobiliser lorsque le fluide non mouillant a trouvé un chemin de passage préférentiel. Cet équilibre est très dépendant du régime d'écoulement et de la géométrie des fissures.

I.4.f.4) Macroscopisation.

Il n'existe pas, à notre connaissance, de calculs déterministes permettant de globaliser le mécanisme d'imbibition à l'échelle d'un E.V.R.¹³

Il n'est donc pas certain que le système classique (I.63 p.40) soit applicable aux milieux fissurés. En outre, même si c'était le cas, il conviendrait de faire des études plus approfondies sur la saturation résiduelle pour voir dans quels domaines de pression elle peut être considérée comme invariante.

Vu cette complexité à laquelle se heurtent les méthodes déterministes, les approches stochastiques ont été développées pour des écoulements polyphasiques (Crine 1988). Il convient peut-être de les envisager. Toutefois, on pourrait proposer d'aborder les transferts immiscibles pores-fissures d'une manière analogue à ceux qui concernent les substances miscibles.

Sur base de l'équation I.67, on rajouterait un terme de transfert. On obtiendrait:

$$n \cdot \frac{\partial S_{wF}}{\partial t} = \text{div} (G_{wF} \cdot \vec{\text{grad}} S_{wF}) - \left(\frac{\partial F_{wF}}{\partial S_{wF}} \cdot \vec{q}_t \right) \cdot \vec{\text{grad}} S_{wF} \\ + \text{div} (H_{wF} \cdot \vec{\text{grad}} z) - \alpha(S_{wF}, S_{wP}) \cdot (S_{wF} - S_{wP}) \quad (\text{I.69a})$$

$$n \cdot \frac{\partial S_{wP}}{\partial t} = \alpha(S_{wF}, S_{wP}) \cdot (S_{wF} - S_{wP}) \quad (\text{I.69b})$$

¹³ Tout au plus, certains comportements moyens sont qualitativement expliqués par le principe de l'imbibition.

I.69a représenterait l'écoulement polyphasique dans les fissures
 I.69b représenterait le bilan dans les pores où les écoulements
 sont très faibles (\vec{q} négligeable) et où la saturation est
 est supposée homogène [$G_{WP} \cdot \text{grad } S_{WP}$ et $\text{div } (H_{WP} \cdot \text{grad } z)$
 sont négligés également].

Il est clair que α dépendrait des saturations dans les
 pores (S_{WP}) et dans les fissures (S_{WF}). En particulier, pour une
 fissure idéale, α serait nul tant que $S_{WP} > S_{rWP}$. Le terme de trans-
 fert est donc aussi fortement non linéaire.

I.5. THEORIE DETERMINISTE UNIFIEE DES POLLUTIONS.

I.5.a) Définition d'une substance réelle.

Dans la nature, il existe peu de substances parfaitement
 immiscibles à l'eau. Elles y ont, en général, une solubilité non
 nulle. La théorie développée dans la section I.4 s'applique donc
 uniquement lorsque cette solubilisation est négligeable. Si ce
 n'est pas le cas, il convient de définir une théorie plus
 générale.

De cette miscibilité partielle peuvent découler des
 phénomènes d'instabilités de phase qui sont régis par les lois de
 la thermodynamique. Toutefois, ces processus sont essentiellement
 rencontrés dans le domaine du "reservoir engineering". Dans les
 applications hydrogéologiques, cette solubilisation engendre
 surtout un accroissement de mobilité par convection-dispersion
 (figure I.25a) et une variation de la saturation résiduelle
 par remise en mouvement des gouttelettes piégées (figure I.25b).

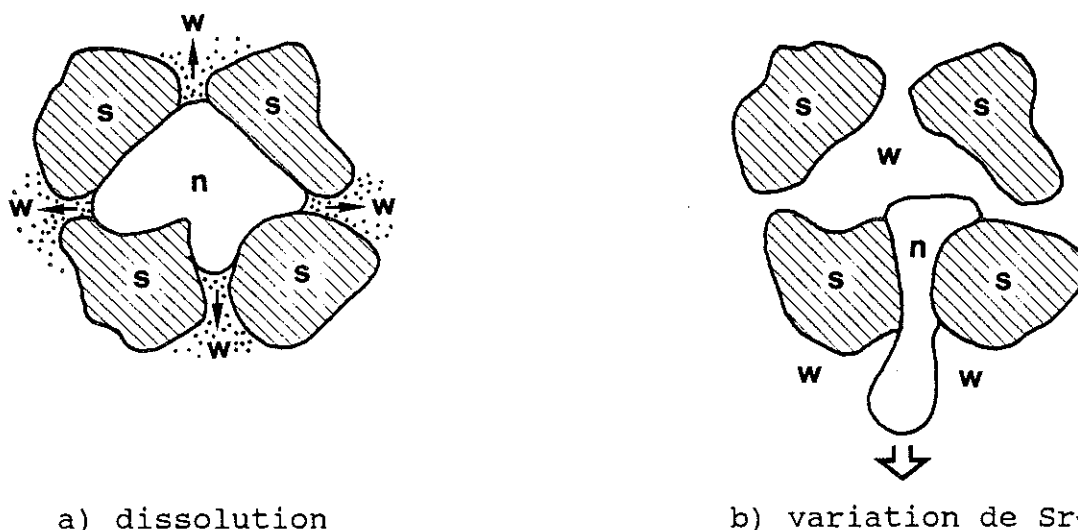


figure I.25: processus de remobilisation (Hunt et Sitar 1988).

Cette fraction remobilisée doit être considérée car les
 faibles teneurs qu'elle engendre dans les eaux souterraines sont
 parfois suffisantes pour les rendre impropres à la consommation.

I.5.b) Système complet régissant le comportement de substances partiellement miscibles entre elles.

Soient 3 phases a, b et c présentes dans le milieu poreux et dont la composition est déterminée par n constituants indépendants. Ces 3 phases sont supposées partiellement miscibles entre elles (le milieu pouvant être incomplètement saturé par les liquides, nous envisageons une phase gazeuse). Leur composition n'est pas fixe et les n constituants peuvent être transférés d'une phase à l'autre. Au sein d'une même phase, les n constituants sont miscibles entre eux et ils peuvent diffuser au sein des n-1 autres.

Pour décrire cette situation, Young (1982) utilise le système suivant (pour un milieu isotrope) :

1°) n équations de bilan pour les n constituants indépendants

$$\begin{aligned}
 n \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\rho_a \cdot S_a \cdot x_i + \rho_b \cdot S_b \cdot y_i + \rho_c \cdot S_c \cdot z_i) = \\
 - \operatorname{div} (\rho_a \cdot \vec{u}_a \cdot x_i + \rho_b \cdot \vec{u}_b \cdot y_i + \rho_c \cdot \vec{u}_c \cdot z_i) \\
 + \operatorname{div} (\rho_a \cdot \underline{D}_{ha} \cdot \vec{\operatorname{grad}} x_i) \\
 + \operatorname{div} (\rho_b \cdot \underline{D}_{hb} \cdot \vec{\operatorname{grad}} y_i) \\
 + \operatorname{div} (\rho_c \cdot \underline{D}_{hc} \cdot \vec{\operatorname{grad}} z_i) \quad i=1, n \quad (\text{I.70a})
 \end{aligned}$$

2°) 3 équations de Darcy pour les 3 phases en présence

$$\begin{aligned}
 \vec{u}_a &= k \cdot k_{ra} / \mu_a \cdot (\vec{\operatorname{grad}} p_a - \rho_a \cdot g \cdot \vec{\operatorname{grad}} z) \\
 \vec{u}_b &= k \cdot k_{rb} / \mu_b \cdot (\vec{\operatorname{grad}} p_b - \rho_b \cdot g \cdot \vec{\operatorname{grad}} z) \\
 \vec{u}_c &= k \cdot k_{rc} / \mu_c \cdot (\vec{\operatorname{grad}} p_c - \rho_c \cdot g \cdot \vec{\operatorname{grad}} z) \quad (\text{I.70b})
 \end{aligned}$$

3°) 1 équation de partage de la porosité

$$S_a + S_b + S_c = 1 \quad (\text{I.70c})$$

4°) 3 équations de composition pour les 3 phases

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^N x_i &= 1 \\
 \sum_{i=1}^N y_i &= 1 \\
 \sum_{i=1}^N z_i &= 1 \quad (\text{I.70d})
 \end{aligned}$$

- 5°) pour chacun des n constituants, 2 équations pour l'équilibre entre les 3 phases

$$\hat{f}_{ai} = \hat{f}_{bi} = \hat{f}_{ci} \quad i=1,n \quad (\text{I.70e})$$

- 6°) les équations de capillarité pour assurer l'équilibre des tensions superficielles entre les 3 phases

$$\begin{aligned} p_{cab} &= p_b - p_a = F_1(S_a, S_c) \\ p_{cbc} &= p_c - p_b = F_2(S_a, S_c) \\ p_{cca} &= p_a - p_c = F_3(S_a, S_c) \end{aligned} \quad (\text{I.70f})$$

pour b de mouillabilité intermédiaire entre a et c.

Dans ces équations, on utilise un certain nombre de grandeurs définies comme suit :

x_i = fraction massique du constituant i dans la phase a
 y_i = fraction massique du constituant i dans la phase b
 z_i = fraction massique du constituant i dans la phase c
 n = porosité totale du milieu poreux
 ρ_f = masse volumique de la phase f considérée (kg/m^3)
 S_f = saturation du milieu en la phase f (kg/m^3)
 \vec{u}_f = débit spécifique de la phase f (m/s)
 D_{hf} = tenseur de dispersion hydrodynamique dans f (m^2/s)
 \bar{k} = perméabilité intrinsèque du milieu poreux (m^2)
 k_{rf} = perméabilité relative de la phase f
 μ_f = viscosité dynamique de la phase f (Pa.s)
 p_f = pression interstitielle de la phase f (Pa)
 p_{cfg} = pression capillaire entre les phases f et g (Pa)

\hat{f}_{fi} = fugacité du constituant i par rapport à la phase f, coefficient définissant la propension du constituant i à quitter la phase f.

Les fugacités, densités et viscosités dépendent de la pression et de la composition de la phase considérée. Les pressions capillaires et les perméabilités relatives dépendent, en général, de la saturation des phases qu'elles concernent (Bear, 1990).

La fugacité est un terme général qui peut être relié à la pression partielle du constituant pour un gaz parfait (exemple: l'air) et à la concentration volumique pour une solution diluée idéale (exemple: l'eau si la densité est peu variable). Pour une solution non diluée, on parlera plutôt d'activité (Blanpain, 1984). Les équations I.70 peuvent donc être dérivées de la thermodynamique chimique. En pratique, il s'agit souvent de relations simples entre pression partielle et concentration (pour un équilibre chimique gaz-liquide) ou entre concentrations (pour un équilibre chimique liquide-liquide).

Les tenseurs de dispersion hydrodynamiques sont exprimés comme suit :

$$(\underline{D}_{hf})_{ij} = (D_{fm} + \alpha_{fT} \cdot |\vec{u}_f|) \cdot \delta_{ij} + (\alpha_{fL} - \alpha_{fT}) \cdot u_{fi} \cdot u_{fj} / |\vec{u}_f| \quad (I.71)$$

α_{xT} et α_{xL} sont les dispersivités transversale et longitudinale dans la phase X. Elles dépendent de la saturation des phases et, dans une moindre mesure, de leur composition.

Pour un problème analogue à celui décrit par la figure I.26, un système composé des équations (I.70) doit être considéré avec 3 phases:

- le gaz g composé d'air et de polluant
- le liquide mouillant w composé d'eau et de polluant
- le liquide non mouillant n (appelé parfois N.A.P.L. : non aqueous phase liquid) composé de polluant.

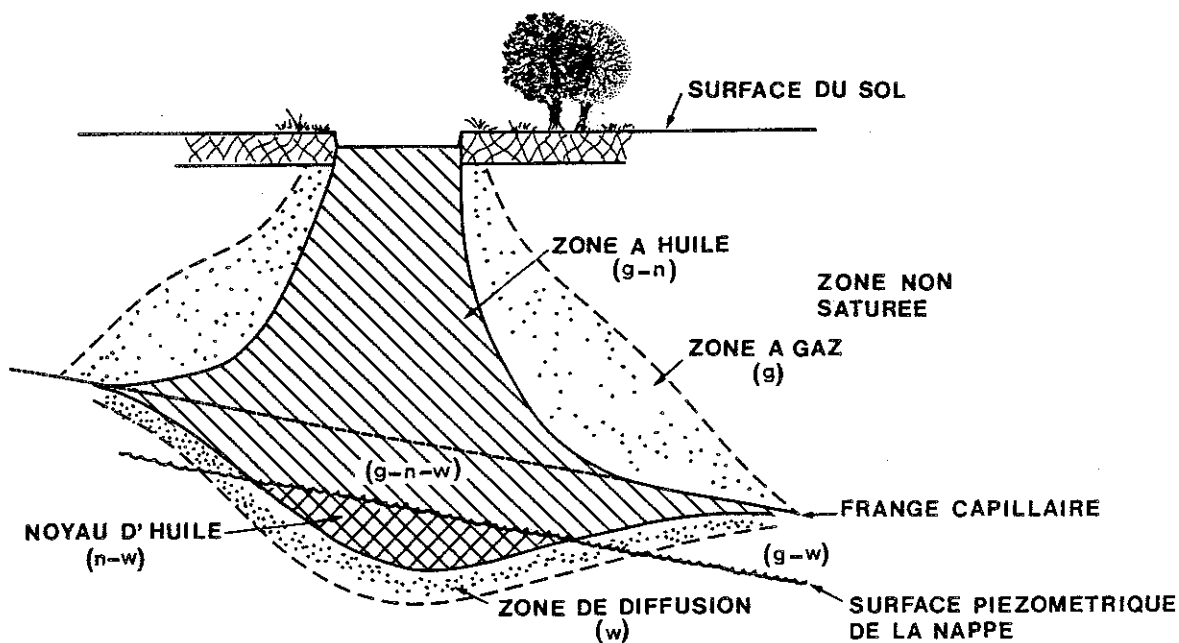


figure I.26: exemple type d'une pollution par une substance non aqueuse (Abriola et Pinder 1985).

En limitant ainsi le nombre de constituants dans chaque phase, le nombre d'équations d'équilibre chimique est ramené à 2. Les équations de transport s'en trouvent par la même occasion simplifiées. On peut encore simplifier en supposant la convection négligeable dans le gaz. La pollution s'y fait alors par un processus purement diffusif.

Il s'agit ici d'un exemple particulier. Il importe, à chaque application, d'envisager, à partir de ce système général, les simplifications qui s'imposent pour obtenir un compromis entre la qualité du modèle conceptuel et un nombre raisonnable de coefficients à déterminer.

Signalons enfin que le système I.70 peut être envisagé sous une forme encore plus complexe lorsque, en plus des variations de pression, il faut envisager les effets d'une autre variable thermodynamique importante : la température T. Dans ce cas, un certain nombre de coefficients doivent être considérés comme dépendants de T. Toutefois, de telles variations sont rarement importantes dans les phénomènes de propagation spontanée. Elles prennent de l'importance dans d'autres contextes: pour certaines opérations de dépollution, lors de l'exploitation de réservoirs géothermiques, ou dans les sites de stockage de déchets hautement radioactifs (dégradation avec dégagement important de chaleur).

I.6. DEFINITION DU MODELE MIS AU POINT.

Dans la suite de ce travail, nous nous intéresserons au transport de solutés dans la craie du Crétacé de Hesbaye. C'est pourquoi, le but du modèle que nous désirons construire est de représenter, à partir d'une théorie déterministe dont les coefficients sont quantifiables, le comportement de substances (polluantes ou non) miscibles dans un aquifère multiporeux.

Avant de décrire les hypothèses que nous envisageons, il convient de préciser la notion de polluant miscible et d'expliquer la raison de notre choix.

Une substance miscible est appelée polluant lorsque sa concentration massique dans les eaux considérées est supérieure à celle définie par les normes en vigueur sur le territoire envisagé (le tableau I.1. donne, pour un certain nombre de substances, les normes de potabilité actuelles). Si ce n'est pas le cas, on parle plutôt de substance miscible non polluante (les traceurs ¹⁴ font, en principe, partie de ce groupe). Par conséquent, la notion de polluant est liée non seulement à la nature chimique du produit mais aussi à sa quantification dans le milieu et, citère plus subjectif, aux conventions humaines admises localement.

¹⁴ Nous définissons un traceur comme une substance quantifiable dont le comportement, dans le milieu poreux, est analogue à celui du produit que l'on désire étudier. Une définition plus complète est donnée au chapitre IV.

éléments majeurs	norme C.E.E. (ppm)	norme R.W. (ppm)
chlorure Cl ⁻	200	200
nitrate NO ₃ ⁻	25	50
sulfate SO ₄ ⁼	250	250
sodium Na ⁺	150	150
potassium K ⁺	12	12
magnésium Mg ⁺⁺	50	50
éléments en trace	norme C.E.E. (ppb)	norme R.W. (ppb)
fer Fe	200	200
sélénium Se	10	10
mercure Hg	1	1
arsenic As	50	50
cyanure CN	50	10
nitrite NO ₂	100	100
hydrocarbures	norme C.E.E. (ppb)	norme R.W. (ppb)
totaux	10	10
polycycliques aromatiques	.2	.2

tableau I.1: normes de potabilité pour les eaux destinées à la consommation (Communauté Economique Européenne et Région Wallonne)

Il existe peu de polluants parfaitement immiscibles. Par contre, dans de nombreux cas, le produit mis en contact avec l'eau souterraine se solubilise entièrement. L'eau est en effet un solvant puissant, du fait de la polarité de ses molécules. En se référant au tableau I.1., il est clair qu'un certain nombre d'éléments sont considérés comme polluants à des teneurs pour lesquelles ils peuvent être considérés comme miscibles et dilués idéalement (sans effet d'immiscibilité et sans influence sur la densité du mélange).

En outre, nous avons démontré que, lorsqu'une immiscibilité apparaît, celle-ci doit être traitée dans le cadre d'un problème plus général dans lequel les mécanismes du transport miscible apparaissent (système I.70, p.46). De plus, dans certains cas (équation I.67, p.41), un formalisme analogue à celui de la convection-dispersion-dégradation peut être utilisé pour résoudre l'écoulement biphasique correspondant.

Pour toutes ces raisons, il est préférable, dans un premier temps, de mettre au point un modèle de transport miscible robuste et d'intérêt pratique immédiat. Les équations que nous allons résoudre sont bidimensionnelles. Elles sont obtenues en intégrant les équations I.46 p.27 sur l'épaisseur de la zone polluée e , les concentrations étant supposées constantes sur e .

On obtient :

$$\begin{aligned} \text{Rdm.} \frac{\partial s_m}{\partial t} + A_m \cdot s_m - \alpha_m \cdot s_{im} + \text{div}(\vec{V}) \cdot s_m + v_x \cdot \frac{\partial s_m}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial s_m}{\partial y} \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{hxx} \cdot \frac{\partial s_m}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial s_m}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{hxy} \cdot \frac{\partial s_m}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial s_m}{\partial y} \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.72a})$$

$$\text{Rdim.} \frac{\partial s_{im}}{\partial t} + A_{im} \cdot s_{im} - \alpha_{im} \cdot s_m = 0 \quad (\text{I.72b})$$

En outre, puisque l'équation de diffusivité est également ramenée à 2 dimensions, on a aussi:

$$D_{hxx} = (\alpha_L \cdot v_x^2 + \alpha_T \cdot v_y^2) / |\vec{V}|$$

$$D_{hyy} = (\alpha_T \cdot v_x^2 + \alpha_L \cdot v_y^2) / |\vec{V}|$$

$$D_{hxy} = (\alpha_L - \alpha_T) \cdot v_x \cdot v_y / |\vec{V}|$$

$$n_e \cdot v_x = - K \cdot \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$n_e \cdot v_y = - K \cdot \frac{\partial h}{\partial y} - \beta_s \cdot [\rho(s) - \rho_0]$$

$$= - K \cdot \frac{\partial h}{\partial y} + \text{contribution de la pesanteur}$$

$$\text{div} \vec{V} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = - S_s / n_e \cdot \frac{\partial h}{\partial t}$$

h étant obtenue par résolution de l'équation de diffusivité déduite de I.54 (p.33) en supposant h constant sur l'épaisseur modélisée. Pour un milieu isotrope, on a:

$$S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \{ \beta_s \cdot [\rho(s) - \rho_0] \} \quad (\text{I.72c})$$

Dans un tel système, β_s doit être considéré comme non nul lorsque y représente la coordonnée dans la direction de la gravité [modèle vertical avec $h = p/(\rho_0 \cdot g) + y$] et que la substance n'est pas idéalement diluée (les concentrations s_m et s_{im} sont alors massiques). Par contre, dans le cas d'un modèle horizontal, $h = p/(\rho_0 \cdot g) + z$ et I.72c correspond à l'hypothèse de Dupuit selon laquelle l'écoulement de l'eau est horizontal, sans effet gravitaire. Corollairement, I.72a et b représentent alors le transport d'une substance diluée idéalement (les concentrations peuvent être volumiques).

Rappelons les hypothèses de validité de ces équations :

- 1°) le milieu est isotrope pour l'écoulement et le transport;
- 2°) le milieu est saturé en eau;

- 3°) l'adsorption, la dégradation et l'effet d'eau immobile sont linéarisés par rapport aux concentrations;
- 4°) la dispersion hydrodynamique est une fonction linéaire de la vitesse de convection;
- 5°) la substance transportée doit être miscible pour le domaine de concentration envisagé. Les variations de masse volumique qu'elle engendre n'ont d'effet que sur la composante gravitaire de l'écoulement. Quant aux variations de viscosité, elles sont négligeables (l'hypothèse de Boussinesq classique est donc valable).
- 6°) La compressibilité du squelette poreux et du fluide agissent uniquement sur l'emmagasinement d'eau via S_s .
- 7°) La hauteur piézométrique et les concentrations sont constantes dans la troisième direction de l'espace (celle qui n'est pas prise en compte dans le modèle).

Ce modèle peut avoir des applications diverses en ce qui concerne les nappes d'eau souterraines. Entre autres :

- la propagation d'un radionuclide dont la loi de désintégration est simple et dont l'adsorption est linéarisable;
- la pollution par une substance organique lorsque sa concentration n'atteint pas la limite de solubilité;
- la migration d'un ion dissocié qui n'est pas en équilibre chimique avec un autre ion participant au transport, et dont le schéma hydrodispersif serait différent;
- l'invasion d'eau salée lorsque les concentrations sont du même ordre de grandeur que celles de l'eau de mer et que la solution n'est pas idéalement diluée;
- le transfert de chaleur par conduction et convection dans une eau souterraine en mouvement.

Pour toutes ces applications, le milieu peut être multiporeux mais il convient alors de vérifier l'hypothèse de milieu poreux équivalent; c'est-à-dire que les coefficients doivent être déterminés à une échelle macroscopique, voire mégascopique.

Enfin nous insistons à nouveau sur le fait que la généralisation du modèle pour des pollutions présentant des immiscibilités est loin d'être immédiate, même lorsqu'un formalisme similaire peut être utilisé. En effet, un tel formalisme fait intervenir des non linéarités importantes qui ne sont pas prises en compte dans le système ci-dessus.

CHAPITRE II

PROCEDES DE RESOLUTION DES EQUATIONS DE TRANSPORT MISCIBLE

II.1. INTRODUCTION.

Au chapitre précédent, un modèle conceptuel a été choisi. Les phénomènes physicochimiques entrant en jeu dans les applications qui nous concernent ont été décrits et mis en équation dans un formalisme déterministe. Il importe maintenant de résoudre correctement le système d'équations. Dans l'absolu, il est clair que la meilleure méthode de résolution est analytique, car la portée des approximations qu'elle comporte est immédiate. C'est pour cette raison que les hydrogéologues ont développé, tant pour l'écoulement que pour le transport, un certain nombre de solutions théoriques analytiques, exactes ou parfois, approchées.

Toutefois, l'idéalisation des problèmes décrits par ces solutions analytiques est souvent fort éloignée de l'application pratique rencontrée dans la nature. Il en résulte que le comportement évalué par ce type d'interprétation ne représente qu'une première approximation. Même pour de simples essais in situ (essais de pompage, essais de traçage), elle peut se révéler fort grossière. La nécessité d'utiliser une méthode numérique de résolution se fait alors sentir. Ces méthodes mettent en jeu des modes de calcul plus complexes, mais ceci est le prix à payer pour restaurer une image plus précise d'une réalité complexe.

Si l'application des méthodes numériques à la résolution des équations d'écoulement est bien maîtrisée, il n'en est pas de même pour les problèmes de transport. Lorsqu'une équation de diffusivité (I.72c) est comparée à un bilan de masse pour une substance miscible (I.72a), la principale différence réside dans la nature des dérivées spatiales. Elles sont uniquement du second ordre pour la première; pour la seconde, il y a présence simultanée de dérivées spatiales du premier et du second ordre.

Le bilan de masse est particulièrement difficile à résoudre lorsque la convection prend de l'importance. Ceci résulte d'un comportement numérique très différent pour les termes du premier et du second ordre. Cette particularité met en échec les méthodes traditionnelles d'intégration numérique.

Pour cette raison, de nouveaux schémas de résolution ont dû être élaborés. La littérature de ces 20 dernières années regorge d'une multitude de procédés très différents les uns des autres, dont aucun ne semble s'être imposé. Il convient donc de choisir, dans cet ensemble, les méthodes les plus appropriées aux applications à traiter.

Dans ce chapitre, après avoir décrit brièvement un ensemble de méthodes existantes, nous examinerons plus en détail deux formulations par éléments finis en maillage fixe. Ce choix, volontairement restreint, résulte de la complexité géométrique souvent rencontrée dans les applications géologiques.

Il sera expliqué comment introduire ces méthodes, adéquates pour nos problèmes, dans un code classique de modélisation par éléments finis. A cette occasion, les tests qui ont servi à valider le modèle seront présentés. Une discussion sur les conditions aux limites clôturera ce deuxième chapitre.

II.2. HISTORIQUE DES PROCÉDES DE RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS DE CONVECTION-DISPERSION.

II.2.a) Méthodes analytiques exactes ou approchées.

Dans cette section, nous donnons une liste non exhaustive de solutions pour des problèmes théoriques simples. Le domaine d'application de chacune d'elle est mentionné.

II.2.a.1) Transport unidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini.

Soient (figure II.1):

- un milieu poreux homogène, isotrope, et incompressible qui s'étend d'un point d'origine à l'infini;
- une substance diluée idéale dont le déplacement dans ce milieu est unidirectionnel et se fait sous l'action d'une vitesse de convection v constante et d'une dispersion hydrodynamique D_{HL} (constante elle aussi).

En l'absence de tout échange avec l'eau immobile, si la substance se dégrade et s'adsorbe suivant une loi linéaire, le système général se résume à:

$$R_d \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} = D_{HL} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - A_m \cdot C_m \quad (II.1)$$

CONDITIONS AUX LIMITES

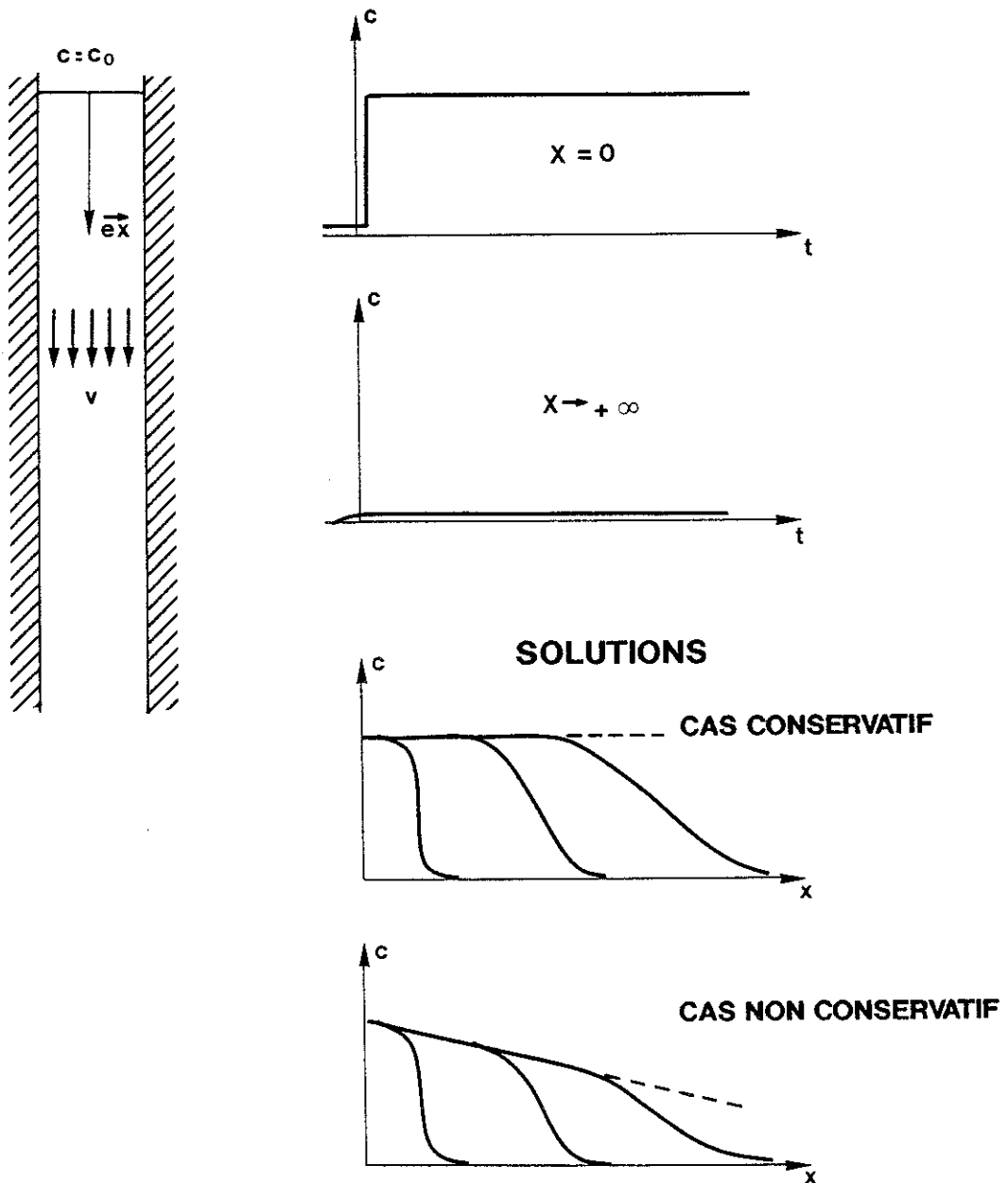


figure II.1: transport unidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini (description du problème).

Envisageons comme condition initiale:

$$c_m(x, 0) = 0 \quad \forall x > 0$$

comme conditions aux frontières:

$$c_m(0, t) = c_0 \quad \forall t \geq 0$$

$$c_m(\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0$$

Ogata et Banks (1961) donnent la solution à ce problème en utilisant la méthode des transformées de Laplace:

$$c_m(x,t) = \frac{c_0}{2} \cdot \exp\left(\frac{v \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \left[\exp\left(\frac{-v \cdot \gamma \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v \cdot \gamma \cdot t/R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot t/R_d}}\right) + \exp\left(\frac{v \cdot \gamma \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + v \cdot \gamma \cdot t/R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot t/R_d}}\right) \right] \quad (\text{II.2})$$

$$\text{avec } \gamma = \sqrt{1 + 4 \cdot A_m \cdot R_d \cdot D_{hL} / u^2}$$

$$\operatorname{erfc}(a) = 1 - \operatorname{erf}(a)$$

$$\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-\varepsilon^2} \cdot d\varepsilon = \text{fonction d'erreur de Gauss}$$

c_0, x, t définis par la figure II.1

Cette solution est représentée figure II.1 pour un transport conservatif ou non (sans ou avec dégradation).

On remarquera que le 2^{ème} terme de (II.2) devient négligeable lorsque $D_{hL} < 0.002 v \cdot x$ (pour une erreur maximale de 3 %). Cette solution est souvent utilisée pour interpréter les expériences de laboratoires sur colonnes étroites qui visent à déterminer la dispersivité longitudinale du milieu $\alpha_L = \frac{D_{hL} - D_m}{v}$ pour le produit envisagé.

II.2.a.2) Transport bidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini.

Soit un problème analogue à celui décrit au paragraphe II.2.a.1), envisageons cependant (figure II.2.) qu'un transfert latéral soit possible par dispersion hydrodynamique et que la substance ne se dégrade pas. L'équation du problème devient alors:

$$R_d \cdot \frac{\partial c_m}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial c_m}{\partial x} = D_{hL} \cdot \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} + D_{hT} \cdot \frac{\partial^2 c_m}{\partial y^2} \quad (\text{II.3})$$

Envisageons comme conditions initiales:

$$c_m(x,y,0) = 0 \quad \forall x,y > 0$$

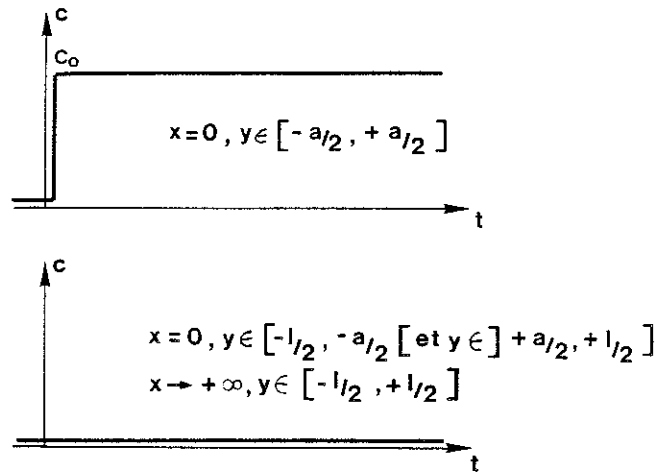
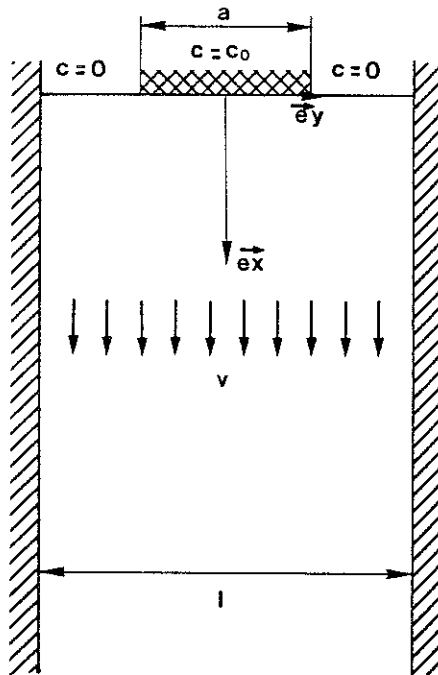
comme conditions aux frontières:

$$c_m(0,y,t) = \begin{cases} c_0 & \forall y \in [-a/2, a/2], \forall t \geq 0 \\ 0 & \forall y \in [-l/2, -a/2], \forall t \geq 0 \\ 0 & \forall y \in [a/2, l/2], \forall t \geq 0 \end{cases}$$

$$c_m(\infty,y,t) = 0 \quad \forall y \in [-l/2, l/2], \forall t \geq 0$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial y}(x, \pm l/2, t) = 0 \quad \forall x \geq 0, \quad \forall t \geq 0$$

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTION

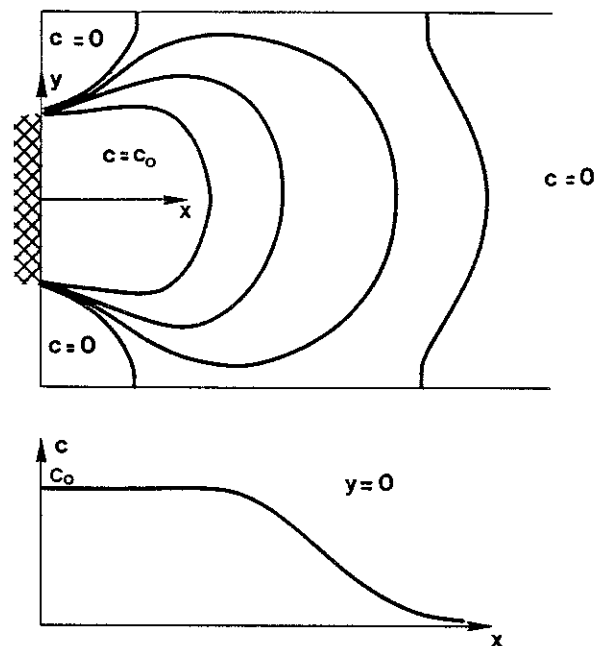


figure II.2: transport bidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini (description du problème).

Bruch et Street (1967) généralisent la solution d'Ogata et Banks pour cette nouvelle géométrie. Ils donnent l'expression de la concentration c_m sous forme d'un développement en série :

$$\begin{aligned}
 c_m(x, y, t) = & a \cdot \frac{c_0}{l} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{y - v \cdot t / R_d}{\sqrt{D_{hT} \cdot t / R_d}} \right) \\
 & + a \cdot c_0 / l \cdot \exp \left(\frac{v \cdot y}{D_{hL}} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{y + v \cdot t / R_d}{\sqrt{D_{hT} \cdot t / R_d}} \right) \\
 & + 1/2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left[F_n \cdot \cos \left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{l/2} \right) \right] \cdot \exp \left[\left(\frac{v}{D_{hT}} - J_n \right) \cdot y \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{y - J_n \cdot D_{hT} \cdot t / R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hT} \cdot t / R_d}} \right) \\
 & + 1/2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left[F_n \cdot \cos \left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{l/2} \right) \right] \cdot \exp \left[\left(\frac{v}{D_{hT}} + J_n \right) \cdot y \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{y + J_n \cdot D_{hT} \cdot t / R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hT} \cdot t / R_d}} \right)
 \end{aligned} \tag{II.4}$$

avec : $F_n = \frac{2 \cdot c_0}{\pi \cdot n} \cdot \sin \left(\frac{n \cdot \pi \cdot a}{l/2} \right)$

$$J_n = \left[\left(\frac{v}{D_{hT}} \right)^2 + \left(\frac{4 \cdot \pi \cdot n}{l} \right)^2 \cdot \frac{D_{hL}}{D_{hT}} \right]^{1/2}$$

c_0, x, y, t, a, l étant définis par la figure II.2

Ce développement sert à l'interprétation de tests de dispersion en laboratoire sur des colonnes larges. Ces tests permettent de prendre en compte la dispersivité transversale

$$\alpha_T = \frac{D_{hT} - D_m}{v}$$

II.2.a.3) Transport unidimensionnel, injection en écoulement uniforme, dans un milieu infini.

Considérons cette fois que le milieu poreux (homogène, isotrope, et incompressible) s'étend à l'infini dans les deux sens. Prenons les mêmes hypothèses de transport que le problème II.2.a.1) régi par l'équation (II.1).

Supposons qu'on injecte instantanément une masse ΔM de substance en un point $x = 0$ du domaine. Dans ce cas, les conditions initiales sont données par (II.5a), les conditions-limites par (II.5b) et (II.5c).

$$c_m(x, 0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta M \cdot \delta(x)}{\Delta x \cdot n_e \cdot S \cdot R_d} \quad \forall x \geq 0 \tag{II.5a}$$

$$c_m(0, t) = c_m(0, 0) \cdot \delta(t) \quad \forall t \geq 0 \tag{II.5b}$$

$$c_m(\pm\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0 \tag{II.5c}$$

Dans ces relations, δ est la fonction adimensionnelle de Dirac valant 1 au point d'origine et 0 ailleurs, $n_e \cdot S$ est la section de passage du fluide (égale à la section S du milieu poreux multipliée par la porosité efficace n_e).

Il est clair que l'injection de Dirac décrite par (II.5a) et (II.5b) est une abstraction mathématique puisqu'elle correspond à une concentration ponctuelle infinie. En pratique, on considérera la limite atteinte lorsque Δx est petit vis-à-vis de la taille du domaine étudié. L'injection de ΔM se fait alors en un intervalle de temps donné par $\Delta t = \Delta x/v$ qui est, lui aussi, considéré comme petit par rapport à la durée de l'expérience.

La solution de ce problème est décrite par une fonction de Gauss.

$$c_m(x, t) = \frac{\Delta M}{2 \cdot n_e \cdot S \cdot R_d \cdot \sqrt{\pi \cdot D_{hL} \cdot t / R_d}} \cdot \exp(-A_m \cdot x) \cdot \exp\left(\frac{-(x - v \cdot t / R_d)^2}{4 \cdot D_{hL} \cdot t / R_d}\right) \quad (\text{II.6})$$

Elle représente (figure II.3) une courbe en cloche centrée sur $x = v \cdot t / R_d$, de largeur $\sqrt{2 \cdot D_{hL} \cdot t / R_d}$, et dont l'aire vaut $\Delta M \cdot \exp(-A_m \cdot t)$.

Dans le cas d'une injection continue à un taux \dot{M} constant, on a $\Delta M = \dot{M} \cdot \Delta t = \dot{M} \cdot \Delta x / v$.

Les conditions initiales deviennent :

$$c_m(x, 0) = \frac{\dot{M} \cdot \delta(x)}{(n_e \cdot S \cdot R_d \cdot v)} \quad \forall x \geq 0 \quad (\text{II.7a})$$

$$= c_0 \cdot \delta(x)$$

Quant aux conditions-limites, elles s'écrivent :

$$c_m(0, t) = c_m(0, 0) = c_0 \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.7b})$$

$$c_m(\pm\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.7c})$$

La solution devient alors :

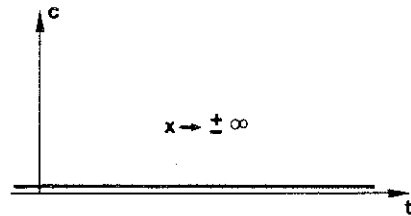
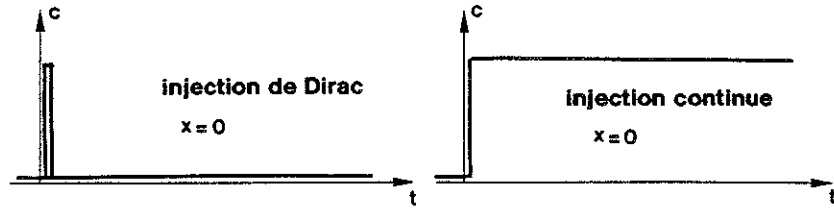
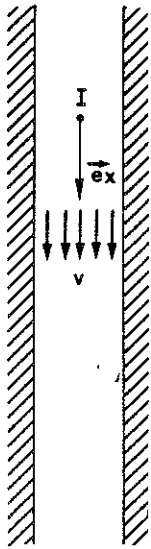
$$c_m(x, t) = c_0 / 2 \cdot \exp\left(\frac{v \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \left[\exp\left(\frac{-v \cdot \gamma \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \text{erfc}\left(\frac{x - v \cdot \gamma \cdot t / R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot t / R_d}}\right) - \exp\left(\frac{v \cdot \gamma \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \text{erfc}\left(\frac{x + v \cdot \gamma \cdot t / R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot t / R_d}}\right) \right] \quad (\text{II.8})$$

Cette solution (représentée également figure II.3) diffère d'un signe de celle d'Ogata et Banks en raison de la géométrie différente de ce nouveau problème. On comprend aisément que si, à proximité de l'origine, la dispersion agit dans les deux sens plutôt que dans un seul, les concentrations mesurées seront plus petites.

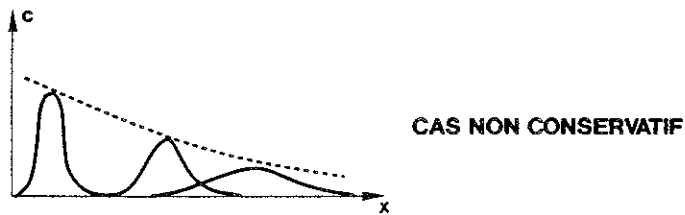
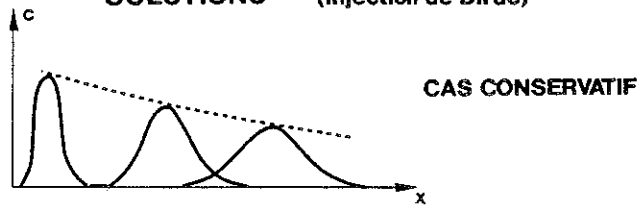
Lorsque la convection est prépondérante ou lorsqu'on s'éloigne du point d'injection, ces deux problèmes ont des solutions similaires. Ceci se traduit mathématiquement par le fait que pour $v \cdot x / D_{hL} > 10$, elles dégénèrent toutes les 2 vers la même forme approximée:

$$c_m(x, t) \approx c_0 / 2 \cdot \exp\left(\frac{v \cdot (1 - \gamma) \cdot x}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot \text{erfc}\left(\frac{x - v \cdot \gamma \cdot t / R_d}{2 \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot t / R_d}}\right) \quad (\text{II.9})$$

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTIONS (injection de Dirac)



SOLUTIONS (injection continue)

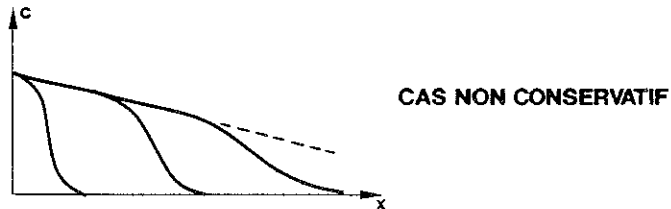
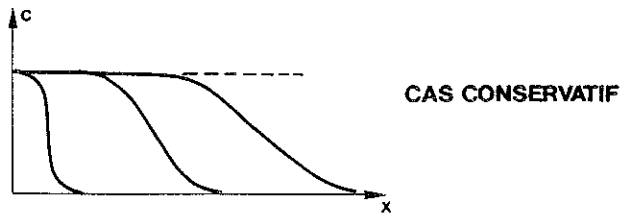


figure II.3: transport unidimensionnel, injection en écoulement uniforme, dans un milieu infini (description du problème).

Notons également que, pour des injections dont la dépendance temporelle est plus complexe, la solution s'écrit sous la forme d'une intégrale de convolution de la fonction de concentration $c_{m\delta}$ correspondant à l'injection de Dirac d'une quantité $\Delta M = \dot{M}(t)$

$$c_m(x,t) = \int_0^t \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} c_{m\delta}[x, (t-\tau)] \cdot d\tau \quad (\text{II.10})$$

Ces formulations sont souvent utilisées pour interpréter les essais de traçage in situ en écoulement uniforme dans des drains.

II.2.a.4) Transport bidimensionnel, injection en écoulement uniforme, dans un milieu infini.

Reprenons l'équation (II.1) en ajoutant le terme de dispersion latérale.

Il vient :

$$R_d \cdot \frac{\partial c_m}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial c_m}{\partial x} = D_{hL} \cdot \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} + D_{hT} \cdot \frac{\partial^2 c_m}{\partial y^2} - A_m \cdot c_m \quad (\text{II.11})$$

Pour une injection instantanée d'une masse ΔM en un point $x = 0, y = 0$ du domaine, les conditions initiales et les conditions-limites s'écrivent:

$$c_m(x,y,0) = \lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0 \\ \Delta y \rightarrow 0}} \frac{\Delta M \cdot \delta(x) \cdot \delta(y)}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot n \cdot e \cdot R_d} \quad \forall x, y \geq 0 \quad (\text{II.12a})$$

avec e = épaisseur de l'aquifère concernée par le transport.

$$c_m(0,0,t) = c_m(0,0,0) \cdot \delta(t) \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.12b})$$

$$c_m(\pm\infty, \pm\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.12c})$$

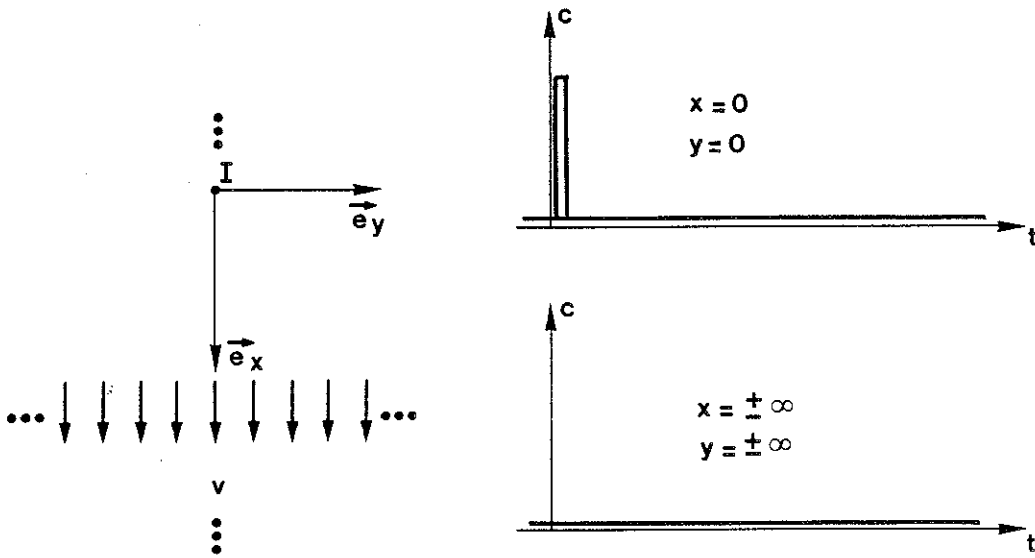
Ce cas est décrit par une généralisation de la solution (II.6) (Csanady, 1979)

$$c_m(x,t) = \frac{\Delta M}{2 \cdot n \cdot e \cdot e \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot D_{hT} \cdot t}} \cdot \exp(-A_m \cdot x) \cdot \exp\left(\frac{(x - v \cdot t/R_d)^2}{4 \cdot D_{hL} \cdot t/R_d} + \frac{y^2}{4 \cdot D_{hT} \cdot t/R_d}\right) \quad (\text{II.13})$$

$$= c_{m\delta}(x,y,t)$$

Il s'agit d'une distribution en cloche centrée sur $x = v \cdot t/R_d, y = 0$, de forme elliptique. Les 2 axes principaux de l'ellipse ont respectivement les longueurs $4 \cdot \sqrt{2 \cdot D_{hL} \cdot t/R_d}$ et $4 \cdot \sqrt{2 \cdot D_{hT} \cdot t/R_d}$ (voir figure II.4).

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTION

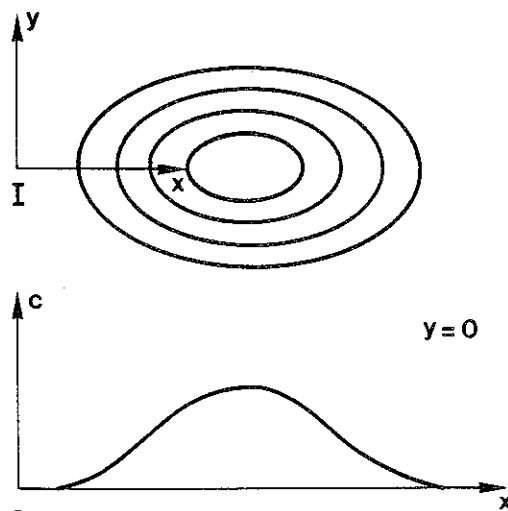


figure II.4: transport bidimensionnel, injection instantanée, en écoulement uniforme, dans un milieu infini (description du problème).

Le cas d'une injection continue à un taux \dot{M} constant s'obtient (tout comme pour des injections plus complexes) par convolution de la fonction $c_{m\delta}$ correspondant à l'injection bidimensionnelle de Dirac d'une quantité $\Delta M = \dot{M}$.

$$c_m(x, y, t) = \int_0^t \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} c_{m\delta}[x, y, (t-\tau)] \cdot d\tau \quad (\text{II.14})$$

En développant, la solution s'écrit (Wilson et Miller, 1977) :

$$c_m(x, t) = \frac{\dot{M}}{4 \cdot \pi \cdot n_e \cdot e \cdot \sqrt{D_{hL} \cdot D_{hT}}} \cdot \exp\left(\frac{x \cdot v}{2 \cdot D_{hL}}\right) \cdot W\left(\frac{r^2 \cdot R_d}{4 \cdot D_{hL} \cdot t}, \frac{r \cdot \gamma}{2 \cdot D_{hL}}\right)$$

$$\text{avec: } \gamma = \sqrt{1 + 4 \cdot A_m \cdot R_d \cdot D_{hL} / u^2} \quad (\text{II.15})$$

$$r^2 = x^2 + y^2 \cdot D_{hL} / D_{hT}$$

$$W(a_1, a_2) = \int_{a_1}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon} \cdot \exp\left(-\varepsilon - \frac{a_2^2}{4 \cdot \varepsilon}\right) \cdot d\varepsilon = \text{fonction de Hantush}$$

Elle correspond aux conditions initiales et aux conditions-limites suivantes :

$$c_m(x, y, 0) = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{M \cdot \delta(x) \cdot \delta(y)}{\Delta y \cdot n_e \cdot e \cdot R_d} \quad \forall x, y \geq 0 \quad (\text{II.16a})$$

$$c_m(0, 0, t) = c_m(0, 0, 0) \cdot \delta(t) \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.16b})$$

$$c_m(\pm\infty, \pm\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{II.16c})$$

Pour évaluer la fonction de Hantush, Henry et Foree (1979) proposent l'approximation suivante, obtenue par les techniques d'approximation de Laplace.

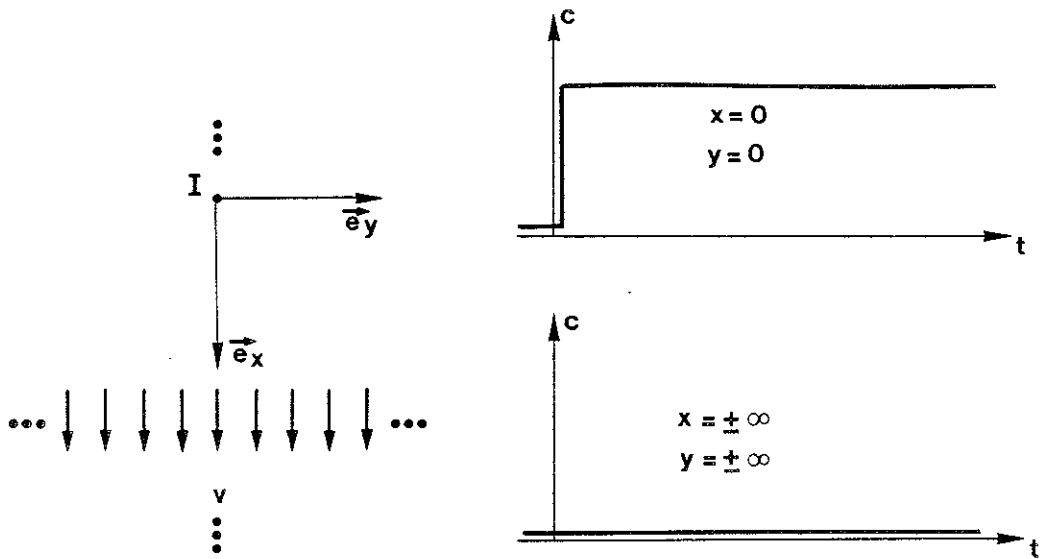
$$W(a_1, a_2) = \sqrt{\pi / (2 \cdot a_2)} \cdot \exp(-a_2) \cdot \text{erfc}\left(-\frac{a_2 - 2 \cdot a_1}{2 \cdot \sqrt{a_1}}\right) \quad (\text{II.17})$$

Cette approximation donne une solution solution doublement asymptotique représentée figure II.5, dont le domaine de validité est défini par la condition $r \cdot v / (2 \cdot D_{hL}) > 5$ (pour 5 % d'erreur au maximum).

La décroissance brutale de la concentration observée au voisinage du point d'injection résulte de l'action de la dispersion latérale, élevée à cause d'un fort gradient de concentration. Une seconde décroissance s'observe plus loin. Il s'agit de la transition entre la zone contaminée et la zone vierge; elle est déterminée par la dispersion.

Ces formules de transport bidimensionnel dans un milieu infini sont souvent utilisées pour interpréter les essais de traçage in situ en écoulement uniforme dans des aquifères homogènes.

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTION

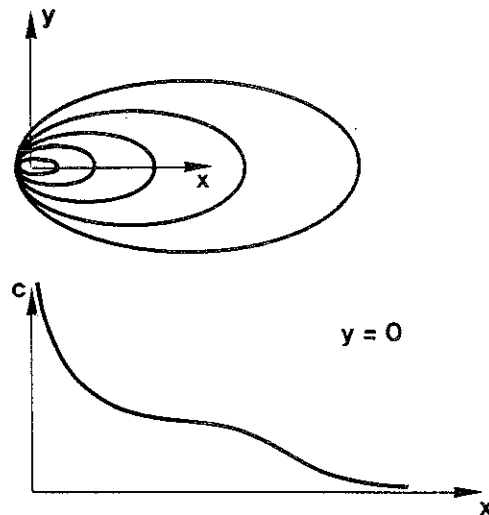


figure II.5: transport bidimensionnel, injection continue, en écoulement uniforme, dans un milieu infini (description du problème).

II.2.a.5) Transport bidimensionnel, injection instantanée, en écoulement convergent stabilisé, dans un milieu infini.

Lorsque l'écoulement est radial convergent, la vitesse de convection possède 2 composantes, et l'équation de transport en coordonnées cartésiennes s'écrit (pour un milieu isotrope, homogène, et un transport dilué, sans eau immobile):

$$\begin{aligned} R_d \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + v_x \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{hxx} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{hxy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial y} \right) - A_m \cdot C_m \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Ecrive telle quelle, cette équation est trop complexe. Il convient donc de faire un changement de variable en coordonnées polaires.

Soient r, θ tels que: $x = r \cdot \cos \theta$
 $y = r \cdot \sin \theta$

$$\begin{aligned} \text{dans ce cas: } \frac{\partial f}{\partial x} &= \cos \theta \cdot \frac{\partial f}{\partial r} - \sin \theta / r \cdot \frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= \sin \theta \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \cos \theta / r \cdot \frac{\partial f}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

f désignant une fonction scalaire des coordonnées spatiales.

De plus, dans les axes $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta$ (figure II.6):

\vec{v} est dirigé suivant \vec{e}_r
 D_h est diagonal

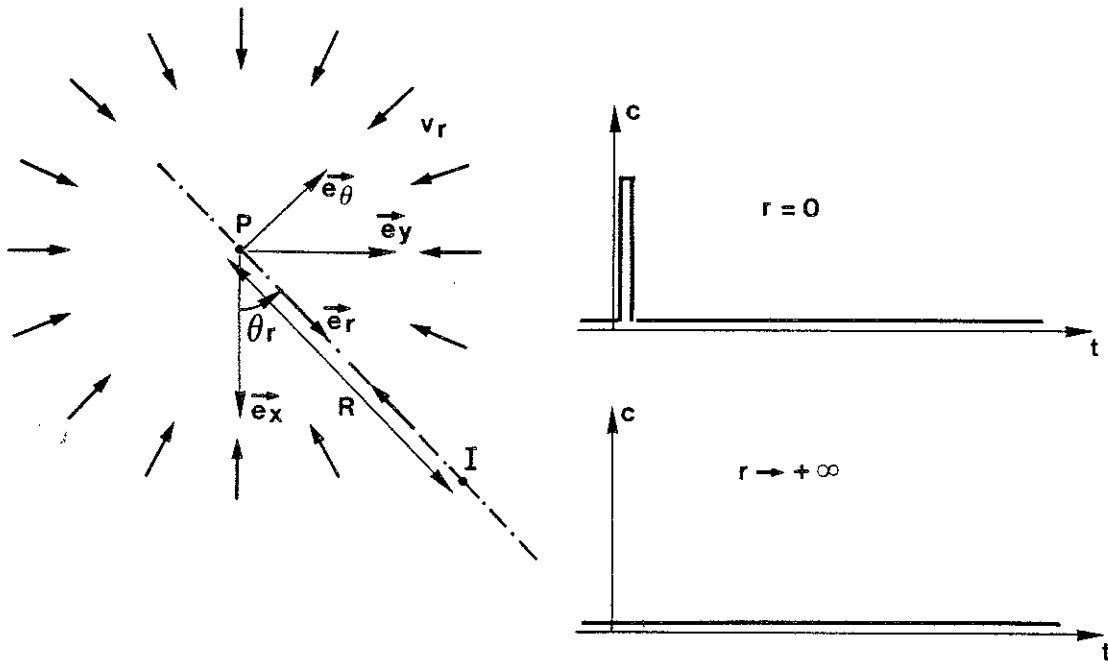
puisque ces axes sont les axes de Frenet pour un écoulement radial convergent.

Il vient donc pour c_m, v, D_{hL}, D_{hT} fonctions de r, θ :

$$R_d \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + (|\vec{v}| - D_{hL}/r) \cdot \frac{\partial C_m}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{hL} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(D_{hT}/r^2 \cdot \frac{\partial C_m}{\partial \theta} \right) - A_m \cdot C_m \quad (\text{II.20})$$

Sauty et Kinzelbach (1988) proposent une solution approchée de cette équation (pour le point de pompage P) en effectuant une régression sur des résultats numériques et en négligeant l'action de la diffusion moléculaire par rapport à celle de la dispersion mécanique ($D_{hL} = a_L \cdot v$).

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTION

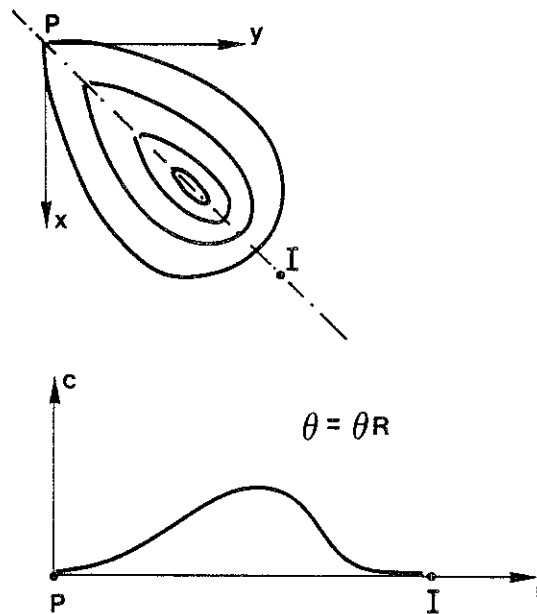


figure II.6 transport bidimensionnel, injection instantanée, en écoulement convergent, dans un milieu infini (description du problème).

Ils définissent :

$$c_m(0, \theta_R, t) = \frac{M.R}{2.Q.\sqrt{\pi}.a_L.V} . t^{-3/2} . \exp\left(-\frac{(R-V.t)^2}{4.a_L.V.t}\right) . \exp(-A_m.t) \quad (\text{II.21})$$

- où θ_R = angle que fait le segment PI (pompage-injection) avec l'axe global \vec{e}_x
 R = distance radiale [PI]
 M = masse injectée en I de manière instantanée
 Q = débit constant pompé en P
 V = vitesse de convection engendrée en I par le pompage en P
 $= Q/(2.\pi.R.e.n_e)$
 e = épaisseur de l'aquifère concernée par l'injection

Ils expliquent également que cette approximation donne de bons résultats lorsque $R > 10.a_L$ mais se dégrade progressivement pour des distances radiales R plus faibles (figure II.7).

On constate que la dispersivité transversale α_T n'intervient pas dans cette solution. Ceci peut se comprendre en invoquant la convergence de l'écoulement qui a une action antagoniste par rapport à la dispersion transversale. Sauty (1977) démontre que la concentration moyenne à une distance r du point de pompage est en effet indépendante de α_T .

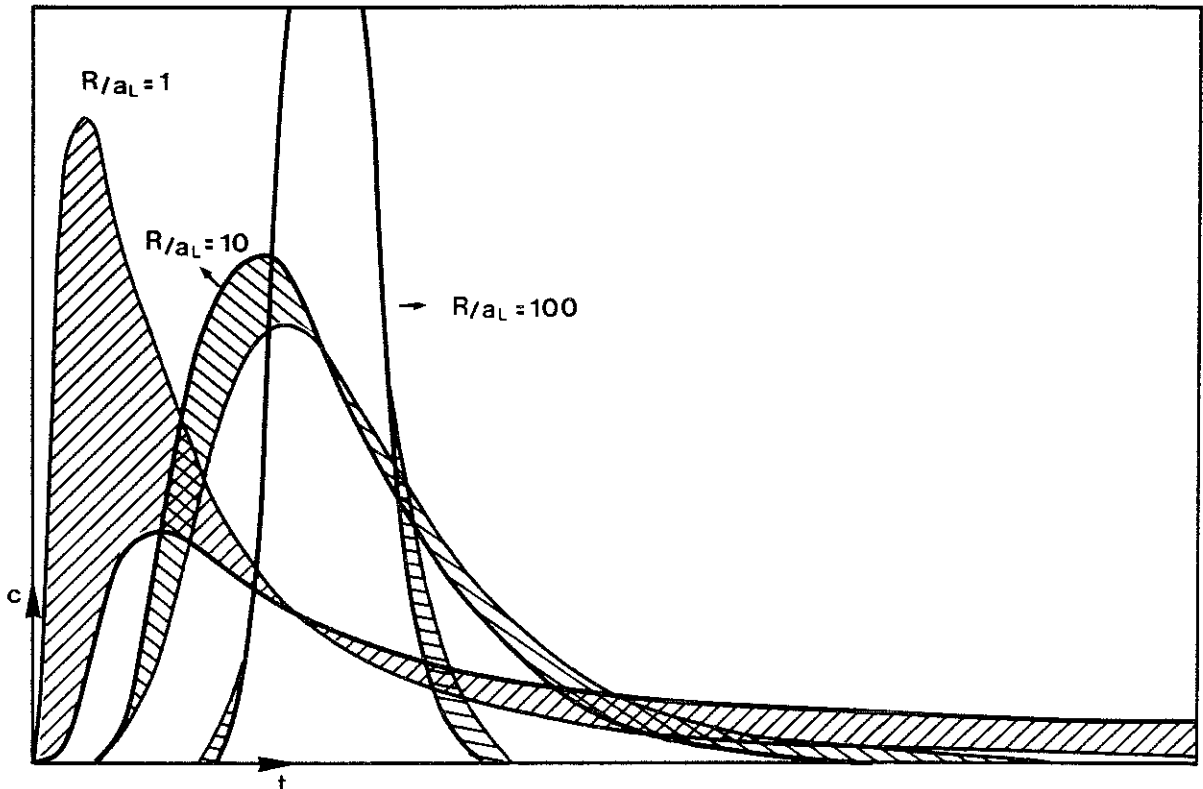


figure II.7: écart de la formule approchée de Sauty-Kinzelbach par rapport aux solutions numériques exactes.

Cette solution peut se révéler fort pratique pour donner une première approximation des coefficients de transfert à partir des essais de traçage in situ, en écoulement convergent, dans des aquifères homogènes, lorsque l'injection est de courte durée par rapport au temps nécessaire à la restitution complète du traceur.

II.2.a.6) Transport unidimensionnel avec effet d'eau immobile, injection instantanée, en écoulement uniforme, dans un milieu infini.

Lorsque l'effet d'eau immobile affecte le transport unidimensionnel, il faut prendre en compte une seconde équation de bilan. Considérons un système sans adsorption ni dégradation, il vient:

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} = D_{hL} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \frac{\alpha_d^*}{\theta_m} \cdot (C_m - C_{im}) \quad (II.22a)$$

$$\frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\alpha_d^*}{\theta_{im}} \cdot (C_m - C_{im}) \quad (II.22b)$$

II.22b dans II.22a donne :

$$\phi \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + (1-\phi) \cdot \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + v' \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} = D_{hL}' \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} \quad (II.23a)$$

$$(1-\phi) \cdot \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha_d'^* \cdot (C_m - C_{im}) \quad (II.23b)$$

où $\phi = \theta_m/n$ et $(1-\phi) = \theta_{im}/n$, le milieu étant saturé

$$v' = v \cdot \phi$$

$$D_{hL}' = D_{hL} \cdot \phi$$

$$\alpha_d'^* = \alpha_d^* / n$$

Par la méthode des transformées de Laplace, Villiermaux et Van Swaaij (1969) résolvent le système pour les conditions initiales et les conditions-limites suivantes:

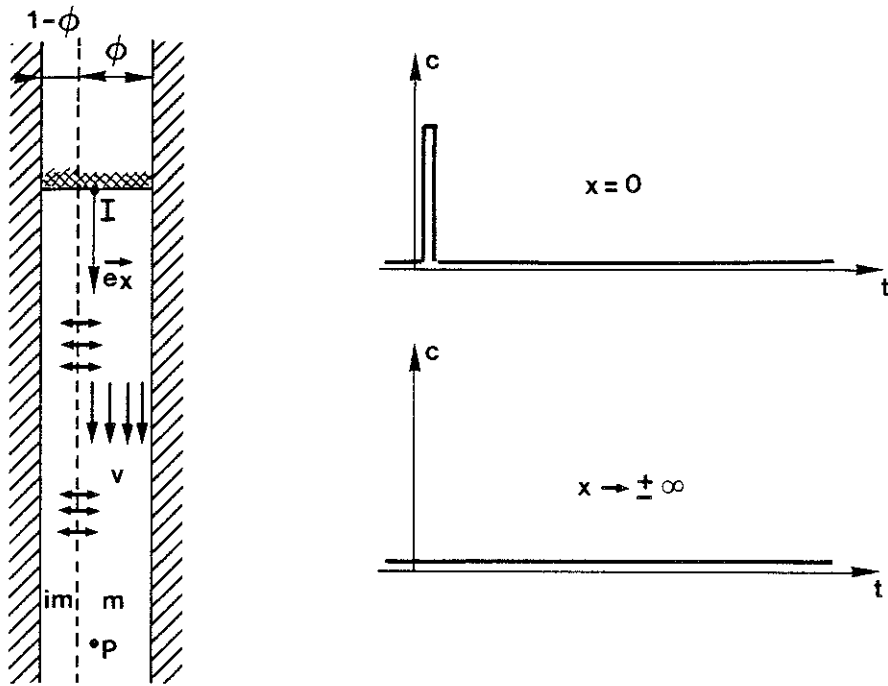
$$C_m(x, 0) = C_{im}(x, 0) = 0 \quad \forall x > 0 \quad (II.24a)$$

$$C_m(\pm\infty, t) = C_{im}(\pm\infty, t) = 0 \quad \forall t \geq 0 \quad (II.24b)$$

$$-D_{hL} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x}(0, t) + v \cdot C_m(0, t) = \Delta M \cdot \delta(t) \quad \forall t \geq 0 \quad (II.24c)$$

où l'équation II.24b correspondant à une condition limite avec injection instantanée de la substance par convection et dispersion. Ce problème est illustré figure II.8.

CONDITIONS AUX LIMITES



SOLUTIONS

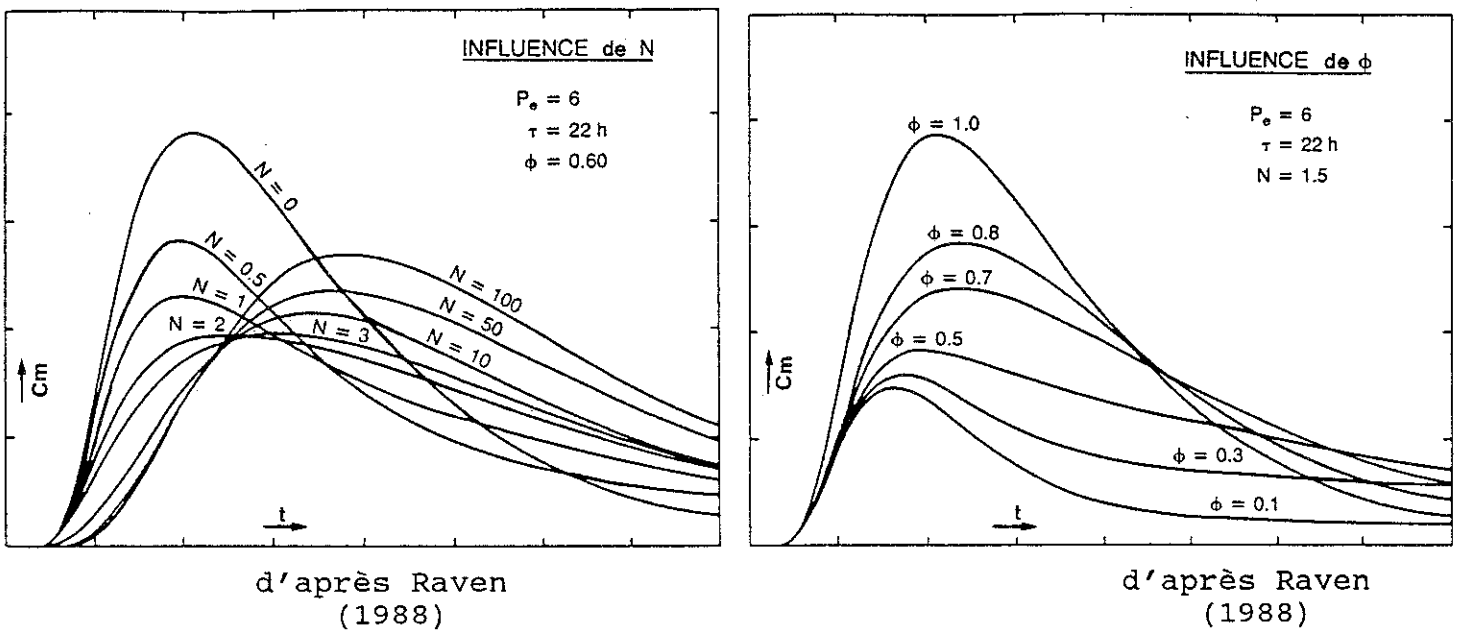


figure II.8: transport unidimensionnel avec effet d'eau immobile, injection instantanée, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini (description du problème).

La fonction de concentration qu'ils obtiennent s'écrit :

$$c_m(x,t) = \frac{\Delta M}{v \cdot n_e \cdot S} \cdot \exp(-N \cdot \theta / \phi) \cdot h(\theta, \phi) + \int_0^\theta g(\chi, \theta, \phi) \cdot d\chi \quad (\text{II.25})$$

$$\text{avec } h(\chi, \phi) = \left(\frac{Pex}{\pi \cdot \phi \cdot \chi} \right)^{1/2} \cdot \exp\left(-\frac{Pex \cdot (\chi - \phi)^2}{4 \cdot \chi \cdot \phi}\right) - \frac{Pex}{2 \cdot \phi} \cdot \exp(Pex) \cdot \operatorname{erfc}\left[\left(\frac{Pex}{\phi \cdot \chi}\right)^{1/2} \cdot \frac{\chi + \phi}{2}\right]$$

$$g(\chi, \theta, \phi) = \frac{N}{\phi} \cdot \left(\frac{\phi \cdot \chi}{(1-\phi) \cdot (\theta - \chi)} \right)^{1/2} \cdot I_1 \left[2 \cdot N \cdot \left(\frac{\chi \cdot (\theta - \chi)}{\phi \cdot (1-\phi)} \right)^{1/2} \right] \cdot \exp\left[\frac{-N \cdot (\chi - 2 \cdot \phi \cdot \chi + \phi \cdot \theta)}{\phi \cdot (1-\phi)}\right] \cdot h(\chi, \phi)$$

où I_1 = fonction de Bessel modifiée d'ordre 1

$\theta = t \cdot v / x$ = coordonnée temporelle adimensionnelle

$\chi = x / l$ = coordonnée spatiale adimensionnelle

l = longueur de la zone étudiée

$Pex = l \cdot v / D_{hL}$ = nombre de Peclet du problème

$N = \alpha_d^* \cdot x / v$ = constante adimensionnelle de transfert v vers l'eau immobile

L'effet de l'eau immobile se fait sentir sur cette solution par 2 paramètres: la rapidité du transfert chiffrée par N , et la quantité de fluide qui ne participe pas à l'écoulement chiffrée par ϕ . L'influence de ces 2 paramètres est décrite à la figure II.8.

Signalons que cette solution a été utilisée par Raven (1988) pour interpréter des essais de traçage in situ dans des drains dont les épontes sont poreuses et réceptives au traceur.

II.2.b) Méthodes par éléments finis.

II.2.b.1) Concepts de base.

Considérons (figure II.9) un problème de champ posé sur un domaine V par les équations d'équilibre suivantes :

$$A(u) = 0 \text{ sur un domaine } V \quad (\text{II.26a})$$

$$B(u) = 0 \text{ sur la frontière } S \text{ de } V \quad (\text{II.26b})$$

avec $u(\vec{x}, t)$ le champ scalaire inconnu (dans notre cas la hauteur piézométrique h ou les concentrations c_m, c_{im}).

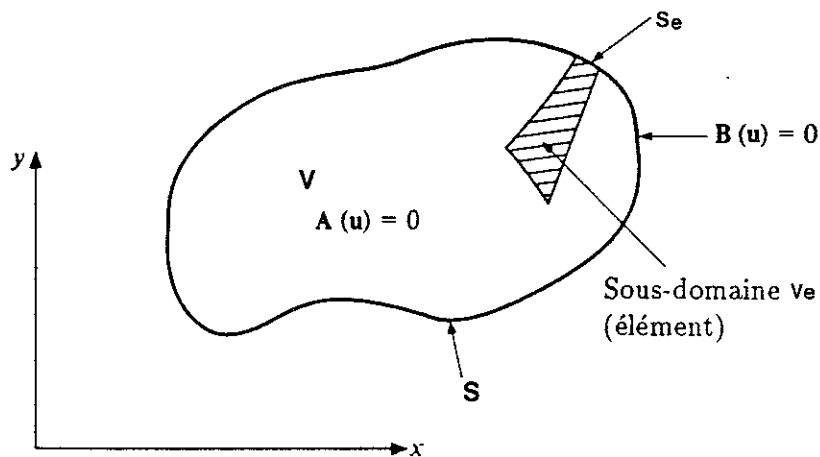


figure II.9: définition d'un problème de champ.

La méthode des éléments finis peut être décrite par les étapes suivantes:

1°) Discrétisation.

Le champ u est approximé par une combinaison linéaire de $2N$ champs plus simples:

$$u(\vec{x}, t) \approx \hat{u}(\vec{x}, t) = \left[\sum_{i=1}^N u_i^n \cdot N_i^x(\vec{x}) \right] \cdot N_n^t(t) + \left[\sum_{i=1}^N u_i^{n+1} \cdot N_i^x(\vec{x}) \right] \cdot N_{n+1}^t(t) \quad (\text{II.27})$$

Les u_i sont appelés valeurs nodales (ou connecteurs) du champ approché \hat{u} aux N points \vec{x}_i appelés noeuds.

On se ramène, de cette manière, à un problème à N inconnues discrètes u_i^{n+1} ($i = 1, N$); $n+1$ désignant le temps t_{n+1} où il convient d'évaluer le champ \hat{u} , n le temps t_n auquel le champ est supposé connu à partir des u_i^n .

Cette discrétisation est non seulement spatiale car V est subdivisé en un ensemble de sous-domaines V_e construits sur les noeuds \vec{x}_i et appelés éléments finis, mais aussi temporelle car le temps est morcelé en intervalles Δt appelés pas. L'évolution temporelle du champ s'obtient en évaluant successivement ce dernier à partir d'une valeur initiale u_0 connue.

Les fonctions $N_i^x(\vec{x})$ sont les fonctions d'interpolation spatiale du noeud \vec{x}_i . Elles sont définies par morceaux sur les éléments V_e de telle sorte que $N_i^x(\vec{x}_j) = \delta_{ij}$. Elles ont une forme simple sur les éléments comportant le noeud i et sont nulles sur les autres éléments.

Les fonctions $N_n^t(t)$ sont les fonctions d'interpolation temporelle. Elles sont définies par morceaux sur les pas de temps Δt d'une manière analogue.

2°) Recherche de l'équilibre global.

Plutôt que de résoudre les équations d'équilibre à chaque instant et en chaque point du domaine, la méthode des éléments finis propose de résoudre, pour le champ discrétisé \hat{u} , un ensemble d'équilibres pondérés sur le voisinage spatial de chaque noeud et sur le pas de temps.

On écrit :

$$\int_{\Delta t} \left[\int_{\Delta V} A(\hat{u}) \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dV + \int_{\Delta S} B(\hat{u}) \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \right] \cdot dt = 0 \quad j = 1, N \quad (\text{II.28})$$

où $W_j(\vec{x}, t)$ est la fonction de pondération spatio-temporelle du noeud \vec{x}_j , non nulle sur le voisinage ΔV de ce noeud (voisinage délimité par la surface ΔS).

En procédant de la sorte, on définit un système de N équations à N inconnues, les u_i^{n+1} .

Ce système s'écrit : $[M] \cdot \dot{\vec{u}} + [K] \cdot \vec{u} = \vec{g}$ (II.29)

- avec $[M]$ = matrice globale de masse généralisée
- $[K]$ = matrice globale de rigidité généralisée
- \vec{g} = vecteur des flux nodaux équivalents
- \vec{u} = vecteur des inconnues nodales du problème
- $\dot{\vec{u}}$ = vecteur de leur dérivée temporelle.

Dans cette forme faible, les opérations d'intégration sont facilitées puisque le champ \hat{u} est défini par morceaux (l'intégrale II.28 devient une somme de contributions élémentaires du même type).

L'exactitude de la solution discrète obtenue par la résolution du système (II.29) dépend de plusieurs facteurs:

- l'aptitude du champ approché \hat{u} à représenter les variations réelles. Ceci dépend de la finesse de la discrétisation mais aussi du choix des fonctions d'interpolation $N_i^x(\vec{x})$ et $N_n^t(t)$. En particulier, ces fonctions doivent assurer la continuité entre éléments à partir des connecteurs u_i et elles doivent posséder un mode homogène. Il est donc nécessaire d'avoir davantage de connecteurs (et par conséquent une discrétisation plus poussée) lorsqu'on veut utiliser des fonctions d'interpolation plus complexes.
- le choix de bonnes fonctions de pondération pour que l'équilibre pondéré soit une bonne image de l'équilibre réel. Il existe, dans la littérature, très peu d'informations sur les conditions que doivent nécessairement remplir les fonctions $W_j(\vec{x}, t)$. Hughes (1982) démontre même qu'elles peuvent être discontinues par morceaux. La qualité d'une pondération se remarque donc a posteriori en comparant le résultat obtenu avec des solutions analytiques et des modèles numériques d'un autre type.

Mentionnons enfin que l'équation (II.27) peut être également interprétée comme un principe des puissances virtuelles. Elle traduit, en effet, l'annulation moyenne des opérateurs $A(u)$, $B(u)$ lorsqu'une variation virtuelle arbitraire du champ

$$\delta u(\vec{x}, t) = \sum_{j=1}^N W_j(\vec{x}, t) \cdot \delta u_j(t) \text{ est considérée.}$$

II.2.b.2) Méthode de Bubnov-Galerkin.

La méthode de Bubnov-Galerkin est la méthode par éléments finis la plus fréquemment utilisée pour résoudre un problème de champ. Elle propose les fonctions de pondérations suivantes (illustrées figure II.10 pour un cas unidimensionnel):

$$W_j(\vec{x}, t) = N_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) \quad (\text{II.30})$$

Ces fonctions sont découplées; la pondération spatiale se fait par les fonctions d'interpolation $N_j^x(\vec{x})$ et la pondération temporelle se fait par la fonction $W^t(t)$.

Dans le cas des équations de type diffusif (équations d'écoulement par exemple), ce schéma possède des propriétés excellentes pour autant que la fonction $W^t(t)$ soit correctement choisie. Pour un problème dont les coefficients ne dépendent pas explicitement des coordonnées spatiales \vec{x} et du temps t , On détermine, par une analyse modale, un critère de stabilité et de précision basé sur le paramètre

$$\theta = \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt / \int_{\Delta t} W^t(t) \cdot dt$$

où $N_2^t(t)$ est une fonction de pondération temporelle

- linéaire sur le pas Δt ,
- nulle en t_n ,
- unitaire en t_{n+1} .

Cette analyse conduit aux conclusions suivantes:

- pour obtenir une intégration temporelle stable, il faut choisir $\theta \geq 1/2$.
- pour obtenir une intégration précise, il faut prendre $\theta \in [1/2, 1]$
Parmi ces valeurs, $\theta = 1/2$ (schéma de Crank-Nicholson) donne les meilleurs résultats pour de petits pas de temps (précision au second ordre). Pour de grands pas de temps, $\theta = 2/3$ (schéma de Galerkin) assure un meilleur compromis de précision entre tous les modes.

Lorsqu'on applique la méthode de Bubnov-Galerkin à une équation de transport miscible, on aboutit à des solutions instables. Il apparaît des oscillations spatiales. Ces oscillations (en anglais "wiggles") décrites par Gresho et Lee (1979), ont une amplitude qui croît avec le caractère convectif du problème. Il nous faut donc chercher d'autres modes de pondération, plus généraux.

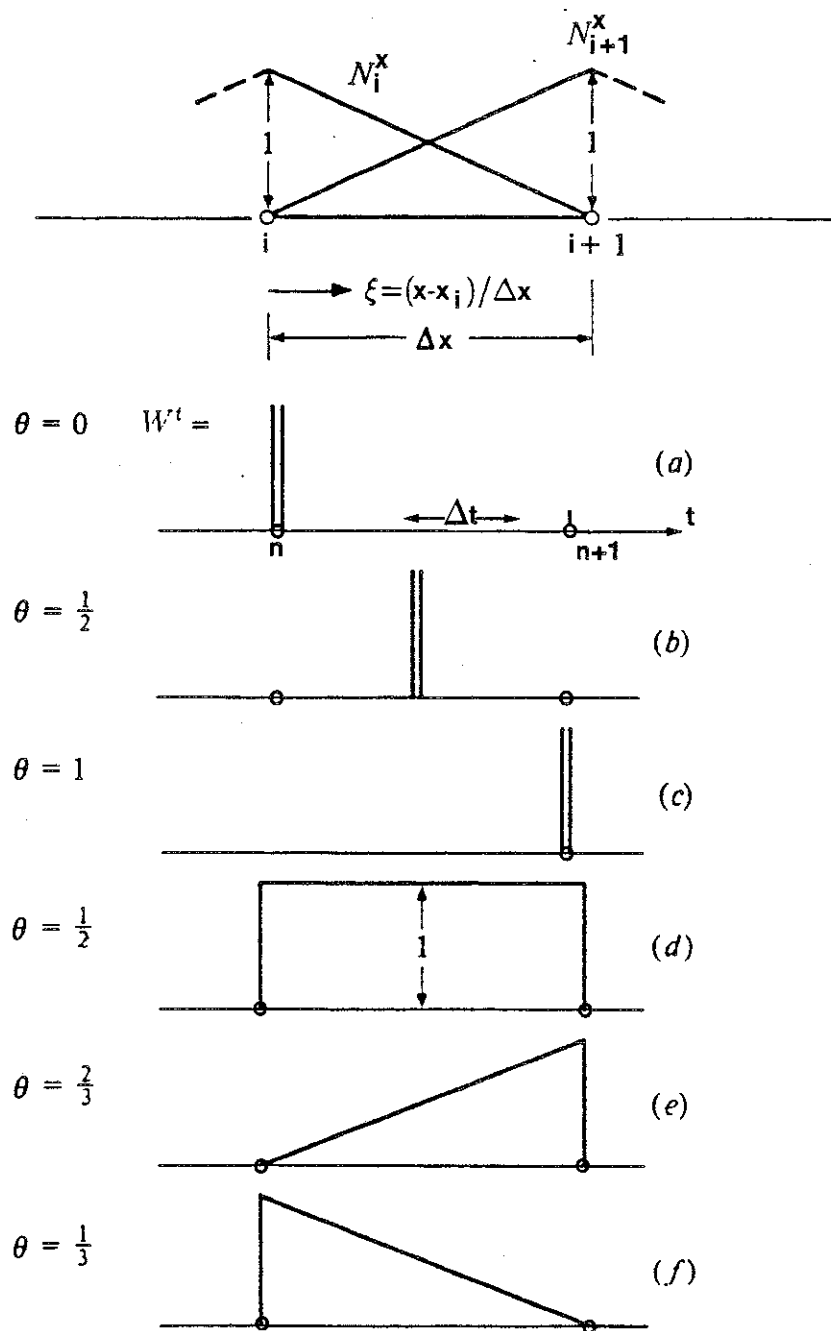


figure II.10: fonctions de pondération spatiale et temporelle, méthode de Bubnov-Galerkin, d'après Zienkiewicz (1977)

II.2.b.3) Méthodes de Petrov-Galerkin.

Puisque les instabilités qui apparaissent avec la méthode de Bubnov-Galerkin ont un caractère spatial, il est logique de penser que la pondération spatiale doit être modifiée. Comme l'amplitude des oscillations est liée à la convection, de nombreux auteurs (Heinrich, Hughes, Tezduyar, Brooks, ...) proposent des fonctions de pondérations spatiales décentrées qui accordent plus de poids aux éléments du voisinage qui sont en amont par rapport à la vitesse de convection. Ces procédés sont appelés méthodes de Petrov-Galerkin.

Elles sont toutes basées sur la relation suivante:

$$W_j(\vec{x}, t) = W_j^*(\vec{x}) \cdot W^t(t) \quad (\text{II.31a})$$

$$W_j^*(\vec{x}) = N_j^*(\vec{x}) + F_j(\vec{x}) \quad (\text{II.31b})$$

où $F_j(\vec{x})$ est la fonction de décentrage
(en anglais "upwind function")
dont le degré définit l'ordre du décentrage.

1°) Problème unidimensionnel.

Pour une application unidimensionnelle traitée avec des éléments linéaires à 2 noeuds, on peut écrire:

$$N_1^*(\xi) = (1-\xi)/2 \quad W_1^*(\xi) = N_1^*(\xi) - \alpha \cdot f(\xi) \quad (\text{II.32a})$$

$$N_2^*(\xi) = (1+\xi)/2 \quad W_2^*(\xi) = N_2^*(\xi) + \alpha \cdot f(\xi) \quad (\text{II.32b})$$

ξ étant la coordonnée adimensionnelle locale de l'élément.
le noeud 2 étant en amont du noeud 1 par rapport au courant convectif v .

Hughes (1982) prend $f(\xi) = 1$ (II.33a)
décentrage d'ordre $n-1$

Zienkiewicz (1977) propose $f(\xi) = 3/4 \cdot (1-\xi) \cdot (1+\xi)$ (II.33b)
décentrage d'ordre $n+1$

Dick (1983) utilise $f(\xi) = 5/8 \cdot \xi \cdot (\xi-1) \cdot (\xi+1)$ (II.33c)
décentrage d'ordre $n+2$

n étant le degré des fonctions d'interpolation (1 dans notre cas).

Ces fonctions sont représentées à la figure II.11.

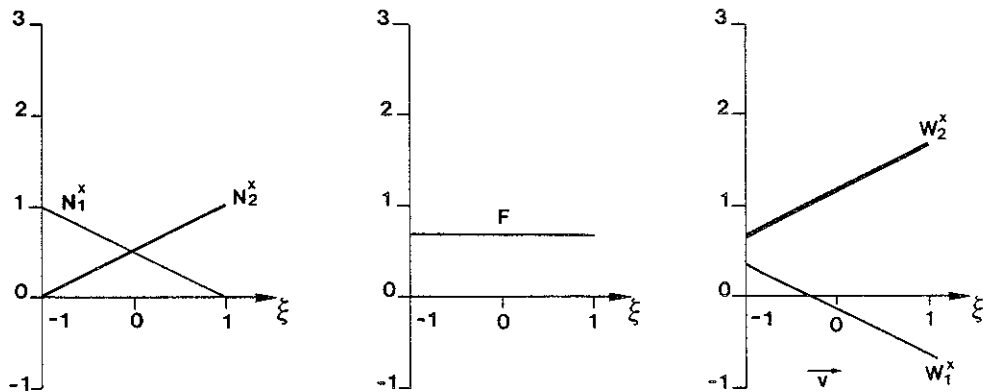
Les décentrages d'ordre $n-1$ et $n+1$ affectent la matrice de rigidité généralisée $[K]$ du système résultant (équation II.29). Un résultat optimum est obtenu en choisissant:

$$\alpha_{\text{opt}} = \coth(P_{\text{ex}}/2) - 2/P_{\text{ex}} \quad (\text{II.34})$$

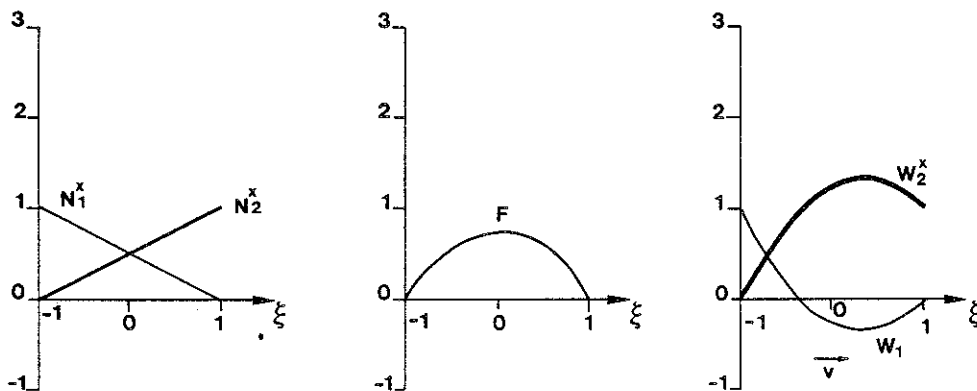
avec $P_{\text{ex}} = v \cdot \Delta x / D_{\text{hl}} =$ nombre de Péclet numérique du problème unidimensionnel

avec $\Delta x =$ largeur de l'élément fini.

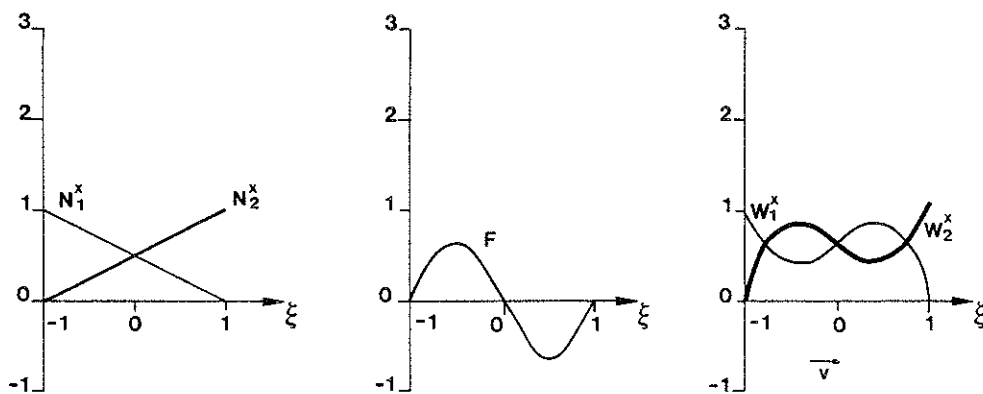
Le nombre de Péclet numérique (Pe_x), dont nous venons de donner l'expression mathématique, compare les effets convectif et dispersif au niveau d'une maille de la structure discrétisée. Il est radicalement différent du nombre de Péclet physique (Pe_p) qui compare ces deux composantes par rapport à la taille des chenaux du milieu poreux.



a) décentrage d'ordre $n-1$



b) décentrage d'ordre $n+1$



c) décentrage d'ordre $n+2$

figure II.11: fonctions de pondération unidimensionnelles pour les méthodes de Petrov-Galerkin (d'après Hughes, Zienkiewicz, Dick).

Envisageons maintenant le cas particulier d'une équation de transport unidimensionnel en régime permanent sans dégradation:

$$v \cdot \frac{\partial C_m}{\partial X} - D_{HL} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial X^2} = 0.$$

Avec une méthode de Petrov-Galerkin, la solution exacte aux noeuds est trouvée lorsqu'on utilise un décentrage optimum¹⁵ et une largeur identique pour tous les éléments linéaires (figure II.12c). Ce n'est pas le cas avec la méthode de Bubnov-Galerkin qui donne de sérieuses instabilités (figure II.12b).

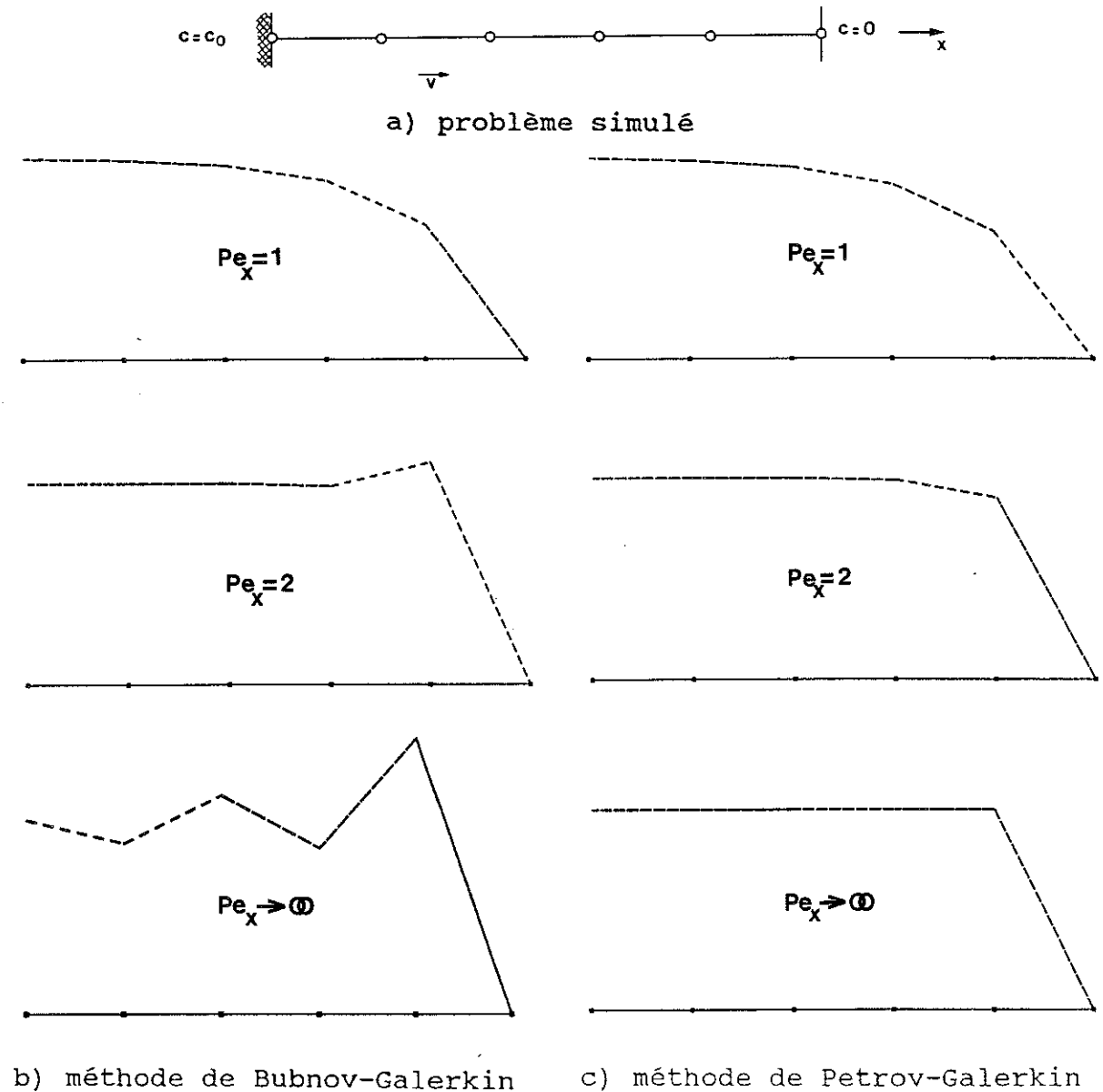


figure II.12: convection diffusion en régime permanent (effet du décentrage).

¹⁵ Lorsque Pe_x varie de 0 à l'infini, α_{opt} varie de 0 à 1. Si on choisit $\alpha > \alpha_{opt}$, la diffusion est surestimée; si $\alpha < \alpha_{opt}$, les oscillations persistent.

Pour ce même problème (unidimensionnel avec éléments linéaires de largeur constante), mais envisagé en régime transitoire, on peut démontrer que le décentrage d'ordre $n+2$ n'affecte que la matrice de masse généralisée $[M]$ du système résultant. Dans ce cas, il n'est pas possible de trouver un α optimum pour tout Pe_x en régime permanent (ceci est dû à la nature antisymétrique de la fonction). Par contre, ce décentrage améliore la précision de la pondération du terme transitoire. Pour cette raison, Westerink et Shea (1989) proposent un décentrage double par la formule suivante (représentation graphique figure II.13.a):

$$\begin{aligned} N_1^x(\xi) &= (1-\xi)/2 & W_1^x(\xi) &= N_1^x(\xi) - \alpha \cdot f_a(\xi) - \beta \cdot f_b(\xi) & \text{(II.35a)} \\ N_2^x(\xi) &= (1+\xi)/2 & W_2^x(\xi) &= N_2^x(\xi) + \alpha \cdot f_a(\xi) + \beta \cdot f_b(\xi) & \text{(II.35b)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_a(\xi) &= 3/4 \cdot (1-\xi) \cdot (1+\xi) \\ f_b(\xi) &= 5/8 \cdot \xi \cdot (\xi-1) \cdot (\xi+1) \end{aligned}$$

Ils obtiennent un schéma précis au troisième ordre en choisissant:

$$\alpha_{opt} = Cr_x^2 \cdot Pe_x / 6 \quad \text{(II.36a)}$$

$$\beta_{opt} = 2 \cdot Cr_x^2 \quad \text{(II.36b)}$$

avec $Cr_x = v \cdot \Delta t / \Delta x =$ nombre de Courant pour le problème unidimensionnel

Nous introduisons ici un nouveau nombre adimensionnel (Cr_x). Il permet de comparer les discrétisations temporelle et spatiale, en tenant compte de la vitesse de convection. Ainsi, si $Cr_x < 1$, la distance de transport par convection est inférieure à la longueur de l'élément considéré et la variation de concentration qui en résulte peut être visualisée dans cet élément.

Pour cette même analyse transitoire, Yu et Heinrich (1986) proposent, un autre procédé de décentrage à 2 coefficients. Cette fois, les pondérations spatiales et temporelles ne sont pas découplées, on a:

$$W_j(\xi, \tau) = N_j^x(\xi) \cdot W^t(\tau) + \alpha \cdot \frac{\partial N_j^x(\xi)}{\partial \xi} \cdot W^t(\tau) + \beta \cdot \frac{\partial N_j^x(\xi)}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial W^t(\tau)}{\partial \tau} \quad \text{(II.37)}$$

avec $\xi =$ coordonnée spatiale adimensionnelle de l'élément
 $\tau =$ coordonnée temporelle adimensionnelle du pas de temps

Ils obtiennent une solution précise au troisième ordre dans l'espace et au second ordre dans le temps en utilisant les options suivantes:

$$\alpha_{opt} = \coth(Pe_x/2) - 2/Pe_x \quad \text{(II.38a)}$$

$$\beta_{opt} = Cr_x/3 - 2 \cdot \alpha_{opt} / (Pe_x \cdot Cr_x) \quad \text{(II.38b)}$$

$$W^t(\tau) = 4 \cdot N_1^t(\tau) \cdot N_2^t(\tau) \quad \text{(II.38c)}$$

Cette méthode de décentrage complet (spatial et temporel) est appelée "Full Upwind Petrov Galerkin method" (F.U.P.G.). Elle agit sur la matrice de rigidité équivalente $[K]$ et sur la matrice de masse équivalente $[M]$. Elle dégénère en une méthode de Petrov-Galerkin simple pour un transport en régime permanent.

D'après la figure II.13b, on constate que la fonction $W^t(\tau)$ est une parabole symétrique par rapport à $\tau = 1/2$. Elle permet d'obtenir une intégration temporelle de Crank Nicholson pour le premier terme du décentrage (lié à α_{opt}) et une intégration temporelle antisymétrique pour le second (lié à β_{opt}). En la combinant aux fonctions de forme linéaires, conformément à la relation (II.37), on obtient la surface $W_j(\xi, \tau)$ (figure II.13b). Elle correspond au déplacement d'un segment de droite sur des lignes directrices de forme parabolique.

Remarquons également que la relation (II.38b) fait aussi intervenir le nombre de Péclet (Pe_x) et le nombre de Courant (Cr_x). Leurs valeurs déterminent la stabilité des schémas éléments finis par rapport à la sollicitation convective (Pe_x détermine les instabilités liées à la discrétisation spatiale, Cr_x permet de repérer les stratégies temporelles mal choisies). Par conséquent, il nous semble logique que le décentrage soit déterminé par ces deux nombres.

Toutefois, il est important de constater que, même avec un décentrage à deux coefficients (que nous considérons comme meilleur qu'un décentrage à coefficient unique), les méthodes de Petrov-Galerkin conduisent à des instabilités importantes et non bornées lorsque le pas de temps est trop grand et que la condition $Cr_x < 1$ est violée. Le principal avantage de ces procédés consiste donc à atténuer (et souvent à annuler complètement) les oscillations sans engendrer de surdiffusion excessive. Encore faut-il utiliser un petit pas de temps et un schéma approprié d'intégration temporelle (Crank-Nicholson ou assimilé).

2°) Problème bidimensionnel.

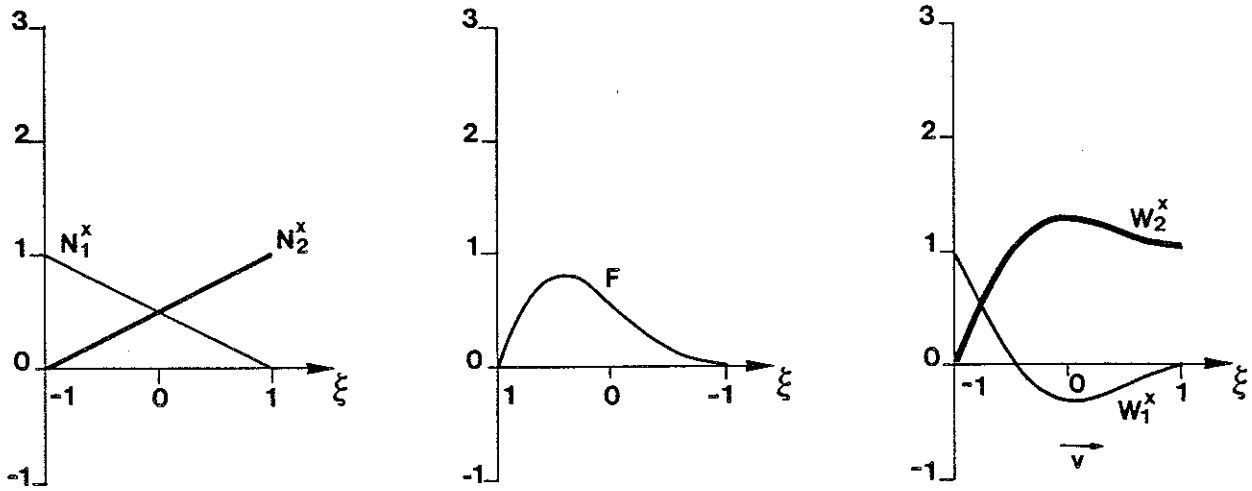
La généralisation des méthodes de Petrov-Galerkin à 2 dimensions n'est pas facile. Nous recensons ici un certain nombre de procédés en mentionnant leurs avantages et inconvénients.

- Décentrage "bidirectionnel" (Heinrich, 1977).

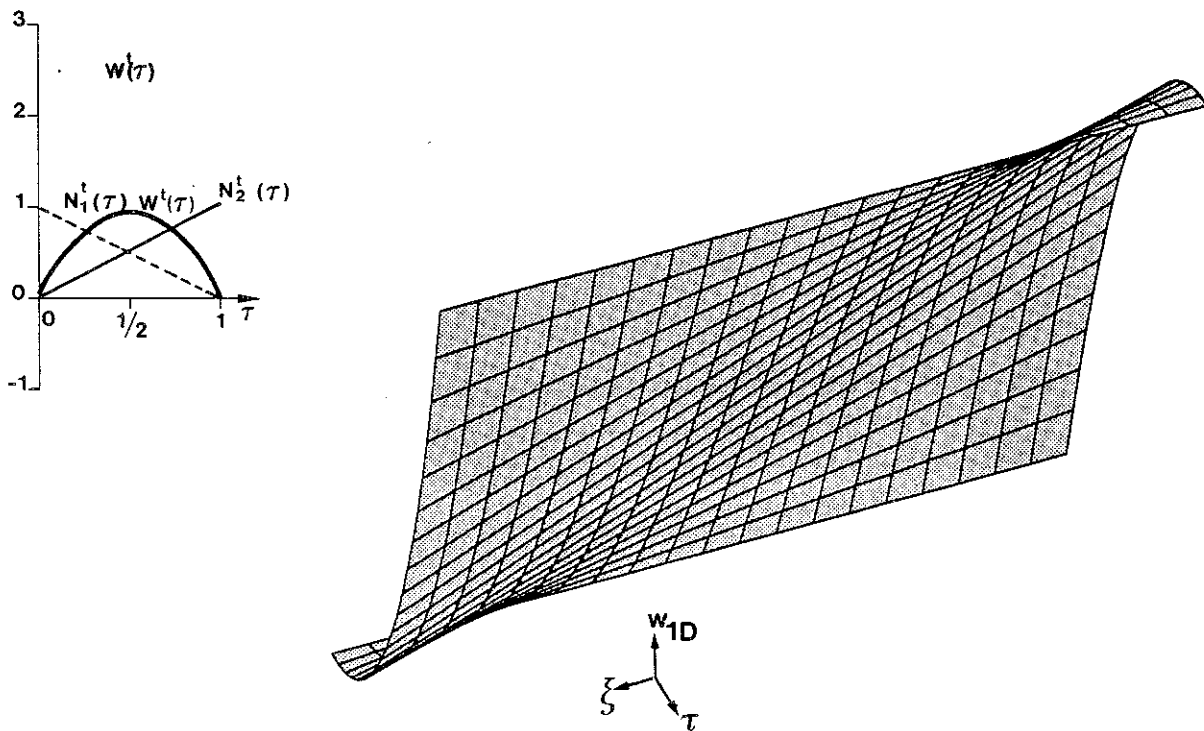
On définit les fonctions d'interpolation bidimensionnelles par le produit de 2 fonctions d'interpolation unidimensionnelles caractérisant les 2 directions de l'espace. Le décentrage bidirectionnel s'obtient en effectuant la même opération pour définir les fonctions de pondération.

Par exemple, pour un élément bilinéaire à 4 noeuds et un décentrage découplé (figure II.14), on a :

$$\begin{aligned} N_1^x(\xi, \eta) &= (1-\xi)/2 \cdot (1-\eta)/2 \\ N_2^x(\xi, \eta) &= (1-\xi)/2 \cdot (1+\eta)/2 \\ N_3^x(\xi, \eta) &= (1+\xi)/2 \cdot (1+\eta)/2 \\ N_4^x(\xi, \eta) &= (1+\xi)/2 \cdot (1-\eta)/2 \end{aligned} \quad (II.39a)$$



a) décentrage mixte d'ordre $n+1$ et $n+2$ (Westerink et Shea)



b) décentrage complet F.U.P.G. (Yu et Heinrich)

figure II.13: fonctions de pondération unidimensionnelles pour le décentrage double.

$$\begin{aligned}
W_1^x(\xi, \eta) &= [(1-\xi)/2 - \alpha_1 \cdot f(\xi)] \cdot [(1-\eta)/2 - \beta_1 \cdot f(\eta)] \quad (\text{II.39b}) \\
W_2^x(\xi, \eta) &= [(1-\xi)/2 - \alpha_1 \cdot f(\xi)] \cdot [(1+\eta)/2 + \beta_2 \cdot f(\eta)] \\
W_3^x(\xi, \eta) &= [(1+\xi)/2 + \alpha_2 \cdot f(\xi)] \cdot [(1+\eta)/2 + \beta_2 \cdot f(\eta)] \\
W_4^x(\xi, \eta) &= [(1+\xi)/2 + \alpha_2 \cdot f(\xi)] \cdot [(1-\eta)/2 - \beta_1 \cdot f(\eta)]
\end{aligned}$$

expression contenant 4 coefficients de décentration pour choisir 4 fonctions de manière optimale.

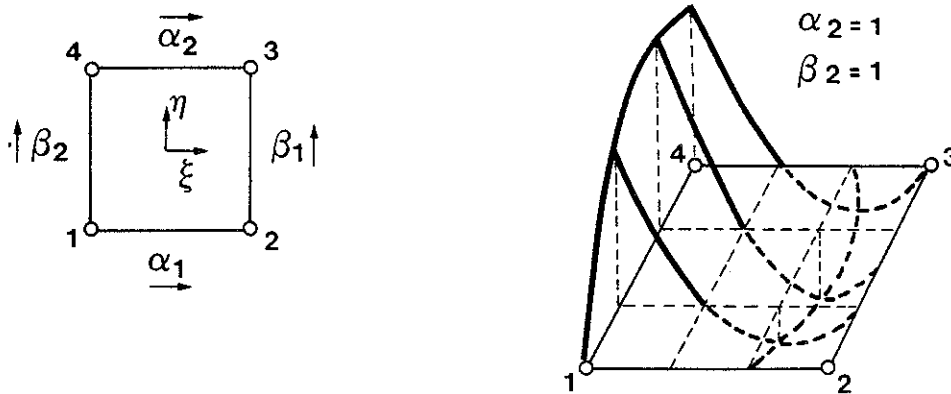


figure II.14: méthode de Petrov-Galerkin à 2 dimensions (décentration selon Heinrich)

Cette façon de procéder n'est pas objective car elle engendre une diffusion latérale surestimée par rapport au problème réel (diffusion numérique). On peut comprendre, en effet, qu'il n'est pas nécessaire de décentrer les fonctions de pondération dans une direction perpendiculaire à la vitesse de convection où seule la diffusion agit.

- Décentration "unidirectionnel".

Pour éviter la diffusion numérique transversale, Hughes propose de définir la fonction de pondération comme suit:

$$W_j(\vec{x}, t) = W_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) \quad (\text{II.40a})$$

$$W_j^x(\vec{x}) = N_j^x(\vec{x}) + \alpha_{opt} \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \cdot \text{grad } N_j^x(\vec{x}) \quad (\text{II.40b})$$

avec α_{opt} = coefficient de décentration optimum pour le problème unidimensionnel

Δl = une longueur caractéristique de l'élément

Cette fonction est intéressante car elle n'est décentrée que dans la direction de la vitesse de convection \vec{v} . C'est pourquoi on parle de "Streamline Upwind Petrov Galerkin method" (S.U.P.G.).

Un exemple de pondération qui correspond à ce schéma est présenté à la figure suivante. L'élément concerné est bilinéaire. La fonction de pondération est alors obtenue en combinant, à la fonction de forme, un plan dont l'orientation dépend du courant convectif. On comprend dès lors que la distorsion de la fonction est limitée.

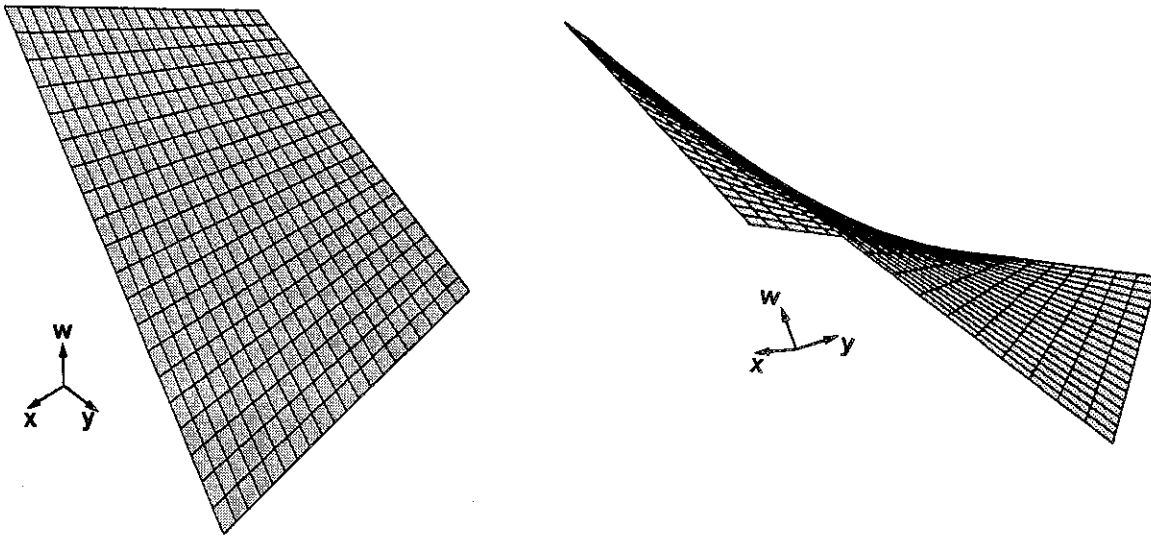


figure II.15: fonction de pondération pour la méthode S.U.P.G. (décentrage "unidirectionnel") convection à 40°, $\alpha = 1$.

Ce procédé peut être étendu aux méthodes de décentrage complet (Yu et Heinrich, 1987). Il vient:

$$W_j(\vec{x}, t) = N_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) + \alpha_{opt} \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \cdot \text{grad } N_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) + \beta_{opt} \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \cdot \text{grad } N_j^x(\vec{x}) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \quad (\text{II.41})$$

avec $\alpha_{opt}, \beta_{opt}$ = coefficients de décentrage optimal pour le problème unidimensionnel
 Δl = une longueur caractéristique de l'élément

- Méthode directe.

La méthode directe consiste à définir directement $F(\xi, \eta)$ telle que:

$$W_j^x(\xi, \eta) = N_j^x(\xi, \eta) + F(\xi, \eta) \quad (\text{II.42})$$

Cantekin et Westerink (1990) proposent un décentrage d'ordre $n+2$ pour un élément bilinéaire, avec une fonction qui est un polynôme complet du troisième degré. Les constantes de chaque terme sont définies, sur base des nombres de Courant Cr_x et Cr_y , pour minimiser la dispersion numérique transversale et pour retrouver la solution théorique du problème unidimensionnel. Toutefois, leurs développements se limitent à une équation dominée par la convection.

II.2.b.4) Autres méthodes de décentrage.

Objectant que les fonctions de pondération bidimensionnelles définies par les méthodes de Petrov-Galerkin font appel à des coefficients optimisés pour des problèmes trop simples, un certain nombre d'auteurs ont cherché un formalisme de décentrage plus général. Nous abordons ici brièvement deux de ces méthodes. Pour plus de détails, le lecteur retournera aux références.

Signalons dès à présent qu'il n'existe, à notre connaissance, aucune méthode de décentrage qui permette de s'affranchir de la condition $Cr < 1$. En outre, la fonction d'upwind idéale qui, dans un problème bidimensionnel, supprimerait totalement les oscillations sans induire de diffusion numérique, (quelque soit le rapport convection/dispersion) n'a pas encore été établie. Son existence n'est pas mathématiquement prouvée.

Mentionnons toutefois les travaux de Freund et Salonen (1992) qui travaillent sur des fonctions incorporant les conditions aux frontières du problème, définies par $B(u) = 0$ (équation II.26). Cette façon de procéder est intéressante lorsqu'on connaît les imprécisions engendrées aux frontières par les méthodes de Petrov-Galerkin. Encore faut-il généraliser ces nouvelles formulations à plusieurs dimensions.

1°) Méthode de la fonction de pondération optimale

Pour éviter de traiter l'intégration volumique d'une équation de convection dispersion, la méthode de pondération optimale (Optimal Test Function ou O.T.F.) tente de ramener l'équilibre global à une intégration sur la frontière S du domaine V .

Pour y arriver, on choisit des fonctions de pondération $W_i(\vec{x}, t) = W_i(\vec{x}) \cdot W^t(t)$ telles que $W_i(\vec{x})$ satisfait à l'annulation d'un opérateur self-adjoint de l'équation d'équilibre $[A(W_i) = 0$ plutôt que $A(u) = 0]$. Cet opérateur est obtenu en intégrant, deux fois successivement par parties, le premier terme de l'équation II.28.

Celia (1989) a élaboré cette méthode pour un problème unidimensionnel présentant un terme de dégradation. Avec les fonctions de pondération décrites figure II.16, il retrouve la solution exacte aux noeuds pour un problème en régime permanent.

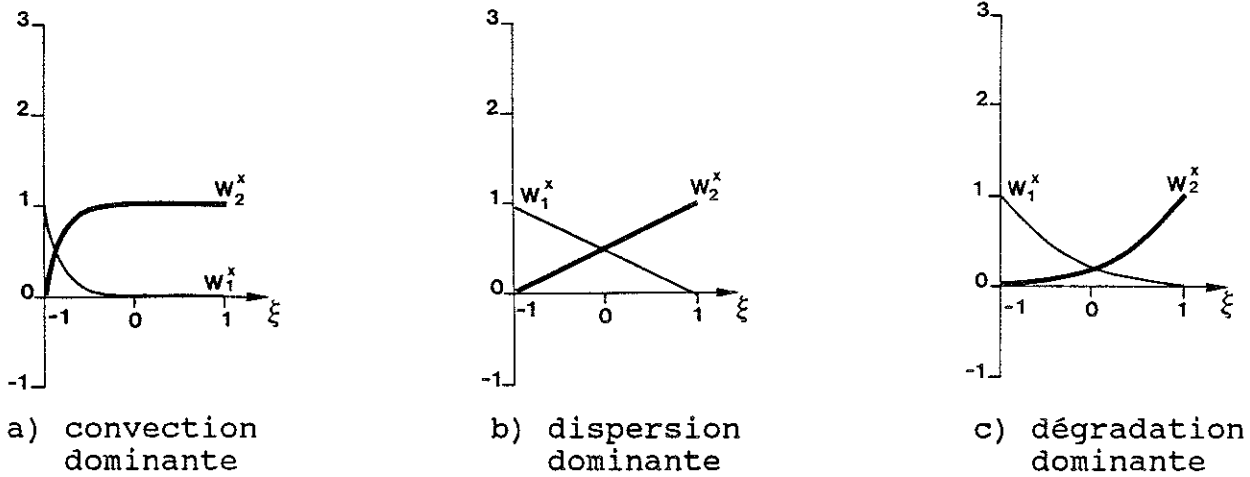


figure II.16: fonctions de pondération, méthode O.T.F., problème unidimensionnel (Celia).

Lorsqu'on essaie de généraliser cette méthode à 2 dimensions (Biver, 1991), on se heurte à de sérieuses difficultés. La solution à l'opérateur self-adjoint est calculable dans les axes de Frenet, mais lorsqu'on effectue le changement de variable vers les coordonnées adimensionnelles de l'élément, l'opérateur self-adjoint devient plus complexe et la distorsion des fonctions $W_i^x(\vec{x})$ correspondantes s'accroît au fur et à mesure que la convection est plus oblique par rapport à l'élément. En particulier, lorsque la vitesse est orientée suivant une diagonale de l'élément, les équations self-adjointes donnent une singularité et la fonction $W_i^x(\vec{x})$ oscille entre $-\infty$ et $+\infty$. Ces constatations sont illustrées par les figures II.17 (convection inclinée par rapport au maillage) et II.18 (convection parallèle au maillage). Le problème de l'opérateur self-adjoint est donc parfois très mal conditionné pour des maillages quelconques. Le résoudre de manière discrète n'apporte aucun avantage (Biver, 1991).

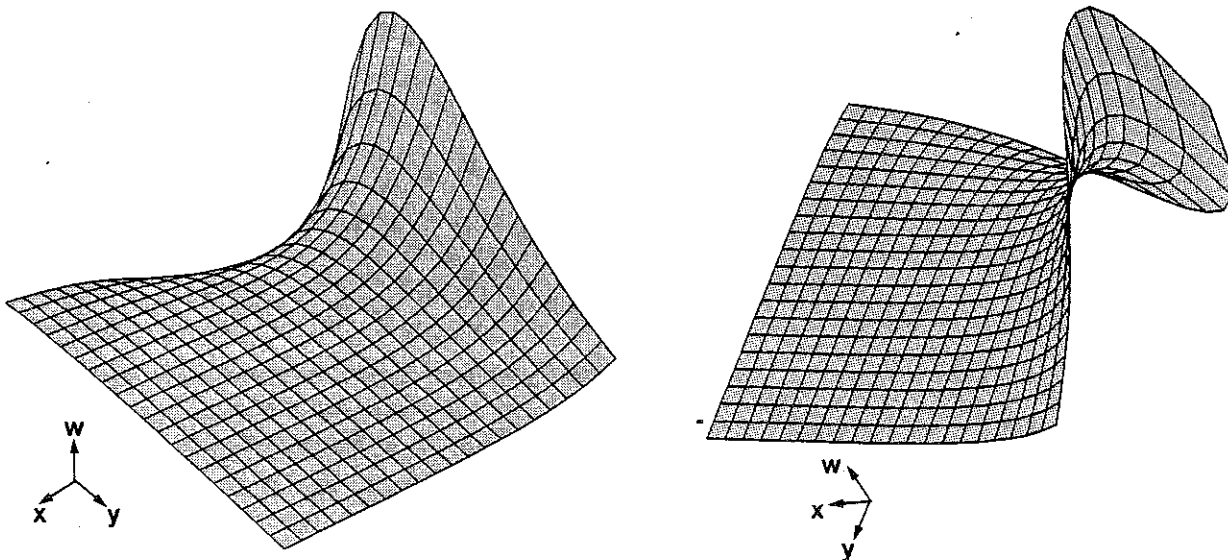
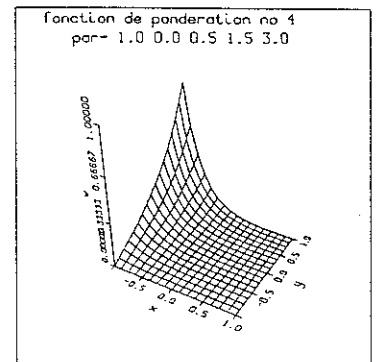
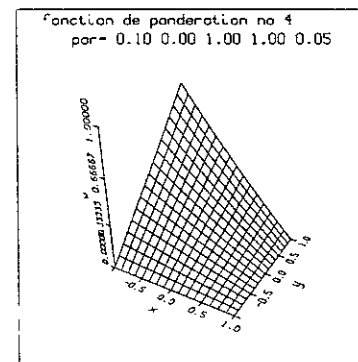
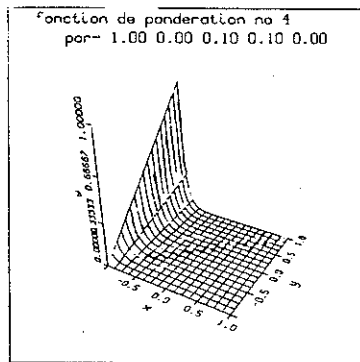
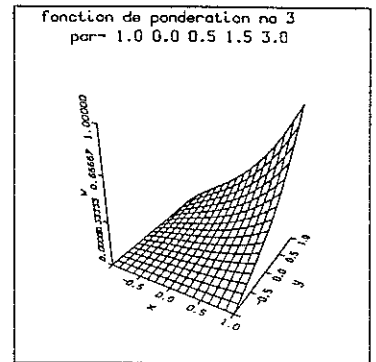
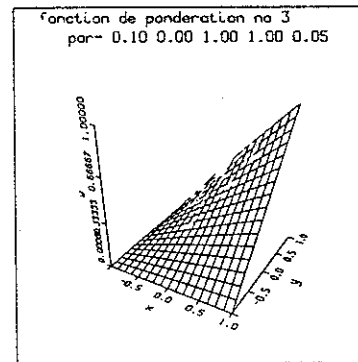
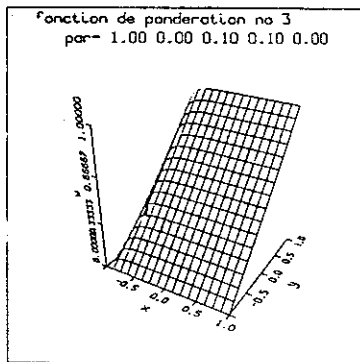
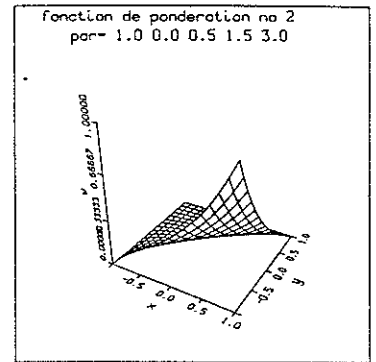
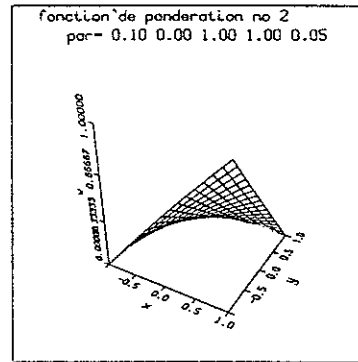
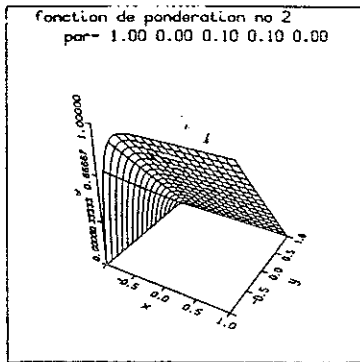
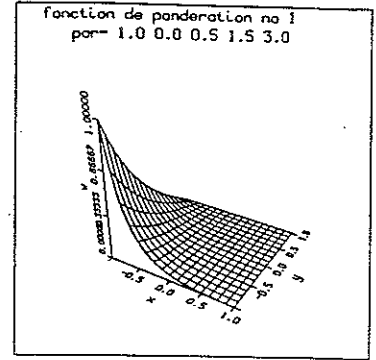
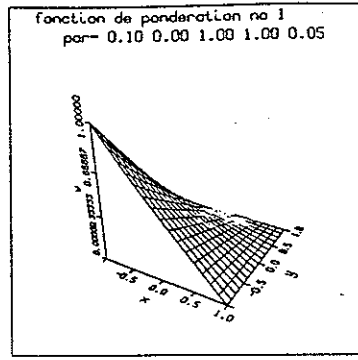
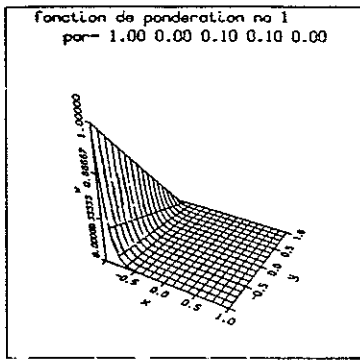


figure II.17: fonction de pondération, méthode O.T.F., problème bidimensionnel, convection inclinée à 40° par rapport au maillage. $v = 1 \text{ m/s}$, $a_L = 0.3 \text{ m}$, $\Delta_m = 0.05 \text{ s}^{-1}$



a) convection dominante

b) dispersion dominante

c) dégradation dominante

figure II.18: fonctions de pondération, méthode O.T.F., problème bidimensionnel, convection parallèle au maillage.

2°) Méthode de décentrage par principes pseudovariationnels.

Idelsohn (1989) propose d'exprimer les fonctions de pondération sous la forme d'un produit:

$$W_j(\vec{x}, t) = W_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) = N_j^x(\vec{x}) \cdot Q_j(\vec{x}, u) \cdot W^t(t) \quad (\text{II.43})$$

Il démontre alors que l'équilibre convecto-diffusif pondéré équivaut à une intégration de Bubnov-Galerkin portant sur le terme diffusif; et ce, à condition que la fonction $Q_j(\vec{x}, u)$ satisfasse, sur le voisinage du noeud j , à un équilibre appelé principe pseudo-variationnel.

Cette méthode présente deux inconvénients majeurs:

- elle mène à un système non linéaire (Q_i étant fonction des concentrations nodales d'après l'équation II.43), et ce, même lorsqu'il n'y a pas de non-linéarité dans les équations à résoudre initialement.¹⁶ Pour le problème linéaire que nous envisageons, cela engendre un accroissement du temps de calcul;
- pour que le principe pseudo-variationnel soit valable, la fonction Q_i doit être non nulle sur le voisinage du noeud i . Pour des problèmes fortement convectifs nécessitant un décentrage important, cette condition n'est pas réalisable (figure II.19).

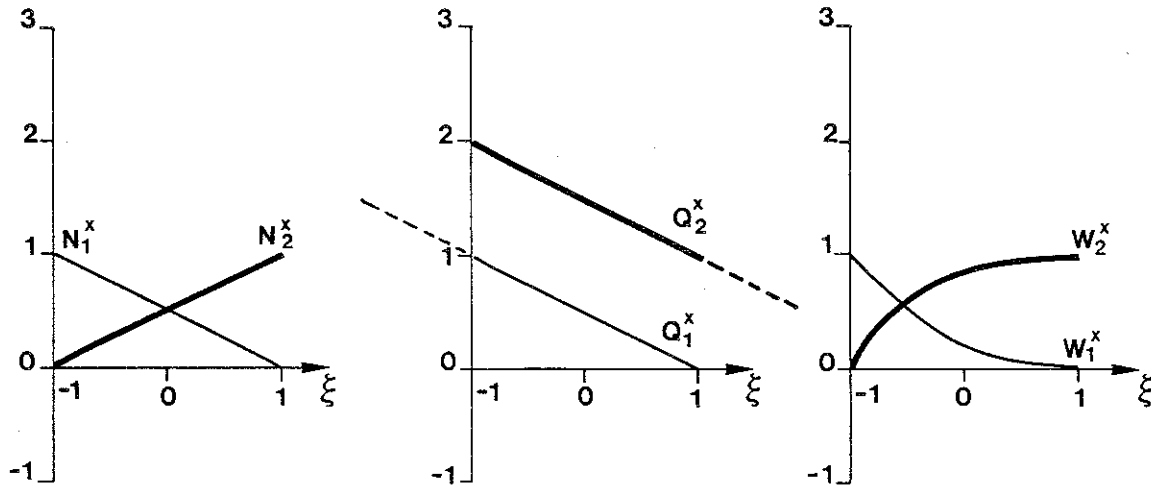


figure II.19: fonction de pondération, méthode par principe pseudovariationnel, problème unidimensionnel.

¹⁶ On parle de non linéarité pour un problème de champ, lorsque les coefficients sont dépendants de l'inconnue fondamentale qu'on cherche à déterminer.

En pratique, le processus itératif de résolution du système sera divergent. Pour éviter ces divergences, Idelsohn propose d'introduire une diffusion artificielle choisie pour pouvoir satisfaire le principe variationnel. Toutefois, ce procédé n'est pas sans risques car il peut rendre imprécise la solution trouvée.

II.2.b.5) Autres méthodes de résolution par éléments finis, en maillage fixe.

Etant donnés les problèmes rencontrés par les méthodes de décentrage, une série d'auteurs proposent des formulations alternatives. On citera, dans ce paragraphe, quatre types de procédés possédant apparemment des propriétés mathématiques meilleures.

1°) Les méthodes mixtes eulériennes et lagrangiennes.

Pour s'affranchir de la restriction sur le nombre de Courant, on peut écrire les équations de transport dans des axes liés à la vitesse de convection. On obtient ainsi un schéma purement dispersif qui peut être intégré par la méthode de Bubnov-Galerkin. Lorsque le maillage se déforme pour s'adapter à ces axes mobiles, on parle de méthodes "lagrangiennes" par opposition aux méthodes dites "eulériennes" qui envisagent des maillages fixes et une équation d'équilibre décrite dans des axes globaux. Ces méthodes nécessitent des remaillages fréquents et difficiles à gérer, surtout pour des géométries complexes comme celles rencontrées en géologie.

Toutefois, au cours de cette dernière décennie, des procédés hybrides ont été élaborés (Neuman 1984, Yeh 1990). Ils traitent séparément le terme convectif par une méthode lagrangienne qui consiste à suivre les lignes de courant du fluide dans lequel se propage la substance. On parle de méthode des caractéristiques, ou encore de "particle tracking". Les autres termes sont traités d'une manière eulérienne par la pondération de Bubnov-Galerkin. La performance de ces méthodes mixtes (Hybrid Eulerian Lagrangian Methods ou H.E.L.M.) dépend très fort de la qualité du "particle tracking" (précision de l'intégration du chemin convectif et interpolation finale). Elles présentent toutefois un avantage considérable: le nombre de Courant peut être choisi plus grand que l'unité et le pas de temps n'est restreint, en principe, que par les termes non convectifs du transport.

Actuellement, une nouvelle génération de procédés de ce type sont développés (Celia, Russel, Herrera, Ewing, 1990). Ils consistent à définir des fonctions de pondération qui vérifient l'opérateur self-adjoint décrit par la méthode O.T.F. et qui dépendent des positions convectives obtenues par le particle tracking. Ces méthodes semblent très prometteuses. Il est mathématiquement prouvé qu'elles sont conservatives, c'est-à-dire qu'elles n'engendrent pas de pertes de masse globale autres que celles définies par la dégradation physicochimique du problème. Elles intègrent tous les types de conditions frontières de manière naturelle. Toutefois, elles n'ont pas encore été étendues à des problèmes multidimensionnels suffisamment généraux.

2°) Les méthodes spectrales.

Un important désavantage des méthodes de décentrage est la difficulté de représenter le déplacement, par convection, d'un front abrupt de l'inconnue u .

Pour éviter la persistance des oscillations dans ce type de problème, Hughes (1984, 1987) propose, pour les méthodes S.U.P.G., un décentrage complémentaire défini par un opérateur appelé Discontinuity Capturing Operator. Cette façon de faire ne rencontre qu'un succès mitigé car elle introduit, en contrepartie, une diffusion numérique faible mais non négligeable.

Pour mieux résoudre ce type de problèmes, certains auteurs font appel à une nouvelle sorte d'éléments: les éléments finis spectraux (Patera 1984, Deville 1984, Demaret 1989).

Dans ces éléments, les fonctions d'interpolation $N_i^x(x)$ ne sont plus des polynômes classiques, mais bien des fonctions harmoniques des coordonnées adimensionnelles, plus aptes à représenter des variations brutales au sein même d'un élément.

On cite souvent les polynômes de Chebyshev :

$$N_i^x(\xi) = \cos(i.\theta) \text{ lorsque } \xi = \cos\theta \quad (\text{II.44})$$

ξ étant la coordonnée adimensionnelle de l'élément

Le champ approximé s'écrit alors :

$$\hat{u}(\xi) = \sum_{i=0}^N N_i^x(\xi) . a_i \quad (\text{II.45})$$

a_i étant un coefficient, inconnu a priori, définissant l'importance du mode i dans la solution approchée.

La continuité du champ \hat{u} entre les éléments est assurée par ces coefficients a_i évalués en un nombre suffisant de points d'intégration.

La position ξ_i dans l'élément de ces points d'intégration doit également être optimisée pour bien représenter les fortes variations de l'inconnue.

Dans notre exemple unidimensionnel, on a :

$$\xi_i = \cos(\pi.i/N) \quad i = 0, N_{PI} \quad (\text{II.46})$$

N_{PI} étant le nombre de points d'intégration de l'élément spectral,

$N+1$ étant le nombre de modes intervenant dans la solution.

Habituellement, 2 types de pondération sont envisagées :

- soit une pondération classique de Galerkin :

$$W_j(\vec{X}, t) = N_j^x(\vec{X}) . W^t(t) \quad (\text{II.47a})$$

- soit une pondération par collocation spatiale :

$$W_j(\vec{x}, t) = W_j^*(\vec{x}) \cdot W^t(t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_j) \cdot W^t(t) \quad (\text{II.47b})$$

nulle partout sauf en \vec{x}_j

Dans le second cas, l'équilibre n'est résolu qu'en un ensemble discret de points que sont les noeuds du maillage. Dans les deux éventualités, toute notion de décentrage a disparu.

Ces schémas possèdent des propriétés excellentes (notamment en convection pure: Patera, 1984); toutefois, il n'est pas facile d'introduire de tels éléments dans un logiciel classique d'éléments finis pour la simple et bonne raison que les inconnues nodales sont, cette fois, les coefficients a_i . Ainsi, lorsque le système est résolu, il convient d'effectuer des évaluations supplémentaires pour retrouver le champ discrétisé.

En outre, pour obtenir un champ approximé suffisamment riche, on travaille ici avec quelques grands éléments spectraux (appelés sous-domaines) qui comportent un nombre relativement élevé de points d'intégration, alors que les éléments finis classiques sont nombreux et possèdent peu de points d'intégration.

On comprend, dès lors, les limitations géométriques d'une telle méthode: pour nos applications, les variations brutales du champ inconnu sont susceptibles d'apparaître à tout endroit; par conséquent, tout le domaine discrétisé doit être spectral; la discrétisation se réduit alors à une subdivision du domaine géologique hétérogène en quelques sous-domaines seulement.

3°) Les méthodes de Taylor-Galerkin.

Ces méthodes, développées par Donea (1984) et Laval (1990), proposent une intégration temporelle plus évoluée des équations d'équilibre.

Soit l'équation d'équilibre

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A_x(u) \quad (\text{II.48})$$

avec A_x un opérateur de dérivation spatiale.

En développant u^{n+1} en série de Taylor dans le temps, il vient :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{\partial u^n}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + O(\Delta t^2) \quad (\text{II.49})$$

sachant que, d'après (II.48): 1°/ $\frac{\partial u^n}{\partial t} = A_x(u^n)$

$$2°/ \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} = A_x \left(\frac{\partial u^n}{\partial t} \right)$$

en approximant $\frac{\partial u^n}{\partial t}$ par $\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}$,

$$\text{il vient: } \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot A_x\right) \cdot \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = A_x(\bar{u}) \quad (\text{II.50})$$

En pondérant (I.50) à la façon de Bubnov-Galerkin, on obtient un système dont la matrice de masse généralisée [M] est modifiée et tient mieux compte de la convection que la méthode classique de Bubnov-Galerkin. En particulier, l'intégration temporelle est précise au second ordre. En ce qui concerne la précision spatiale, on constate que, dans le cas d'éléments linéaires, cette méthode est instable pour des problèmes fortement convectifs.

Par contre, les résultats deviennent meilleurs pour des éléments quadratiques. Signalons toutefois que cette amélioration est également constatée pour des pondérations décentrées (Codina 1990) et même pour des méthodes de Bubnov-Galerkin classiques. Enfin, lorsque l'effet d'eau immobile est présent, les développements de Taylor deviennent plus complexes.

4°) Les méthodes par transformées de Laplace.

Sudicky (1989) propose une alternative originale pour résoudre une équation de convection-dispersion. Il se propose de résoudre l'équation d'équilibre $A(u) = 0$ dans le domaine de Laplace en effectuant la transformation suivante du même nom:

$$L\{ A [u(t)] \} = \int_0^{\infty} A [u(t)] \cdot \exp(-n \cdot t) \cdot dt = 0 \quad (\text{II.51})$$

n étant la variable de la transformée.

En se servant des propriétés des transformées, il démontre que le nouvel équilibre est permanent et que sa solution, plus lissée, peut être recherchée par la méthode de Bubnov-Galerkin. La définition du champ réel est alors obtenue en effectuant la transformée inverse de la solution trouvée par une formule approchée simple, robuste et précise (Crump, 1976). L'avantage de cette méthode est qu'elle permet, sur base de N solutions spatiales de II.51 ($n = 1, N$), de déterminer simplement l'évolution temporelle de la solution.

L'inconvénient réside en l'expression des conditions aux frontières $B(u) = 0$ dans le domaine de Laplace. En particulier, lorsque ces conditions deviennent transitoires, elles doivent être exprimées sous une forme discrétisée, impliquant des fonctions dont la transformée de Laplace est simple.

II.2.c) Méthodes par différences finies.

II.2.c.1) Concepts de base.

Contrairement à la méthode des éléments finis qui approxime essentiellement le champ inconnu, la méthode des différences finies effectue des approximations directement sur les dérivées intervenant dans l'équation d'équilibre. Pour cette raison, la discrétisation spatiale doit être simplifiée et consiste, souvent, en une série de cellules rectangulaires centrées sur les noeuds du maillage.

Considérons une équation de convection - dispersion unidimensionnelle:

$$Rd. \frac{\partial C_m}{\partial t} + v. \frac{\partial C_m}{\partial x} - D_{HL}. \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{II.52})$$

soit la discrétisation spatiale décrite figure suivante,

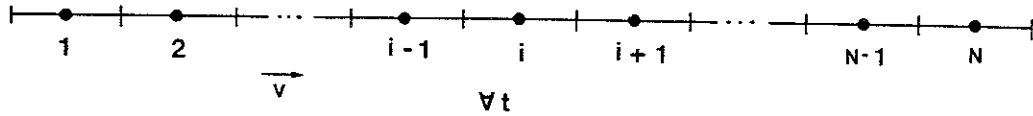


figure II.20: discrétisation différence finie, modèle unidimensionnel.

on peut développer u en série de Taylor des 3 façons suivantes :

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^n \cdot \Delta t + O(\Delta t^2) \quad (\text{II.53a})$$

$$u_{i+1} = u_i + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i \cdot \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i \cdot \Delta x^2 / 2 + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i \cdot \Delta x^3 / 6 + O(\Delta x^4) \quad (\text{II.53b})$$

$$u_{i-1} = u_i - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i \cdot \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i \cdot \Delta x^2 / 2 - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i \cdot \Delta x^3 / 6 + O(\Delta x^4) \quad (\text{II.53c})$$

l'indice n donnant la position temporelle, i la position spatiale pour l'évaluation envisagée.

On pose alors :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} \quad (\text{II.54a}) \text{ de } (\text{II.53a})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2 \cdot \Delta x} \quad (\text{II.54b}) \text{ de } (\text{II.53b}) - (\text{II.53c})$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2 \cdot u_i}{\Delta x^2} \quad (\text{II.54c}) \text{ de } (\text{II.53b}) + (\text{II.53c})$$

Cette façon de procéder conduit à un système de N équations à N inconnues (les u_i^{n+1}) qui, pour ce problème unidimensionnel, est équivalent à une résolution par éléments finis pondérée par la méthode de Bubnov-Galerkin (Hogge, 1988). On obtient donc le même caractère instable lorsque la convection devient importante.

II.2.c.2) Méthodes des différences finies "upstream".

Pour éliminer les oscillations, Léonard (1979) propose un procédé similaire aux méthodes de Petrov-Galerkin des éléments finis. Dans les développements de Taylor (II.53b et II.53c), ils introduisent un coefficient α donnant plus de poids aux valeurs nodales situées en amont par rapport à la vitesse de convection. Ces développements modifiés sont utilisés pour évaluer le terme convectif, c'est-à-dire la dérivée spatiale première seulement.

Il vient :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{(1-\alpha) \cdot u_{i+1} + 2 \cdot \alpha \cdot u_i - (1+\alpha) \cdot u_{i-1}}{2 \cdot \Delta x} \quad (\text{II.55})$$

$$\alpha \in [0,1]$$

Pour un problème unidimensionnel, l'analogie avec les éléments finis est parfaite et $\alpha_{\text{opt}} = \coth(P_{\text{ex}}/2) - P_{\text{ex}}/2$. Par contre, la généralisation bidimensionnelle est différente et il semble, à première vue, difficile de construire un système semblable à celui obtenu par les pondérations S.U.P.G. en éléments finis.

II.2.c.3) Méthode des volumes finis.

Pour résoudre plus objectivement les problèmes de convection-dispersion multidimensionnels, un certain nombre d'auteurs (Kinney 1988, Beckers 1992) proposent une évaluation plus élaborée des flux convectifs et diffusifs. Considérons la cellule d'une grille bidimensionnelle pour différences finies (figure II.21). Le bilan réel est remplacé par un bilan sur cette cellule de contrôle de taille finie. Pour cette raison on parle de méthode des volumes finis. Dans ce nouveau procédé, les flux (inconnues et coefficients) sont évalués directement aux interfaces entre les cellules.

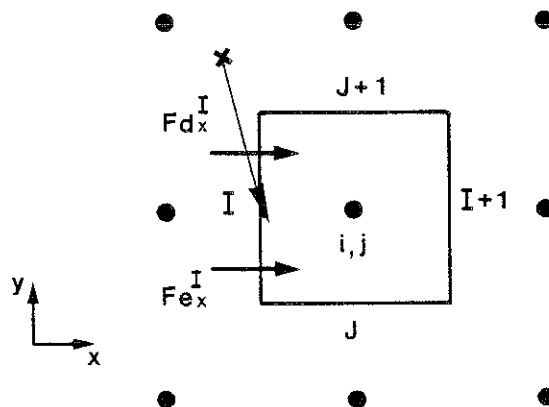


figure II.21: évaluation des flux dans la méthode des volumes finis.

On a, pour l'interface I :

$$f_d^I = D_h^I \cdot \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \quad (\text{II.56a})$$

= flux dispersif perpendiculaire à I

$$f_c^I = v_x^I \cdot u^I \quad (\text{II.56b})$$

= flux convectif perpendiculaire à I

avec: u_i = inconnue au noeud i représentant une moyenne sur la cellule

D_h^I = dispersion suivant x, évaluée en I

v_x^I = vitesse de convection suivant x, évaluée en I

u^I = inconnue évaluée à l'interface.

Le caractère plus ou moins décentré du schéma s'exprime alors par l'évaluation de u^I en fonction des inconnues nodales u_i .

En procédant de la sorte pour tous les interfaces (I, I+1, J, J+1), on obtient l'équation de bilan sur la cellule bidimensionnelle :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{1}{\Delta x} \cdot (f_x^{I+1} - f_x^I) + \frac{1}{\Delta y} \cdot (f_y^{J+1} - f_y^J) = 0 \quad (\text{II.57})$$

où f désigne la somme $f_d + f_c$.

La discrétisation temporelle est alors introduite en supposant une variation linéaire des flux et de la concentration en fonction du temps. On écrit:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \quad (\text{II.58a})$$

$$f_d^I = (1-\alpha) \cdot f_d^{I,n} + \alpha \cdot f_d^{I,n+1} \quad (\text{II.58b})$$

$$f_c^I = (1-\beta) \cdot f_c^{I,n} + \beta \cdot f_c^{I,n+1} \quad (\text{II.58c})$$

où α et β sont les taux d'implicité du schéma temporel.

Dans ce développement, $u^{I,n+1}$ est nécessaire pour évaluer $f_c^{I,n+1}$. Il est obtenu en effectuant le trajet convectif inverse de la position à l'interface et en interpolant sur la grille le point obtenu (voir figure II.21)

Pour ce schéma, Beckers (1991) établit un critère général de stabilité. Il conseille de choisir α et β identiques dans toutes les directions et aussi proches que possible de la limite de stabilité pour obtenir un schéma suffisamment précis. En pratique, $\alpha_i = \beta_i = 1/2$ donnent une bonne évaluation de cette limite. Ce critère de stabilité tient également compte des nombres de Courant $C_{rx} = v_x \cdot \Delta t / \Delta x$ et $C_{ry} = v_y \cdot \Delta t / \Delta y$. Il exprime que ceux-ci ne doivent pas être trop élevés. A ces conditions, nécessaires mais pas suffisantes, doivent encore être ajoutés d'autres critères où apparaissent les nombres de Péclet.

Il est intéressant de constater que, par des moyens radicalement différents de ceux mis en oeuvre pour les éléments finis décentrés, la méthode des volumes finis (généralisation de celle des différences finies) aboutit à des conclusions similaires à savoir:

- limitation de la taille du pas de temps
- schéma d'intégration temporelle symétrique.

Toutefois, il existe une différence essentielle: le décentrage également imposé dans le sens de la vitesse de convection est choisi de manière beaucoup plus libre et peut être réalisé de façon à produire un schéma conservatif.

Le comportement de cette méthode en convection pure est très bon, peut-être même supérieur à celui de nombreuses méthodes par éléments finis. Une comparaison objective sur un ensemble de problèmes tests (à définir) pourrait confirmer cette hypothèse et déterminer les qualités et les défauts de ces deux types d'approches.

II.2.d) Les méthodes Random Walk (R.W.).

Constatant les difficultés pour résoudre des équations de convection-dispersion par la méthode des éléments finis, certains auteurs (Uffink 1983, Kinzelbach 1986) ont proposé d'autres méthodes numériques qui consistent à représenter la dispersion par un traitement statistique: les méthodes "Random Walk" ou méthodes des "chemins de hasard".

Il s'agit bien de résoudre une équation déterministe par un processus stochastique, et non de représenter directement les phénomènes physiques par des lois microscopiques auxquelles on attribue des distributions probabilistes comme le proposent Dagan (1989) ou Crine (1988). Ces procédés ne font pas appel au concept d'élément fini et constituent un excellent point de comparaison numérique avec nos modèles. Leurs principaux fondements sont décrits dans ce paragraphe (pour plus de détails, on retournera aux références).

II.2.d.1) Problème unidimensionnel.

Considérons une particule se déplaçant au cours du temps dans une direction X par pas successifs S, dont la longueur est déterminée par une loi de distribution de probabilité $g(S,t)$. Chaque pas possède donc une probabilité qui n'est pas conditionnelle de celle du pas précédent et dont la moyenne vaut μ_s et l'écart-type σ_s .

Dans ce cas, on peut démontrer mathématiquement que la probabilité $G(x,t_n)$ de trouver la particule dans un intervalle $[x-dx/2, x+dx/2]$ au temps t_n , tend rapidement (lorsque le nombre de pas n est suffisant) vers une distribution gaussienne de probabilité fournie par la relation suivante :

$$G(x,t_n) = 1/\sqrt{2.\pi.n.\sigma_s^2} \cdot \exp\left(\frac{-(x-n.\mu_s)^2}{2.n.\sigma_s^2}\right) \quad (\text{II.59a})$$

Ce résultat est, d'après le théorème de la limite centrale, vérifié quelle que soit la distribution $g(S,t)$. La loi de distribution II.59a est similaire à la solution analytique II.59b donnant la concentration c_m dans un drain unidimensionnel soumis à la convection v et à la dispersion D_{hL} lorsque l'injection dans le drain est unitaire (voir équation II.6 p.66).

$$c_m(x, t_n) = 1 / \sqrt{2 \cdot \pi \cdot D_{hL} \cdot t_n} \cdot \exp \left(\frac{-(x - v \cdot t_n)^2}{4 \cdot D_{hL} \cdot t_n} \right) \quad (\text{II.59b})$$

En identifiant les 2 expressions, on obtient:

$$\begin{aligned} v &= \mu_s / \tau & \text{ou encore} & & \mu_s &= v \cdot \tau & (\text{II.60}) \\ D_{hL} &= \sigma_s^2 / (2 \cdot \tau) & & & \sigma_s &= \sqrt{2 \cdot D_{hL} \cdot \tau} \\ & & & & \text{avec } \tau &= t_n / n \end{aligned}$$

Dès lors, la simulation du problème unidimensionnel se fait comme suit :

- un nombre aléatoire R est généré;
- le déplacement S d'une particule au cours du pas $t_n \rightarrow t_{n+1}$ est donné par $S = M + U \cdot R$ ou M et U sont respectivement les meilleurs estimateurs de μ_s et σ_s (c'est-à-dire la moyenne et l'écart-type de la loi gaussienne limite);
- M représente le déplacement convectif et est purement déterministe; $U \cdot R$ est le déplacement dispersif, composante stochastique du modèle.

Cette opération est répétée pour un nombre N de particules de manière à définir un échantillon représentatif d'une population. Une même masse est alors affectée à chaque particule pour définir la quantité de polluant évoluant dans le domaine modélisé.

II.2.d.2) Généralisation à 2 dimensions.

Pour une particule qui se déplace par pas successifs dans un espace bidimensionnel, la probabilité $G(x,y,t_n)$ de trouver celle-ci dans une cellule dx, dy , centrée sur le point x,y ne peut être exprimée analytiquement. Elle se décrit par une équation différentielle du second ordre: l'équation de Fokker-Planck.

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} &= - \operatorname{div} (\vec{A} \cdot G) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (B_{xx} \cdot G) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} (B_{yy} \cdot G) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (B_{xy} \cdot G) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (B_{yx} \cdot G) \end{aligned} \quad (\text{II.61})$$

avec \vec{A} = vecteur de mouvement (drift vector)
 \underline{B} = tenseur de bruit (noise tensor)

$$\begin{aligned} A_i &= \lim_{\tau \rightarrow 0} S_i / \tau & i, j & \text{représentant } x \text{ ou } y \\ B_{ij} &= \lim_{\tau \rightarrow 0} S_i \cdot S_j / (2 \cdot \tau) \end{aligned}$$

Si B_{ij} est fonction des coordonnées spatiales, on peut réécrire l'équation de Fokker-Planck sous la forme:

$$\frac{\partial G}{\partial t} = - \operatorname{div} [(\vec{A} - \overline{\partial B}) \cdot G] + \operatorname{div} (\underline{B} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}} G) \quad (\text{II.62a})$$

$$\text{avec } \overline{\partial B} = (\partial B_x, \partial B_y)$$

$$\partial B_x = \frac{\partial B_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial B_{xy}}{\partial y}$$

$$\partial B_y = \frac{\partial B_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial B_{yy}}{\partial y}$$

Cette équation peut être comparée à l'équation bidimensionnelle de convection-diffusion:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = - \operatorname{div} [\vec{V} \cdot c_m] + \operatorname{div} (\underline{D}_h \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}} c_m) \quad (\text{II.62b})$$

En identifiant les relations, il vient:

$$\vec{V} = \vec{A} - \overline{\partial B}$$

$$\underline{D}_h = \underline{B}$$

De nouveau, la composante convective est présentée comme déterministe alors que la dispersion est stochastique, identifiée à un bruit par rapport à la convection.

Le point important de ce type de résolution est de considérer un nombre suffisant de particules pour que le processus stochastique du modèle corresponde à l'équation de bilan.

On peut comprendre également les difficultés que l'on rencontre pour représenter une géométrie hétérogène et des conditions forcées (non naturelles) aux frontières.

II.2.e) Autres procédés de résolution.

La liste des méthodes envisagées ci-dessus ne prétend pas être exhaustive. Il existe aussi un grand nombre de procédés hybrides très particuliers. Signalons, par exemple, des méthodes de maillage adaptatif en différences finies (Gaspar et al. 1991), des méthodes eulériennes-lagrangiennes couplant des éléments finis avec des méthodes Random Walk (Dimou et Adams 1991), etc...

II.2.f) Synthèse et choix du procédé de résolution.

En énumérant (de façon non exhaustive rappelons-le) les nombreux procédés de résolution pour les problèmes de convection-diffusion, nous avons constaté que:

- les méthodes traditionnelles (éléments finis de Bubnov-Galerkin, différences finies classiques, procédés analytiques) sont rapidement mises en défaut;
- aucune des méthodes alternatives n'est universellement admise et de vives controverses subsistent encore à l'heure actuelle.

On comprend dès lors l'importance qu'il y a à bien cerner notre domaine d'application pour faire un choix judicieux. En ce qui nous concerne, les méthodes aux éléments finis seront privilégiées puisqu'elles offrent une grande liberté de discrétisation, utile pour les applications géologiques. Cependant, nous nous rendons compte que, pour le transport miscible, cet avantage est parfois très relatif. En effet, la distorsion des éléments doit, dans certains cas, être limitée autant que possible.

Remarquons aussi que, dans les aquifères poreux ou raisonnablement fissurés, les écoulements sont le plus souvent laminaires. En outre, le transport est rarement dominé par la convection, puisque la tortuosité des chenaux poreux engendre une dispersion mécanique non négligeable, et que la porosité multiple provoque un stockage temporaire dans des zones de moindre circulation. C'est plutôt dans les conduits karstiques qu'on rencontre des propagations dominées par une convection présentant souvent des zones de turbulence.

Par conséquent, dans un premier temps, nous avons choisi de développer une méthode de décentrage complet unidirectionnel (F.U.P.G.) qui se révèle robuste pour nos applications et qui est relativement aisée à implanter. Ensuite, pour pouvoir s'affranchir de la subordination de la discrétisation temporelle à la discrétisation spatiale (condition $C_r < 1$), nous programmerons une méthode eulérienne-lagrangienne mixte (H.E.L.M.). Ce procédé est plus lourd à programmer, parfois plus fragile, mais il est complémentaire du mode de résolution F.U.P.G. Nous pourrions donc construire en toute sérénité, la discrétisation imposée par la nature du problème, et utiliser ensuite la technique de résolution qui s'y adapte le mieux.

De toute façon, les deux méthodes améliorent très significativement la représentation de la composante convective du transport. Toutefois, nous ne nous attarderons pas à éliminer les dernières instabilités qui persistent en convection pure, puisque ce domaine nous concerne peu. Cependant, même dans cette optique, Zienkiewicz (1990) mentionne que les méthodes F.U.P.G. et H.E.L.M. figurent parmi les meilleurs procédés de résolution par éléments finis. Il souligne que:

- les méthodes de type F.U.P.G. convergent vers une solution en régime permanent lorsque l'effet transitoire devient négligeable; de plus, leur précision est meilleure lorsque le pas de temps diminue.
- les méthodes de type H.E.L.M. sont en plein essor, elles semblent très attrayantes pour des courants convectifs importants et variables car elles traitent séparément cette composante du transport.

Enfin, signalons dès maintenant que ces deux techniques de résolution se sont révélées performantes pour traiter l'effet d'eau immobile qui est une composante essentielle du transport miscible dans la craie de Hesbaye. Il n'en n'est pas de même pour la méthode S.U.P.G. simple qui n'utilise pas de décentrage temporel.

II.3. DEVELOPPEMENT, DANS UN CODE CLASSIQUE, DE NOUVEAUX ELEMENTS FINIS POUR LA RESOLUTION DES PROBLEMES DE TRANSPORT MISCIBLE.

II.3.a) Introduction.

Comme nous venons de le signaler, nous étudierons, de manière détaillée, deux procédés de résolution par éléments finis (F.U.P.G. et H.E.L.M.) Nous détaillons ici les opérations nécessaires pour programmer les éléments finis correspondants. Ces éléments seront testés sur des problèmes simples dont certains possèdent une solution théorique. Leur comportement en convection pure sera également envisagé et on peut, dès à présent, dire que, même si celui-ci n'est pas parfait, il est néanmoins nettement meilleur que celui des éléments classiques. Le logiciel de base que nous utilisons est le code éléments finis LAGAMINE du département M.S.M. de l'Université de Liège. L'organigramme de ce code est fourni en annexe avec une description des routines que nous y avons incluses.

II.3.b) Développement d'un élément fini F.U.P.G. 4 noeuds, pour un problème transitoire de transport bidimensionnel, en régime permanent d'écoulement, sans effet d'eau immobile.

Soit le problème suivant:¹⁷

$$A(c) \equiv R_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + A \cdot c + v_x \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \cdot \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{hxx} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{hxy} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) = 0$$

ou sous sa forme compacte :

$$A(c) \equiv R_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + A \cdot c + \vec{v} \cdot \vec{\text{grad}} c - \text{div} (\underline{D}_h \cdot \vec{\text{grad}} c) = 0 \quad (\text{II.64a})$$

avec $\alpha_d^* = 0$ puisque l'effet d'eau immobile n'est pas pris en compte

$v_x, v_y, D_{hxx}, D_{hxy}, D_{hyy}$ variant spatialement mais pas temporellement

v_x, v_y étant déterminés à partir d'une équation de diffusivité en régime permanent et une loi de Darcy pour milieu isotrope :

$$K \cdot \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = 0 \quad v_x = - \frac{K}{n_e} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \quad v_y = - \frac{K}{n_e} \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \quad (\text{II.64b})$$

¹⁷ Dans ces développements, nous omettons volontairement l'indice m puisque l'eau immobile im est inexistante.

Dans cette section, nous nous proposons de développer, pour ce problème, la contribution élémentaire I_{ej} de l'intégrale de volume intervenant dans l'équation (II.28) p.79. Nous utiliserons les pondérations décrites par la relation (II.41) p.89.

Effectuons la pondération sur un quadrilatère V_e à 4 noeuds et sur le pas de temps Δt . On a, par la formule généralisée d'intégration par parties, appliquée au terme dispersif:

$$\begin{aligned}
 I_{ej} &= \int_{\Delta t} \int_{V_e} \left[R_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + A \cdot c + \vec{v} \cdot \text{grad } c - \text{div}(\underline{D}_h \cdot \text{grad } c) \right] \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dV \cdot dt \\
 &= \int_{\Delta t} \int_{V_e} \left[\left(R_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + A \cdot c + \vec{v} \cdot \text{grad } c \right) \cdot W_j(\vec{x}, t) \right. \\
 &\quad \left. + \underline{D}_h \cdot \text{grad } c \cdot \text{grad } W_j(\vec{x}, t) \right] \cdot dV \cdot dt \\
 &+ \int_{\Delta t} \int_{S_e} (-\underline{D}_h \cdot \text{grad } c)_n \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \quad (\text{II.65}) \\
 &= t_{vej} + t_{sej} \quad j=1,4
 \end{aligned}$$

où t_{sej} est un terme de surface qui est regroupé avec celui qui concerne les conditions frontières. L'ensemble est traité séparément par après.

Cette façon de procéder permet d'éviter l'évaluation des dérivées spatiales du second ordre pour l'inconnue en simplifiant les intégrales de surfaces.

A ce stade, introduisons la discrétisation temporelle :

$$\begin{aligned}
 c &= N_1^t(t) \cdot c^n + N_2^t(t) \cdot c^{n+1} \quad \text{avec } N_1^t(t) = 1 - t'/\Delta t \\
 &\quad N_2^t(t) = t'/\Delta t \\
 &\quad t' = t - t_n \\
 &\quad dt' = dt
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{impliquant: } \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \\
 \frac{\partial c}{\partial x} &= N_1^t(t) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + N_2^t(t) \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \\
 \frac{\partial c}{\partial y} &= N_1^t(t) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} + N_2^t(t) \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \quad (\text{II.66a})
 \end{aligned}$$

Posons également :

$$\begin{aligned}
 W_j(\vec{x}, t) &= N_j^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) \quad \text{avec } \Delta W_{j1}^x(\vec{x}) = \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \cdot \text{grad } N_j^x(\vec{x}) \\
 &+ \Delta W_{j1}^x(\vec{x}) \cdot W^t(t) \\
 &+ \Delta W_{j2}^x(\vec{x}) \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \quad \Delta W_{j2}^x(\vec{x}) = \beta \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \cdot \text{grad } N_j^x(\vec{x}) \\
 &\quad (\text{II.66b})
 \end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_j}{\partial x}(\vec{x}, t) &= \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot W^t(t) & \text{et} & \frac{\partial W_j}{\partial y}(\vec{x}, t) = \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot W^t(t) \\ &+ \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot W^t(t) & & + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot W^t(t) \\ &+ \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} & & + \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \end{aligned}$$

(II.66c)

En introduisant ces relations dans (II.65); il vient, après regroupement :

$$\begin{aligned} t_{vej} &= \int_{\Delta t} W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} R_d \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{x})] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} [A \cdot c^n + \vec{v} \cdot \vec{grad} c^n] \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{x})] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} [A \cdot c^{n+1} + \vec{v} \cdot \vec{grad} c^{n+1}] \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{x})] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} R_d \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} [A \cdot c^n + \vec{v} \cdot \vec{grad} c^n] \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} [A \cdot c^{n+1} + \vec{v} \cdot \vec{grad} c^{n+1}] \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial x} \right] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial x} \right] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial y} \right] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W^t(t) \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial y} \right] \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \\ &+ \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + D_{hyy} \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \end{aligned}$$

(II.67)

Divisons alors par $\int_{\Delta t} W^t(t) \cdot dt$, ce qui revient à utiliser une fonction $W^t(t)$ normée. Supposons en outre que la fonction $W^t(t)$ soit symétrique par rapport à $\Delta t/2$ sur l'intervalle $[0, \Delta t]$.

Dans ce cas :

$$\theta = \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt = \int N_1^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt = (1-\theta) = 1/2 \quad (\text{II.68a})$$

$$\theta' = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot \frac{\partial W_N^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt = - \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W_N^t(t)}{\partial t} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot dt \quad (\text{II.68b})$$

vu que $N_1^t(t) + N_2^t(t) = 1 \quad \forall t \in [0, \Delta t]$

et que $\frac{\partial W_N^t(t)}{\partial t}$ est antisymétrique.

On peut alors écrire :

$$\begin{aligned} t_{vei} &= \int_{V_e} R_d \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_j^x(\vec{x})] \cdot dV \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} [A \cdot (c^n + c^{n+1}) + \vec{v} \cdot (\text{grad } c^n + \text{grad } c^{n+1})] \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_j^x(\vec{x})] \cdot dV \\ &+ \theta' \cdot \int_{V_e} [A \cdot (c^n - c^{n+1}) + \vec{v} \cdot (\text{grad } c^n - \text{grad } c^{n+1})] \cdot \Delta W_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial x} \right] \cdot dV \\ &+ \theta' \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} - \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} - \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot dV \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hyy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} + \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial y} \right] \cdot dV \\ &+ \theta' \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} - \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hyy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} - \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \end{aligned} \quad j=1,4 \quad (\text{II.69})$$

Cette intégration temporelle comporte un terme symétrique correspondant à un schéma classique de Crank-Nicholson et un terme antisymétrique, propre aux méthodes F.U.P.G., qui n'existe que lorsque le second coefficient de décentrage (β) est non nul. Ce type de schéma convient particulièrement bien aux petits pas de temps (imposés par la condition $Cr < 1$) et au décentrage temporel. Yu et Heinrich (1987) proposent de choisir :

$$W^t(t) = 4 \cdot N_1^t(t) \cdot N_2^t(t)$$

$$\alpha_{opt} = \coth(Pe/2) - 2/Pe \quad \text{avec } Pe = \frac{|\vec{v}| \cdot \Delta l}{D_{hl}} \quad (\text{II.70a})$$

$$\beta_{opt} = Cr/3 - 2 \cdot \alpha_{opt} / (Pe \cdot Cr) \quad Cr = \frac{|\vec{v}| \cdot \Delta t}{\Delta l} \quad (\text{II.70b})$$

$|\vec{v}|$ étant la vitesse de convection moyenne sur l'élément

Δl étant une longueur caractéristique de l'élément, somme de la projection des médianes dans la direction de la vitesse ou, dans notre cas, la longueur de l'élément dans la direction de v (voir figure II.22).

Souvent, en appliquant cette méthode, on simplifie encore le terme t_2 en négligeant les dérivées spatiales des ΔW_i^x . Elles s'expriment en effet à partir de dérivées secondes des N_i et sont nulles pour des éléments rectangulaires parallèles aux axes globaux.

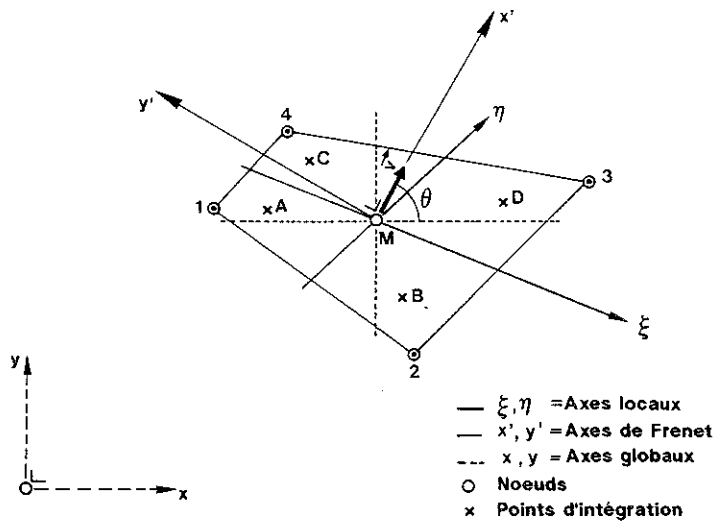


figure II.22: définition des différents systèmes d'axes dans lesquels on peut définir la pondération du transport sur le volume élémentaire V_e .

De cette façon, on obtient un schéma de Crank-Nicholson pour le terme diffusif. On a :

$$\begin{aligned}
 t_{vei} = & \int_{V_e} R_d \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot [N_j^x(\vec{X}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{X})] \cdot dV \\
 & + \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} [A \cdot (c^n + c^{n+1}) + \vec{v} \cdot (\text{grad } c^n + \text{grad } c^{n+1})] \cdot [N_j^x(\vec{X}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{X})] \cdot dV \\
 & + \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} [A \cdot (c^n - c^{n+1}) + \vec{v} \cdot (\text{grad } c^n - \text{grad } c^{n+1})] \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{X}) \cdot dV \\
 & + \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{X})}{\partial x} \cdot dV \\
 & + \frac{1}{2} \cdot \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial x} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hyy} \cdot \left(\frac{\partial c^n}{\partial y} + \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{X})}{\partial y} \cdot dV
 \end{aligned}$$

$j=1,4$
 (II.71)

Dans cette dernière expression, on introduit alors la discrétisation spatiale :

$$\begin{aligned}
 c^n &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{X}) \cdot c_i^n \quad \text{impliquant} \quad \dot{c}^{n \rightarrow n+1} = \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{X}) \cdot \dot{c}_i^{n \rightarrow n+1} \\
 c^{n+1} &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{X}) \cdot c_i^{n+1} \quad \text{avec} \quad \dot{c}_i^{n \rightarrow n+1} = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t}
 \end{aligned}$$

(II.72)

En dérivant les t_{vei} par rapport aux c_i^{n+1} , on obtient ainsi les composantes de la matrice complète de rigidité généralisée pour l'élément V_e . Cette matrice est la somme $[K] + [M]/\Delta t$ où $[K]$ est la matrice de rigidité généralisée au sens strict et $[M]$ la matrice de masse généralisée.

Par ailleurs, en choisissant une première approximation des c_i^{n+1} , les t_{vei} représentent les forces hors équilibre de l'élément V_e . Le système global s'obtient alors par un assemblage classique.

Notons encore que les intégrations sont réalisées numériquement, par une méthode classique:

1°) on effectue le changement de variables vers les coordonnées locales de l'élément ξ, η (voir figure II.22).

$$\text{On a : } dV = \det \underline{J} \cdot d\xi \cdot d\eta \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \underline{J}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (\text{II.73})$$

$$\text{avec } \underline{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad x = \sum_{i=1}^4 N_i^x(\xi, \eta) \cdot x_i$$

$$y = \sum_{i=1}^4 N_i^y(\xi, \eta) \cdot y_i \quad 18$$

traduisant le caractère isoparamétrique de l'élément.

2°) on transforme l'intégrale en une somme par la méthode de Gauss.

$$\int_{V_e} f(\xi, \eta) \cdot d\xi \cdot d\eta = \sum_{IPI=1}^{NPI} f(\xi_{IPI}, \eta_{IPI}) \cdot W_{IPI} \quad (\text{II.74})$$

avec W_{IPI} = poids de Gauss associé au point IPI appelé point d'intégration de Gauss

f = une fonction des coordonnées spatiales adimensionnelles de l'élément.

Dans notre cas, un schéma à 4 points d'intégration sera utilisé, et il importe donc de calculer les vitesses de convection v et les tenseurs de dispersion \underline{D}_h en ces 4 points. Lorsque les maillages pour l'écoulement et le transport sont identiques, les points d'intégration sont les mêmes et les résultats bruts du modèle écoulement sont utilisés. Dans le cas de maillages différents, la valeur des vitesses aux points d'intégration du maillage de transport est déterminée par une interpolation en $1/R_k^2$ (procédé développé par Habraken, 1989):

$$\vec{v}_{IPI} = \sum_k \frac{\vec{v}_k / R_k^2 \cdot P_k}{1/R_k^2 \cdot P_k} \quad (\text{II.75})$$

R_k désignant la distance entre le point d'évaluation IPI et le point k connu,

P_k le poids de ce point dans la pondération.

¹⁸ Un élément isoparamétrique est un élément dont la géométrie est évaluée, à partir des coordonnées nodales, par les fonctions d'interpolation du champ inconnu.

Seuls les points contenus dans un cercle limité par R_{\max} seront considérés, et ceux qui sont dans un cercle R_{\min} auront un poids P_k plus grand.

Cette interpolation ne sera pas utilisée pour l'expression de v dans les fonctions de pondération $W_i^{\vec{x},t}$. Dans ce cas, on se contentera d'une vitesse moyenne sur l'élément.

Enfin, nous programmons un message d'erreur avertissant l'utilisateur lorsque la condition $C_r < 1$ est violée.

II.3.c) Développement d'un élément fini H.E.L.M. à 4 noeuds pour le même problème.

Reprenons le problème (II.64) décrit dans un référentiel eulérien (fixe). Reformulons-le en tenant compte, pour la convection, d'axes mobiles liés à une particule se déplaçant à la vitesse v (référentiel lagrangien).

Cette particule ne "voit" aucune vitesse de convection. Par contre, elle "visualise" une variation de concentration différente de celle qui existe dans les axes fixes.

On écrit :

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\text{grad}} c \quad (\text{II.76})$$

L'équation d'équilibre dans les axes fixes peut alors se réécrire différemment:

$$A'(c) \equiv (R_d - 1) \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{dc}{dt} + A \cdot c - \text{div} (\underline{D}_h \cdot \vec{\text{grad}} c) = 0 \quad (\text{II.77})$$

Cette nouvelle équation est purement diffusive et peut donc être pondérée par la méthode de Bubnov-Galerkin [$W_i(\vec{x},t) = N_i^{\vec{x}}(\vec{x}) \cdot W^t(t)$]. La composante convective est traitée à part en évaluant $\frac{dc}{dt}$. On obtient, pour le quadrilatère V_e à 4 noeuds:

$$\begin{aligned} I_{ej} = & \int_{\Delta t} \int_{V_e} \left[\left((R_d - 1) \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{dc}{dt} + A \cdot c \right) \cdot N_j^{\vec{x}}(\vec{x}) \cdot W^t(t) \right. \\ & \left. + \underline{D}_h \cdot \vec{\text{grad}} c \cdot \vec{\text{grad}} N_j^{\vec{x}}(\vec{x}) \cdot W^t(t) \right] \cdot dV \cdot dt \\ & + \int_{\Delta t} \int_{S_e} (-\underline{D}_h \cdot \vec{\text{grad}} c)_n \cdot N_j^{\vec{x}}(\vec{x}) \cdot W^t(t) \cdot dS \cdot dt \end{aligned} \quad (\text{II.78})$$

$$= t_{vej} + t_{sej}$$

La discrétisation temporelle est introduite dans cette équation avec une particularité supplémentaire:

$$\text{Outre } c = N_1^t(t) \cdot c^n + N_2^t(t) \cdot c^{n+1}$$

$$\begin{aligned} \text{impliquant : } \quad \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \\ \frac{\partial c}{\partial x} &= N_1^t(t) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + N_2^t(t) \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial y} &= N_1^t(t) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} + N_2^t(t) \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{II.79a})$$

$$\text{on écrit aussi : } \frac{dc}{dt} = \frac{c^{n+1} - c^{n*}}{\Delta t} = \dot{c}^{*n \rightarrow n+1} \quad (\text{II.79b})$$

Il vient alors, en conduisant les calculs de la même manière que pour l'élément F.U.P.G. :

$$\begin{aligned} t_{vei} &= \int_{V_e} \dot{c}^{*n \rightarrow n+1} \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{V_e} (R_d - 1) \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{V_e} A \cdot [c^n \cdot (1 - \theta) + \theta \cdot c^{n+1}] \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\ &+ \int_{V_e} \left[D_{hxx} \cdot \left((1 - \theta) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + \theta \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hxy} \cdot \left((1 - \theta) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} + \theta \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \\ &+ \int_{V_e} \left[D_{hxy} \cdot \left((1 - \theta) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + \theta \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} \right) + D_{hyy} \cdot \left((1 - \theta) \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} + \theta \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right) \right] \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \end{aligned}$$

$$\text{avec } \theta = \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt \quad \begin{matrix} j=1,4 \\ (\text{II.80}) \end{matrix}$$

Si on introduit la discrétisation spatiale, t_{vei} s'exprimera à partir de concentrations nodales. La discrétisation se formule comme suit:

$$\begin{aligned} c^n &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{x}) \cdot c_i^n \quad \text{impliquant} & \dot{c}^{n \rightarrow n+1} &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{x}) \cdot \dot{c}_i^{n \rightarrow n+1} \\ c^{n+1} &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{x}) \cdot c_i^{n+1} & \dot{c}^{*n \rightarrow n+1} &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{x}) \cdot \dot{c}_i^{*n \rightarrow n+1} \\ c^{*n} &= \sum_{i=1}^4 N_i^x(\vec{x}) \cdot c_i^{*n} & \text{avec } \dot{c}_i^{n \rightarrow n+1} &= \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \\ & & \dot{c}_i^{*n \rightarrow n+1} &= \frac{c_i^{n+1} - c_i^{*n}}{\Delta t} \end{aligned}$$

Les opérations qui suivent (détermination de la rigidité, changement de repère, et intégration de Gauss) sont alors tout à fait analogues à celles d'une formulation classique. Toutefois, pour les effectuer, il convient de connaître les c_i^n appelées concentrations lagrangiennes au temps t_n pour les noeuds i . Ces variables représentent, en fait, les concentrations qui existeraient au temps t_{n+1} pour les noeuds i si le processus de transfert était purement convectif.¹⁹

¹⁹ En effet, si $R_d = 1$, $A = 0$, $D_h = 0$, l'équation (II.77) se résume à $c^{n+1} = c^{*n}$.

Pour les déterminer, il convient d'effectuer un traçage inverse des positions nodales ("reverse particle tracking" en anglais). Il s'agit de remonter le long des lignes de courant convectif passant par les positions nodales. On parle de méthode modifiée des caractéristiques par opposition aux méthodes qui déplacent les noeuds dans le sens du courant. La figure II.23 illustre ce procédé pour un pas de temps divisé en trois sous intervalles.

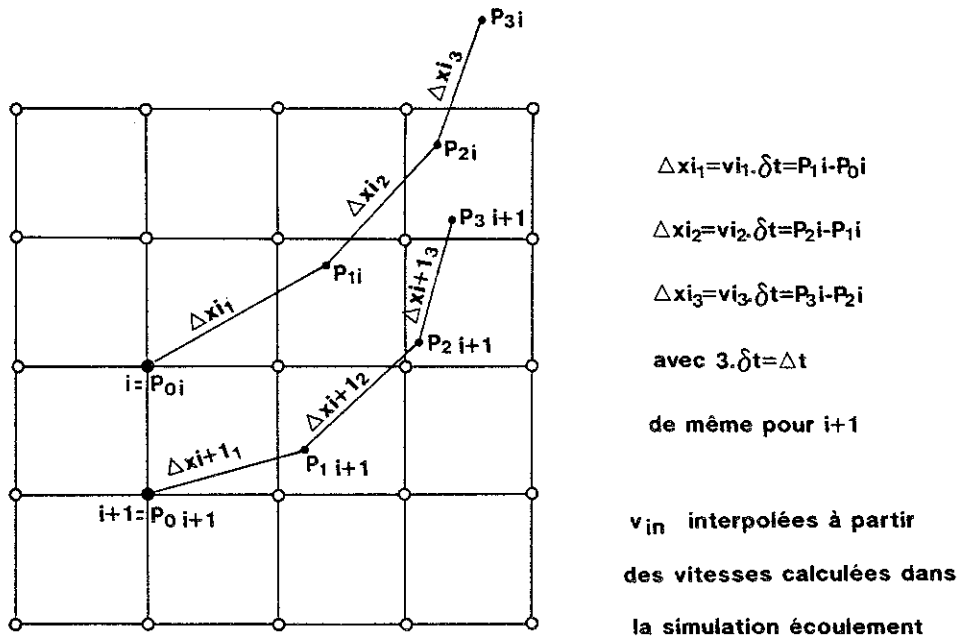


figure II.23: processus de "reverse particle tracking".

Mathématiquement on écrit :

$$\vec{x}_i^{*n} = \vec{x}_i^{n+1} - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \vec{v}_i \cdot dt \quad (II.82a)$$

$$c_i^{*n} = \sum_{j=1}^4 c_j^n \cdot N_j^x(\vec{x}_i^{*n}) \quad (II.82b)$$

où \vec{x}_i^{n+1} est une position nodale mais pas \vec{x}_i^{*n} qui représente la position convective inverse de la particule traçée.

N_j^x sont les fonctions d'interpolation de l'élément qui contient la position \vec{x}_i^{*n} .

L'intégrale de la relation (II.82a) est approximée numériquement comme suit :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \vec{v}_i \cdot dt \approx \sum_{k=1}^K \vec{v}_i^k \cdot \delta t_k \quad (II.82c)$$

où K est le nombre de sous-intervalles

\vec{v}_i^k est déterminé par interpolation sur l'élément contenant la position intermédiaire de la particule traçée au début du sous-intervalle δt_k

Ceci exige la connaissance des vitesses nodales v_j . Lorsque le maillage pour le transport est identique à celui pour l'écoulement, nous les déterminerons à partir des valeurs aux points d'intégration par la méthode de l'extrapolation nodale (Habracken, 1989). Dans le cas de maillages différents, nous procéderons à une interpolation en $1/R^2$, toujours bornée.

Lorsqu'on examine ce procédé, il est clair que, pour évaluer correctement x_i^n (donc c_i^n), il faut considérer un nombre de sous-intervalles suffisant. Comme critère, nous considérerons que chaque δt_k propre au noeud i "tracé" doit être tel qu'il engendre un déplacement égal à un sous-multiple de la longueur de l'élément. Ainsi, dans les grands éléments, où on demande peu de précision, le pas Δt sera très vite parcouru. Au contraire, dans les petits éléments, les incréments δt_k seront faibles. Envisagé de cette manière, le "particle tracking" s'adapte à la discrétisation spatiale du problème. Il est normal de procéder de cette façon puisque c'est la finesse de la discrétisation qui définit la connaissance plus ou moins précise du champ convectif.

Un point important doit encore être analysé dans la méthode H.E.L.M. Le processus de "particle tracking" décrit par (II.82) présente un grave inconvénient. Envisageons, en effet, la propagation par convection pure d'un front de polluant c_0 . Dans ce cas, les concentrations en fin de pas sont les concentrations lagrangiennes et on peut graphiquement construire la solution numérique du problème (figure II.24).

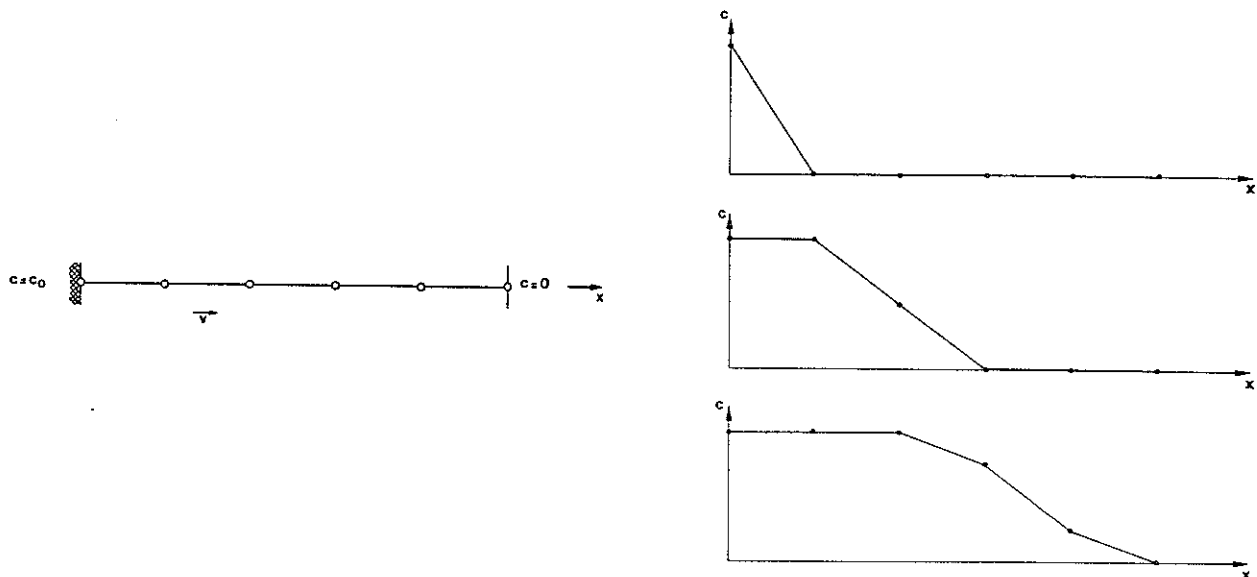


figure II.24: convection pure d'une discontinuité (méthode H.E.L.M.)

Lorsque le trajet convectif au cours du pas de temps n'est pas un multiple de la largeur de maille, on constate une diffusion numérique importante et non bornée. Elle résulte de l'interpolation (II.82b). Pour éviter ce problème, nous définissons, en nous basant sur les travaux de Yeh (1990), un raffinement adaptatif du maillage.

Les éléments présentant, au temps t_n , une forte variation de concentration entre leurs différents noeuds sont appelés éléments de front abrupt ("sharp front elements" en anglais). Dans ces éléments, l'approximation (II.82b) devient imprécise.

Pour améliorer les résultats, ils sont subdivisés (ou "zoomés") en un nombre $(2 * I_{\text{zoom}} + 1)^2$ de sous-éléments (SE); I_{zoom} est un entier définissant l'ordre du zoom. En conséquence, de nouvelles positions nodales apparaissent, correspondant à des noeuds qui n'apparaissent pas dans la discrétisation: les noeuds "cachés" (voir figure II.25).

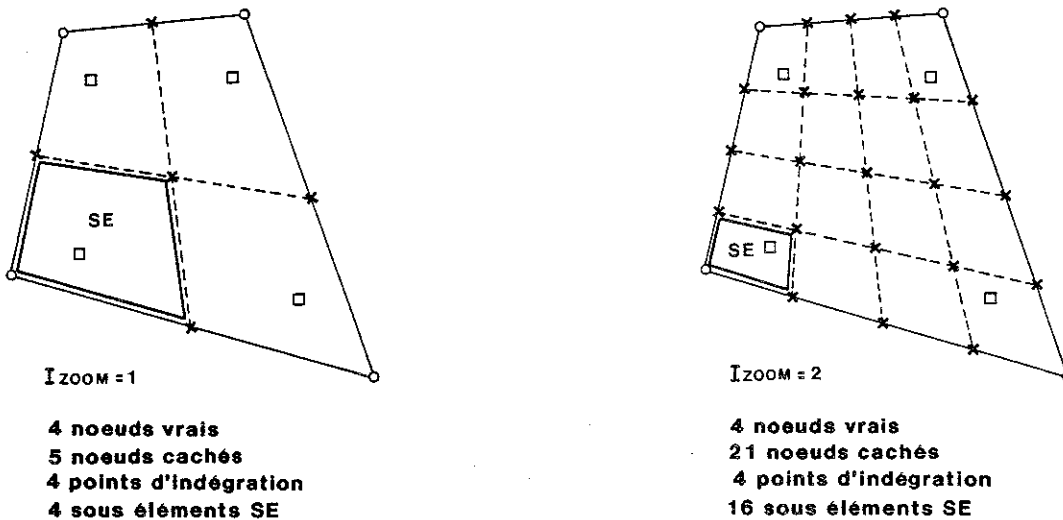


figure II.25: raffinement adaptatif du maillage pour la méthode H.E.L.M.: distinction des noeuds cachés dans les éléments zoomés.

L'interpolation (II.82b) est alors modifiée et s'écrit:

$$c_i^{*n} = \sum_{j=1}^4 c_j^{Hn} \cdot N_j^{SE}(\vec{x}_i^{*n}) \quad \text{avec } c_j^{Hn} = \sum_{j=1}^4 N_j^x(\vec{x}^H) \cdot c_j^n \quad (\text{II.83})$$

où N_j^{SE} sont les fonctions d'interpolation associées au sous-élément contenant \vec{x}_i^{*n}

c_j^{Hn} sont les concentrations des noeuds cachés au temps t^n

\vec{x}^H sont les positions de ces noeuds cachés.

Ces éléments zoomés le resteront tant qu'ils "voient" de fortes variations de concentration. Il convient donc, dans certains cas, d'actualiser les concentrations totales des noeuds cachés. On utilisera l'approximation suivante:

$$c_i^{Hn+1} = c_i^{H*n} + \sum_{j=1}^4 (c_j^{n+1} - c_j^{*n}) \cdot N_j^x(\vec{x}^H) \quad (\text{II.84})$$

avec c_i^{H*n} = concentrations lagrangiennes des noeuds cachés ("hidden nodes" en anglais)

Ceci implique que les noeuds cachés subissent également le "reverse particle tracking".

Il est important de souligner que le processus d'interpolation modifiée n'implique pas de discontinuité entre éléments pour le champ c inconnu qui reste linéaire sur les bords de l'élément. Toutefois, l'interpolation (II.84) est un peu arbitraire. Yeh signale qu'elle est suffisante pour de nombreuses applications avec une dispersion non négligeable mais déconseille son utilisation dans les cas de convection pure.

Enfin, il convient de déterminer le critère indiquant si un élément doit être zoomé. Nous proposons le triple critère suivant:

$$\Delta c_e / \Delta c_v > \text{tol}_3 \quad \Delta c_v / \Delta c_{\text{tot}} > \text{tol}_2 \quad \Delta c_{\text{tot}} / c_{\text{max}} > \text{tol}_1 \quad (\text{II.85})$$

où Δc_e = écart maximum entre les concentrations nodales c_i^n de l'élément

Δc_v = écart maximum entre les concentrations nodales c_i^n du voisinage de l'élément²⁰

Δc_{tot} = variation de concentration sur toute la structure au temps t^n

c_{max} = concentration maximale sur la structure au temps t^n

Il est évident que ce travail de topologie sur les éléments est lourd; même si on rationalise au maximum les calculs en effectuant les identifications sur le maillage dans un préprocesseur (voir annexe). Toutefois, en contrepartie, on obtient 2 avantages énormes:

- 1°) la possibilité de travailler avec des nombres de Courant C_r supérieurs à l'unité. La discrétisation temporelle n'est alors conditionnée que par la représentation correcte de la dispersion et de la dégradation;
- 2°) l'absence de tout décentrage conférant un caractère à priori plus général à cette méthode.

Pour nos applications, les méthodes F.U.P.G. et H.E.L.M. donnent des résultats très similaires pour des temps de calcul qui sont du même ordre de grandeur. En effet le coût C.P.U. engendré par le "particle tracking" est compensé par l'utilisation de plus grands pas de temps.

Notons encore que, pour obtenir une intégration temporelle consistante, nous choisirons un schéma totalement implicite ($\theta=1$). Il est en effet compréhensible que, lorsque le pas de temps est grand, les concentrations c^n et c^{n+1} ont peu de relation entre elles, la convection ayant provoqué un trajet spatial non négligeable. Mais, lorsque le pas de temps est trop petit ($C_r < 1$), ce schéma devient alors surdiffusif, tout comme les méthodes de Petrov-Galerkin lorsque la pondération temporelle est trop implicite. Un message est prévu dans le programme pour que l'utilisateur évite ce type d'erreur.

²⁰ On entend par voisinage d'un élément, l'élément lui-même ainsi que tous ceux qui ont un noeud en commun avec lui.

II.3.d) Tests des éléments créés sur quelques problèmes simples.

II.3.d.1) Tests unidimensionnels.

1°) Convection-dispersion d'un front de polluant.

Le premier test que nous envisageons correspond à la propagation unidimensionnelle d'une substance injectée de manière continue, en écoulement uniforme, dans un milieu semi-infini (solution analytique donnée au paragraphe II.2.a.1). Le domaine modélisé est discrétisé en 30 éléments, mais la concentration en aval n'est pas imposée, de sorte que le polluant peut s'évacuer par convection.

Envisageons d'abord le cas où convection et dispersion agissent simultanément dans un rapport défini par le nombre de Peclet numérique $Pe = v.\Delta l/D_h = 2$.

Les résultats (représentés figure II.26) démontrent clairement que, lorsque les 2 éléments sont utilisés correctement, ils produisent des résultats rigoureusement identiques et exacts aux noeuds (II.26a et II.26c). On constate également que l'augmentation du nombre de Courant $Cr = v.\Delta t/\Delta l$ a un effet désastreux sur le schéma F.U.P.G. (II.26b) alors que le schéma H.E.L.M. s'accommode très bien de valeurs de Cr élevées ($Cr = 2.5$). Signalons également que l'absence du zoom dans ce dernier schéma n'engendre pas, pour ce problème, une diminution excessive de la précision de la solution (II.26d).

Lorsque le transport est dominé par la convection ($Pe \rightarrow \infty$), la qualité des résultats se dégrade (figures II.27 et II.28). Une légère dispersion et une oscillation localisée (limitée à environ 5 %) persistent dans la solution F.U.P.G. (II.27a). Cette solution constitue cependant une nette amélioration par rapport au schéma non décentré (II.28).

Pour la solution H.E.L.M. sans zoom, la dispersion numérique est plus importante (II.27b). Elle peut être éliminée par l'introduction du zoom, mais il apparaît alors des oscillations localisées d'amplitude croissante (II.27c). Et c'est seulement lorsque Cr est un nombre entier que le résultat exact peut être retrouvé (II.27d).

Pour des problèmes plus complexes où v varie dans l'espace, cette condition ne peut pas être satisfaite et ce n'est qu'en faisant de très grands pas de temps qu'une solution de très bonne qualité peut être obtenue.

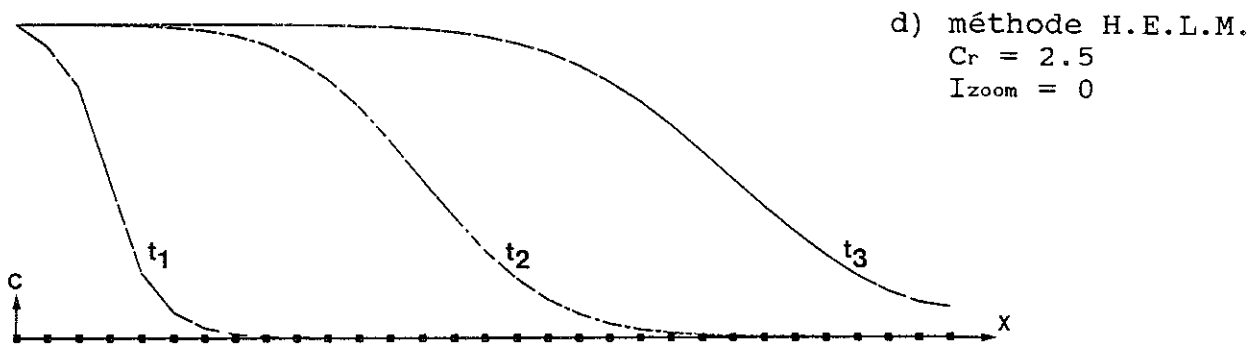
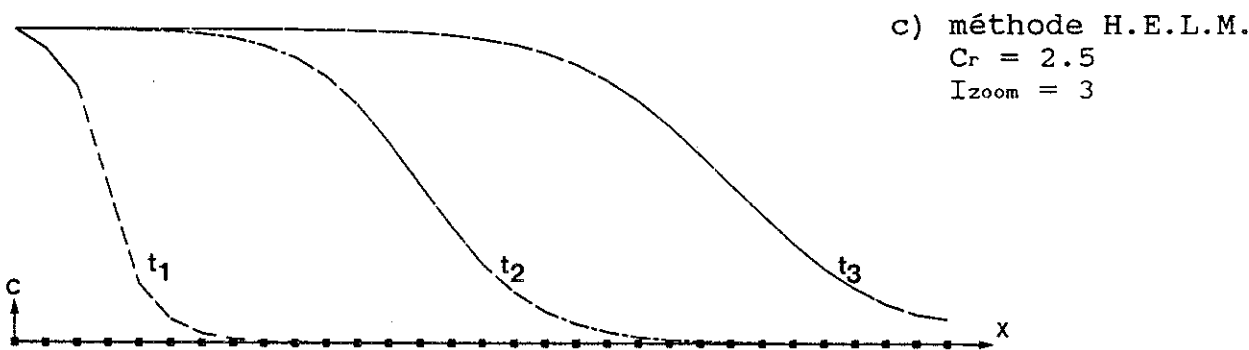
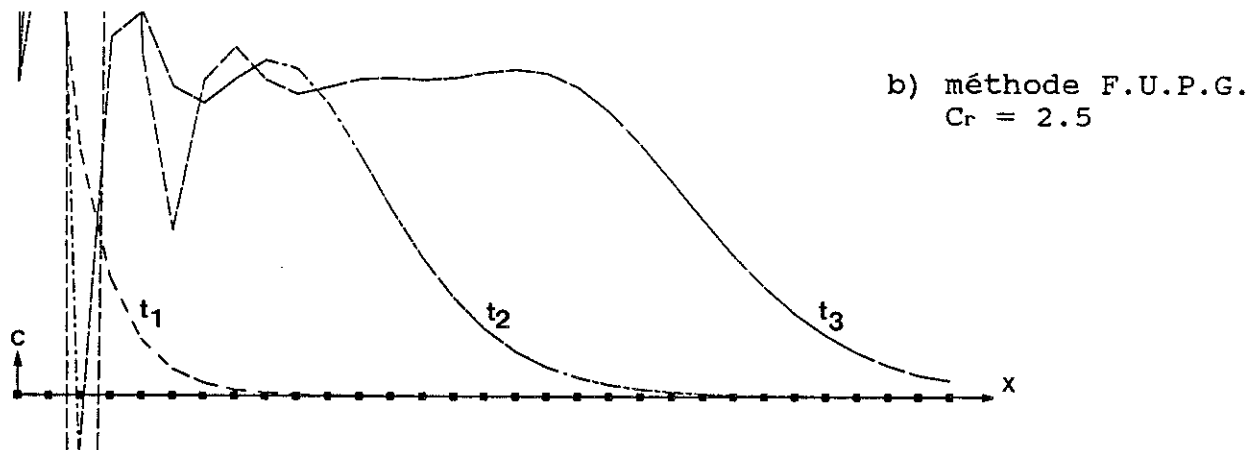
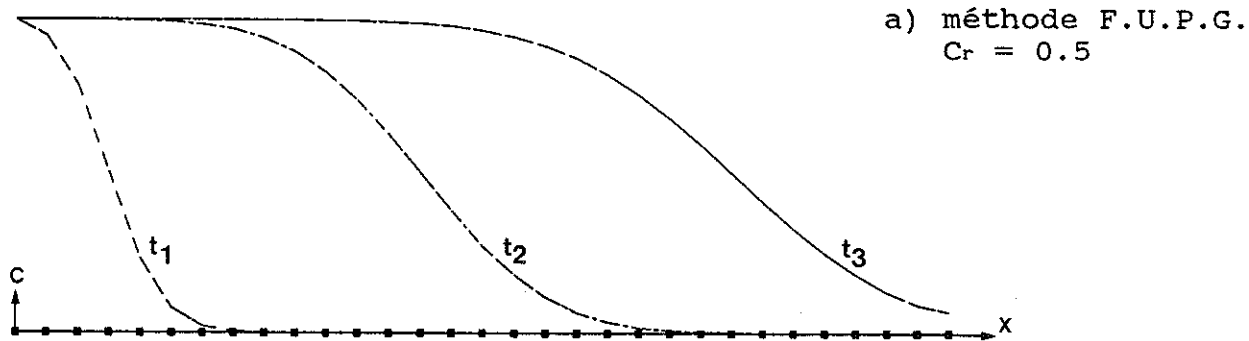


figure II.26: convection-dispersion à une dimension d'un front de polluant, $Pe = 2$.

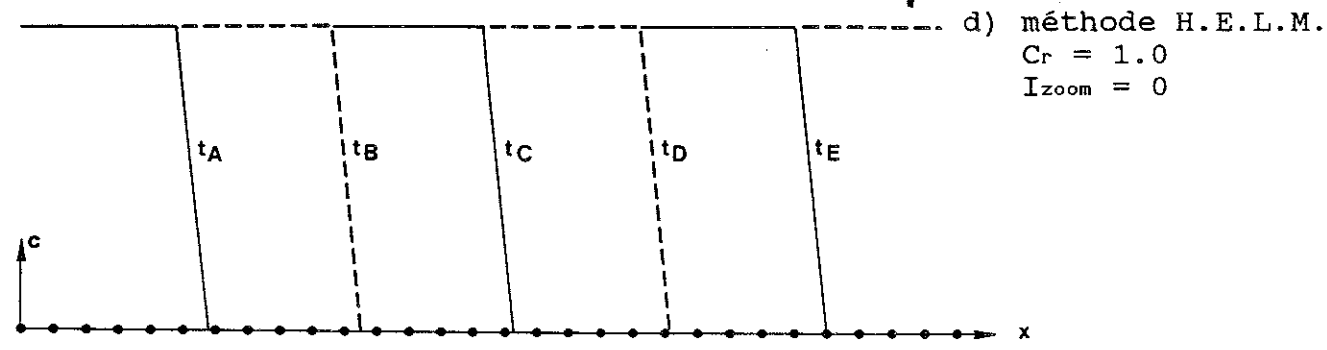
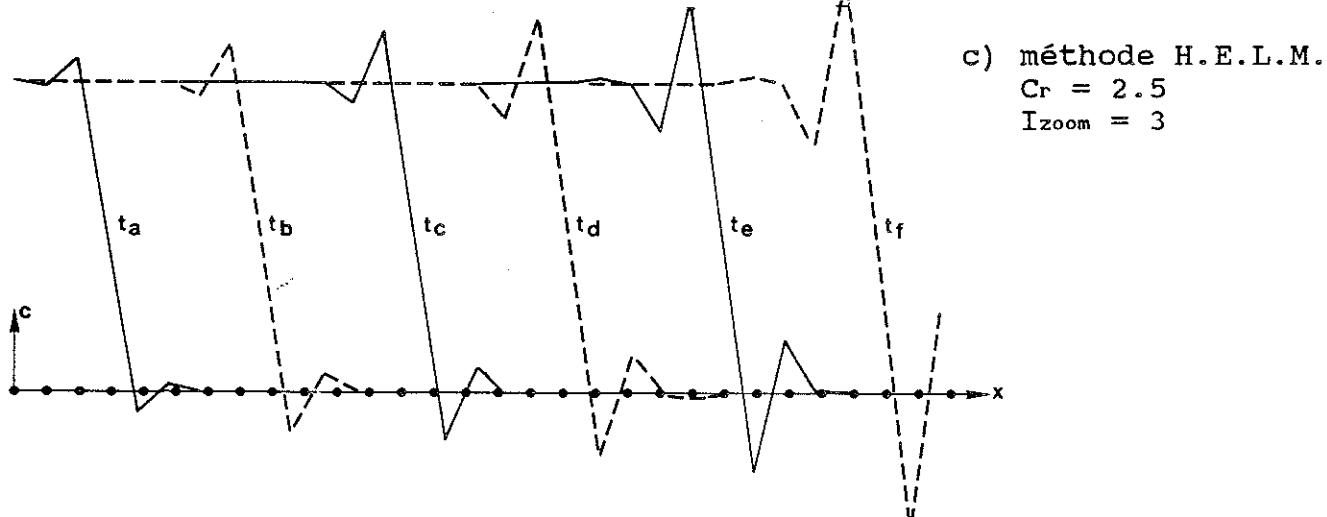
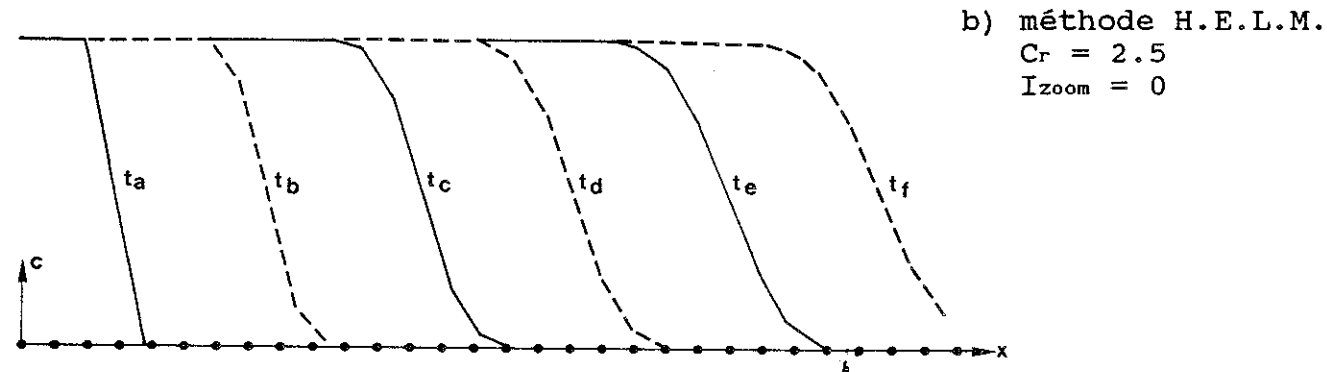
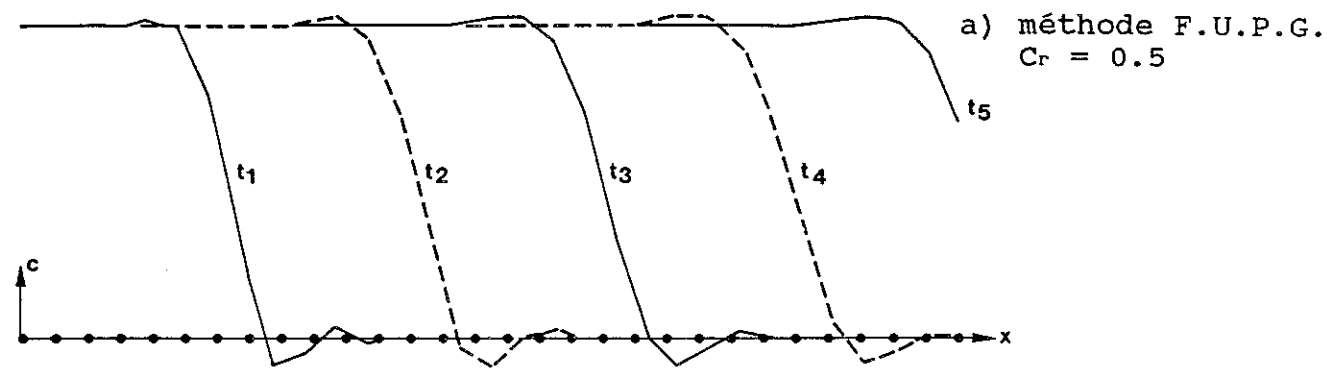


figure II.27: convection-dispersion à une dimension d'un front de polluant, $Pe \rightarrow \infty$.

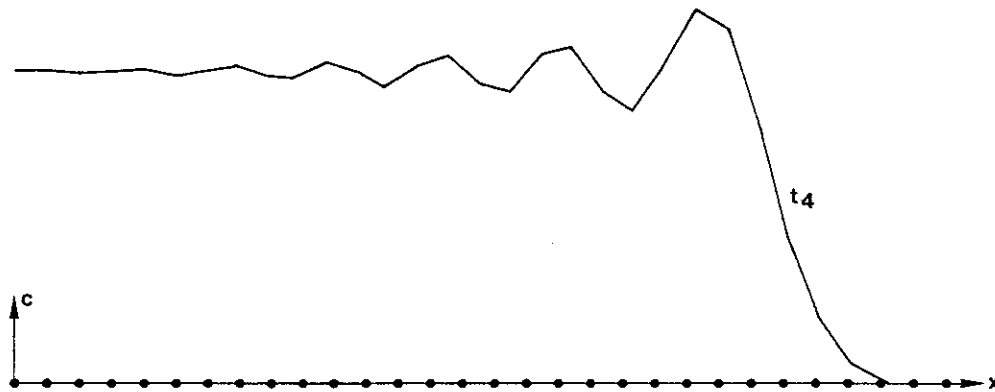


figure II.28: convection-dispersion à une dimension d'un front de polluant, $Pe \rightarrow \infty$, $Cr = 0.5$, méthode classique de Bubnov-Galerkin.

2°) Convection-dispersion d'un pulse de polluant.

Envisageons, dans les mêmes conditions, la propagation d'une distribution en cloche de la concentration. Des constatations similaires peuvent être faites lorsqu'on examine les figures II.29 et II.30. Toutefois, comme ce problème est moins pénalisant pour des éléments finis linéaires, on s'attend à voir diminuer l'amplitude des oscillations en convection pure.

Ce phénomène est observé pour les éléments F.U.P.G. (II.30a) Par contre, pour les éléments H.E.L.M. avec zoom, l'amplitude des oscillations reste similaire (II.30c).

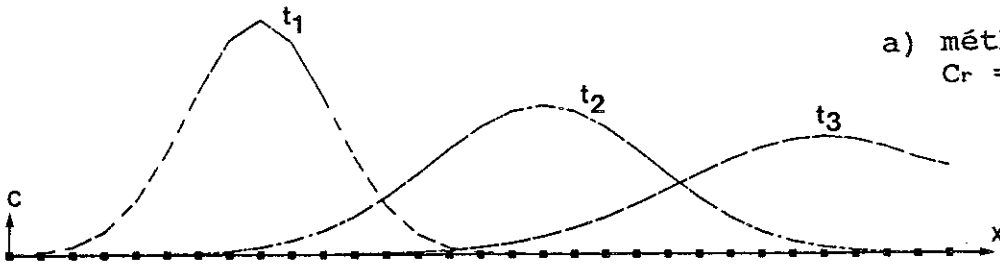
Nous expliquons ce fait en considérant l'équation d'équilibre en convection pure pour ce schéma: $c = c^*$. Celle-ci est intégrée en n'utilisant que 4 points d'intégration, alors que l'élément comporte bien plus de noeuds cachés où c est évalué. Une intégration plus riche donnerait peut-être un meilleur résultat. Mais, dans ce cas, la diffusion serait surintégrée et nous ne savons pas si c'est bénéfique pour cette composante.

Si de telles oscillations se présentent, nous choisirons de raffiner le maillage dans son ensemble. Cette opération est, bien évidemment très différente du zoom qui est un raffinement adaptatif, localisé dans le temps et dans l'espace. dans le cas des problèmes purement convectifs, on pourra également agrandir très fortement le pas de temps.

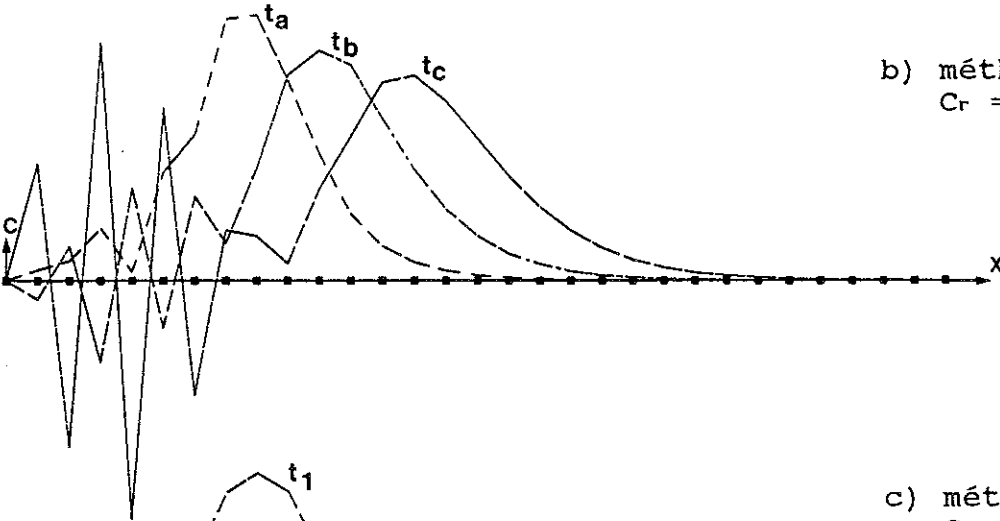
3°) Représentation d'une dégradation pour ces 2 problèmes.

Envisageons, pour la migration de la discontinuité et du pulse, un coefficient de dégradation représentant 10 % du module de la vitesse de convection. Pour voir clairement son effet, considérons une dispersion nulle. Les simulations (figure II.31) reproduisent correctement l'évolution prévue par la théorie. Ceci démontre, si cela était encore nécessaire, que la prise en compte des termes proportionnels à l'inconnue ne constitue pas une difficulté numérique. Codina et al. démontrent mathématiquement le fait pour des éléments à pondération décentrée (1990).

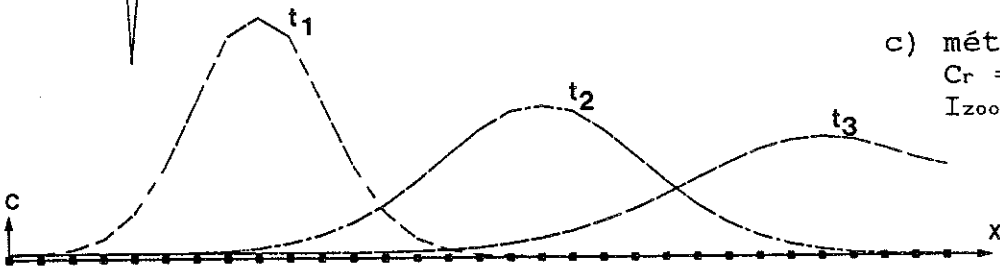
a) méthode F.U.P.G.
 $Cr = 0.5$



b) méthode F.U.P.G.
 $Cr = 2.5$



c) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 2.5$
 $I_{zoom} = 3$



d) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 2.5$
 $I_{zoom} = 0$

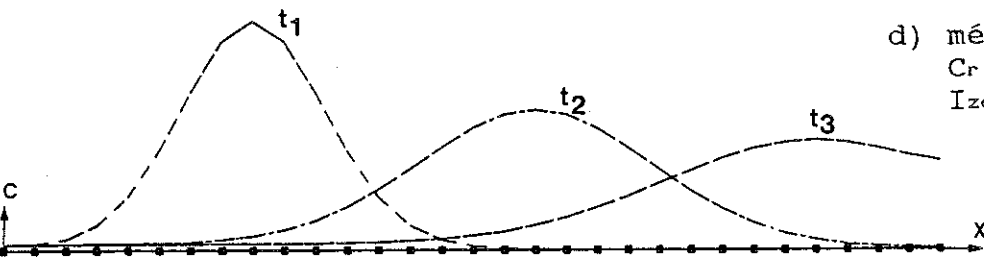
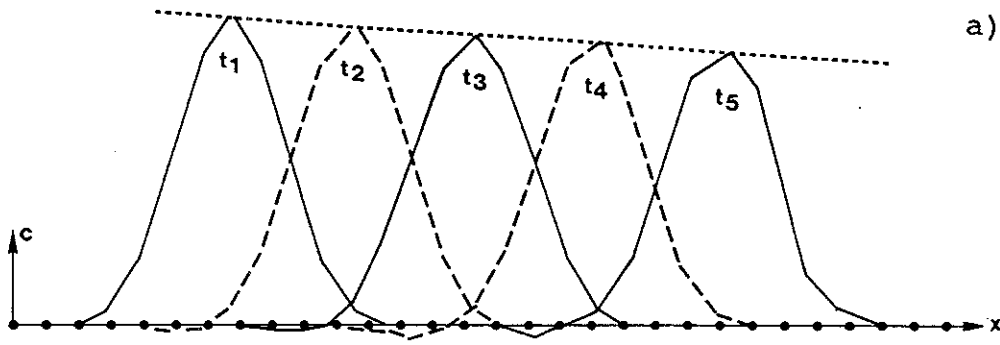
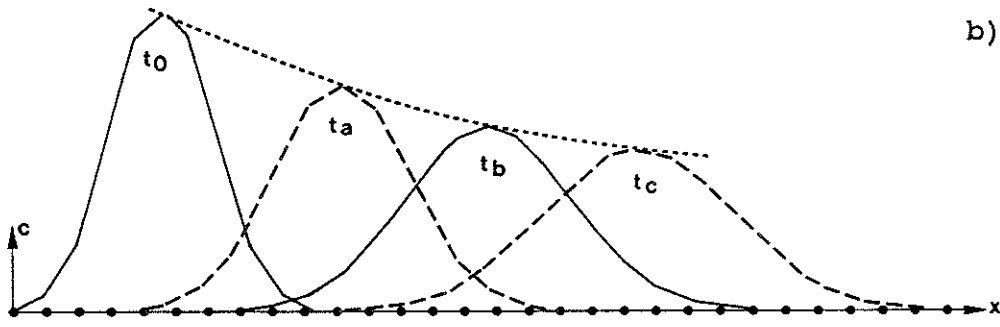


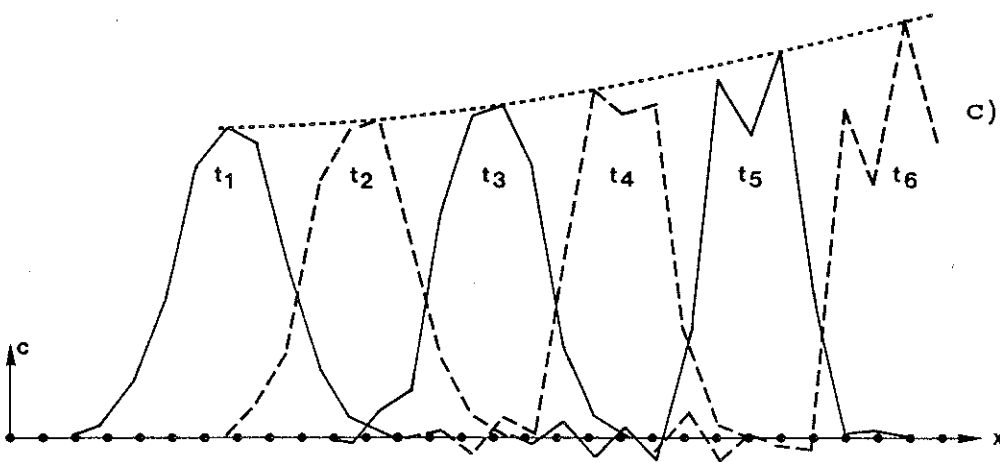
figure II.29: convection-dispersion à une dimension d'un pulse de polluant, $Pe = 2$.



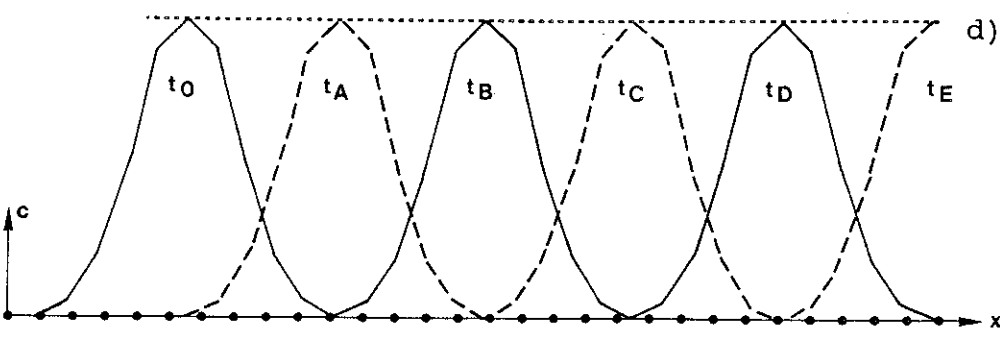
a) méthode F.U.P.G.
 $Cr = 0.5$



b) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 2.5$
 $I_{zoom} = 0$



c) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 2.5$
 $I_{zoom} = 3$



d) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 1.0$
 $I_{zoom} = 0$

figure II.30: convection-dispersion à une dimension d'un pulse de polluant, $Pe \rightarrow \infty$.

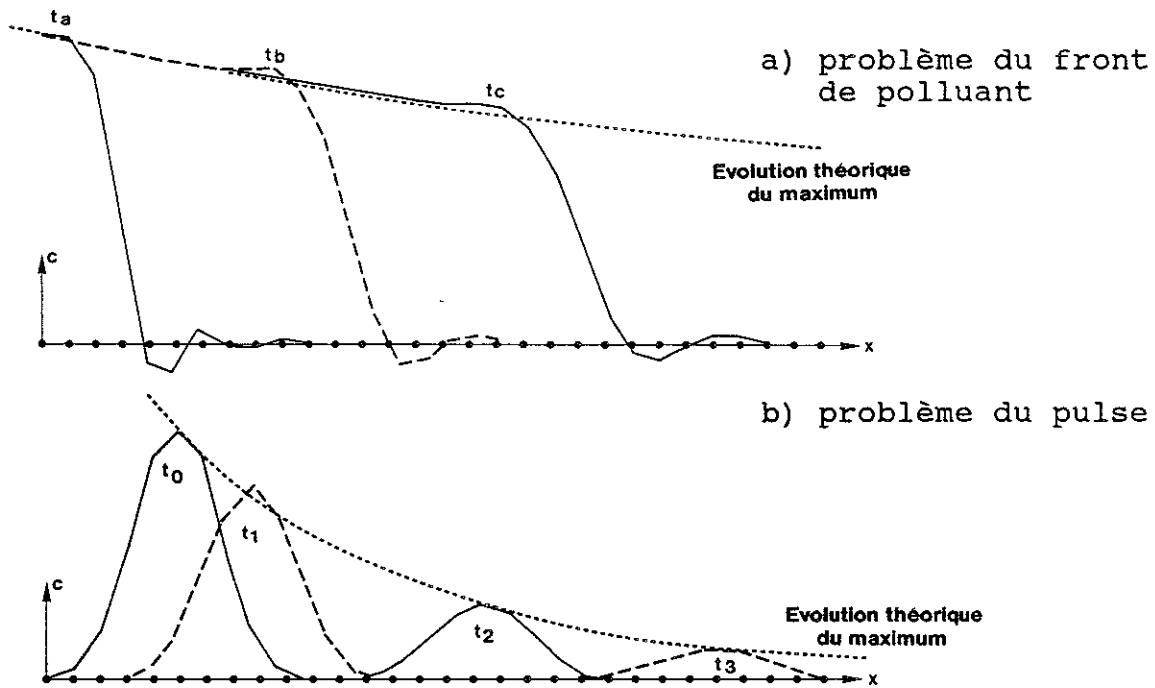


figure II.31: convection-dégradation à une dimension
($Pe \rightarrow \infty$, $A/v = 0.1$).

II.3.d.2) Tests bidimensionnels.

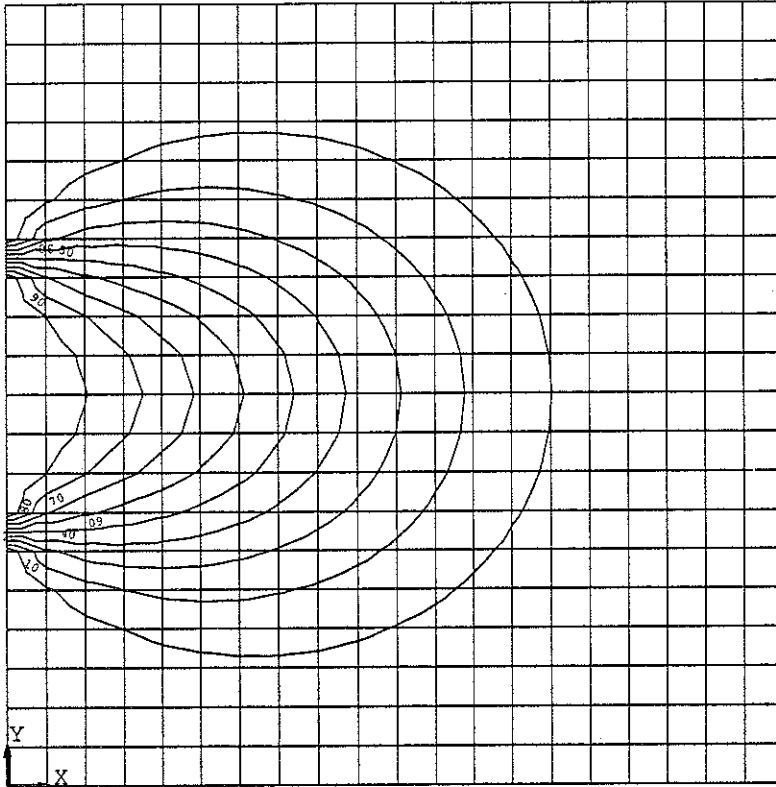
Nous savons que les équations de convection-dispersion sont plus difficiles à résoudre pour un problème bidimensionnel. Nous envisageons ici des problèmes de ce type dont la difficulté de résolution est croissante.

1°) Injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme.

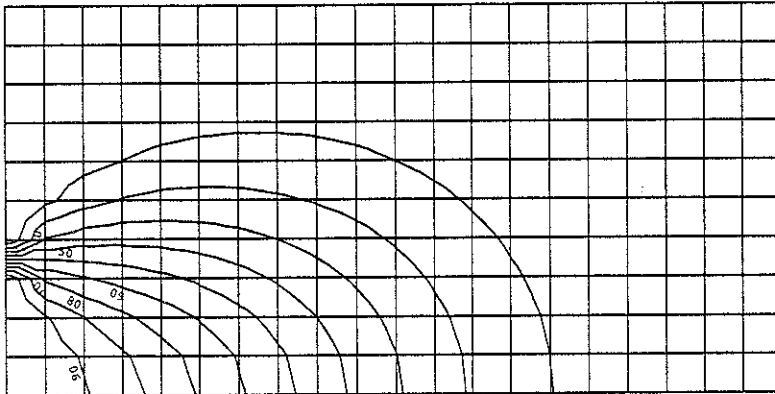
Reprenons maintenant le problème d'injection continue défini au paragraphe II.2.a.2) et comparons la solution analytique (II.4)²¹ à celles obtenues avec nos éléments. Nous considérons une injection centrée de largeur a égale à 7 mètres. Le domaine dans lequel le polluant se propage a une largeur l de 20 mètres et est soumis à une convection de 1 m/s. Il est représenté par un maillage carré de 20×20 éléments. La figure II.32 illustre les résultats lorsque les dispersivités longitudinale et transversale valent respectivement 1,5 et 1 m ($Pe = 0,66$). Pour la figure II.33, ces grandeurs sont divisées par 10 ($Pe = 6,66$).

La corrélation entre les simulations numériques et la solution analytique est excellente. Toutefois, on remarque que la méthode H.E.L.M produit une dispersion légèrement moindre. Ce phénomène peut s'expliquer par l'utilisation d'une intégration temporelle totalement implicite (qui est parfois moins précise qu'un schéma de Crank Nicholson), ou par l'utilisation d'un pas de temps plus grand (qui intègre moins bien la dispersion).

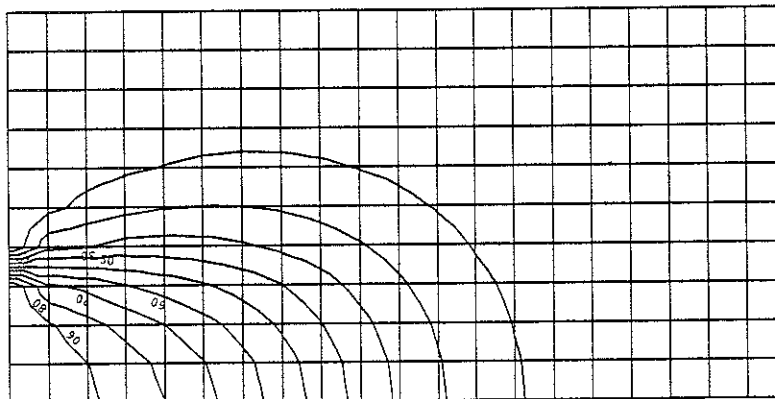
²¹ Cette solution est programmée en évaluant le développement en série jusqu'au dixième terme.



a) solution analytique

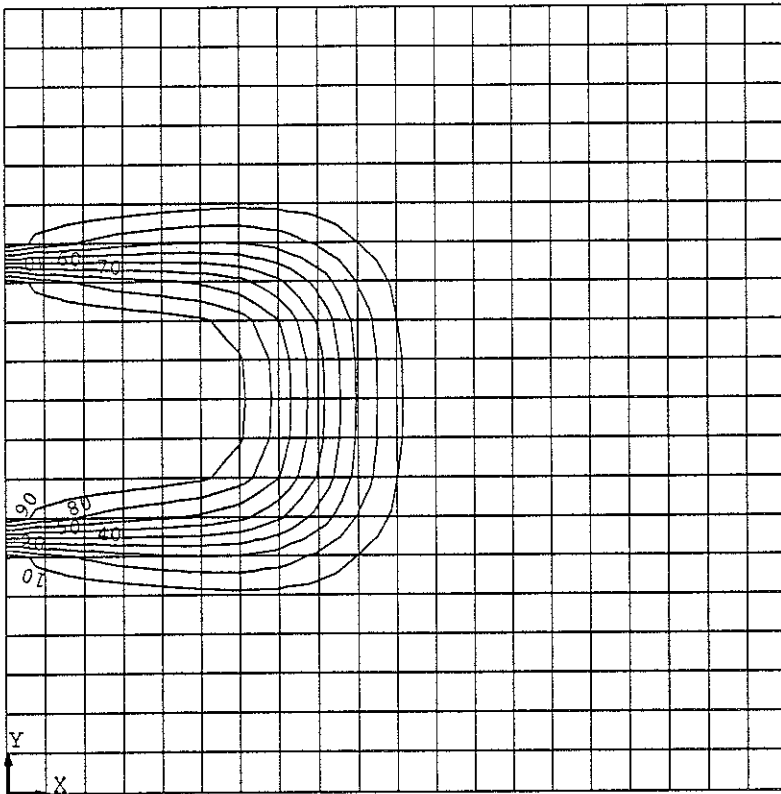


b) méthode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$

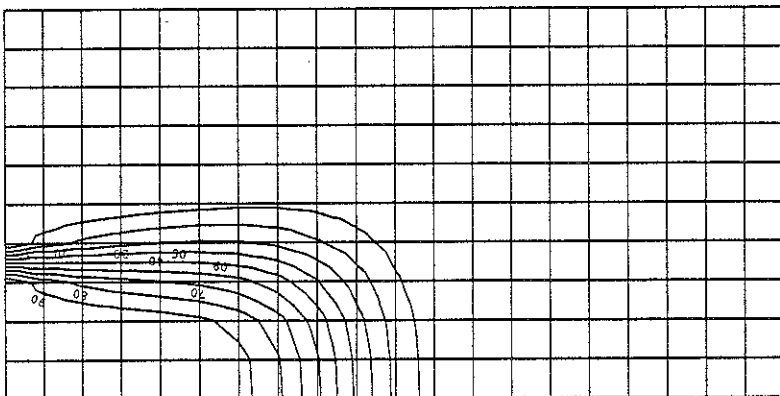


c) méthode H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$

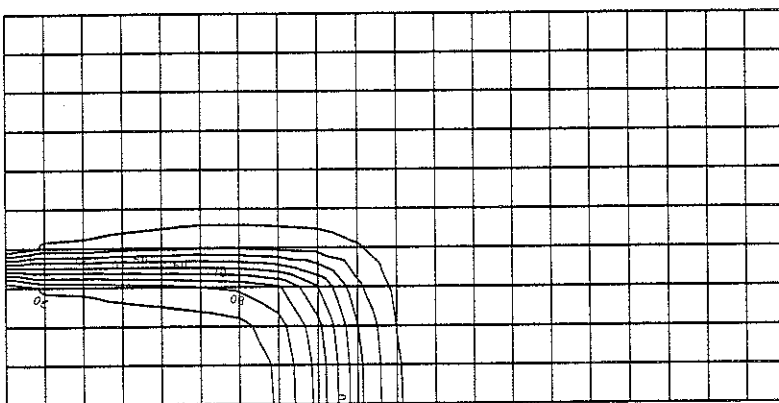
figure II.32: injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme, $v = 1$ m/s, $a_l = 1.5$ m, $a_r = 1.0$ m. Résultats après 8 s d'injection.



a) solution analytique



b) méthode F.U.P.G.
Cr = 0.5



c) méthode H.E.L.M.
Cr = 1.5

figure II.33: injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme, $v = 1$ m/s, $a_L = 0.15$ m, $a_T = 0.10$ m. Résultats après 8 s d'injection.

2°) Injection continue, ponctuelle, dans un champ convectif uniforme.

Le problème correspondant à la solution II.15 p.70 a été également simulé. Il contient une difficulté supplémentaire par rapport au cas précédent car l'injection n'est plus répartie sur une certaine longueur. De plus, c'est l'occasion de comparer 4 méthodes de résolution différentes avec des discrétisations similaires:

- la solution analytique approchée (II.17) qui ne sera évaluée que dans son domaine de validité [$r.y/(2.D_{HL}) > 10$ pour 10 % d'erreur au maximum, avec $r^2 = x^2 + y^2.D_{HL}/D_{HT}$]
- la solution Random Walk, obtenue par le logiciel FLORAN, élaboré par Uffink dans le cadre de sa thèse et commercialisé par l'I.G.W.M.C. (International Ground Water Modeling Center). Ce "software" permet d'envisager des injections dans un milieu homogène, isotrope, soumis à un champ convectif de forme simple.²²
- les deux solutions éléments finis (F.U.P.G. et H.E.L.M).

2 jeux de dispersivités ont été utilisés:

- $a_L = 1.0$ m, $a_T = 0.1$ m (courbes d'égale concentration représentées figure II.34).
- $a_L = 1.5$ m, $a_T = 1.0$ m (courbes d'égale concentration représentées figure II.35).

Des graphiques $c/c_{in}-x$ ont également été tracés (figure II.36). La situation représentée est obtenue après un transport pendant 20 jours, dans un écoulement convectif de 10^{-5} m/s.

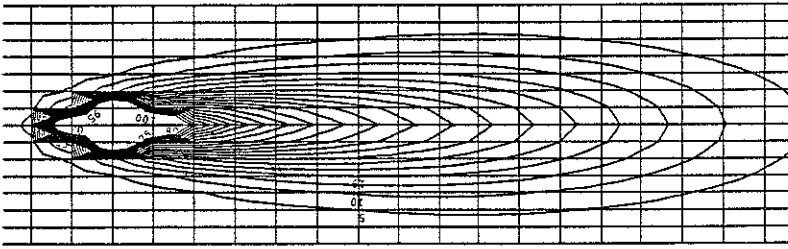
Dans le premier cas, on constate une bonne similitude entre les 4 solutions. On remarquera également l'irrégularité des contours d'égale concentration obtenus par l'approche Random Walk. Ces irrégularités sont l'image du processus stochastique et ne doivent pas être considérées comme une réalité physique.

Dans le second cas, la méthode Random Walk donne un résultat un peu différent. Nous imputons cette erreur à un nombre insuffisant de particules en regard de la taille plus vaste du domaine dans lequel elles se déplacent (le logiciel est en effet limité à un nombre arbitrairement fixé qui a été augmenté sur la dernière version du programme).

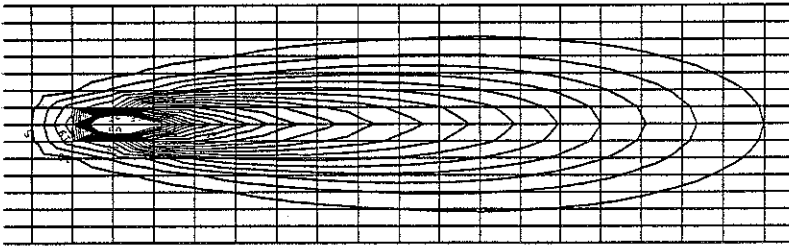
Certains auteurs (Dimou et Adams, 1991) prétendent en effet que le nombre de particules doit être fort élevé (20000) pour réduire suffisamment les irrégularités des concentrations calculées dans le cas d'une injection ponctuelle. Quoiqu'il en soit, les solutions par éléments finis sont très proches de l'évaluation analytique.

²² Les résolutions Random Walk que nous présentons ont été obtenues par X. Renard dans le cadre de son travail de fin d'études.

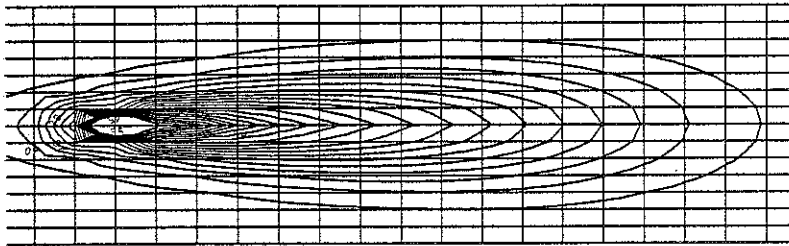
a) solution analytique



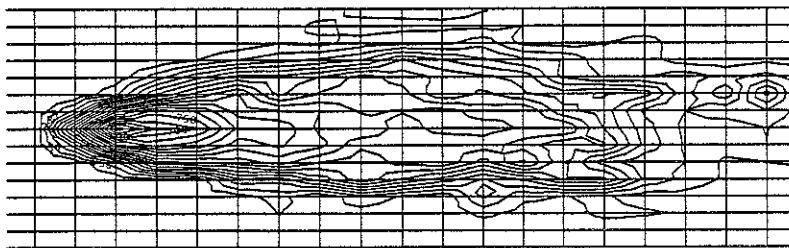
b) méthode F.U.P.G.
 $Cr = 0.83$




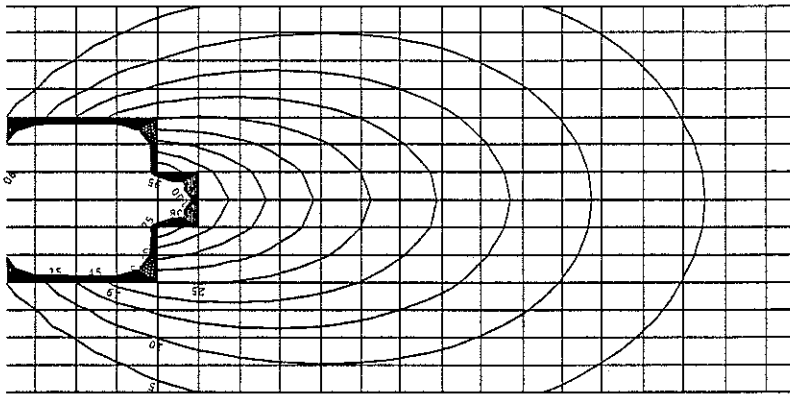
c) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 1.25$



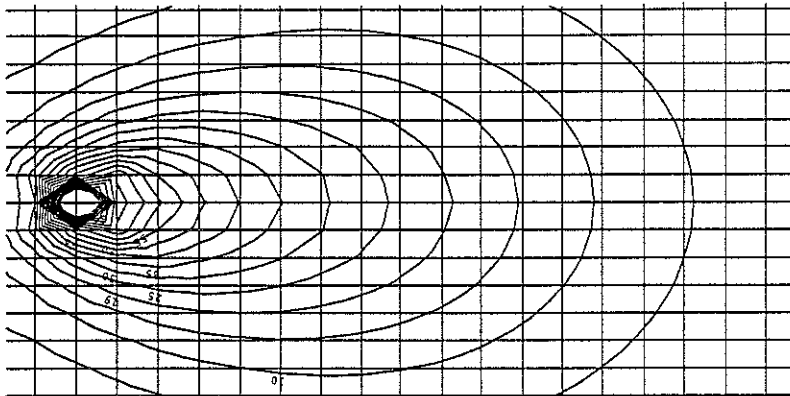
d) méthode Random Walk



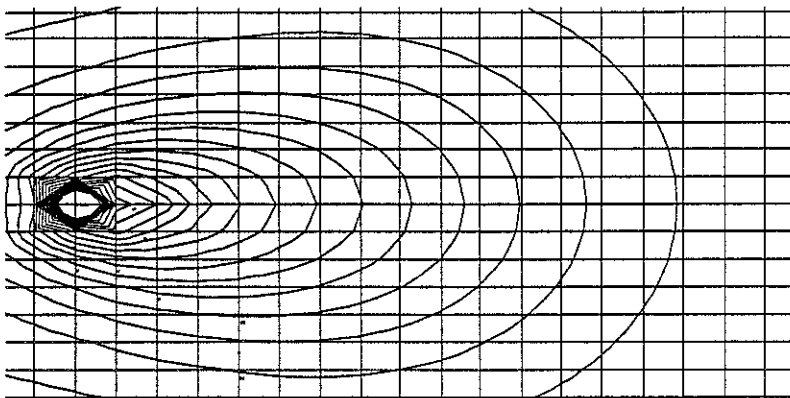
 **figure II.34:** Injection continue, ponctuelle, dans un champ convectif uniforme, $v = 10^{-5}$ m/s, $a_L = 1.0$, $a_T = 0.1$ ($Pe = 1.36$).



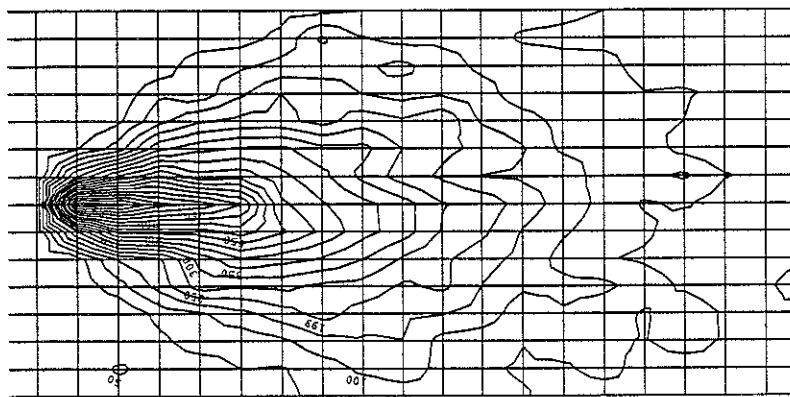
a) solution analytique



b) méthode F.U.P.G.
 $Cr = 0.8$



c) méthode H.E.L.M.
 $Cr = 1.2$

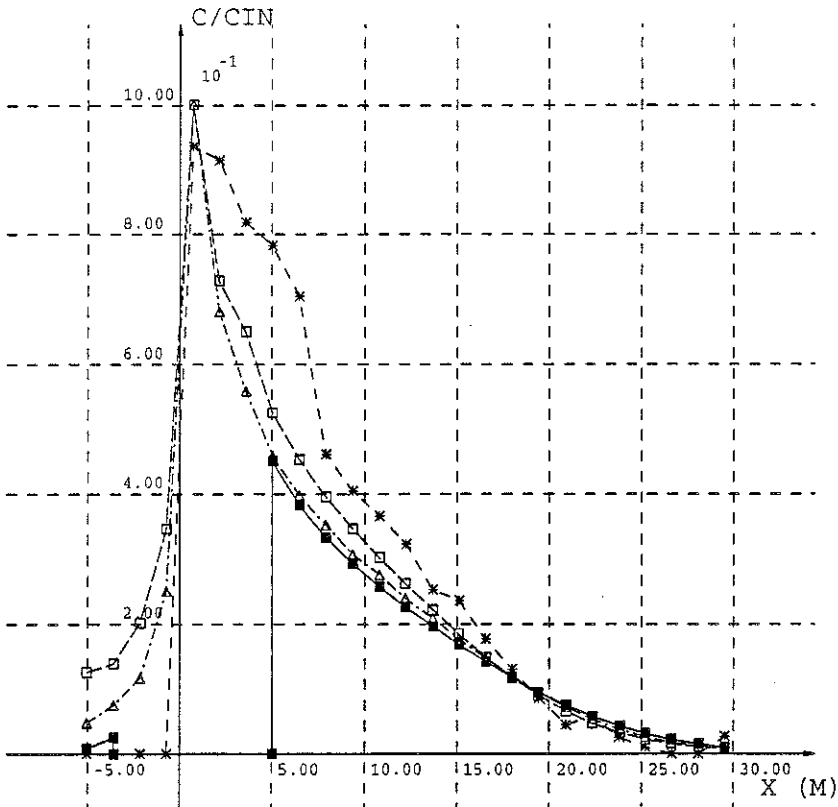


d) méthode Random Walk



figure II.35: Injection continue, ponctuelle, dans un champ convectif uniforme, $v = 10^{-5}$ m/s, $al = 1.5$, $ar = 1.0$ ($Pe = 0.95$).

COMPARAISON DE 4 METHODES DE RESOLUTION

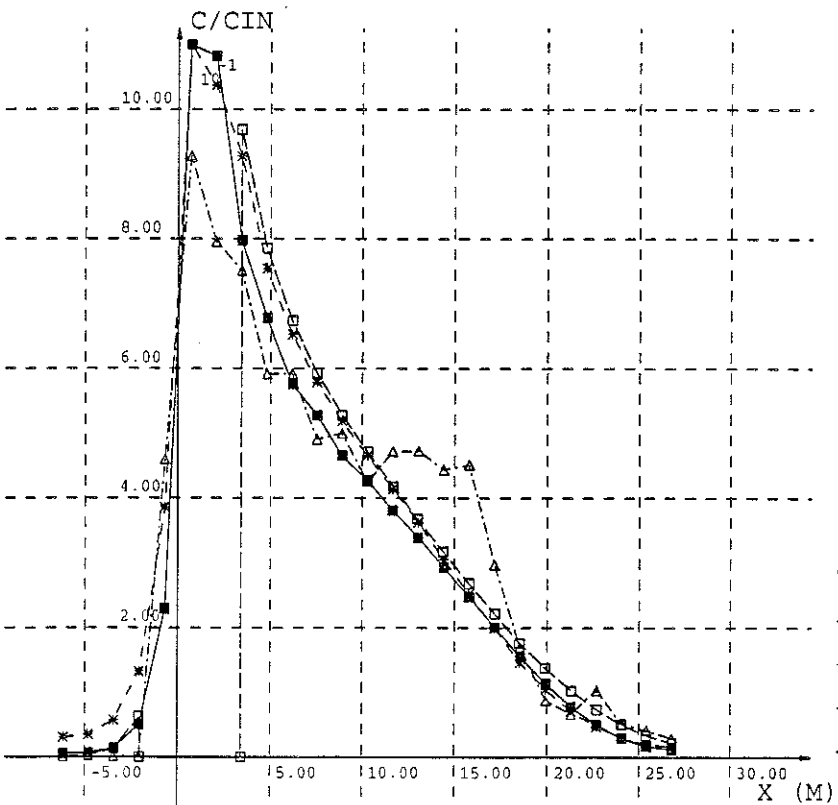


a) $a_L = 1.0,$
 $a_r = 0.1,$
 $(Pe = 0.95).$

COUPE VERT. T=20J.

—■— ANALYTIQUE
 -*- RANDOM WALK
 -△- EUL.PUR DT=1.0J
 -□- EUL.LAG DT=1.5J

COMPARAISON DE 4 METHODES DE RESOLUTION



b) $a_L = 1.5,$
 $a_r = 1.0,$
 $(Pe = 0.95).$

COUPE VERT. T=20J.

—■— EUL.PUR DT=1J.
 -*- EUL.LAG DT=1.5J
 -△- RANDOM WALK
 -□- ANALYTIQUE

figure II.36: Injection continue, ponctuelle, dans un champ convectif uniforme, $v = 10^{-5}$ m/s (coupes $c/c_{in}-x$).

3°) Test de convection inclinée par rapport au maillage.

Dans les 2 cas précédents, le maillage que nous avons choisi est parallèle à la direction convective. Il est clair que ce cas constitue une configuration privilégiée pour laquelle la pondération par décentrage "unidirectionnelle" (élément F.U.P.G.) ainsi que l'interpolation de la concentration lagrangienne (élément H.E.L.M.) agissent de façon optimale. Hughes (1982) envisage un problème test plus général qui est devenu un critère de référence pour les méthodes de décentrage. Ce test est représenté figure II.37.

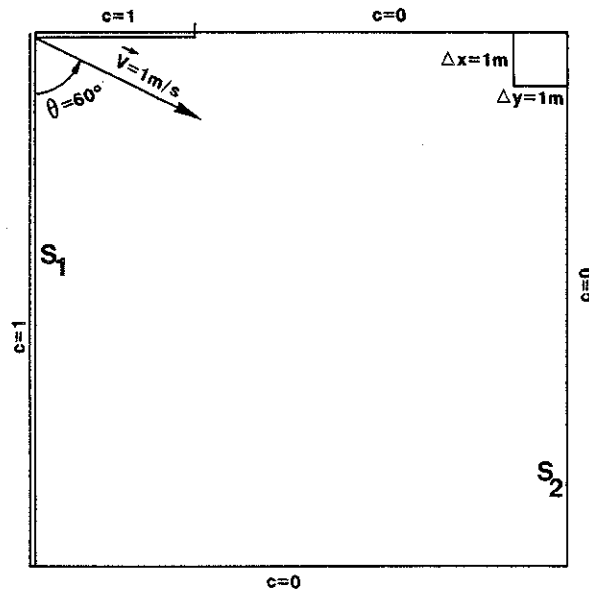
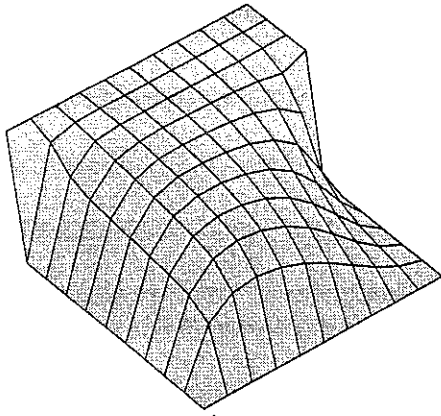


figure II.37: description du problème test de Hughes

Il s'agit de modéliser un aquifère carré (représenté par un maillage 10 x 10) dont la concentration est imposée sur le pourtour (unitaire sur S_1 , nulle sur S_2). La vitesse de convection qui y règne est uniforme (1 m/s), mais est orientée suivant un angle θ par rapport au maillage.

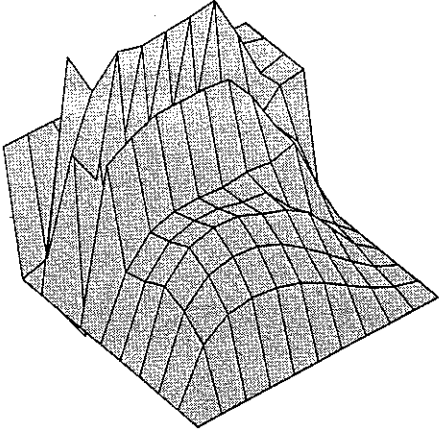
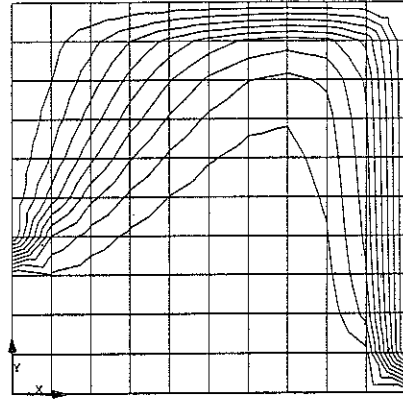
Envisageons d'abord le cas où les dispersions longitudinale et latérale valent 0.6, de telle sorte que le nombre de Peclet numérique Pe vaut 2.0. Nous choisirons un angle θ égal à 60° , valeur pour laquelle le problème engendre des instabilités numériques importantes (contrairement à $\theta = 45^\circ$ par exemple).

Les diagrammes repris en II.38 expriment les résultats sous forme d'une vue en perspective (x,y,c) avec sa projection bidimensionnelle (x,y) montrant les courbes d'égale concentration.



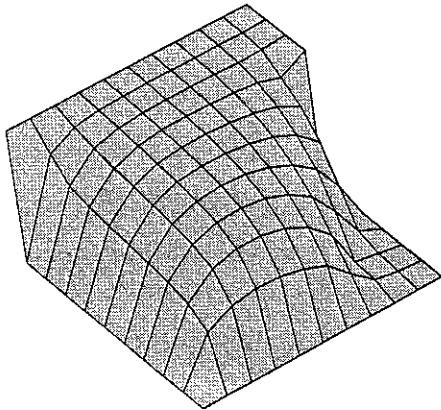
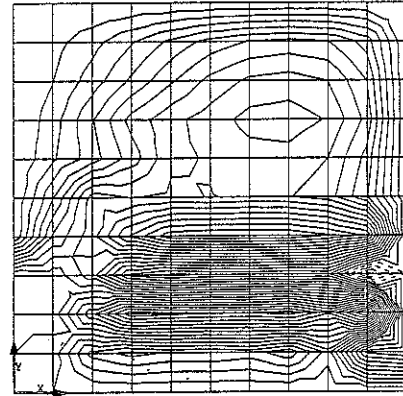
a)

méthode
F.U.P.G.
 $Cr = 0.87$



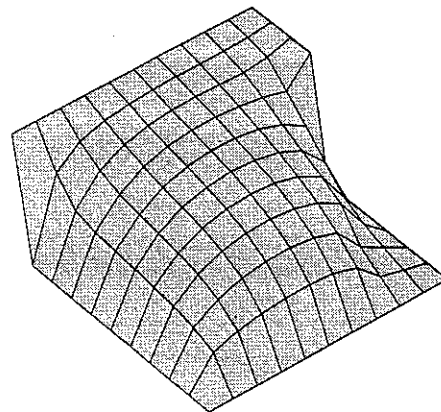
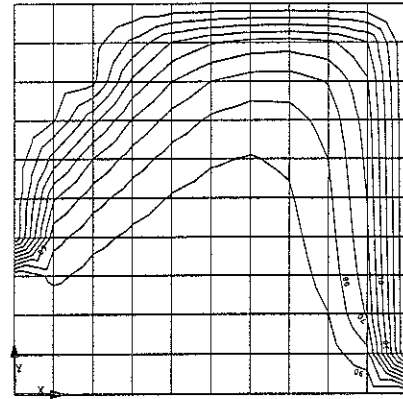
b)

méthode
F.U.P.G.
 $Cr = 1.75$



c)

méthode
H.E.L.M.
 $Cr = 1.75$
 $I_{zoom} = 3$



d)

méthode
H.E.L.M.
 $Cr = 8.7$
 $I_{zoom} = 3$

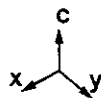
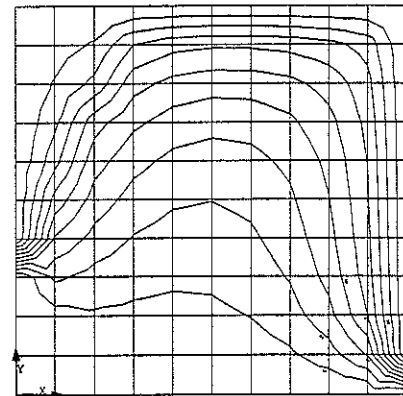


figure II.38: Problème de Hughes (convection inclinée),
 $Pe = 2$, $\theta = 60^\circ$.

Ces graphiques démontrent que, lorsque les éléments sont utilisés dans leur domaine d'applicabilité, ils produisent des solutions similaires (II.38a et II.38c). De nouveau, on constate que le choix d'un bon pas de temps est une condition essentielle pour l'obtention des résultats de qualité.

Avec la méthode F.U.P.G., l'augmentation du nombre de Courant au-delà de l'unité ($C_r = 1,75$ plutôt que 0.87) a pour effet de dégrader très rapidement la solution (II.38b).

Avec la méthode H.E.L.M., de tels nombres de Courant peuvent être utilisés pour autant qu'ils permettent une représentation correcte de la dispersion. Ce n'est pas le cas pour les résultats II.38d obtenus pour $C_r = 8.7$. Ceux-ci représentent un effet dispersif sous-estimé.

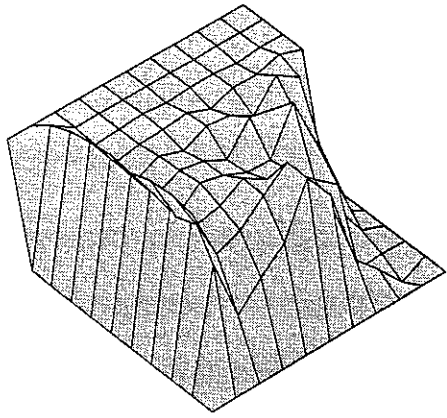
Envisageons maintenant le cas purement convectif (résultats figure II.39). La solution F.U.P.G. se dégrade très fort (II.39a): des oscillations persistent et un effet de bord apparaît.

La solution H.E.L.M. est meilleure mais est surdiffusive (II.39b). Introduire un zoom n'améliore pas les résultats puisque cette résolution va de pair avec l'apparition d'instabilités (II.39c). La solution exacte s'obtient en augmentant très fort le nombre de Courant, ce qui est possible puisque la diffusion n'intervient plus (II.39d).

4°) Injection continue, dans un champ convectif non uniforme.

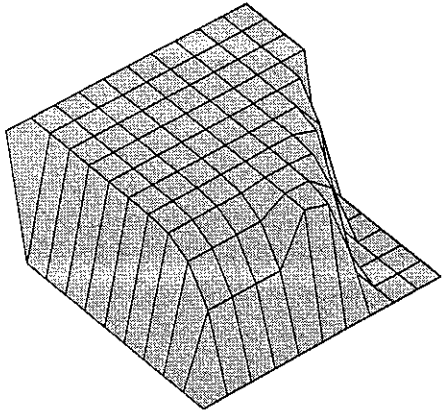
Pour envisager un test tout à fait général, il faudrait encore considérer une variation spatiale de la sollicitation convective.

Young (1984) propose un problème de ce type (figure II.40) dérivé de l'étude des écoulements polyphasiques. Il s'agit d'un champ de pompes et d'injections d'eau, ces dernières s'effectuant à une concentration unitaire. En raison de la symétrie du problème, il suffit de modéliser l'écoulement dans la région A. Le transport peut même être représenté sur une portion B de cette dernière.



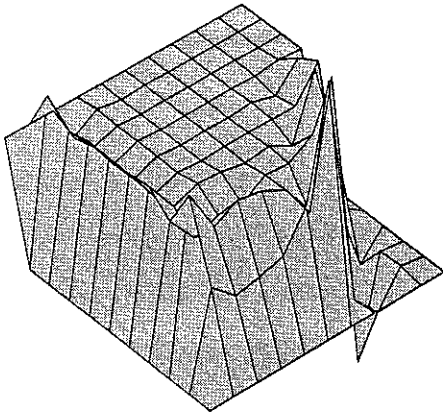
a)

méthode
F.U.P.G.
 $Cr = 0.87$



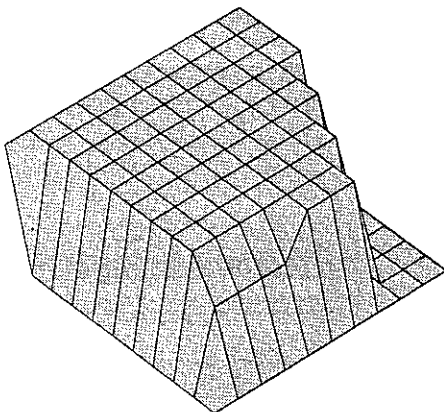
b)

méthode
H.E.L.M.
 $Cr = 1.75$
 $I_{zoom} = 0$



c)

méthode
H.E.L.M.
 $Cr = 1.75$
 $I_{zoom} = 3$



d)

méthode
H.E.L.M.
 $Cr = 8.7$
 $I_{zoom} = 0$

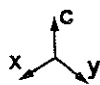


figure II.39: Problème de Hughes (convection inclinée),
 $Pe \rightarrow \infty$, $\theta = 60^\circ$.

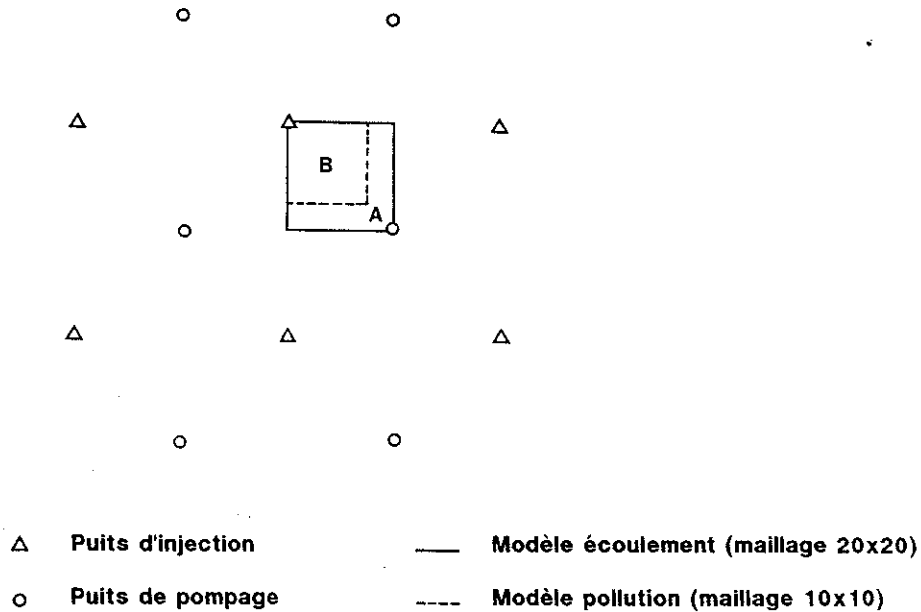


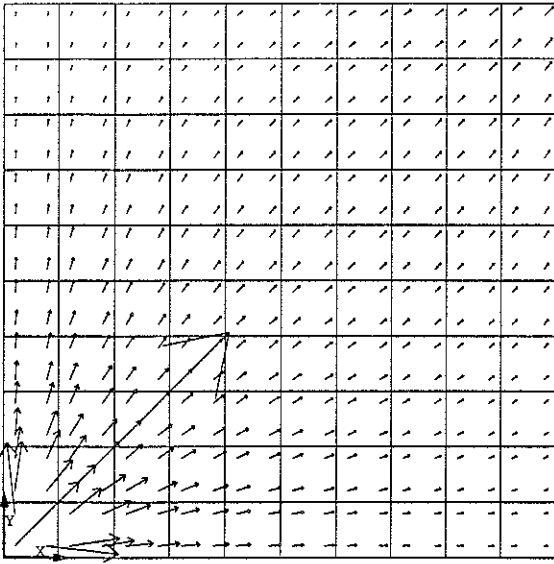
figure II.40: description du problème test de Young.

Nous utiliserons un maillage 20 x 20 pour l'écoulement, un maillage 10 x 10 pour le transport. Nous envisagerons une perméabilité de 10^{-3} m/s et un débit de $0,01 \text{ m}^3/\text{s}$ ($36 \text{ m}^3/\text{h}$) pour les injections et les pompages. La distance entre 2 pompages d'une même ligne sera de 400 m. Les vitesses de Darcy interpolées sont représentées figure II.41a; elles correspondent à un régime permanent d'écoulement. Les autres graphiques de cette figure décrivent les résultats d'une injection pendant 420000 s (4 j et 19 h).

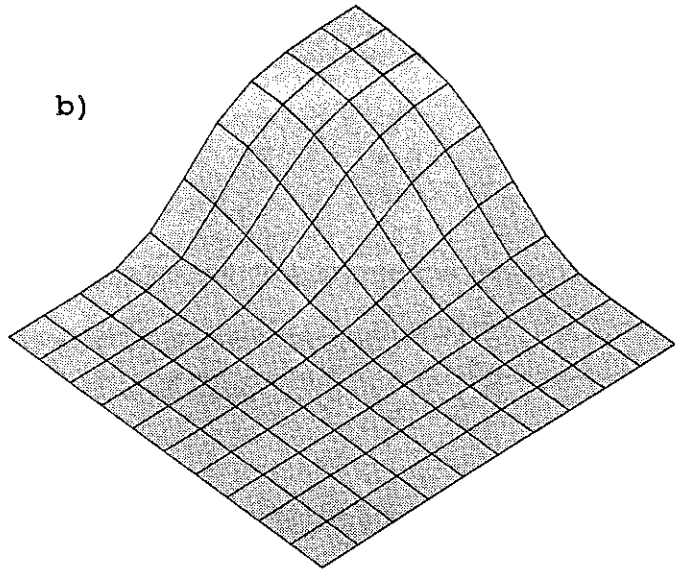
Dans le cas où une dispersivité de 10 m agit (longitudinalement et transversalement), des résultats fort semblables sont obtenus pour les 2 types d'élément (II.41b pour l'élément F.U.P.G., et II.41c pour l'élément H.E.L.M.) On remarquera également, en comparant II.41c et II.41d, que l'utilisation du zoom pour la méthode H.E.L.M. permet d'obtenir une solution meilleure.

Le cas d'une convection pure peut être également envisagé. Pour ces résultats, on observe bien le problème de "discontinuity capturing" lié aux méthodes F.U.P.G. (II.42a). On constate également que les éléments H.E.L.M. ne permettent pas de retrouver la solution exacte. Ceci est expliqué en considérant le champ d'écoulement (II.41a). Il présente, au voisinage du point d'injection, une oscillation due à une discrétisation un peu trop grossière. La solution II.42d, obtenue pour des nombres de Courant élevés, représente alors le transport exact dans cet écoulement localement incorrect.

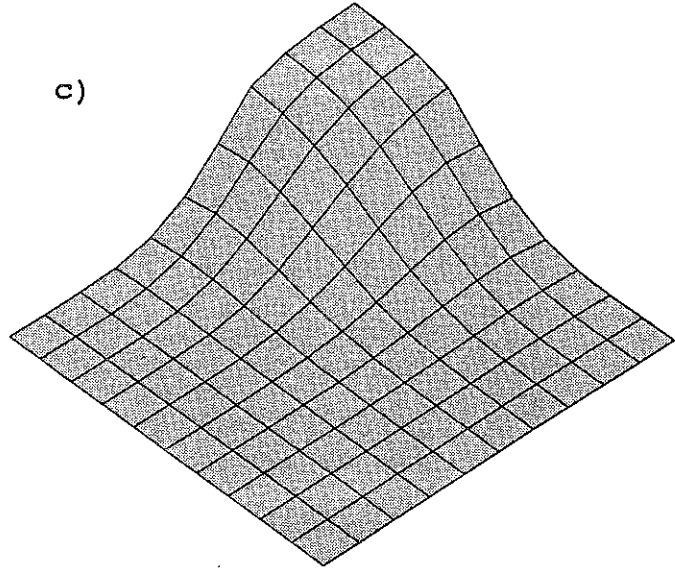
a)



b)



c)



d)

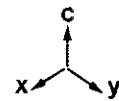
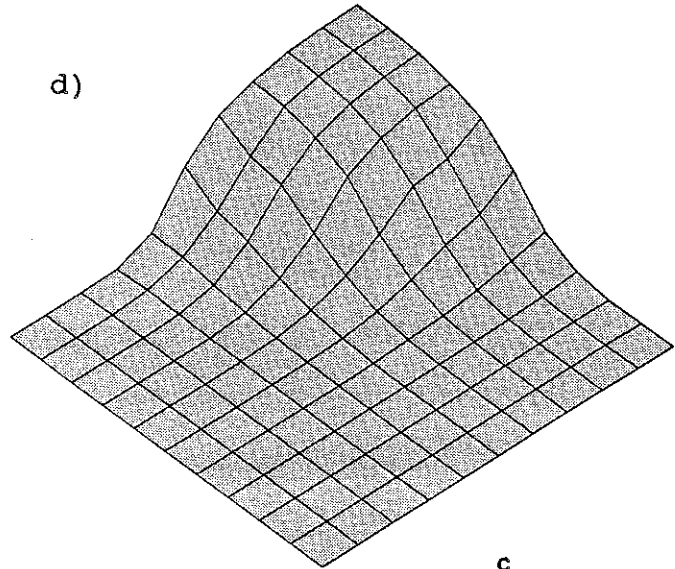
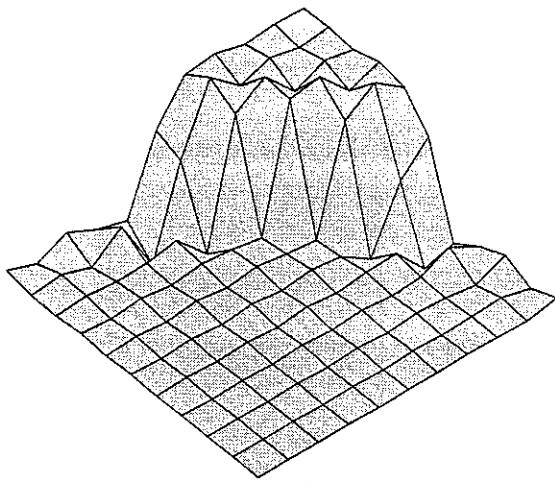
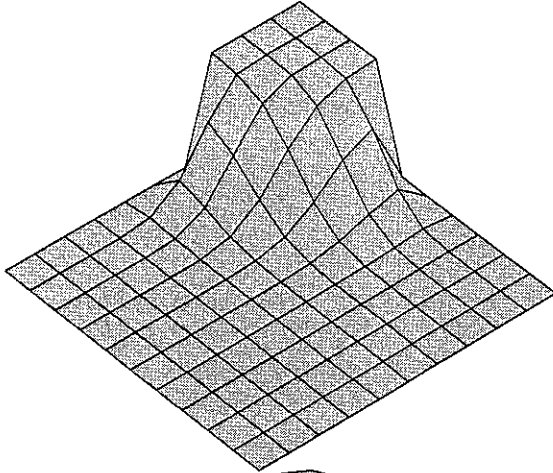


figure II.41: problème de Young (convection non uniforme), $P_{\max}=2$

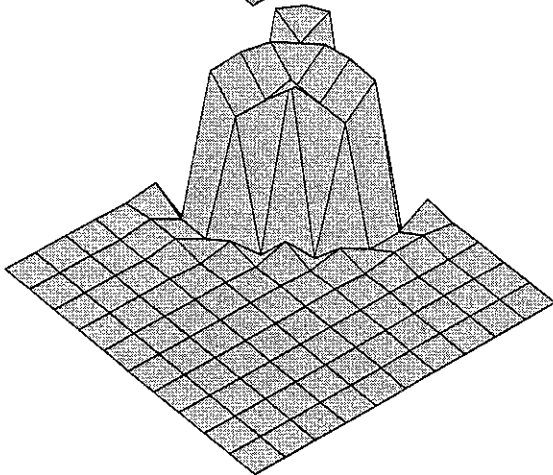
- a) vitesses de Darcy interpolées
- b) modèle F.U.P.G. $C_{\max} = 0.9$
- c) modèle H.E.L.M. $C_{\max} = 5.0$, $I_{\text{zoom}} = 0$
- d) modèle H.E.L.M. $C_{\max} = 5.0$, $I_{\text{zoom}} = 3$



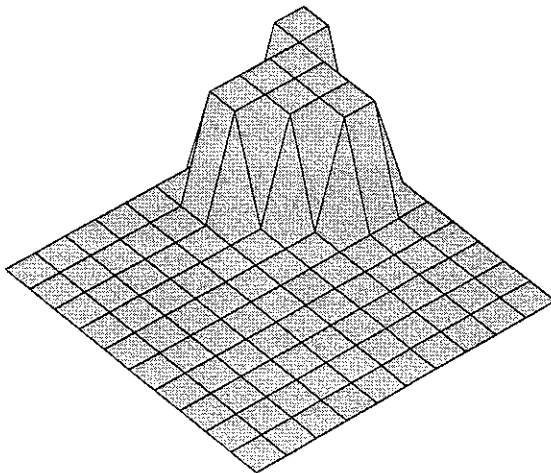
a) méthode F.U.P.G.
 $C_{\max} = 0.9$



b) méthode H.E.L.M.
 $C_{\max} = 5.0$
 $I_{\text{zoom}} = 0$



c) méthode H.E.L.M.
 $C_{\max} = 5.0$
 $I_{\text{zoom}} = 3$



d) méthode H.E.L.M.
 $C_{\max} = 40.0$
 $I_{\text{zoom}} = 0$

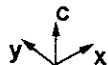


figure II.42: problème de Young (convection non uniforme),
 $Pe \rightarrow \infty$.

II.3.d.3) Comparaison des 2 éléments.

En conclusion des tests qui ont été réalisés, nous établissons ici une comparaison entre la méthode F.U.P.G. et la méthode H.E.L.M.

Ces 2 méthodes donnent de très bons résultats et sont parfaitement complémentaires lorsqu'elles sont utilisées pour résoudre des problèmes où la convection et la dispersion ont une influence significative sur les résultats.

Pour l'élément F.U.P.G. :

- l'intégration temporelle ($\theta = 1/2$, $\theta' = -1/2$) fait intervenir aussi bien les termes en fin de pas que ceux en début de pas par le biais d'une fonction de pondération temporelle $W^t(t)$ symétrique;
- le nombre de Courant doit être inférieur à l'unité, ce qui engendre, pour un maillage prédéterminé, une limitation du pas de temps par la sollicitation convective.

Pour l'élément H.E.L.M. :

- l'intégration temporelle ($\theta=1$) est totalement implicite par le biais d'une collocation au temps t_{n+1} ;
- le nombre de Courant doit être supérieur à l'unité et le pas de temps est alors limité par la composante diffusive du transport.

Lorsque les problèmes à résoudre sont dominés par la convection, les deux méthodes présentent de sérieux inconvénients. Elles apportent cependant une nette amélioration par rapport aux schémas classiques.

Pour l'élément F.U.P.G. :

- la restriction sur le nombre de Courant doit, dans certains cas, être plus sévère ($Cr < 0,8$) sous peine de rencontrer des instabilités* bien plus importantes que celles liées à un décentrage trop faible ou à une mauvaise représentation d'une discontinuité (discontinuity capturing).

Pour l'élément H.E.L.M. :

- l'obligation d'utiliser des nombres de Courant très élevés sous peine de rencontrer, soit des surdiffusions importantes ("peak-clipping" en anglais) ou des oscillations importantes lorsqu'un raffinement adaptatif du maillage est utilisé.

Ces deux derniers points peuvent être illustrés par un exemple supplémentaire: le test de convection pure d'un pulse bidimensionnel, dans une direction oblique de 30° par rapport au maillage (les résultats de ce test sont repris figure II.43).

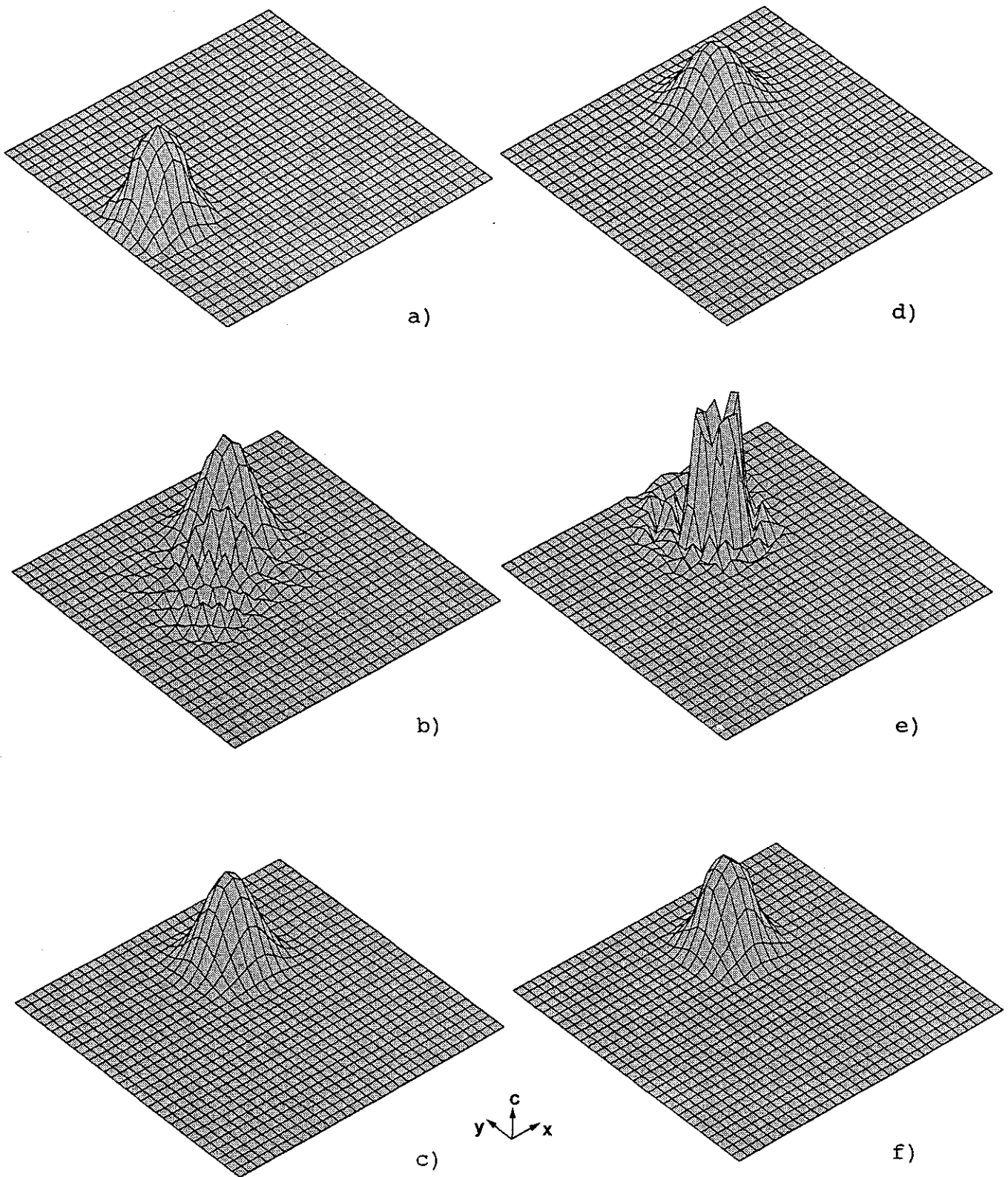


figure II.43: convection d'un pulse bidimensionnel dans un champ convectif uniforme incliné par rapport au maillage.

- a) état initial
- b) méthode F.U.P.G. $C_r = 0.86$
- c) méthode F.U.P.G. $C_r = 0.43$
- d) méthode H.E.L.M. $C_r = 1.73$, $I_{zoom} = 0$
- e) méthode H.E.L.M. $C_r = 1.73$, $I_{zoom} = 3$
- f) méthode H.E.L.M. $C_r = 17.3$, $I_{zoom} = 0$

Signalons enfin que, lorsque nous désirons envisager un régime permanent de transport (ceci est rarement le cas en pratique), seule la méthode F.U.P.G. peut être utilisée puisque la notion de "particle tracking" perd son sens. Dans ce cas, elle dégénère en un schéma S.U.P.G. simple et on choisit $\theta=1$ et $\theta'=0$ pour obtenir une solution finale indépendante d'un état initial qui pourrait être instable en regard d'une équation d'équilibre non transitoire.

II.3.d.4) Influence de la distorsion du maillage.

Lorsque nous avons développé l'élément F.U.P.G., les dérivées spatiales des fonctions de décentrage $\Delta W_{11}(x)$ et $\Delta W_{12}(x)$ ont été supposées nulles.

En fait, lorsque l'élément est distordu, il n'en est rien.

$$\begin{aligned} \text{On a : } \Delta W_{j1}^x(\vec{x}) &= \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \left(\frac{v_x}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{v_y}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial x} &= \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \left(\frac{v_x}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial^2 N_j^x(\vec{x})}{\partial x^2} + \frac{v_y}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial^2 N_j^x(\vec{x})}{\partial x \partial y} \right) \\ \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial y} &= \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \left(\frac{v_x}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial^2 N_j^x(\vec{x})}{\partial y \partial x} + \frac{v_y}{|\vec{v}|} \cdot \frac{\partial^2 N_j^x(\vec{x})}{\partial y^2} \right) \quad (\text{II.86}) \end{aligned}$$

Or, d'après la règle de dérivation des fonctions composées :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + 2 \cdot \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi \partial \eta} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \eta^2} \cdot \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \\ \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + 2 \cdot \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi \partial \eta} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \eta^2} \cdot \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \\ \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \xi \partial \eta} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \\ &\quad + \frac{\partial^2 N_j^x}{\partial \eta^2} \cdot \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \quad (\text{II.87a}) \end{aligned}$$

$$\text{Rappelons que : } \underline{J}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (\text{II.87b})$$

Reprenons un élément 4 noeuds tel que :

$$\begin{aligned} N_1^x(\xi, \eta) &= (1-\xi)/2 \cdot (1-\eta)/2 \\ N_2^x(\xi, \eta) &= (1-\xi)/2 \cdot (1+\eta)/2 \\ N_3^x(\xi, \eta) &= (1+\xi)/2 \cdot (1+\eta)/2 \\ N_4^x(\xi, \eta) &= (1+\xi)/2 \cdot (1-\eta)/2 \quad (\text{II.87c}) \end{aligned}$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta W_{j_1}^x(\vec{X})}{\partial x} &= \pm \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \left(\frac{v_x}{|\vec{V}|} \cdot \frac{J_{i1}^1 \cdot J_{i2}^1}{2} + \frac{v_y}{|\vec{V}|} \cdot \frac{J_{i1}^1 \cdot J_{i2}^2 + J_{i2}^1 \cdot J_{i1}^2}{4} \right) \\ \frac{\partial \Delta W_{j_1}^x(\vec{X})}{\partial y} &= \pm \alpha \cdot \frac{\Delta l}{2} \cdot \left(\frac{v_x}{|\vec{V}|} \cdot \frac{J_{i1}^1 \cdot J_{i2}^2 + J_{i2}^1 \cdot J_{i1}^2}{4} + \frac{v_y}{|\vec{V}|} \cdot \frac{J_{i2}^1 \cdot J_{i2}^2}{2} \right) \\ \frac{\partial \Delta W_{j_2}^x(\vec{X})}{\partial x} &= \frac{\beta}{\alpha} \cdot \frac{\partial \Delta W_{j_1}^x(\vec{X})}{\partial x} && \text{avec le signe - pour } i = 2 \text{ ou } 4 \\ &&& \text{le signe + pour } i = 1 \text{ ou } 3 \\ \frac{\partial \Delta W_{j_2}^x(\vec{X})}{\partial y} &= \frac{\beta}{\alpha} \cdot \frac{\partial \Delta W_{j_1}^x(\vec{X})}{\partial y} && \text{(II.88)} \end{aligned}$$

Ces résultats doivent être introduits dans l'équation II.69 p.108 pour obtenir une pondération F.U.P.G. totalement consistante.

Pour visualiser clairement l'amélioration qu'engendre cette opération, nous allons résoudre le problème de Hughes en utilisant un maillage distordu de même densité que le maillage carré précédemment envisagé (96 éléments distordus contre 100 éléments carrés). Les graphiques II.44 expriment la comparaison dans le cas où la dispersion agit ($Pe=2$).

On voit clairement que la solution F.U.P.G. obtenue en considérant les dérivées spatiales du second ordre des N_i^x (II.44c) présente une nette amélioration par rapport au cas où elles sont négligées (II.44b).

Des résultats similaires sont obtenus par la méthode H.E.L.M. (II.44d) sans modification du schéma puisque celui-ci ne comporte pas de dérivées spatiales secondes des N_i^x .

Remarquons également que, par comparaison au maillage carré (II.44a), les résultats en maillage distordus sont moins précis. En pratique, il convient donc, dans la mesure du possible, d'éviter des distorsions de maillage trop importantes.

II.3.e) Généralisation des éléments pour une sollicitation convective transitoire.

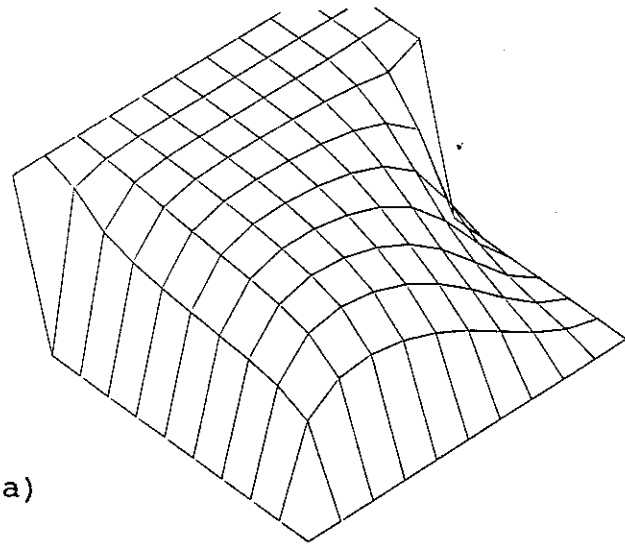
II.3.e.1) Problème découplé.

Envisageons une équation de bilan modifiée par rapport à (II.64a) p.105.

$$A(c) = Rd \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + (A + \text{div } \vec{V}) \cdot c + \vec{V} \cdot \text{grad } c - \text{div} (\underline{Dh} \cdot \text{grad } c) = 0 \quad \text{(II.89a)}$$

associée cette fois une équation de diffusivité transitoire

$$K \cdot \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad v_x = - \frac{K}{n_e} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \quad v_y = - \frac{K}{n_e} \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \quad \text{(II.89b)}$$



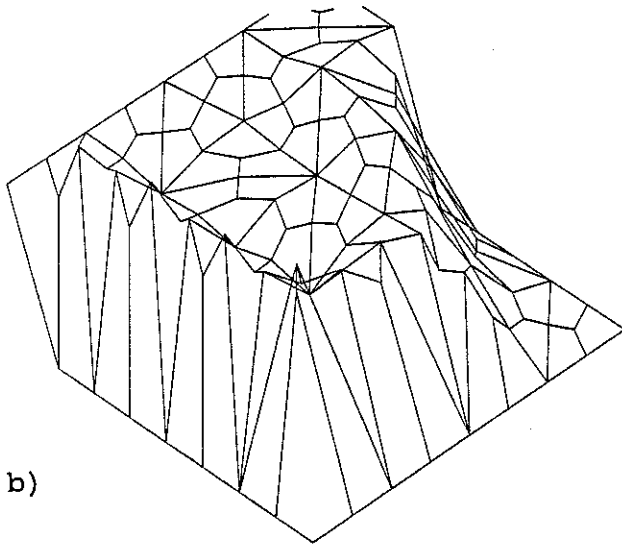
a)

a) methode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$
 maillage carré

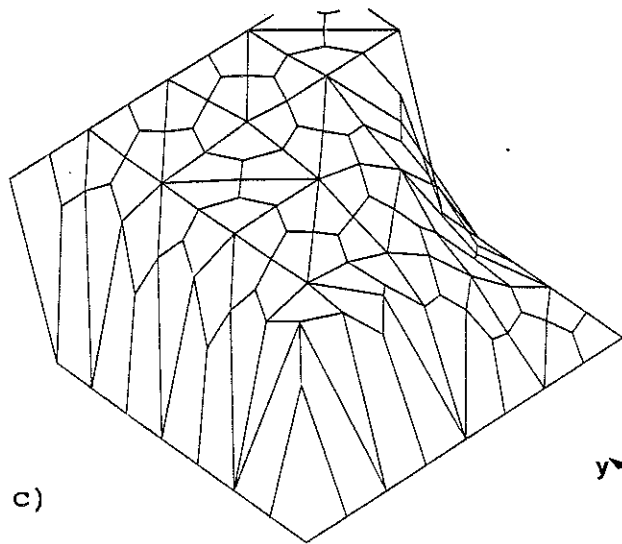
b) methode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$
 maillage distordu
 dérivées secondes
 non incluses

c) methode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$
 maillage distordu
 dérivées secondes
 incluses

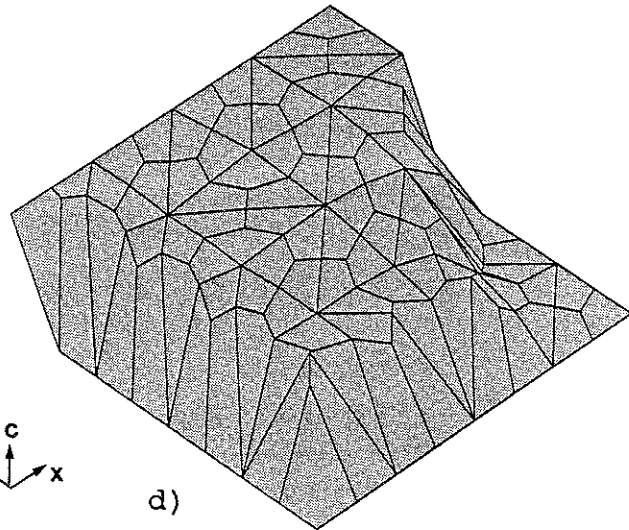
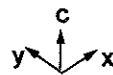
d) méthodes H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$
 $I_{zoom} = 3$
 maillage distordu



b)



c)



d)

figure II.44: Problème de Hughes (convection inclinée),
 $Pe = 2$, $\theta = 60^\circ$, influence de la
 distorsion du maillage.

Il est clair que $v_x, v_y, Dh_{xx}, Dh_{xy}, Dh_{yy}$ deviennent alors des fonctions du temps. Les éléments doivent être généralisés pour en tenir compte. Comme (II.89b) est résolue par la méthode des éléments finis avec une pondération de Bubnov-Galerkin, h peut être supposé linéaire dans le temps sur l'intervalle $[t_n, t_{n+1}]$. En conséquence, nous poserons :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \vec{v} &= -S_s \cdot (h^{n+1} - h^n) / \Delta t = -S_s \cdot h^{n \rightarrow n+1} = \text{cte sur } [t^n, t^{n+1}] \\
 v_x &= N_1^t(t) \cdot v_x^n + N_2^t(t) \cdot v_x^{n+1} \\
 v_y &= N_1^t(t) \cdot v_y^n + N_2^t(t) \cdot v_y^{n+1} \\
 Dh_{xx} &= N_1^t(t) \cdot Dh_{xx}^n + N_2^t(t) \cdot Dh_{xx}^{n+1} \\
 Dh_{xy} &= N_1^t(t) \cdot Dh_{xy}^n + N_2^t(t) \cdot Dh_{xy}^{n+1} \\
 Dh_{yy} &= N_1^t(t) \cdot Dh_{yy}^n + N_2^t(t) \cdot Dh_{yy}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{II.90}$$

En utilisant ces hypothèses pour évaluer les intégrations élémentaires et en conduisant les calculs de la même manière qu'aux paragraphes II.3.b) et II.3.c), il vient :

- pour l'élément F.U.P.G. :

$$\begin{aligned}
 t_{vei} &= \int_{\Delta V} \operatorname{Rd} \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_j^x(\vec{x})] \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} [(A - \operatorname{div} \vec{v}) \cdot 1/2 \cdot (c^n + c^{n+1})] \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_j^x(\vec{x})] \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} [(A - \operatorname{div} \vec{v}) \cdot \theta' \cdot (c^n - c^{n+1})] \cdot \Delta W_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} \{ [(1/2 - \beta) \cdot \vec{v}^n + \beta \cdot \vec{v}^{n+1}] \cdot \operatorname{grad} c^n + [\beta \cdot \vec{v}^n + (1/2 - \beta) \cdot \vec{v}^{n+1}] \cdot \operatorname{grad} c^{n+1} \} \\
 &\quad \cdot [N_j^x(\vec{x}) + \Delta W_j^x(\vec{x})] \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} \{ [(-\theta' - \beta') \cdot \vec{v}^n + \beta' \cdot \vec{v}^{n+1}] \cdot \operatorname{grad} c^n + [\beta' \cdot \vec{v}^n + (\theta' - \beta') \cdot \vec{v}^{n+1}] \cdot \operatorname{grad} c^{n+1} \} \\
 &\quad \cdot \Delta W_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} \left\{ [(1/2 - \beta) \cdot Dh_{xx}^n + \beta \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(1/2 - \beta) \cdot Dh_{xy}^n + \beta \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
 &\quad \left. + [\beta \cdot Dh_{xx}^n + (1/2 - \beta) \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta \cdot Dh_{xy}^n + (1/2 - \beta) \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
 &\quad \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} + \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial x} \right] \cdot dV \\
 &+ \int_{\Delta V} \left\{ [(-\theta' - \beta') \cdot Dh_{xx}^n + \beta' \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(-\theta' - \beta') \cdot Dh_{xy}^n + \beta' \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
 &\quad \left. + [\beta' \cdot Dh_{xx}^n + (\theta' - \beta') \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta' \cdot Dh_{xy}^n + (\theta' - \beta') \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
 &\quad \cdot \frac{\partial \Delta W_j^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot dV
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\Delta V} \left\{ [(1/2-\beta) \cdot Dh_{xy}^n + \beta \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(1/2-\beta) \cdot Dh_{yy}^n + \beta \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
& \quad \left. + [\beta \cdot Dh_{xy}^n + (1/2-\beta) \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta \cdot Dh_{yy}^n + (1/2-\beta) \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
& \quad \cdot \left[\frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} + \frac{\partial \Delta W_{j1}^x(\vec{x})}{\partial y} \right] \cdot dV \\
& + \int_{\Delta V} \left\{ [(-\theta' - \beta') \cdot Dh_{xy}^n + \beta' \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(-\theta' - \beta') \cdot Dh_{yy}^n + \beta' \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
& \quad \left. + [\beta' \cdot Dh_{xy}^n + (\theta' - \beta') \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta' \cdot Dh_{yy}^n + (\theta' - \beta') \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
& \quad \cdot \frac{\partial \Delta W_{j2}^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dV \\
& \quad \quad \quad j=1,4 \\
& \quad \quad \quad (II.91)
\end{aligned}$$

avec $\theta = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt = \frac{1}{2}$
 $\theta' = \int_{\Delta t} N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W_N^t(t)}{\partial t} \cdot dt$
 $\beta = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot N_2^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt$
 $\beta' = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot N_2^t(t) \cdot \frac{\partial W_N^t(t)}{\partial t} \cdot dt$

4 paramètres d'intégration temporelle correspondant à une fonction $W_N^t(t)$ normée et symétrique par rapport à $\Delta t/2$

Lorsque $W^t(t) = 4 \cdot N_1^t(t) \cdot N_2^t(t)$, on a: $\theta=1/2$, $\theta' = -1/2$, $\beta=1/5$, $\beta'=0$. On obtient ainsi le schéma utilisé dans le logiciel. Ce dernier comporte des termes croisés ($Dh^n \cdot c^{n+1}$ par exemple) qui peuvent avoir toute leur importance lorsqu'on évalue un équilibre pondéré sur le pas de temps.

- pour l'élément H.E.L.M.:

$$\begin{aligned}
t_{vei} & = \int_{\Delta V} \dot{c}^{*n \rightarrow n+1} \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\
& + \int_{\Delta V} (R_d - 1) \cdot \dot{c}^{n \rightarrow n+1} \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\
& + \int_{\Delta V} [(A - \text{div } \vec{v}) \cdot [(1-\theta) \cdot c^n + \theta \cdot c^{n+1}] \cdot N_j^x(\vec{x}) \cdot dV \\
& + \int_{\Delta V} \left\{ [(1-\theta-\beta) \cdot Dh_{xx}^n + \beta \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(1-\theta-\beta) \cdot Dh_{xy}^n + \beta \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
& \quad \left. + [\beta \cdot Dh_{xx}^n + (\theta-\beta) \cdot Dh_{xx}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta \cdot Dh_{xy}^n + (\theta-\beta) \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
& \quad \quad \quad \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial x} \cdot dV
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\Delta V} \left\{ [(1-\theta-\beta) \cdot Dh_{xy}^n + \beta \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial x} + [(1-\theta-\beta) \cdot Dh_{yy}^n + \beta \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^n}{\partial y} \right. \\
& \quad \left. + [\beta \cdot Dh_{xy}^n + (\theta-\beta) \cdot Dh_{xy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial x} + [\beta \cdot Dh_{yy}^n + (\theta-\beta) \cdot Dh_{yy}^{n+1}] \cdot \frac{\partial c^{n+1}}{\partial y} \right\} \\
& \quad \cdot \frac{\partial N_j^x(\vec{x})}{\partial y} \cdot dv \\
& \quad j=1,4 \\
& \quad (II.92)
\end{aligned}$$

avec $\theta = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt = \frac{1}{2}$ 2 paramètres d'intégration temporelle correspondant à une fonction $W_N^t(t)$ normée

$\beta = \int_{\Delta t} N_1^t(t) \cdot N_2^t(t) \cdot W_N^t(t) \cdot dt$

Lorsque $W_N^t(t)$ est une collocation implicite, $\theta = 1$ et $\beta = 0$; ces paramètres correspondent au schéma effectivement introduit. Dans ce cas, les termes croisés n'apparaissent pas. Il y correspond une intégration temporelle implicite classique ($\theta = 1$).

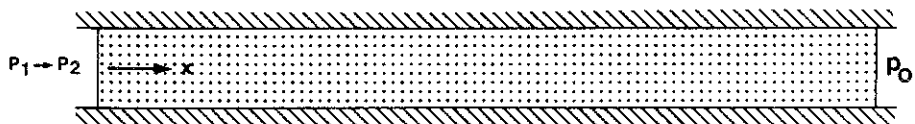
Ces généralisations ont été testées pour le problème unidimensionnel décrit figure II.45a. Il s'agit de la convection pure d'un pulse, dans un drain poreux, lorsque ce dernier est progressivement mis en pression. L'évolution de la pression d'eau est décrite figure II.45b. La propagation du pulse est représentée en II.45c pour le modèle F.U.P.G. ($Cr < 1$), en II.45d pour le modèle H.E.L.M. ($Cr > 1$ sans zoom).

Ce problème n'est pas facile à représenter et constitue un excellent test. En effet, S_s étant non nul, l'eau peut être emmagasinée dans le début du drain et, par conséquent, le polluant aussi. Il en résulte que la distribution de concentration, initialement en forme de cloche, a tendance à évoluer vers une fonction de Dirac, difficile à représenter. Ce phénomène est reproduit par les 2 modèles, avec toutefois les imperfections liées à la résolution des problèmes de convection pure, à savoir:

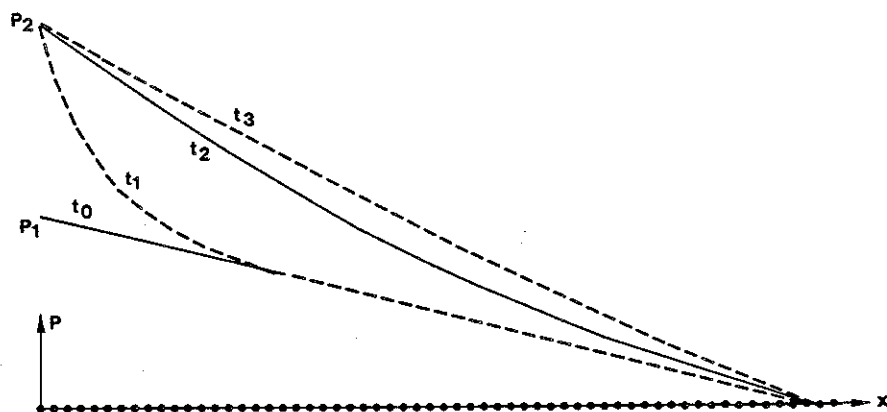
- la persistance d'oscillations pour le modèle F.U.P.G.,
- une légère surdiffusion pour le modèle H.E.L.M. sans zoom.

II.3.e.2) Problème couplé.

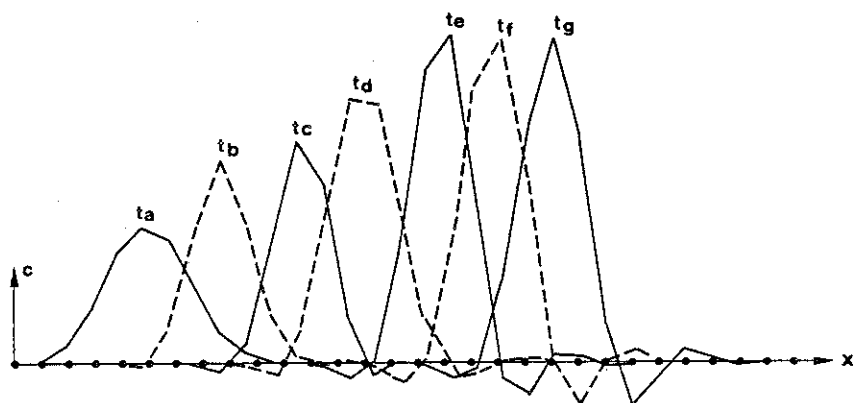
Lorsque la substance n'est pas suffisamment diluée, l'écoulement et le transport sont couplés. Il convient alors de résoudre simultanément les 2 bilans. Dans le cadre de son travail de fin d'études, Munhoven (1991) a utilisé l'élément F.U.P.G. pour effectuer une résolution du système (I.72) p.58. Il a testé ce modèle dans un cas simple: le problème de Henry (1964) qui peut être assimilé au problème d'invasion d'un aquifère par de l'eau salée. Il obtient des résultats tout à fait similaires à ceux obtenus dans la littérature (Frind, Galeati,...). Pour plus de détails sur ces couplages, le lecteur s'en référera à cet excellent travail. Signalons cependant que, dans ce modèle, la gestion des pas de temps est souple et permet de prendre en compte les stratégies temporelles très différentes pour résoudre l'écoulement et le transport.



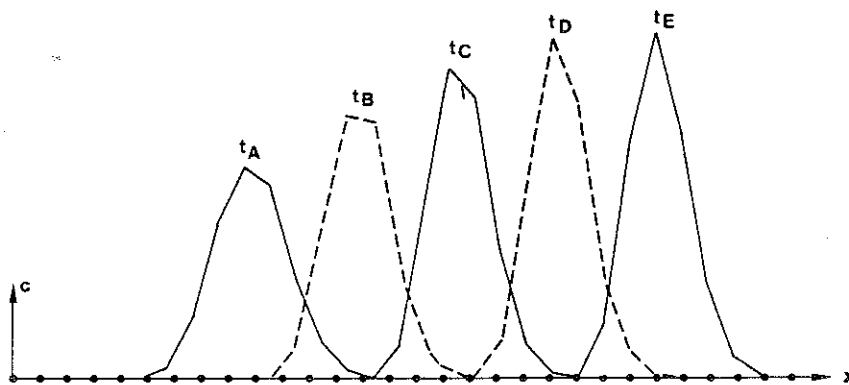
a) description du problème



b) profils de pression successifs



c) évolution du pulse (méthode F.U.P.G.)



d) évolution du pulse (méthode H.E.L.M.)

figure II.45: propagation d'un pulse dans un champ convectif transitoire (drain poreux mis en pression), modèle avec 30 éléments (quadratiques en écoulement, linéaires en transport), $P_0 \rightarrow \infty$.

II.3.f) Introduction de l'effet d'eau immobile dans les éléments créés.

II.3.f.1) Développements théoriques.

Lorsqu'on désire introduire un effet d'eau immobile, il convient de considérer 2 équations de bilan pour la substance miscible. Soit le système suivant:

$$R_{dm} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + (A_m + \text{div } \vec{V}) \cdot C_m + \vec{V} \cdot \text{grad } C_m - \text{div} (D_h \cdot \text{grad } C_m) - \alpha_m \cdot C_{im} = 0 \quad (\text{II.93a})$$

$$R_{dim} \cdot \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + A_{im} \cdot C_{im} - \alpha_{im} \cdot C_m = 0 \quad (\text{II.93b})$$

En discrétisant C_m dans le temps, on peut réécrire II.93b comme suit :

$$R_{dim} \cdot \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + A_{im} \cdot C_{im} = \alpha_{im} \cdot [N_1^t(t') \cdot C_m^n + N_2^t(t') \cdot C_m^{n+1}] \quad (\text{II.94})$$

Cette relation est une équation différentielle linéaire à une seule variable (t), pour la fonction inconnue $C_{im}(t)$ et elle peut être résolue analytiquement. Rappelons que $N_1^t(t') = 1 - t'/\Delta t$, $N_2^t(t') = t'/\Delta t$ avec $t' = t - t_n$. Sachant que l'eau immobile se trouve initialement à la concentration C_{im}^n , on obtient:

$$C_{im}(t') = C_{im}^n \cdot \exp(-A_{im}/R_{dim} \cdot t') + \dot{C}_m^{n \rightarrow n+1} \cdot \alpha_{im}/A_{im} \cdot t' + \alpha_{im}/A_{im} \cdot (C_m^n - R_{dim}/A_{im} \cdot \dot{C}_m^{n \rightarrow n+1}) \cdot [1 - \exp(-A_{im}/R_{dim} \cdot t')]$$

$$\text{avec } \dot{C}_m^{n \rightarrow n+1} = (C_m^{n+1} - C_m^n)/\Delta t \quad (\text{II.95})$$

Cette solution est valable sur l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$. En introduisant (II.95) dans (II.93a), on obtient un bilan de masse unique qui peut être pondéré comme précédemment. Finalement, après des développements analogues, on obtient les expressions modifiées:

- Pour l'élément F.U.P.G.:

$$t_{vei} = t_{vei_N}(C_m)_{F.U.P.G.} + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \alpha_{im}/A_{im} \cdot [(1-\delta) \cdot R_{dim}/A_{im} - \Delta t/2] \cdot \dot{C}_m^{n \rightarrow n+1} \cdot [N_j^x(\vec{X}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{X})] \cdot dV + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \alpha_{im}/A_{im} \cdot [(-\delta') \cdot R_{dim}/A_{im} - \theta' \cdot \Delta t] \cdot \dot{C}_m^{n \rightarrow n+1} \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{X}) \cdot dV + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \alpha_{im}/A_{im} \cdot (1-\delta) \cdot C_m^n \cdot [N_j^x(\vec{X}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{X})] \cdot dV + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \alpha_{im}/A_{im} \cdot (-\delta') \cdot C_m^n \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{X}) \cdot dV + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \delta \cdot C_{im}^n \cdot [N_j^x(\vec{X}) + \Delta W_{j1}^x(\vec{X})] \cdot dV + \int_{\Delta V} \alpha_m \cdot \delta' \cdot C_{im}^n \cdot \Delta W_{j2}^x(\vec{X}) \cdot dV \quad j=1,4 \quad (\text{II.96})$$

où $t_{vei_N}(C_m)_{F.U.P.G.}$ désigne le développement F.U.P.G. normal (II.91) p.xxx avec des concentrations et coefficients (A et R_d) affectés de l'indice m relatif à l'eau en mouvement.

On a également :

$$\delta = \int_0^{\Delta t} \exp(-A_{im}/R_{dim}.t') . W_N^t(t') . dt' \quad (II.97a)$$

$$\delta' = \int_0^{\Delta t} \exp(-A_{im}/R_{dim}.t') . \frac{\partial W_N^t(t')}{\partial t'} . \frac{\Delta t}{2} . dt' \quad (II.97b)$$

2 nouveaux paramètres d'intégration temporelle portant à 6 le nombre de constantes définissant le schéma $(\theta, \theta', \beta, \beta', \delta, \delta')$.

Lorsque $W^t(t) = 4.N_1^t(t).N_2^t(t)$, on a :

$$\delta = 6/(a.\Delta t)^3 . [(a.\Delta t - 2) + (a.\Delta t - 2).exp(-a.\Delta t)] \quad (II.98a)$$

$$\delta' = a.\Delta t / 2.\delta \quad (II.98b)$$

avec $a = A_{im}/R_{dim}$

Signalons dès maintenant que, si la méthode F.U.P.G. donnait, jusqu'à présent, un avantage minime par rapport à une méthode S.U.P.G. avec intégration temporelle symétrique, l'amélioration engendrée pour l'effet d'eau immobile est énorme. Les méthodes S.U.P.G. simples se sont en effet révélées tout à fait incohérentes pour ce type d'application.

- Pour l'élément H.E.L.M. :

$$\begin{aligned} t_{vei} &= t_{vei_N}(C_m)_{H.E.L.M.} \\ &+ \int_{\Delta V} \alpha_m . \alpha_{im} / A_{im} . [(1-\delta) . R_{dim} / A_{im} - \theta . \Delta t] . \dot{c}_m^{n \rightarrow n+1} . N_j^x(\vec{x}) . dV \\ &+ \int_{\Delta V} \alpha_m . \alpha_{im} / A_{im} . (1-\delta) . c_m^n . N_j^x(\vec{x}) . dV \\ &+ \int_{\Delta V} \alpha_m . \delta . c_{im}^n . N_j^x(\vec{x}) . dV \end{aligned} \quad \begin{matrix} j=1,4 \\ (II.99) \end{matrix}$$

avec $\delta = \int_0^{\Delta t} \exp(-A_{im}/R_{dim}.t') . W_N^t(t') . dt'$
 = troisième paramètre d'intégration temporelle

$t_{vei_N}(C_m)_{H.E.L.M.}$ étant le développement H.E.L.M. normal (II.92) pour l'eau mobile m

lorsque $W_N^t(t)$ est une collocation implicite, $\delta = \exp(-a.\Delta t)$.

Remarquons que les nouveaux paramètres que nous venons de définir (δ, δ') ont un statut un peu particulier puisqu'ils dépendent des coefficients de transfert et donc de la nature physique du problème. Ceci n'est pas plus gênant que d'introduire des fonctions de pondération liées au nombre de Péclet numérique.

Dans ces schémas, l'actualisation de l'eau immobile se fait naturellement par la relation (II.95) envisagée pour $t' = \Delta t$ et pour des positions spatiales correspondant aux points d'intégration de Gauss. A cet égard, c_{im} est considérée comme une variable d'état.

Signalons enfin que, lorsque A_{im} ou R_{dim} sont nuls, cette équation est dégénérée. Il convient donc de traiter séparément 3 cas particuliers dont la formulation est triviale et beaucoup plus concise.

II.3.f.2) Tests unidimensionnels avec eau immobile.

Reprenons les tests de convection-dispersion unidimensionnels envisagés dans la section II.3.f.1. Gardons le nombre de Péclet égal à 2 mais envisageons un effet d'eau immobile sans dégradation défini par $\alpha_{im} = \alpha_m = A_{im} = A_m = 0.1 \text{ s}^{-1}$ (10% de v). On constate, d'après les figures II.46 et II.47, que cette composante de transfert est loin d'être négligeable.

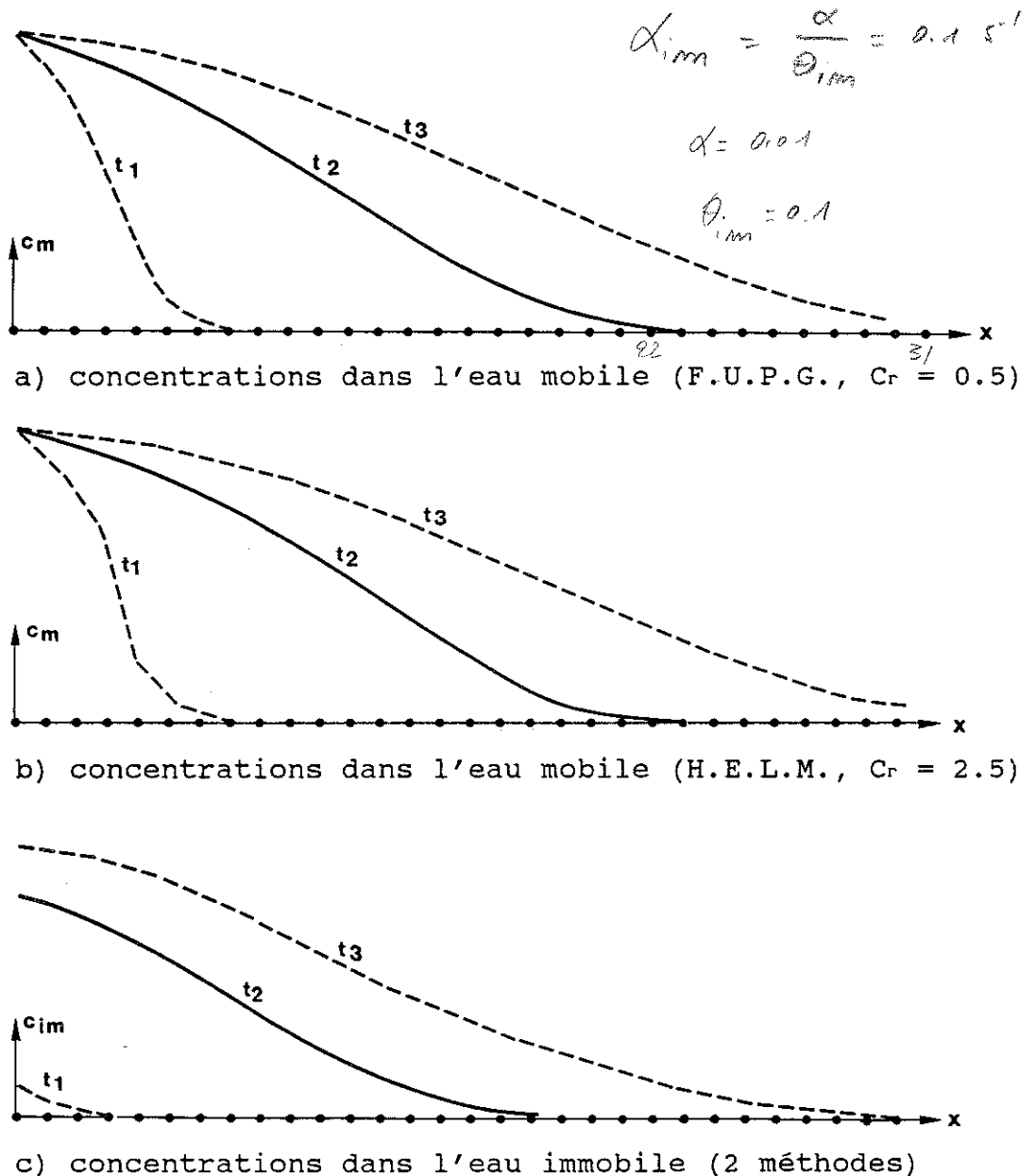


figure II.46: propagation d'un front de polluant par convection-dispersion et avec effet d'eau immobile, $v = 1 \text{ m/s}$, $\alpha_L = 0.5 \text{ m}$, $\alpha_{im} = \alpha_m = A_{im} = A_m = 0.1 \text{ s}^{-1}$.

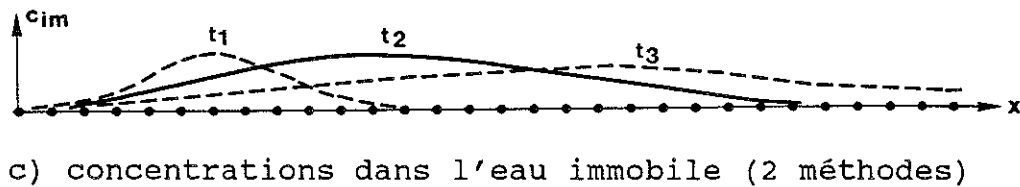
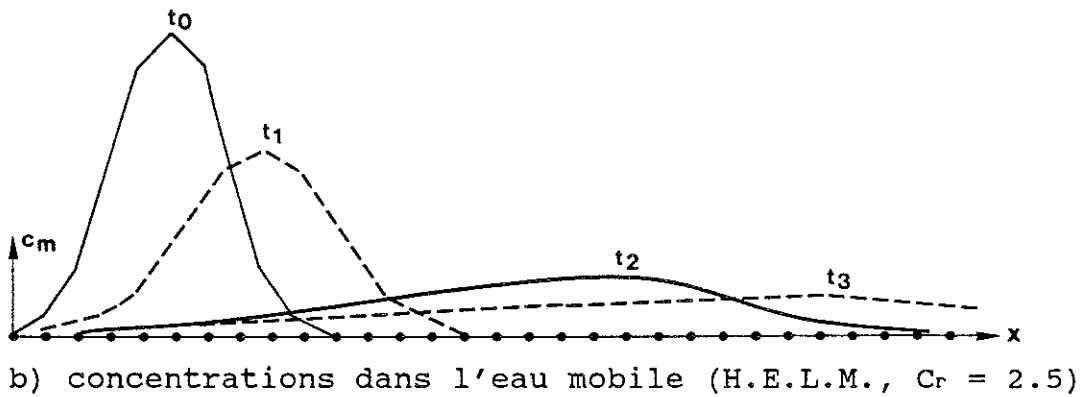
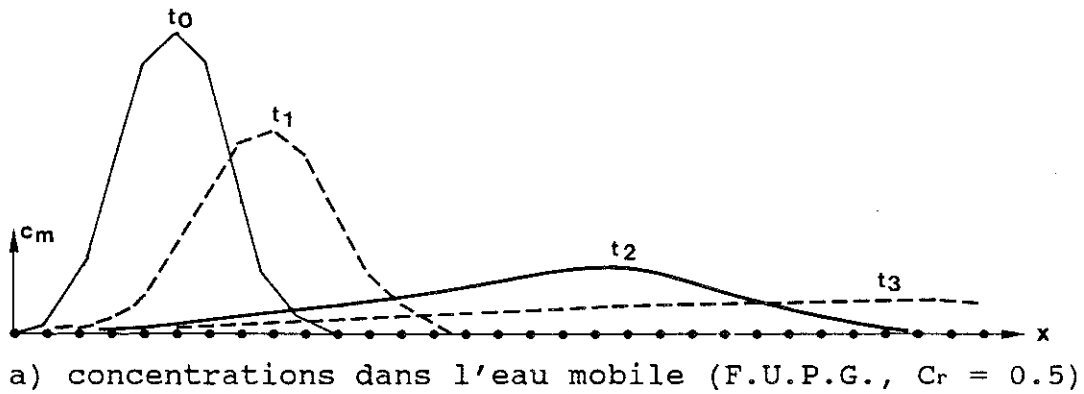


figure II.47: propagation d'un pulse de polluant par convection-dispersion et avec effet d'eau immobile, $v = 1 \text{ m/s}$, $a_L = 0.5 \text{ m}$, $\alpha_{im} = \alpha_m = A_{im} = A_m = 0.1 \text{ s}^{-1}$.

En comparant les diagrammes II.46a et II.26a, il est clair que la propagation du front de polluant est moins rapide et que la zone de mélange devient plus grande. En ce qui concerne le pulse (II.47a à comparer avec II.29a), la migration du maximum se fait à une vitesse similaire mais la distribution de concentration devient dissymétrique avec une longue traînée à l'amont du pic. Dans les deux cas, on observe une perte de masse. En examinant les concentrations dans l'eau immobile (II.46c et II.47c), on peut comprendre qu'une certaine proportion de la substance miscible est stockée temporairement dans les zones à faible circulation. On voit notamment (II.47c) un pulse secondaire plus plat et se déplaçant à une vitesse beaucoup plus lente.

Enfin, nous constatons une excellente similitude entre les solutions F.U.P.G. et H.E.L.M.

II.3.f.3) Tests bidimensionnels avec eau immobile.

Les 2 problèmes bidimensionnels d'injection continue (1° et 2°, section II.3.d.2) ont également été résolus avec un effet d'eau immobile. Les figures II.48 à II.50 représentent les distributions de concentrations correspondantes. De nouveau, quel que soit l'élément utilisé, ces simulations aboutissent à des solutions tout à fait plausibles et explicables physiquement.

Enfin, le problème de Young a été simulé avec 4 jeux de paramètres (figure II.51):

- $\alpha_T = \alpha_L = 0$ m, $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 10^{-6}$ s⁻¹ (figure II.51a)
- $\alpha_T = \alpha_L = 10$ m, $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 10^{-6}$ s⁻¹ (figure II.51b)
- $\alpha_T = \alpha_L = 0$ m, $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 2 \cdot 10^{-4}$ s⁻¹ (figure II.51c)
- $\alpha_T = \alpha_L = 10$ m, $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 2 \cdot 10^{-4}$ s⁻¹ (figure II.51d)

De bons résultats sont obtenus pour chaque situation. Toutefois, avec la méthode F.U.P.G., le dernier cas engendre une solution instable avec de fortes oscillations. Comme ce problème n'apparaît qu'en présence simultanée d'une dispersion et d'un effet d'eau immobile, tous deux importants, il est logique de comparer ces deux effets pour comprendre l'instabilité du schéma.

Définissons, dans ce but, un nombre adimensionnel, rapport de la dispersion à l'effet d'eau immobile au niveau de l'élément fini. Nous le baptiserons "nombre de mobilité". Mathématiquement on écrit:

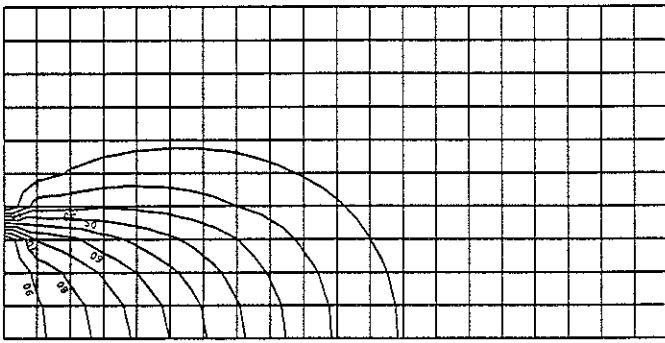
$$Mo = DhL / (\alpha_d^* \Delta l^2) \quad \text{avec } \Delta l \text{ longueur caractéristique de l'élément fini.}$$

On remarquera que toutes les solutions précédentes (qui sont stables) sont caractérisées par un nombre de mobilité en général nettement supérieur à l'unité.

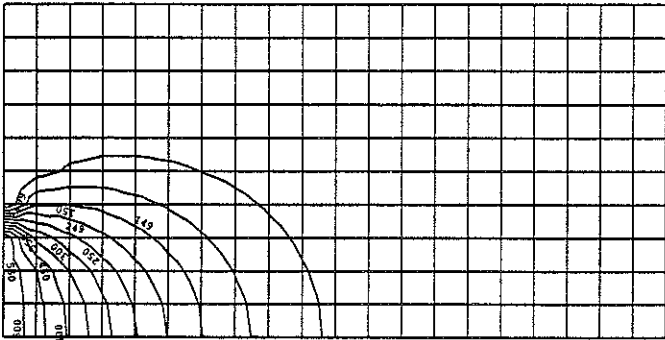
$$\text{Pour le cas II.51d par contre, } Mo_{\max} = \frac{\alpha_L \cdot V_{\max}}{\alpha_d^* (\Delta x^2 + \Delta y^2)} = 2/9 < 1.$$

En effectuant une étude de sensibilité du problème II.2.a.1 à l'effet d'eau immobile, Muller (1990), rencontre également des instabilités similaires. A nouveau, on peut montrer que les oscillations apparaissent pour des nombres de mobilité inférieurs à l'unité.

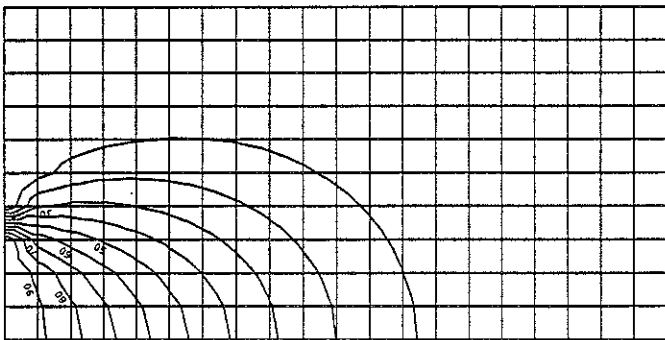
Dès lors, il est clair que, pour retrouver une solution stable du problème de Young avec le quatrième jeu de paramètres, il faut utiliser un maillage plus fin. En divisant la longueur des mailles par 2, on obtient la solution stable II.51e, qui correspond à $Mo_{\max} = 8/9$, plus proche de 1. Ces observations mettent en évidence une nouvelle limitation de la méthode F.U.P.G. Toutefois, en ce qui concerne nos applications pratiques, ce type de problème n'est pas apparu, les nombres de mobilité étant généralement assez élevés.



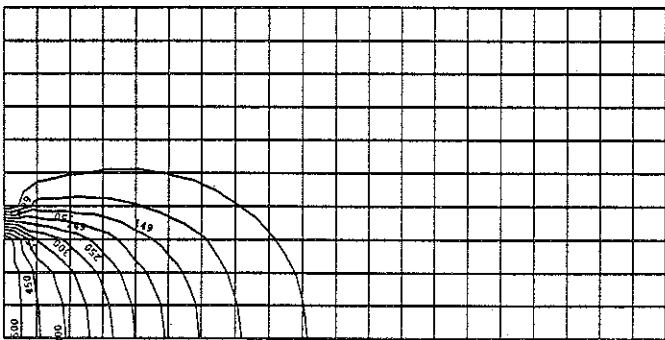
a) concentrations dans l'eau mobile
méthode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$



b) concentrations dans l'eau immobile
méthode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$



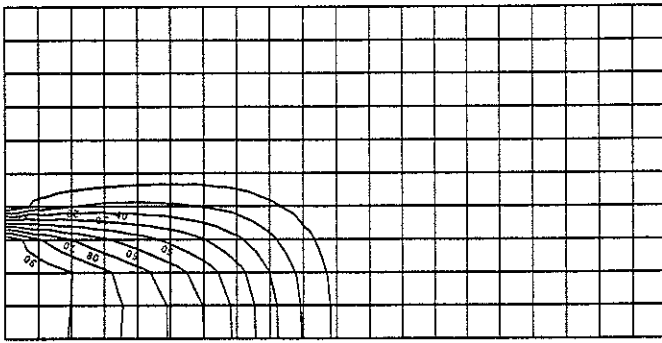
c) concentrations dans l'eau mobile
méthode H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$
 $I_{zoom} = 3$



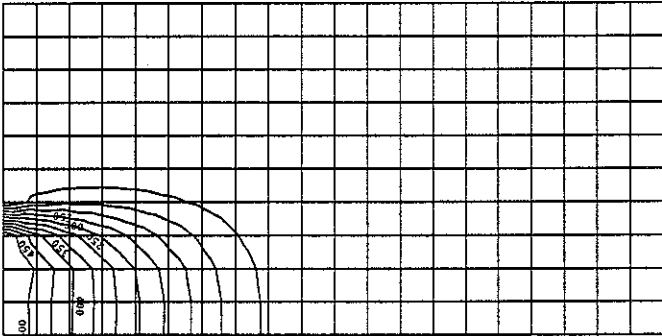
d) concentrations dans l'eau immobile
méthode H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$
 $I_{zoom} = 3$

y
x

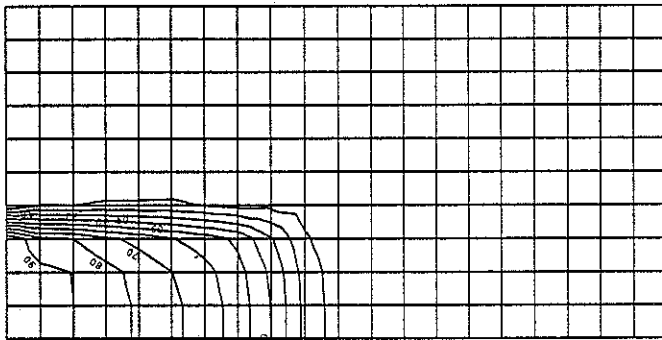
figure II.48: injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme, avec effet d'eau immobile $v = 1 \text{ m/s}$, $a_L = 1.5 \text{ m}$, $a_r = 1.0 \text{ m}$, $\alpha_m = \alpha_{im} = 0.1 \text{ s}^{-1}$



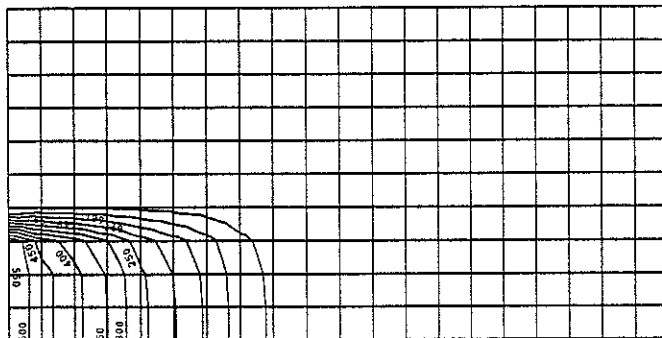
a) concentrations dans l'eau mobile
méthode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$



b) concentrations dans l'eau immobile
méthode F.U.P.G.
 $C_r = 0.5$



c) concentrations dans l'eau mobile
méthode H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$
 $I_{zoom} = 3$



d) concentrations dans l'eau immobile
méthode H.E.L.M.
 $C_r = 1.5$
 $I_{zoom} = 3$



figure II.49: injection continue, non ponctuelle, dans un champ de convection uniforme, avec effet d'eau immobile $v = 1$ m/s, $a_L = 0.15$ m, $a_r = 0.10$ m, $\alpha_m = \alpha_{im} = 0.1$ s⁻¹

COMPARAISON DE 2 METHODES DE RESOLUTION PROBL. INJECTION CONTINUE

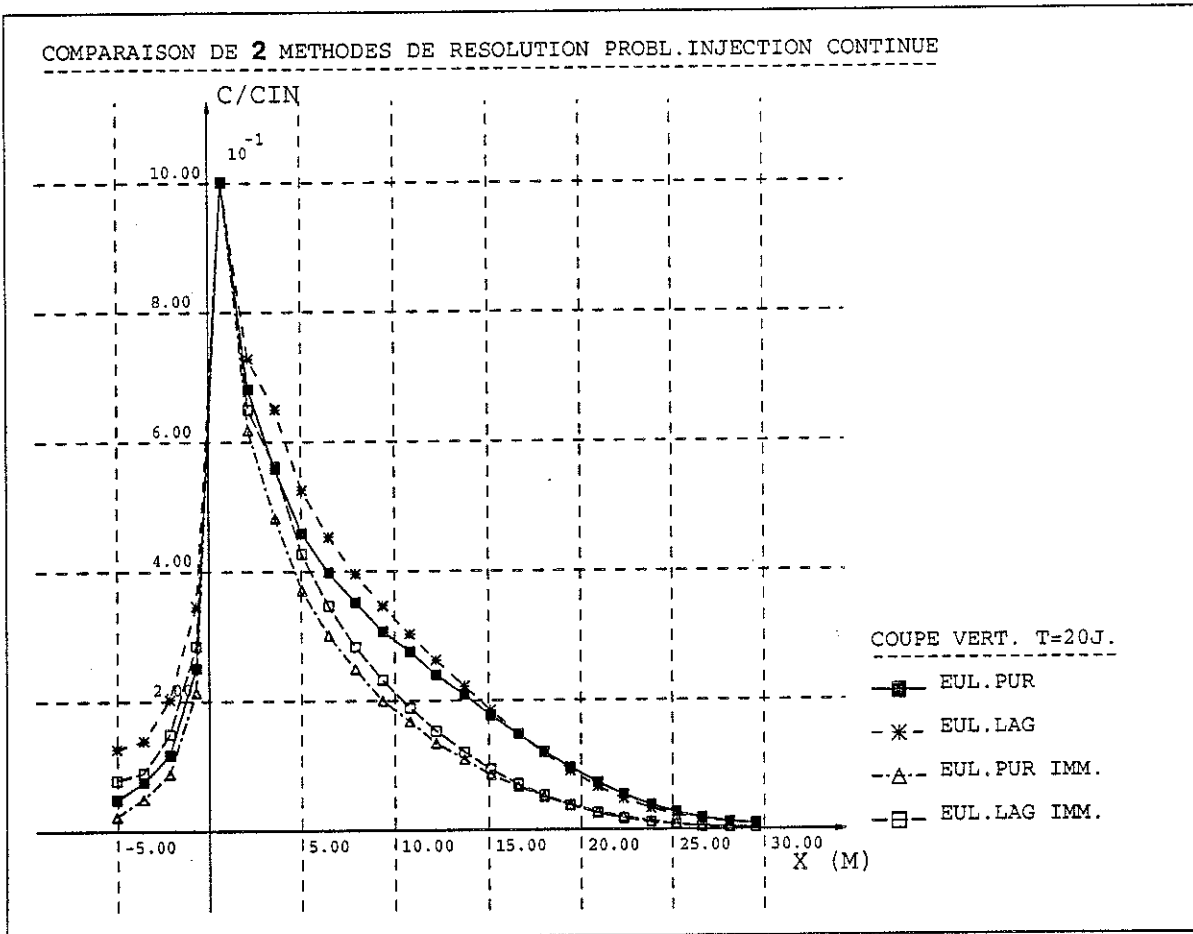


figure II.50: Injection continue, ponctuelle, dans un champ convectif uniforme, avec effet d'eau immobile $v = 10^{-5}$ m/s, $\alpha_l = 1.0$, $\alpha_r = 0.1$ ($Pe = 1.36$), $\alpha_m = \alpha_{im} = 10^{-6}$ m/s, comparaison des courbes $c/c_{in}-x$ (avec ou sans effet d'eau immobile, pour les 2 méthodes de résolution)

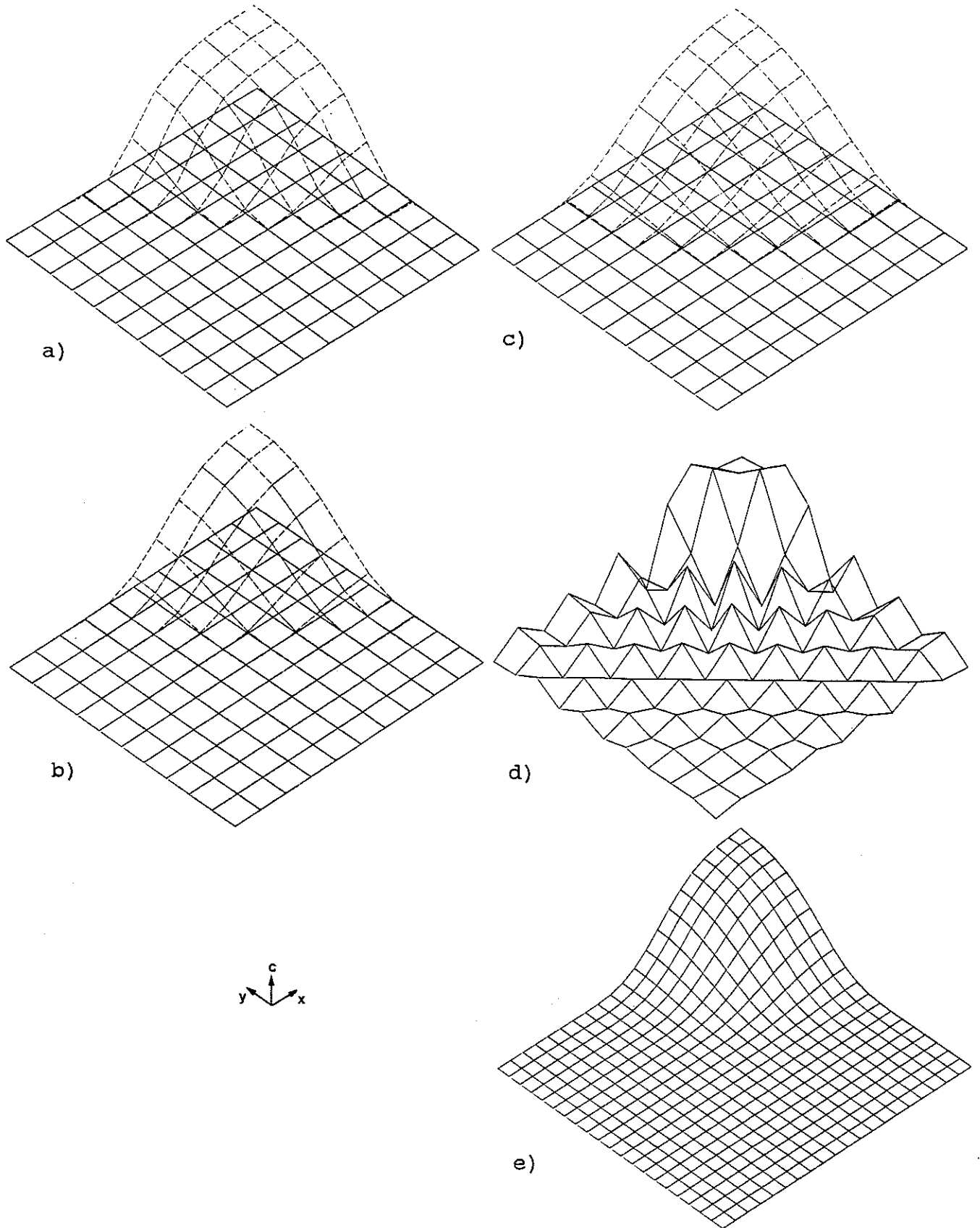


figure II.51: Problème de Young, avec effet d'eau immobile.

- | | | |
|----|---------------------------------------|--|
| a) | $\alpha_T = \alpha_L = 0 \text{ m},$ | $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ |
| b) | $\alpha_T = \alpha_L = 10 \text{ m},$ | $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ |
| c) | $\alpha_T = \alpha_L = 0 \text{ m},$ | $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ |
| d) | $\alpha_T = \alpha_L = 10 \text{ m},$ | $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ |
| e) | $\alpha_T = \alpha_L = 10 \text{ m},$ | $\alpha_d^* = \alpha_m = \alpha_{im} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1},$ maillage fin |

II.4. TRAITEMENT DES CONDITIONS AUX FRONTIERES POUR LES PROBLEMES DE TRANSPORT MISCIBLE.

Pour pouvoir résoudre un problème de transport miscible, il convient de préciser les relations entre la zone modélisée et le monde extérieur qui l'entoure appelé milieu ambiant. En effet, des transferts de masse sont possibles par l'intermédiaire de frontières S constituant l'interface vis-à-vis du milieu ambiant.

II.4.a) Description des différents types de conditions aux frontières.

D'après la nature des processus existant à l'interface S , 5 types de conditions frontières peuvent être distinguées (figure II.52):

- 1°) les conditions de concentration imposée: la concentration existante à la frontière n'est pas calculée mais prescrite au modèle;
- 2°) les conditions de flux convectif imposé: un taux de polluant q_{out} rentre dans le modèle où il est transféré par convection pure;
- 3°) les conditions de flux dispersif imposé: le taux q_{out} est cette fois transmis au modèle par un processus de diffusion-dispersion pure;
- 4°) les conditions de flux total imposé: le taux q_{out} est injecté par diffusion-dispersion et par convection;
- 5°) les conditions d'imperméabilité: aucun flux ne rentre dans le modèle, la concentration sur la frontière varie, de manière naturelle, sous l'influence de la zone modélisée uniquement.

Toutes ces conditions respectent le principe de continuité des flux.

II.4.b) Modélisation de ces différentes conditions.

Lorsque nous avons pondéré le bilan de masse sur le volume discrétisé, par la méthode des éléments finis (section II.3.b), nous avons individualisé (en intégrant par parties) un terme de surface qui porte sur la composante dispersive. Ce terme doit être traité avec les équilibres de surface qui définissent les conditions-frontières.

Considérons S_1, S_2, S_3, S_4 , et S_5 les surfaces sur lesquelles agissent les différentes conditions-frontières définies en II.4.a. On a $\bigcup_i S_i = S$ = surface totale délimitant le domaine modélisé.

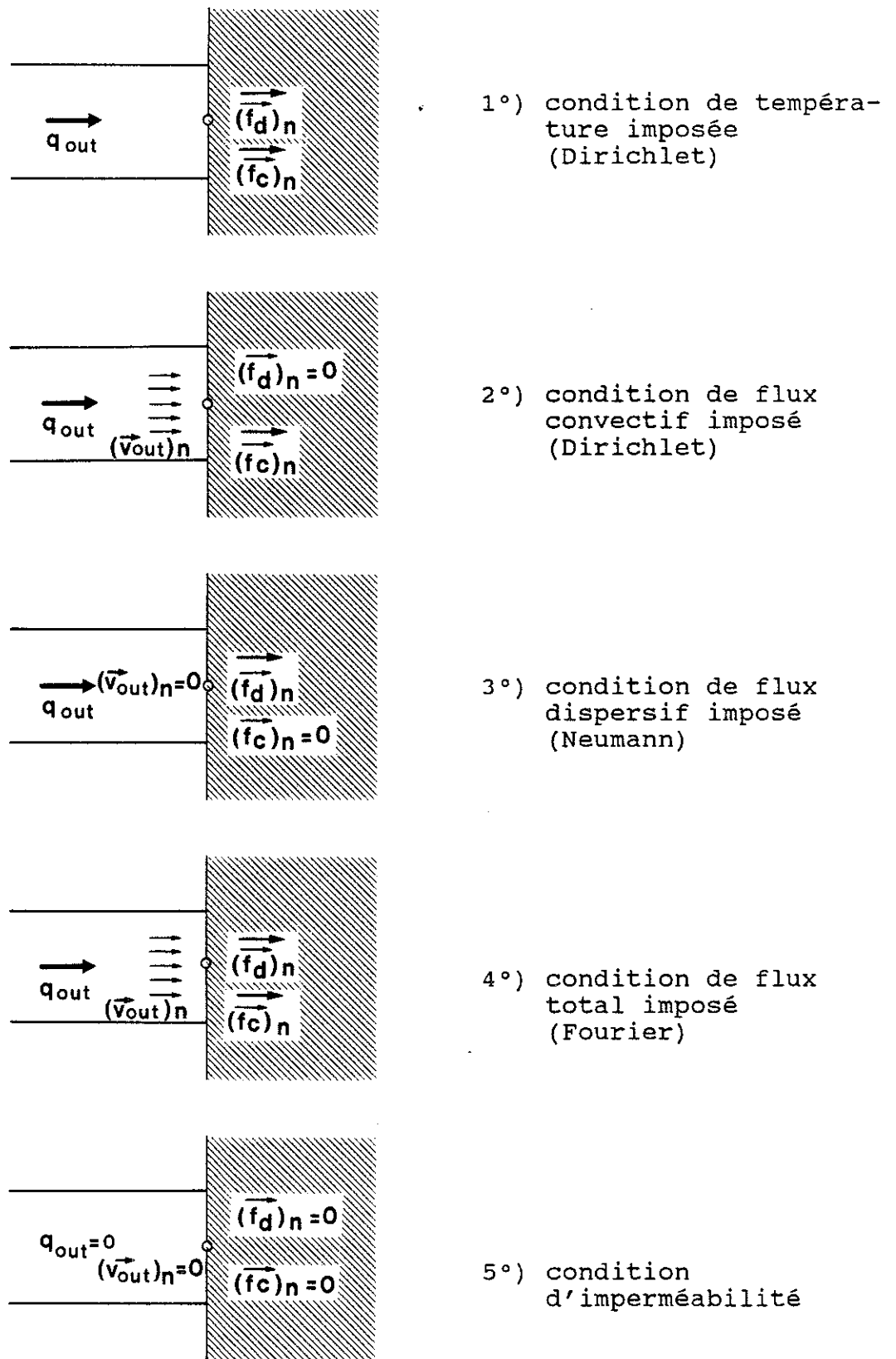


figure II.52: description des différents types de conditions aux frontières.

L'intégrale de surface s'écrit alors:

$$\begin{aligned}
 I_s = & \int_{\Delta t} \int_{S_1} (\hat{c} - c_d) \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_{S_2} [q_{out} - (\vec{v} \cdot \hat{c})_n] \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_{S_3} [q_{out} - (-D_h \cdot \vec{grad} \hat{c})_n] \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_{S_4} [q_{out} - (\vec{v} \cdot \hat{c} - D_h \cdot \vec{grad} \hat{c})_n] \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_S (-D_h \cdot \vec{grad} \hat{c})_n \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \quad (II.101)
 \end{aligned}$$

où n est un indice définissant une projection sur la normale extérieure par rapport à la frontière du domaine;

le dernier terme de (II.101) est celui qui provient de l'intégration volumique.

Lorsqu'un flux q_{out} est imposé sur la frontière, nous considérerons que le côté non modélisé de la frontière est une zone bien homogène de concentration c_{out} connue ("well mixed zone"). Dans ce cas, $grad \ c_{out} = 0$ et seul le flux convectif $(\vec{v}_{out} \cdot c_{out})_n = q_{out}$ entre dans l'aquifère, au voisinage immédiat de la frontière.

Ceci étant admis, choisissons un champ approché \hat{c} qui vérifie les conditions suivantes:

$$\hat{c} = c_d \quad \text{sur } S_1 \quad (II.102a)$$

$$\hat{c} = c_{out} \cdot \frac{\vec{v}_{out} \cdot n}{\vec{v}_{in} \cdot n} \quad \text{sur } S_2 \quad (II.102b)$$

l'indice i_n définissant le côté modélisé de la frontière.

Il vient alors:

$$\begin{aligned}
 I_s = & \int_{\Delta t} \int_{S_1 \cup S_2} (-D_h \cdot \vec{grad} \hat{c})_n \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_{S_3} \vec{v}_{out} \cdot c_{out} \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \\
 & + \int_{\Delta t} \int_{S_4} (\vec{v}_{out} \cdot c_{out} - \vec{v}_{in} \cdot \hat{c}_{in}) \cdot W_j(\vec{x}, t) \cdot dS \cdot dt \quad (II.103)
 \end{aligned}$$

Le premier terme de (II.103) correspond aux conditions de Dirichlet. Il n'est pas évalué tel quel; il est remplacé par une élimination directe au niveau du système global. On remarquera que les flux imposés par convection pure sont repris dans cette composante.

Le second terme correspond aux conditions de Neumann, il englobe les flux imposés par diffusion-dispersion; le troisième terme est celui des conditions de Fourier, il reprend les flux transmis par convection et dispersion-diffusion.

Ces deux dernières intégrales ne sont pas faciles à évaluer car $W_j(\vec{x}, t)$ est une fonction qui dépend des caractéristiques des éléments de volume. Pour cette raison, nous préférons les représenter par des débits de matière équivalents, concentrés aux différents noeuds du maillage.

Dès lors, les conditions de Neumann se résument à des débits extérieurs qui sont imposés de manière conventionnelle au niveau du système global. Il reste donc les conditions de Fourier dont la contribution s'écrit comme suit:

$$\sum_{j=1}^{N_f} \int_{\Delta S_j} (\vec{V}_{out_n} \cdot C_{out} - \vec{V}_{in_n} \cdot \hat{C}_{in})_j \cdot \Delta S_j \cdot W_N(t) \cdot dt$$

l'indice j désignant des grandeurs nodales, N_f étant le nombre de noeuds positionnés sur S_3 , ΔS_j représentant l'aire associée au noeud j sur laquelle agit le flux $q_{out_j} = (\vec{V}_{out} \cdot C_{out})_j$,
(voir figure ci dessous)

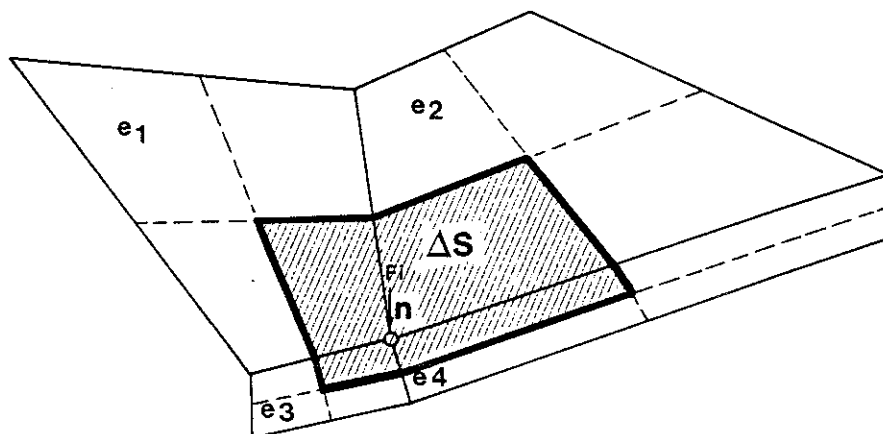


figure II.53: équivalence entre le flux de surface et le débit nodal imposé.

Cette expression n'est toujours pas analogue à une force extérieure puisque c_{in_j} est une inconnue. C'est pourquoi elle sera évaluée par l'intermédiaire d'un élément fini spécial (élément de frontière) comportant 2 noeuds: le noeud j de concentration inconnue, et un noeud d'ambiance dont la concentration c_{out_j} sera prescrite d'une manière similaire aux conditions-frontières de Dirichlet. Les valeurs de \vec{V}_{out_j} et \vec{V}_{in_j} seront précisées dans la loi de comportement associée à l'élément.

A ce stade, il convient de préciser que \vec{V}_{in} et \vec{V}_{out} sont des vitesses réelles. Elles peuvent être différentes (si les matériaux de part et d'autre de la frontière sont différents) et ce malgré une continuité de la vitesse de Darcy exigée par la résolution de l'équation d'écoulement.

L'injection d'un traceur dans un piézomètre constitue un exemple de condition de Fourier avec flux concentré en un noeud (voir figure II.54). Dans ce cas, il se peut également que la convection soit forcée, à proximité de la frontière, par injection d'un débit de fluide sur une distance d . Si cette distance est faible par rapport à la taille des éléments, le cône de relèvement engendré sera représenté par une différence entre les vitesses de Darcy \vec{v}_{Din} et \vec{v}_{Dout} . Un raffinement excessif de la discrétisation écoulement peut en effet se révéler coûteux et inutile.

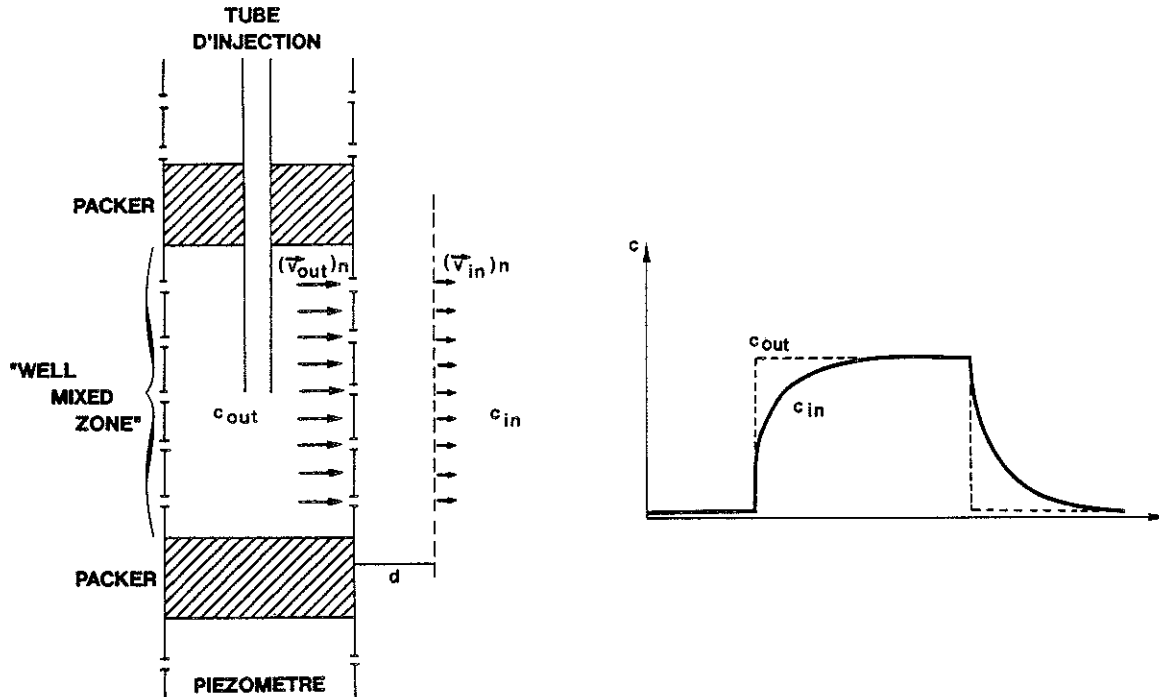


figure II.54: condition de Fourier pour l'injection de traceur dans un piézomètre.

Dans la relation II.103, la surface S_s (qui correspond à la frontière totalement imperméable) n'apparaît pas. Ceci est dû à l'annulation du flux diffusif sur cette frontière. Aucune contribution au système global n'est calculée. Mais ce n'est pas suffisant; pour que l'imperméabilité soit complète, il faut que la vitesse de convection soit parallèle à la frontière. Ceci est assuré par l'imposition d'une imperméabilité au niveau du modèle écoulement.

Si aucune sollicitation n'est imposée et si la vitesse de convection pénètre, par la surface S_s , à l'intérieur de la zone modélisée, le problème est mal posé car la masse injectée n'est pas prédéterminée. Le modèle F.U.P.G. peut mal réagir et calculer des concentrations fortement négatives et dénuées de sens. Pour la méthode H.E.L.M., ce cas particulier est traité dans la routine de "particle tracking" en imposant que $c_{in} = c_{in}^0$. Ceci permet d'obtenir un résultat acceptable. Ce type de problème n'est évidemment pas rencontré lorsque la convection est dirigée vers l'extérieur du modèle; la quantité de matière qui quitte le modèle étant alors liée à la concentration dans le milieu (c_{in}).

Signalons encore qu'il existe des cas où le milieu ambiant ne peut pas être considéré comme une "well mixed zone". Dans ce cas, $\text{grad } c_{\text{out}}$ est non nul et il peut exister un flux diffusif à l'ambiance. En outre, l'interface elle-même peut avoir des propriétés sélectives (par exemple un aquitard argileux et imperméable, adsorbant la substance miscible). Des conditions-frontières présentant un tel degré de complexité ne seront pas envisagées dans ce travail.

II.4.c) Tests de l'élément de frontière.

Pour démontrer l'efficacité du nouvel élément de frontière, la modélisation d'un drain poreux a été envisagée dans divers cas. A chaque fois, la concentration à l'ambiance est imposée à 1 pendant 500 secondes puis annulée.

II.4.c.1) Le drain n'est soumis qu'à une diffusion moléculaire $D_m = 2.10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

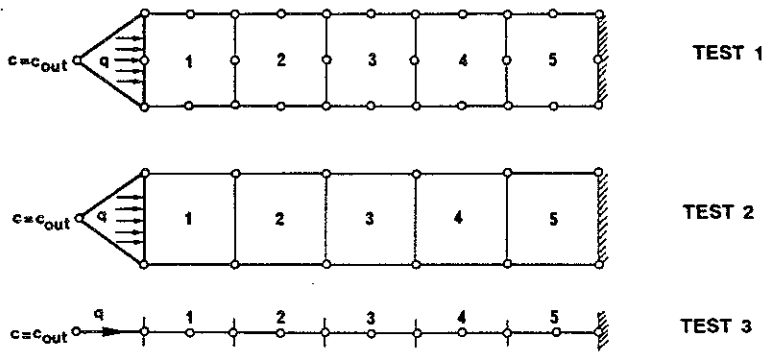
Ce test a pour but de vérifier que, pour un domaine soumis uniquement à la diffusion, on arrive à reproduire les résultats des anciens éléments de flux répartis qui existent déjà dans le logiciel LAGAMINE. La vitesse de convection à l'ambiance (v_{outn}) est de 10^{-4} m/s. Trois discrétisations sont envisagées (voir figure II.55a). Pour la première 2 intégrations temporelles ($\theta = 0.5$ et $\theta = 1$) ont été étudiées. Les résultats d'évolution de concentration dans le temps sont présentés figure II.55b pour l'extrémité du drain soumis à l'ambiance (c_{in}) et figure II.55c pour l'autre extrémité.

On constate bien que la croissance et la décroissance de c_{in} n'est pas instantanée comme celle de c_{out} . Ceci s'explique par la nécessité de transformer le flux convectif en flux diffusif. De plus, on remarque que l'intégration temporelle avec $\theta = 0,5$ donne un résultat plus oscillant dans le temps, mais toujours acceptable.

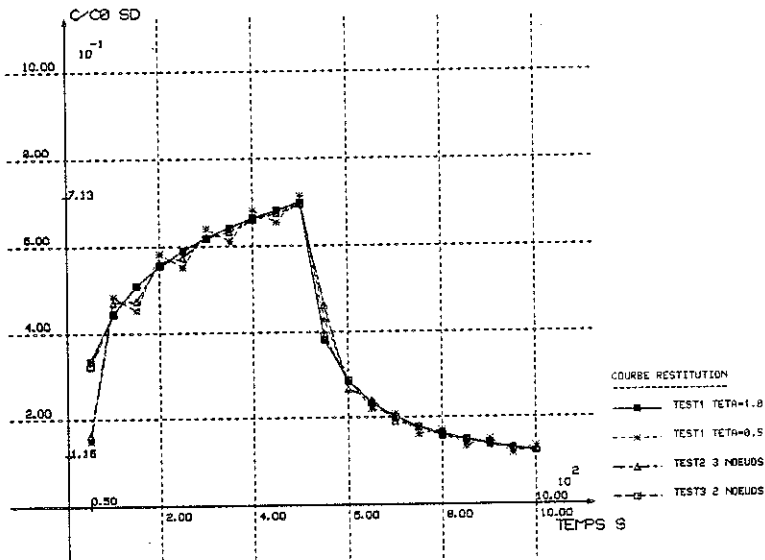
II.4.c.2) Le drain est soumis à une diffusion moléculaire $D_m = 2.10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ et à un courant convectif uni- forme $v_{\text{in}} = 10^{-4} \text{ m/s}$.

Trois autres discrétisations sont envisagées (voir figure II.56a). Pour la première, 3 cas de convection à l'ambiance ont été envisagés. $v_{\text{out}} = 0.5 \cdot 10^{-4}$, $1 \cdot 10^{-4}$ et $2 \cdot 10^{-4}$ m/s respectivement. Pour les 2 autres, seul le dernier cas a été traité. Les résultats d'évolution de concentrations dans le temps sont présentés figures II.56b et II.56c.

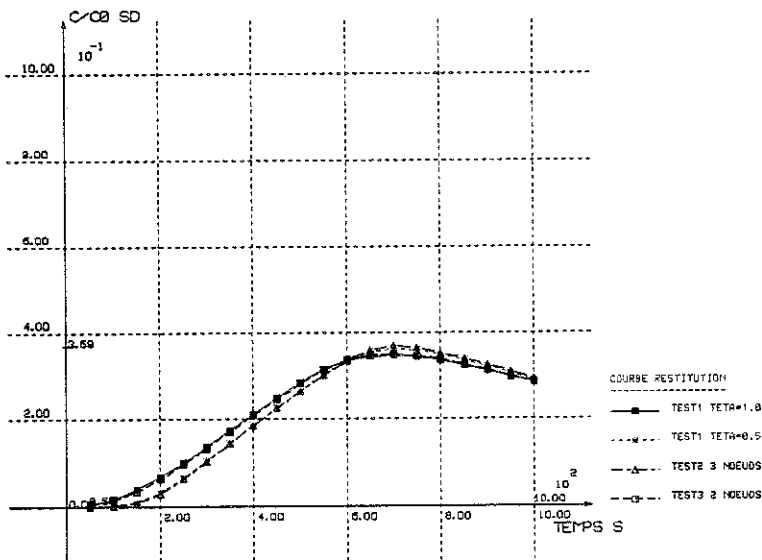
On remarque que, dans tous ces cas, les conditions frontières sont dominées par la convection; c_{in} subit une variation brutale comme c_{out} mais la valeur maximale de c_{in} dépend du contraste entre \vec{v}_{in} et \vec{v}_{out} ainsi que de l'importance du transfert diffusif.



a) discrétisations testées



b) évolution temporelle de c_{in} (concentration relative pour l'extrémité du drain connectée à l'ambiance)



c) évolution temporelle de la concentration relative pour l'autre extrémité

figure II.55: Tests de l'élément de frontière: convection à l'ambiance, diffusion dans le milieu.

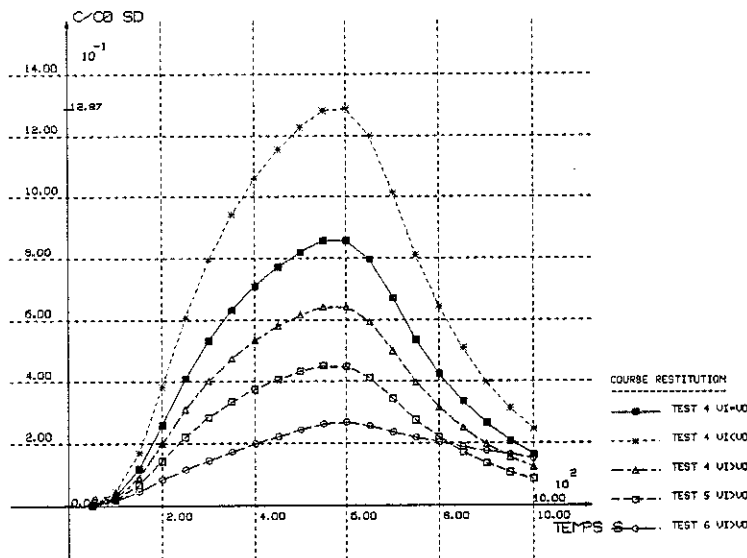
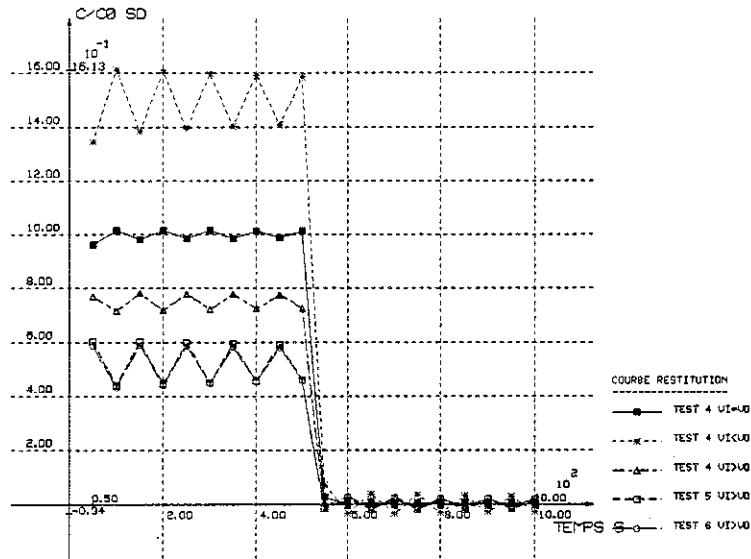
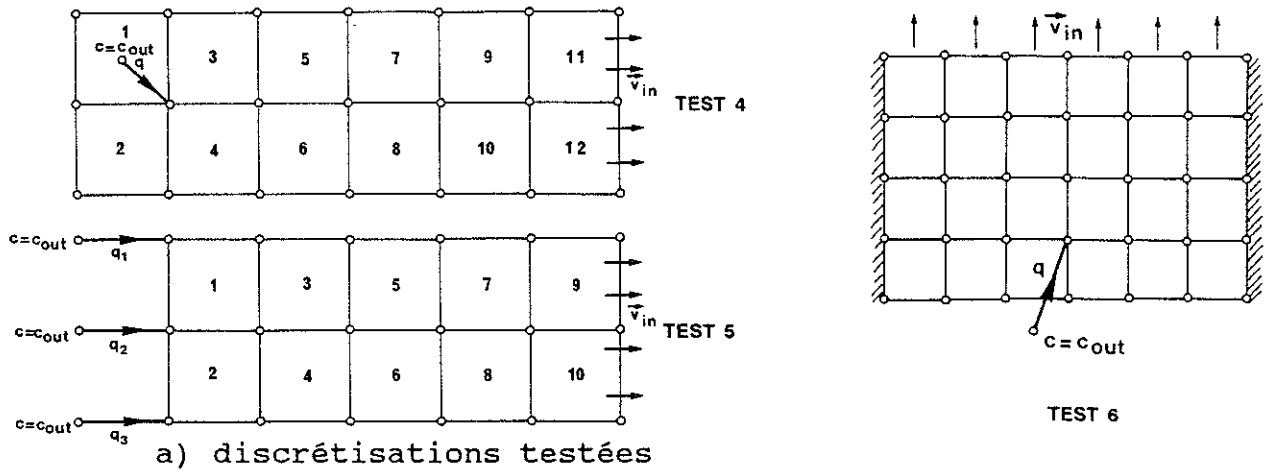


figure II.56: Tests de l'élément de frontière: convection à l'ambiance, convection-diffusion dans le milieu.

Pour visualiser plus clairement la diffusion, il faut regarder l'autre extrémité du drain qui montre ce qu'est devenu le créneau après un trajet convectif de 5 m (figure II.55c). Les courbes les plus hautes sont caractéristiques d'un apport plus grand, étant donné une vitesse de convection à l'ambiance plus élevée. La seule courbe qui croise les autres est celle du problème avec diffusion bidimensionnelle dont les vues en perspective après 50, 500 et 1000 secondes sont représentées figures II.57a, b, et c.

On remarquera aussi les oscillations persistantes, ce qui est normal vu que la condition frontière est dominée par le phénomène convectif.

II.4.c.3) Le drain est soumis à une diffusion $D_m = 2.10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ et à un courant convectif faible au voisinage de l'ambiance.

Cette fois, on a choisi une vitesse de convection à l'ambiance valant la moitié de la vitesse de convection dans le milieu, à proximité immédiate de l'interface. Deux valeurs de cette dernière ont été considérées:

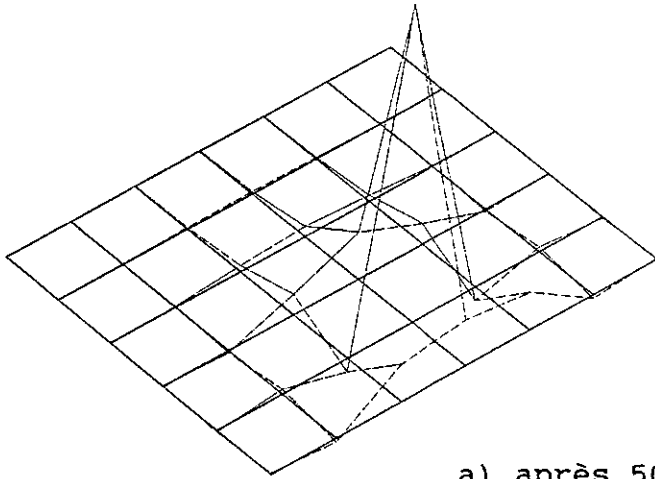
$$v_{in_1} = 5.10^{-6} \text{ m/s et } v_{in_2} = 1,5.10^{-6} \text{ m/s.}$$

Pour chaque cas, deux situations ont été calculées:

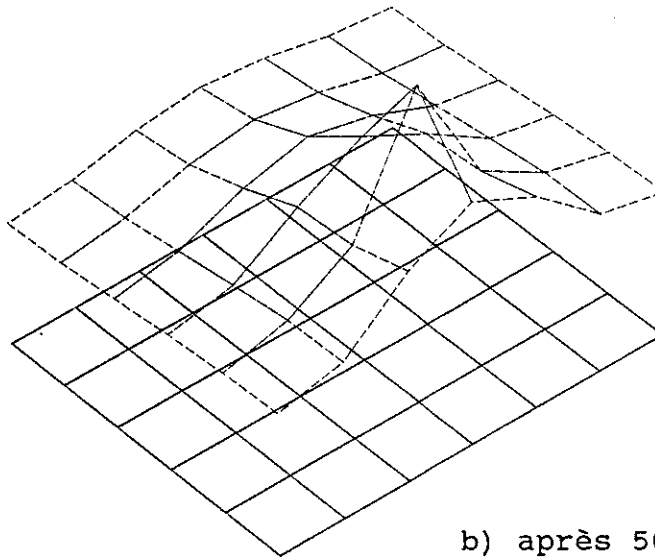
- celle où la convection dans le milieu croît linéairement vers 1.10^{-4} m/s lorsqu'on s'éloigne de l'ambiance;
- celle où la convection est uniforme dans le drain.

Les résultats d'évolution de concentration dans le temps sont présentés figures II.58a et II.58b. Ils démontrent que, cette fois, la condition frontière n'est pas dominée par la convection (surtout pour v_{in_2}) et les oscillations sont atténuées.

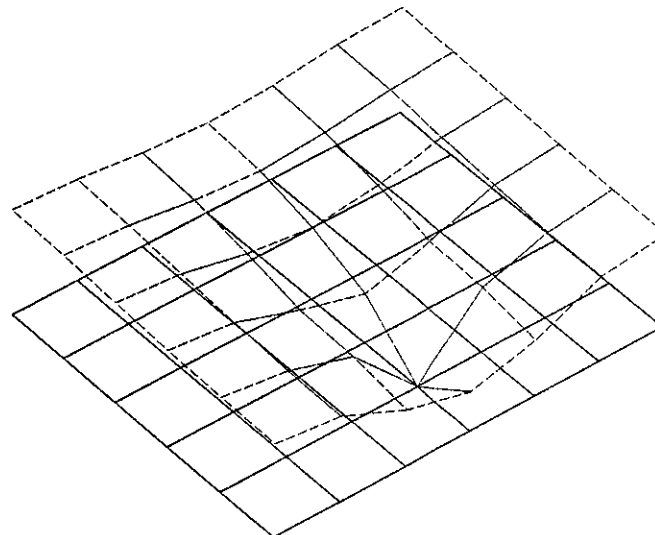
Il s'agit d'un cas intermédiaire entre les 2 cas extrêmes précédemment traités. En examinant l'autre extrémité du drain (figure II.58b), on remarque que, lorsque la convection est fixée à une faible valeur, un temps de 1000 secondes n'est pas suffisant pour voir arriver la pollution. Un temps beaucoup plus long est nécessaire.



a) après 50 s



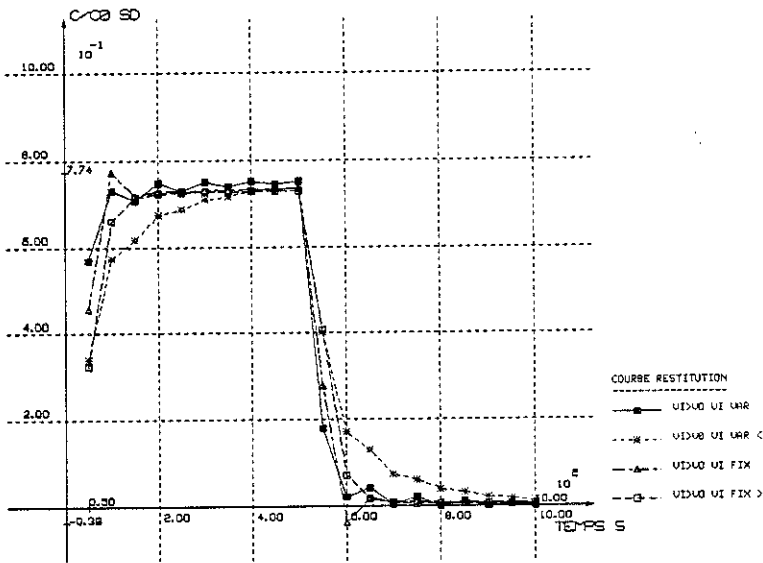
b) après 500 s



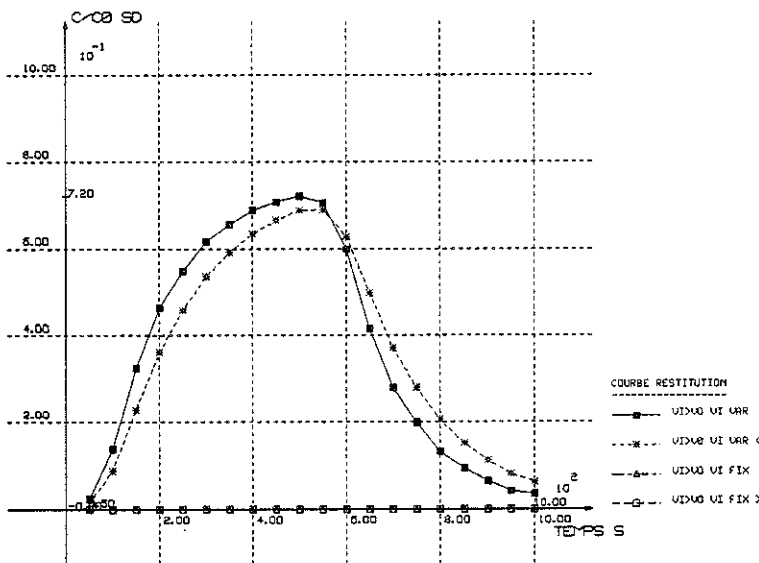
c) après 1000 s



figure II.57: test de l'élément de frontière: vue en perspective des concentrations pour le problème bidimensionnel.



a) évolution temporelle de la concentration relative pour l'extrémité du drain connectée à l'ambiance.



b) évolution temporelle de la concentration relative pour l'autre extrémité.

figure II.58: test de l'élément de frontière: convection à l'ambiance, faible convection et diffusion dans le milieu.

II.5. CONCLUSIONS

Au cours de ce chapitre, nous avons développé et testé deux méthodes de résolution pour un problème linéaire de transport, le plus général possible. Ces procédés sont basés tous les deux sur la méthode des éléments finis. La gestion des conditions aux frontières y est identique. Leurs conditions d'utilisation sont rappelées au tableau synthétique suivant. Elles sont définies par le nombre de Péclet numérique (Pe) et le nombre de Courant (Cr). Ces deux nombres doivent être impérativement analysés pour toute application pratique, à chaque fois qu'une nouvelle discrétisation (spatiale ou temporelle) est envisagée.

	Méthode F.U.P.G. (upwind complet)	Méthode H.E.L.M. (eulerien-lagrangien)
principales caractéristiques de l'intégration		
mode de pondération temporelle	par une fonction symétrique sur le pas de temps, couplée à la pondération spatiale	par une fonction de collocation implicite
mode de pondération spatiale	par une fonction décentrée dans la direction de la convection, couplée à la pondération temporelle	par une fonction centrée découplée de la pondération temporelle; la convection est intégrée à part grâce à un procédé de "particle tracking"
domaine d'application	conditions d'utilisation et inconvénients	
régime permanent	oui, dégénère en une méthode S.U.P.G. implicite	non, car le "particle tracking" devient impossible
régime transitoire		
dominé par la convection ($Pe > 10$)	oui, si $Cr < 0.8$, mais oscillations rémanentes et un peu moins de précision	oui, avec Cr le plus grand possible et sans zoom; sinon instabilités ou surdiffusion
intermédiaire	oui, si $Cr < 1$; taille du pas de temps limitée par la convection	oui, si $Cr > 1$ et avec zoom; taille du pas de temps limitée par la dispersion
dominé par la dispersion ($Pe < 0.1$)	oui, si $Cr < 1$; mais sans intérêt par rapport à la méthode classique de Bubnov-Galerkin	déconseillé en raison de la faible influence du "particle tracking" et de l'implicité de l'intégration temporelle

tableau II.1: tableau comparatif des deux méthodes choisies pour intégrer l'équation du transport miscible.

On constate que les deux techniques sont parfaitement complémentaires par rapport à notre domaine d'application (régime transitoire où convection et dispersion sont importantes). La méthode F.U.P.G. fonctionne avec un grand nombre de petits pas de temps, tandis que la méthode H.E.L.M. utilise un nombre plus restreint de pas de temps plus grands. Toutefois, en raison du "particle tracking" le coût C.P.U. de cette dernière n'est pas toujours inférieur. Comme il est plus sécurisant d'évaluer fréquemment la solution, on préférera le procédé F.U.P.G. En ce qui nous concerne, la résolution H.E.L.M. n'est donc qu'un palliatif à envisager lorsque la résolution F.U.P.G. devient trop coûteuse.

Par contre, pour des problèmes dominés par la convection (nombres de Péclet numériques élevés), la situation est très différente. Les éléments créés ne sont pas totalement satisfaisants. Le schéma H.E.L.M. donne les meilleurs résultats si on ne doit pas évaluer trop fréquemment la solution (nombres de Courant très élevés). Dans le cas contraire, la schéma F.U.P.G. ne répond qu'imparfaitement au problème.

En ce qui concerne la méthode F.U.P.G., il n'existe pas, à notre connaissance, de procédé pour éliminer les quelques pourcents d'oscillations et les imprécisions qui subsistent encore.

Pour la méthode H.E.L.M., Yeh (1990) présente une version plus élégante du raffinement adaptatif du maillage. Il propose de calculer la solution aux noeuds cachés du maillage par une méthode de résolution en sous-systèmes associés à chaque élément zoomé. Cette opération engendre un accroissement du temps C.P.U. nécessaire à la résolution. Or, pour notre élément H.E.L.M., le coût C.P.U. est déjà au moins aussi élevé que pour l'élément F.U.P.G. et ce, malgré son économie sur le nombre de pas de temps (mitigée par le fait que la dispersion doit être correctement représentée). Pour cette raison, nous n'envisagerons pas cette amélioration qui, bien qu'elle donne des résultats excellents, n'apparaît pas d'une absolue nécessité pour les applications que nous allons envisager.

CHAPITRE III

ETUDE EXPERIMENTALE EN LABORATOIRE D'UN PROCESSUS DE MIGRATION: LE TRANSPORT DES NITRATES DANS LA CRAIE MULTIPOREUSE DE LA NAPPE DU CRETACE HESBIGNON.

III.1. INTRODUCTION.

Lorsqu'on désire utiliser un modèle mathématique afin de décrire et de comprendre une situation réelle complexe, il convient de déterminer, par une étude expérimentale, les coefficients qui interviennent dans le modèle.

Pour l'application qui nous concerne (transport des nitrates dans la craie aquifère de Hesbaye), la taille du domaine étudié a une importance fondamentale. On procédera par conséquent en deux étapes:

- La première, que nous développons dans ce chapitre, s'effectuera en laboratoire, à une échelle relativement réduite, mais dans des conditions parfaitement maîtrisées. Elle permettra d'identifier les composantes essentielles de la migration.
- La seconde, qui fait l'objet du chapitre suivant, est une étude in situ. Elle concerne un domaine nettement plus représentatif mais dont l'homogénéité est plus discutable. Nous choisirons de représenter explicitement les hétérogénéités. Ceci complique l'interprétation et nécessite, au préalable, que les mécanismes de base soient correctement décrits.

III.1.a) Description qualitative du matériau étudié.

Le milieu que nous envisageons du point de vue du transport, est l'exemple type d'un aquifère multiporeux. En effet, lorsque nous envisageons des échantillons de craie hesbignonne de taille croissante, on peut voir que les vides se répartissent en structures hiérarchisées.

Il convient donc, pour faire une globalisation correcte, d'envisager des échelles de plus en plus grandes.²³

III.1.a.1) Echelle microscopique.

Lorsqu'on examine la craie au microscope électronique à balayage (figure III.1a), on constate qu'elle est formée de petits fossiles de calcite pure, d'une taille de 10 à 20 microns, appelés coccolithes. Cet assemblage, induré lors de la diagenèse sous l'effet du poids des terrains surincombants, résulte d'une sédimentation en milieu marin (Schroeder 1989).

On peut également observer, entre ces particules, des vides dont la distribution est régulière et statistiquement homogène. Très rapidement, lorsque la taille de l'échantillon atteint quelques centimètres, on obtient un domaine représentatif de cette porosité de pores. Elle constitue approximativement 40 % du volume et ne permet qu'une faible circulation d'eau en raison de la tortuosité et de l'étroitesse des chenaux. On chiffre une perméabilité de l'ordre de 10^{-8} m/s pour une porosité efficace d'environ 35 % dans le cas de gradients très élevés (de l'ordre de 1000).

Toutefois, déjà à cette échelle, on observe çà et là quelques discontinuités de porosité responsables d'une augmentation significative de la perméabilité (d'un facteur 2 à 6). Ces vides, appelés microfissures, peuvent être clairement visualisés sur un échantillon décimétrique lorsqu'on plonge ce dernier, après séchage, dans un bain de paraffine liquide (figure III.1a). On peut comprendre que ces microfissures résultent du caractère plus ou moins pénétratif d'une fissuration qui s'exprime pleinement à une échelle supérieure.

III.1.a.2) Echelle macroscopique.

Lorsqu'on effectue un essai de pompage in situ dans la craie, la perméabilité se chiffre souvent entre 10^{-5} et $5 \cdot 10^{-4}$ m/s. Une telle circulation d'eau est possible grâce à la présence d'un réseau dense de diaclases (ensemble de joints créés lors de la remontée des couches par isostasie et perpendiculaires aux joints de stratification).

La figure III.1b montre la craie à l'échelle de l'affleurement et permet de visualiser la régularité de ces diaclases espacées en moyenne d'une dizaine de centimètres. Un échantillon de quelques mètres est donc en principe suffisant pour les représenter. Il est clair qu'à cette échelle, la notion de porosité efficace est totalement différente. On la chiffre en général entre 1 et 5 %.

III.1.a.3) Echelle mégascopique.

Pour expliquer des perméabilités de l'ordre de 10^{-3} m/s associées à des porosités efficaces de 10, voire 15 %, il nous faut considérer une échelle encore plus grande.

²³ Un parallélisme évident peut être établi avec la figure I.1 p.10



5 μ m pores

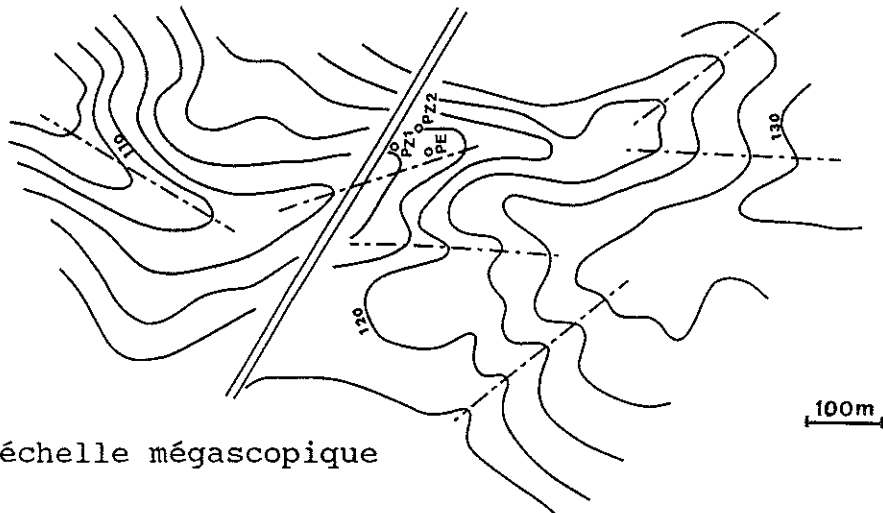


microfissures 1cm

a) échelle microscopique



b) échelle macroscopique 15cm



c) échelle mégascopique

figure III.1: description de la porosité de la craie hesbignonne à différentes échelles.

Suite à la proximité d'accidents tectoniques tels que des failles, mais également à cause des bombements du socle rocheux, l'ouverture des diaclases peut augmenter considérablement; de nouveaux joints peuvent également apparaître (Bolly in Radu et al.1987). Ces mécanismes sont responsables de la formation de zones plus poreuses. Dans ces zones de moindre résistance, l'érosion se manifeste de manière plus importante. C'est pour cette raison qu'elles peuvent être visualisées en surface sous la forme de vallées sèches: dépressions dans la morphologie des terrains superficiels associées à des axes d'écoulement souterrains préférentiels.

La figure III.1c représente de tels linéaments dans la région de Crisnée (l'identification des vallées sèches a pu être établie sur base de l'interprétation de photos aériennes).

III.1.b) Description qualitative du comportement de la substance étudiée dans un tel milieu.

Le transport des nitrates dans les couches meubles, superficielles, et désaturées peut être représenté, en première approche, par un modèle physico-chimique certainement complexe, mais essentiellement vertical.

Il n'en est pas de même dans les couches aquifères plus profondes que nous nous proposons d'étudier. Les nitrates, miscibles à l'eau, s'y répartissent dans toutes les directions de l'espace, essentiellement à l'intérieur des fissures et des pores. Les teneurs habituellement rencontrées dans l'aquifère de Hesbaye n'excèdent pas 200 ppm. Ils seront donc considérés comme dilués idéalement, n'affectant pas l'écoulement gravitaire.

En outre, les différents mécanismes susceptibles d'affecter la répartition d'une telle substance sont repris ci-dessous.

1°) La convection.

Mis à part les quelques zones fortement karstifiées, on peut considérer que les écoulements dans la craie sont laminaires, les gradients de hauteur piézométrique restant faibles (de l'ordre du pour-cent). Ces sollicitations convectives sont toutefois suffisantes pour engendrer un transport tridimensionnel rendant incertaines les corrélations entre les teneurs observées dans l'aquifère et les apports de surface au même endroit.

2°) La dispersion hydrodynamique.

Pour le type de fissuration que nous venons de décrire, on peut montrer, par un rapide calcul relatif au diagramme de Miller et Allman (figure I.15) que les concentrations s'homogénéisent latéralement dans les fissures par diffusion. En outre, nous supposerons (comme c'est très souvent le cas dans les milieux fracturés) que la dispersion a un caractère essentiellement mécanique (domaine IV dans le diagramme de Saffman figure I.16) lié à la distribution des fissures, à leur irrégularité, et à leur ouverture.

3°) L'effet d'eau immobile.

Lorsqu'on compare les perméabilités de pores et de fissures (10^{-8} m/s pour les premières contre 10^{-4} m/s pour les secondes), il est certain que toute l'eau contenue dans les pores (40 % du volume rappelons-le) peut être considérée comme immobile. Cette propriété confère à la craie une très grande potentialité de stockage temporaire. Ce phénomène peut être invoqué pour expliquer l'inertie du "background" des concentrations de nitrates. Celui-ci resterait élevé malgré une restriction des épandages ces dernières années.

4°) L'adsorption.

La calcite qui constitue les 95 % de la matrice solide de la craie possède un réseau cristallin régulier dont les seuls sites non neutres électriquement sont les liaisons de bordure. L'adsorption irréversible est donc faible pour ce type de matériau (contrairement aux argiles).

Par contre, la surface spécifique de la craie est élevée (environ $350 \text{ dm}^2/\text{dm}^3$) et, étant donné la petite taille des coccolithes qui composent le squelette, il existe une quantité non négligeable d'eau hygroscopique et d'eau pelliculaire pouvant jouer un rôle dans un mécanisme d'adsorption réversible.

En effet, il n'est pas certain que cette eau, qui donne au squelette poreux toute sa résistance mécanique²⁴, soit suffisamment libre pour interagir avec les ions nitrates de manière continue et purement diffusive.

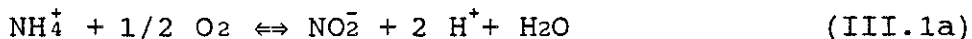
5°) La dégradation.

L'ion nitrate (NO_3^-) ne représente en fait qu'une des formes sous lesquelles l'azote peut se présenter dans les eaux.

On peut en réalité distinguer, dans un ordre décroissant de charge de l'atome N:

- NH_4^+ , l'ion ammonium (N^{3+})
- N_2 , l'azote gazeux (N^0)
- NO_2^- , l'ion nitrite (N^{3-})
- NO_3^- , l'ion nitrate (N^{5-})

Pour cette raison, l'azote possède un fort potentiel de réactivité qui se traduit par l'existence de différents couples Redox:



(en présence de substances hydrocarbonées)

²⁴ Il est possible de montrer que, lorsqu'on élimine l'eau hygroscopique en chauffant la craie au delà de 500 °C, on obtient un solide granulaire pulvérulent et sans cohésion.

III.2. METHODES DE DETECTION DES NITRATES.

III.2.a) Introduction.

Pour doser les nitrates dans l'eau des nappes aquifères, la méthode adéquate est de prélever de manière dynamique, c'est-à-dire lorsque l'eau est en circulation soit naturelle (à un exutoire), soit artificielle (lors d'un pompage d'essai). On mesure alors, dans l'eau prélevée, la concentration par électrode spécifique. En effet, contrairement à l'eau de mer dont la conductivité est essentiellement influencée par la salinité (Na^+ , Cl^-), l'eau douce a une conductivité qui dépend d'un ensemble d'éléments majeurs (Ca^{++} , Mg^{++} , Na^+ , K^+ , NO_3^- , SO_4^{--} , CO_3^{--} , HCO_3^- , Cl^- , SiO_3). Les nitrates ne constituent qu'une faible proportion de cet ensemble. Un dosage in situ indirect par prospection géoélectrique n'est donc pas possible.

Par contre, en laboratoire, il est possible de reconstituer une eau de synthèse en équilibre chimique avec la craie (saturation en CaCO_3 pur) et dont les propriétés électriques dépendent essentiellement de la teneur en nitrates. Nous décrirons, dans cette section, une nouvelle méthode pour doser ces solutions de manière indirecte: la microdiélectrométrie. L'avantage de ce procédé est de permettre une mesure instantanée, même pour de faibles teneurs en nitrates (contrairement à la mesure par conductométrie classique).

Enfin, signalons qu'il n'existe pas d'isotope radioactif de l'azote, ce qui élimine toute possibilité de détection radioactive. On peut cependant doser l'isotope stable de l'azote (^{15}N). Celui-ci est un mauvais marqueur des nitrates mais, couplé à une analyse chimique nitrate, il permet de définir le fractionnement isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$. Cette méthode est très utile pour identifier les mécanismes de transformation des nitrates et pour en détecter l'origine.

III.2.b) Dosage par électrode spécifique.

Nous décrivons brièvement ici le mode opératoire mis en oeuvre pour doser précisément, par potentiométrie, les nitrates dans une eau prélevée.

Ce dosage se fait en mesurant, par rapport à une électrode de référence (Hg/HgSO_4 dans notre cas), le potentiel E développé par une électrode en polymère à base d'ammonium. Ce potentiel s'exprime par la loi de Nernst comme suit:

$$E = E_0 - R.T/F \cdot \ln \left(a_{\text{NO}_3^-} \right) \quad (\text{III.2})$$

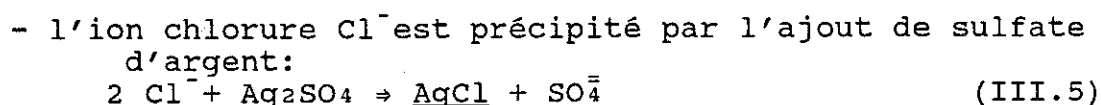
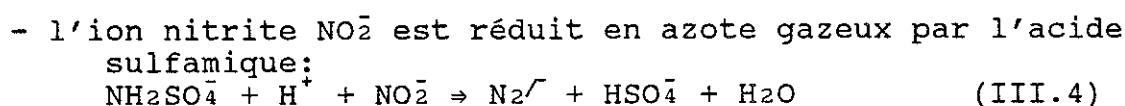
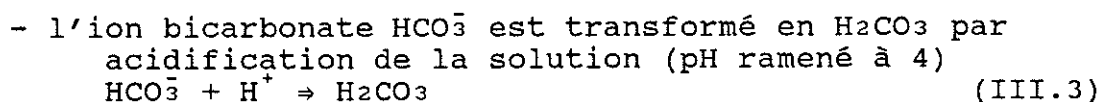
- où E_0 = potentiel standard de l'électrode
 R = constante des gaz parfaits
 T = température absolue de la solution dosée
 F = constante de Faraday
 $a_{\text{NO}_3^-}$ = activité de l'ion nitrate
 $a_{\text{NO}_3^-} = F_{\text{NO}_3^-} \cdot C_{\text{NO}_3^-}$

$F_{NO_3^-}$, coefficient d'activité de l'ion nitrate, relie l'activité et la concentration de l'ion et dépend essentiellement de la force ionique de la solution considérée.

Pour éviter une variation de ce coefficient en fonction des teneurs des autres éléments majeurs, une première précaution consiste à additionner un tampon ionique qui rend négligeable l'influence de ces éléments. En principe, l'addition de $2,5 \times 10^{-5}$ mole de K_2SO_4 est suffisante pour satisfaire à cette exigence.

Grâce à la relation III.2., on comprend que la température joue également un rôle sur la réponse de l'électrode. Il convient donc de faire un étalonnage à température égale à celle de l'échantillon dosé. En particulier, lorsqu'on dose de longues séries, on observe une dérive dont il faut en principe tenir compte, surtout pour les faibles concentrations.

Finalement, la spécificité de l'électrode n'est pas totale et il convient d'éliminer les principaux ions interférents:



Il est clair que l'ensemble de ces manipulations ne peut se faire qu'en laboratoire. Il s'agit donc d'une méthode précise, quantitative mais différée.

De plus, lorsque la solution nitratée imbibe un solide, il convient de broyer finement ce solide après séchage et d'en extraire le contenu nitraté par lessivage. Cette méthode est donc également destructive en ce qui concerne l'échantillon testé.

III.2.c) Mesures par microdiélectrométrie.

III.2.c.1) Présentation de la méthode.

Lorsqu'un matériau est soumis à un champ électrique \vec{E} , il se polarise. Cette polarisation \vec{P} , superposée à l'effet initial du champ électrique, donne une résultante appelée induction (\vec{D}). La permittivité diélectrique absolue (ϵ) du matériau est le rapport \vec{D}/\vec{E} et s'exprime en farad par mètre (cette grandeur lie la cause \vec{E} à la conséquence \vec{D}).

²⁵ Pour rappel, une mole s'obtient en multipliant un gramme de la substance choisie par son poids moléculaire.

On définit également la permittivité diélectrique relative (ϵ_r) comme le rapport de la permittivité diélectrique absolue du milieu (ϵ) à cette même grandeur dans le vide (ϵ_0). ϵ_r est un paramètre physique qui peut faire l'objet de mesures indirectes non destructives.

La méthode qui est présentée ici permet de déterminer, par l'intermédiaire de la permittivité diélectrique, la force ionique d'une solution (méthode indirecte).

1°) Principe.

Le fluide testé joue le rôle du diélectrique d'un condensateur. Aux bornes de ce condensateur, une tension alternative de fréquence choisie est appliquée. Par conséquent, \vec{E} et \vec{D} sont également alternatifs et la permittivité peut être représentée sous forme d'un nombre complexe: $\epsilon_{\text{complexe}} = \epsilon' + j.\epsilon''$. La partie réelle ϵ' est la constante diélectrique du fluide. La partie imaginaire ϵ'' est le facteur de pertes de charge, image du déphasage entre \vec{D} et \vec{E} . La réponse du condensateur est exprimée par les mesures de ϵ' et ϵ'' .

Si la tension appliquée est de très haute fréquence, les charges du diélectrique vont osciller très rapidement sans effectuer nécessairement un trajet important. La constante diélectrique correspondante est appelée permittivité non relaxée ϵ_u' .

Si la tension appliquée est de très basse fréquence, les charges du diélectrique vont pouvoir migrer. La constante diélectrique correspondante est appelée permittivité relaxée ϵ_r' .

C'est en déterminant ϵ' et ϵ'' et leur évolution dans le domaine fréquentiel qu'un matériau peut être caractérisé (notamment par ϵ_u' et ϵ_r'). Cette méthode est actuellement utilisée dans le domaine de la chimie des polymères pour optimiser des cuissons en autoclave et mesurer des diffusions très lentes d'eau dans les parties polymériques de plates-formes de forage.

Pour ces matériaux, des modèles électriques représentatifs du diélectrique ont été développés. Le plus général est représenté figure III.3. Il tient compte de la conductivité du milieu, de la polarisation permanente ou induite de celui-ci, et également de la polarisation des électrodes (Day 1987).

Les équations qui régissent le comportement d'un tel circuit électrique sont les suivantes:

$$\epsilon'_x = \epsilon'.L/(2.eb).[(\tan \delta)^2 + L/(2.eb)] / [(\tan \delta)^2 + L^2/(2.eb)^2] \tag{III.6a}$$

$$\epsilon''_x = \epsilon''.L/(2.eb).[(L-2.eb)/(2.eb)] / [(\tan \delta)^2 + L^2/(2.eb)^2] \tag{III.6b}$$

$$\tan \delta_x = \epsilon''_x/\epsilon'_x \tag{III.6c}$$

avec e_b = épaisseur de la couche bloquante de polarisation
 L = séparation des plateaux du condensateur
 $\epsilon' = \epsilon'_u + (\epsilon'_r - \epsilon'_u) / [1 + (\omega \cdot \tau)^2]$
 $\epsilon'' = \sigma / (\omega \cdot \epsilon_0) + [(\epsilon'_r - \epsilon'_u) \cdot \omega \cdot \tau] / [1 + (\omega \cdot \tau)^2]$
 $\omega = 2 \cdot \pi \cdot f$ = pulsation de la différence de potentiel imposée au condensateur
 τ = temps caractéristique de relaxation
 σ = conductivité diélectrique
 ϵ_0 = permittivité diélectrique du vide

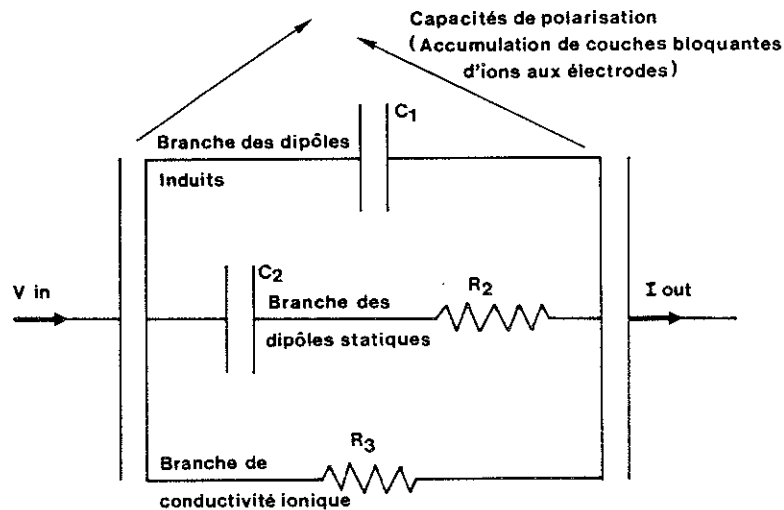


figure III.3: schéma électrique simulant le comportement diélectrique d'un polymère (d'après Day 1987).

2°) Application à la détection de nitrates.

Pour mesurer la conductivité σ d'un diélectrique obéissant aux équations mentionnées ci-dessus, la figure III.4. montre comment se placer dans les conditions optimales.

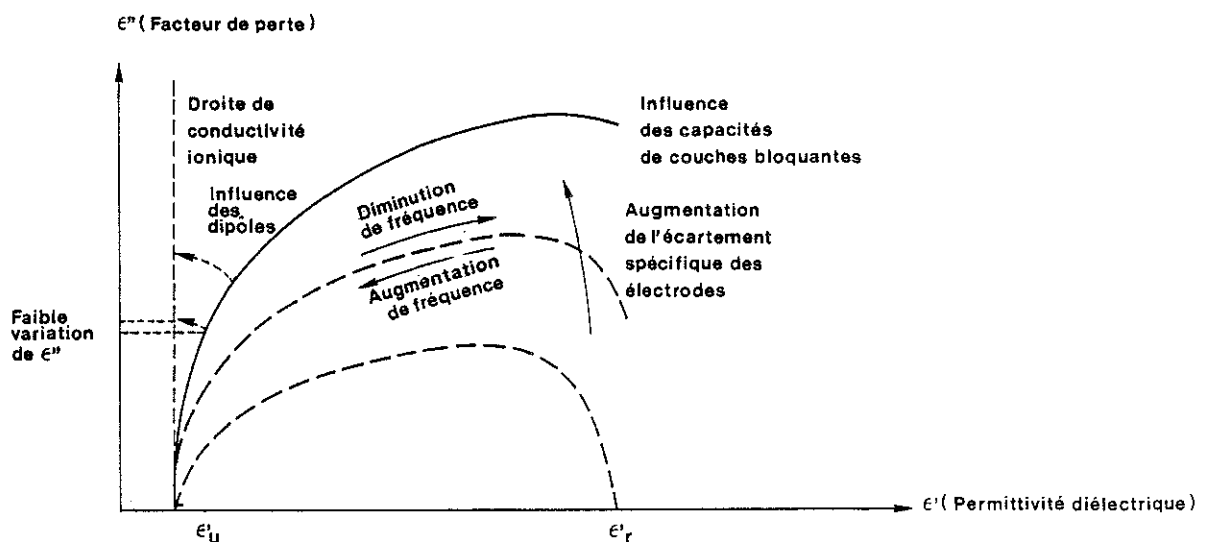


figure III.4: diagramme Cole-Cole (ϵ'' - ϵ') pour des matériaux polymériques (Day 1987).

- En jouant sur le type de condensateur (modifier l'écartement L entre les 2 plaques suivant des règles précises), on choisit la courbe de comportement la plus ouverte possible (pour se rapprocher d'une droite verticale purement conductive). L'importance relative de la polarisation est ainsi diminuée.
- En sélectionnant une fréquence suffisamment élevée, on diminue dans l'absolu la polarisation aux électrodes (on obtient une faible épaisseur de la couche bloquante et on mesure un facteur de perte en régime non relaxé avec terme conductif prépondérant).

3°) Appareillage.

Le condensateur plan posant des problèmes de géométrie variable avec une sensibilité importante au bruit de fond, il a progressivement été remplacé par un capteur sur un bâti fixe avec un système électronique permettant de résoudre les problèmes de calibrage. En outre, un diode thermique a été ajoutée pour mesurer la température.

Les capteurs sont actuellement très petits (1 cm^2 de surface sensible); il en existe de plusieurs types (universel, haute conductivité, basse conductivité, ...). Ceux que nous utilisons sont conçus comme des circuits imprimés sur un film de "capton" résistant à la chaleur (150°C). Ils sont représentés figure III.5.

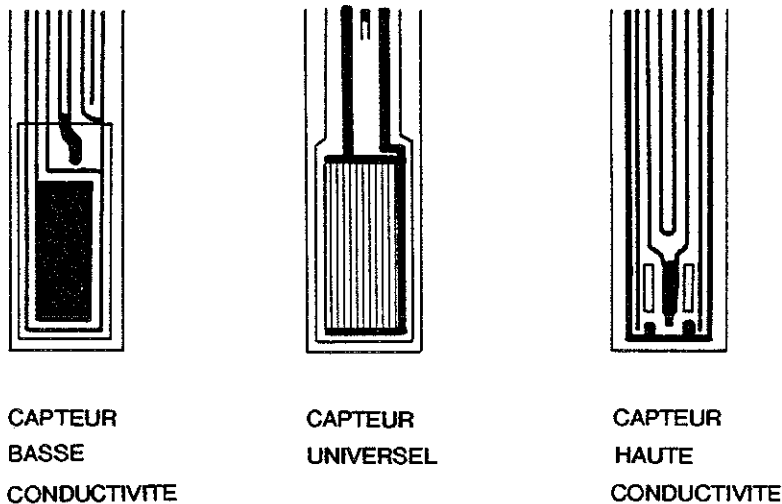


figure III.5: capteurs diélectriques (Micromet. Instruments)

Ils sont connectés à un système d'acquisition de données permettant de faire des mesures à intervalles très courts. Ce système est programmable. Il est en outre pourvu d'un logiciel d'interprétation graphique. Cet appareil, appelé microdiélectromètre SIII, est commercialisé par la firme Micromet Instruments Inc. Il permet d'envisager un domaine fréquentiel allant de 0 à 100.000 Hz pour le champ électrique sollicitant.

Nous l'avons couplé à un système de multiplexage. Nous pouvons ainsi, lors d'un cycle de quelques minutes, couvrir un domaine de 16 points de mesure. L'ensemble est décrit par la figure III.6.

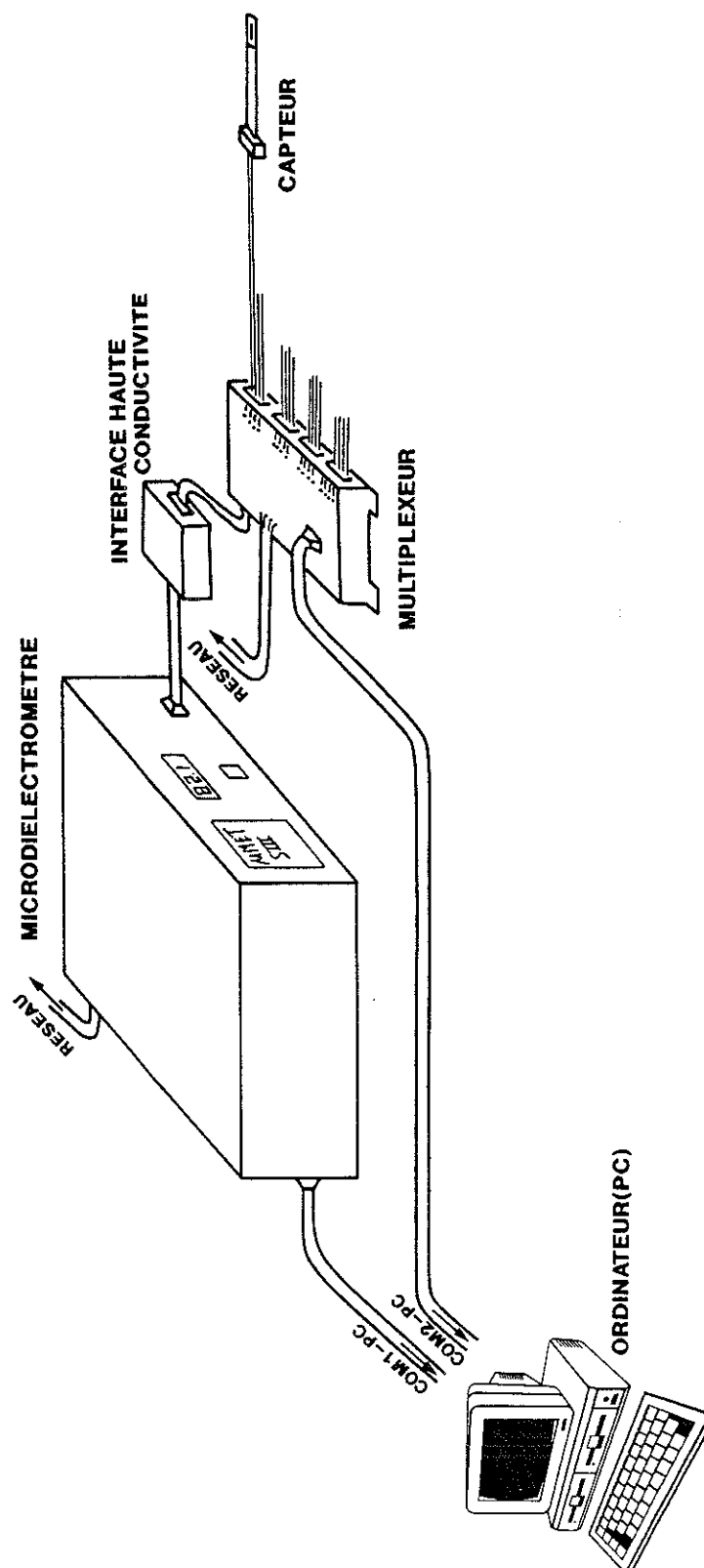


figure III.6: Système d'acquisition des mesures diélectriques.

III.2.c.2) Tests du dispositif.

Pour vérifier l'adéquation de la méthode au dosage des nitrates, nous avons procédé à 2 expériences simples.

1°) Balayage de fréquence comparatif.

Un balayage de fréquence consiste à mesurer ϵ' et ϵ'' pour un domaine fréquentiel choisi du champ électrique sollicitant. Cette opération a été réalisée pour un capteur plongé dans une solution saturée en calcite et contenant 200 ppm de NO_3 d'une part, et dans une solution témoin non nitratée d'autre part.

Les résultats obtenus sont représentés figure III.7, sous forme d'un diagramme $\log \sigma_a - \log f$, f désignant la fréquence de pulsation du champ, σ_a la conductivité apparente donnée par la relation $\sigma_a = \epsilon'' \cdot \epsilon_0 \cdot 2 \cdot \pi \cdot f$, et qu'il ne faut pas confondre avec la conductivité vraie (σ). En effet, ce calcul simple ne tient pas compte des différents phénomènes diélectriques pouvant intervenir (dipôles statiques, dipôles induits, polarisation d'électrode).

Ce graphique amène les constatations suivantes:

- un palier de conductivité apparente maximale est atteint pour les hautes fréquences (plus rapidement dans le cas de la solution témoin non nitratée);
- en dehors de l'intervalle de fréquence $[f_1, f_2]$, la conductivité apparente de la solution nitratée est plus élevée que celle de la solution témoin.

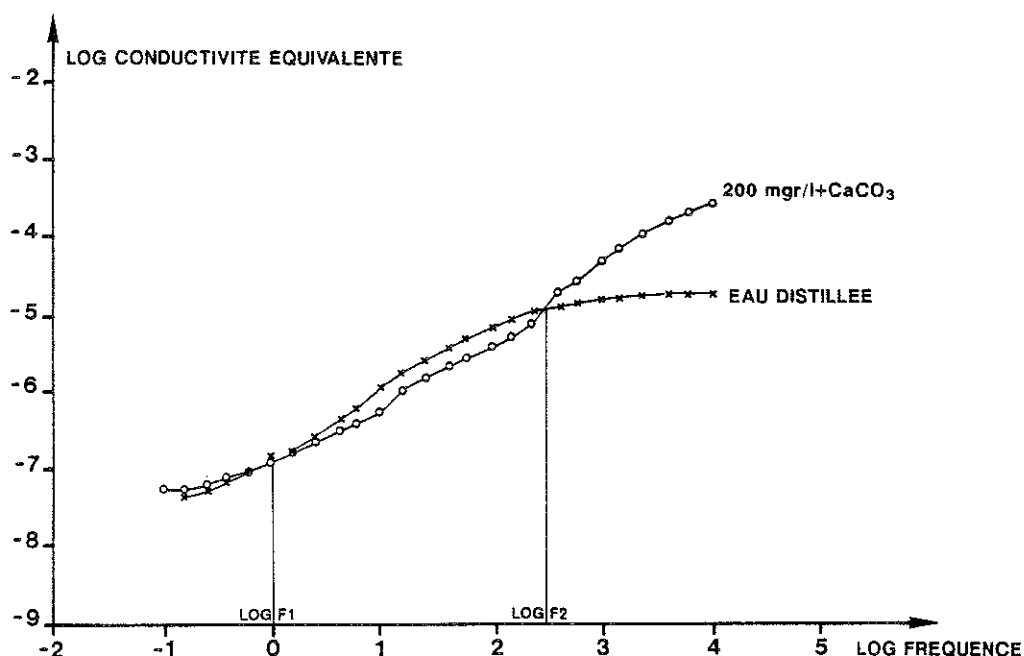


figure III.7: Balayages de fréquences (comparaison entre une solution témoin et une solution nitratée à 200 ppm)

Il est clair que, si les mesures étaient représentatives d'un phénomène purement conductif, la conductivité calculée ne varierait pas avec la fréquence et serait plus importante pour une solution nitratée. Le domaine des fréquences élevées est donc bien, au vu des mesures, celui qui correspond le mieux à ces caractéristiques. C'est pour ces fréquences qu'un contraste maximum est observé.

2°) Cinétique de diffusion.

Il s'agit de voir s'il est possible de mesurer, au cours du temps, une variation de la teneur en nitrate de l'eau interstitielle.

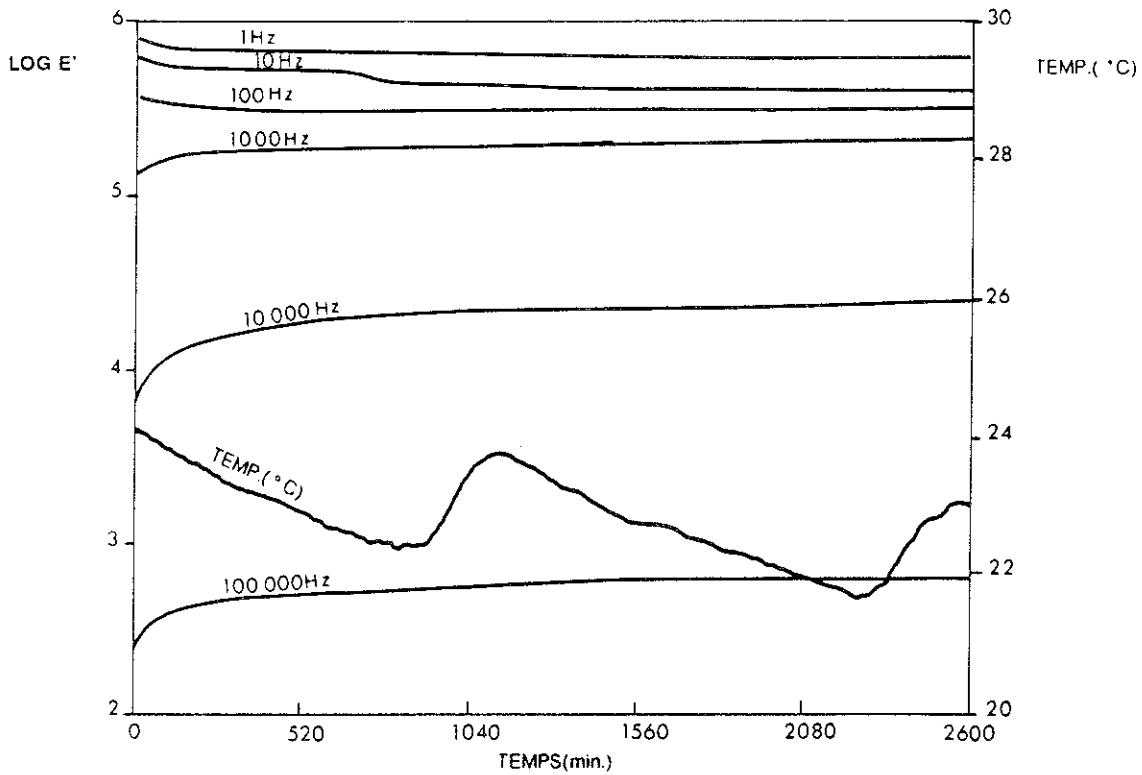
Des cubes décimétriques de craie sont saturés en eau non nitratée, et un capteur γ est introduit. La variation des paramètres diélectriques lorsque le bloc est plongé en milieu nitraté est suivie au cours du temps et ce, jusqu'à l'obtention d'un palier de conductivité apparente. On suppose alors qu'il y a équilibre entre l'eau interstitielle et la solution ambiante.

Les résultats sont représentés graphiquement figure III.8. pour le cas où le milieu ambiant a une concentration initiale de 200 ppm, et figure III.9 pour le cas où cette concentration est de 10 ppm.

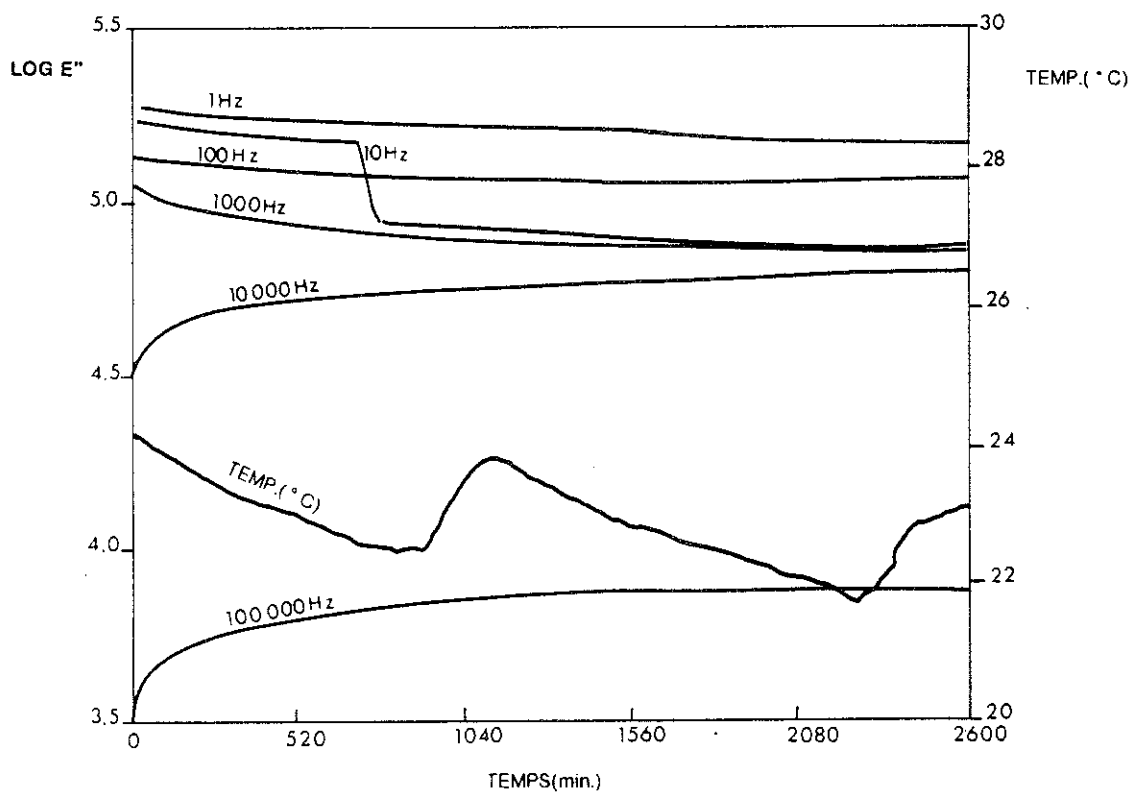
Ces graphiques logarithmiques montrent, pour chaque fréquence, l'évolution dans le temps des paramètres diélectriques ϵ' et ϵ'' avec, en parallèle, l'évolution de la température.

Les constatations suivantes peuvent en être déduites:

- conformément aux résultats des balayages, les basses fréquences engendrent une évolution décroissante des paramètres diélectriques au cours du temps; au contraire, les hautes fréquences engendrent une évolution croissante.
- une cinétique peut s'observer même pour de faibles contrastes de concentration (10 ppm). La méthode est bien adaptée aux faibles concentrations qui sont rencontrées dans la pratique.
- un équilibre entre la solution ambiante et l'eau interstitielle est assez vite réalisé (après 2 jours). Ceci s'explique par la diffusion des nitrates dans plusieurs directions (verticale et horizontale) et par la faible distance de migration (2 cm environ entre les faces du cube et la logette du capteur).
- les valeurs des paramètres diélectriques ne sont pas identifiables à celles observées dans les solutions étalons. Ceci peut s'expliquer par la présence de suspensoïdes de craie modifiant la dynamique de migration des charges.

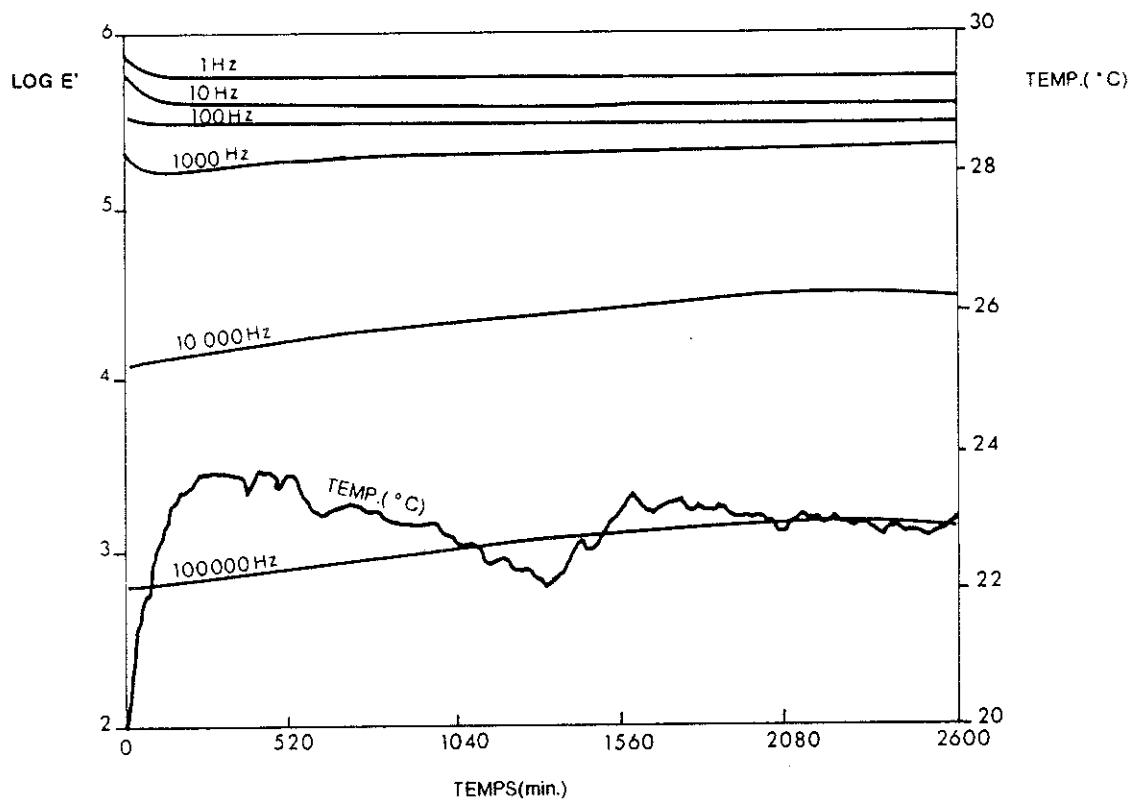


a) courbes $\log \epsilon'$ - temps

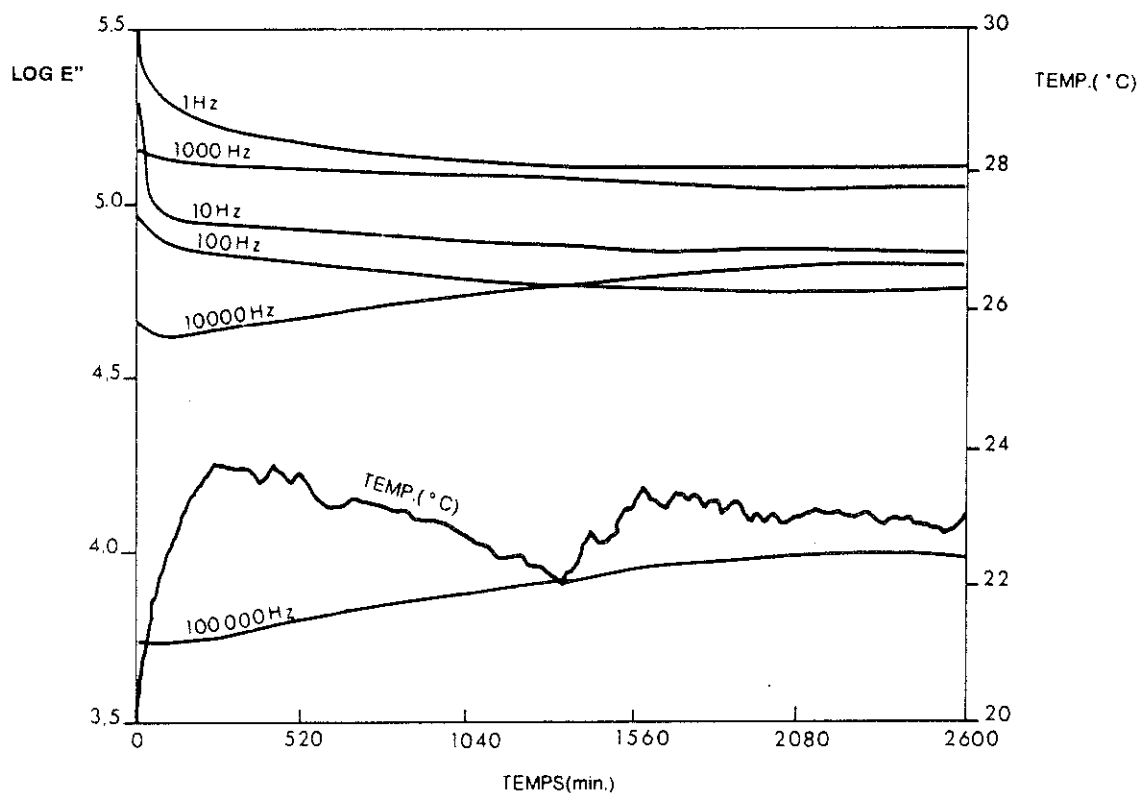


b) courbes $\log \epsilon''$ -temps

figure III.8: cinétique de diffusion observée par microdiélectrométrie: concentration ambiante initiale = 200 ppm



a) courbes $\log \epsilon'$ - temps



b) courbes $\log \epsilon''$ -temps

figure III.9: cinétique de diffusion observée par microdiélectrométrie: concentration ambiante initiale = 10 ppm

III.2.c.3) Etalonnage des mesures.

Si, pour la raison que nous venons de voir, il n'est pas possible d'étalonner la méthode pour des mesures au sein même d'un échantillon crayeux, on peut cependant espérer que les mesures soient reproductibles lorsqu'on considère une solution dépourvue de particules solides.

Pour démontrer la qualité de la méthode, un grand nombre de balayages de fréquence ont été réalisés dans une ambiance thermostatisée sur des solutions étalons de concentrations croissantes.

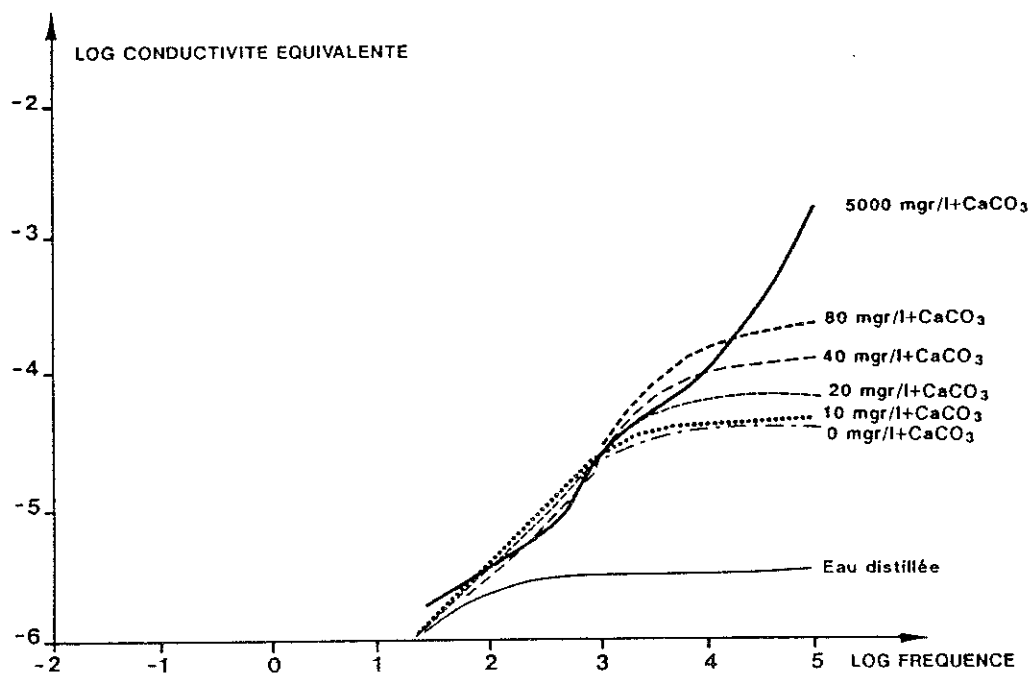
Ainsi, il a été prouvé que:

- la méthode est sensible aux ions chlorures et aux ions nitrates; toutefois, les résultats sont différents; ceci tend à démontrer une certaine spécificité (figure III.10);
- les capteurs à large écartement spécifique (capteur haute conductivité donnent des courbes de fréquence plus plates (comportement plus conducteur) mais toujours bien contrastées aux hautes fréquences (figure III.11);
- la température semble jouer un rôle secondaire, mais non négligeable, sur la dynamique de migration des charges entre les électrodes du capteur (figure III.12 à comparer à la figure III.11);
- les mesures, répétées 5 fois pour chaque point de mesure, sont rigoureusement reproductibles.

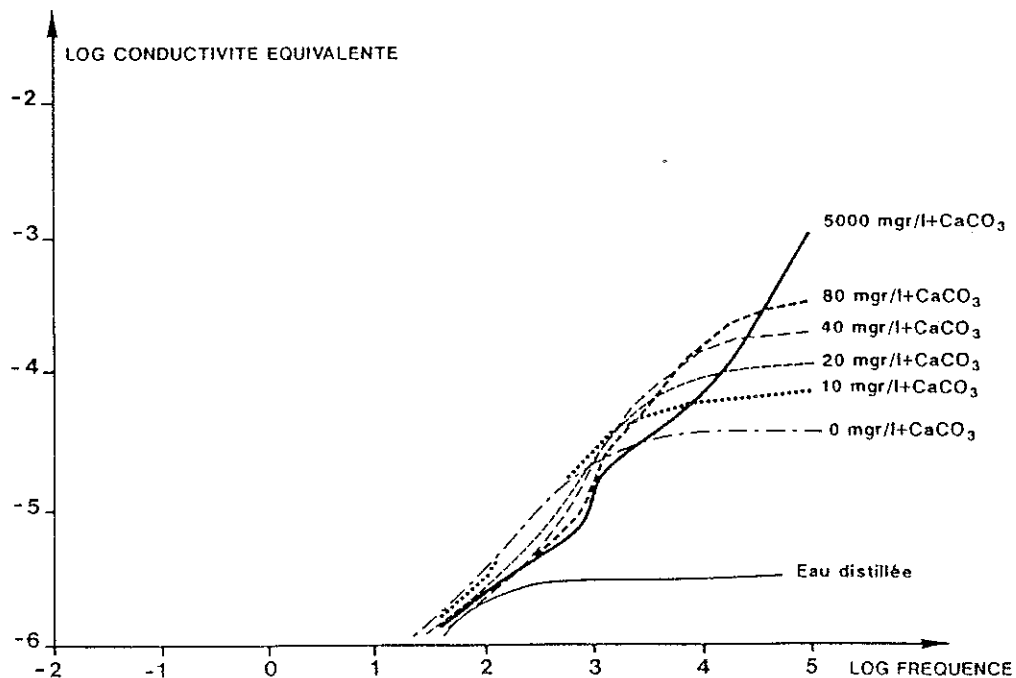
Grâce à ces résultats, nous avons pu tracer, aux fréquences élevées (10000 à 100000 Hz), des courbes d'étalonnage provisoires pour les 2 types de capteurs, les 2 ions testés et les 2 températures envisagées (figure III.13).

Enfin, en traçant, pour le premier test, le graphique $\epsilon''-\epsilon'$ (appelé également diagramme Cole - Cole), on remarque (figure III.14) que la solution aqueuse semble bien avoir un comportement diélectrique relativement classique avec effet conducteur et présence de couches bloquantes (courbe fort ouverte sur le diagramme).

Quoiqu'il en soit, il s'agit là d'une méthode non destructive qui permet de suivre en direct, de manière plus ou moins quantitative, l'évolution du contenu ionique d'une solution.

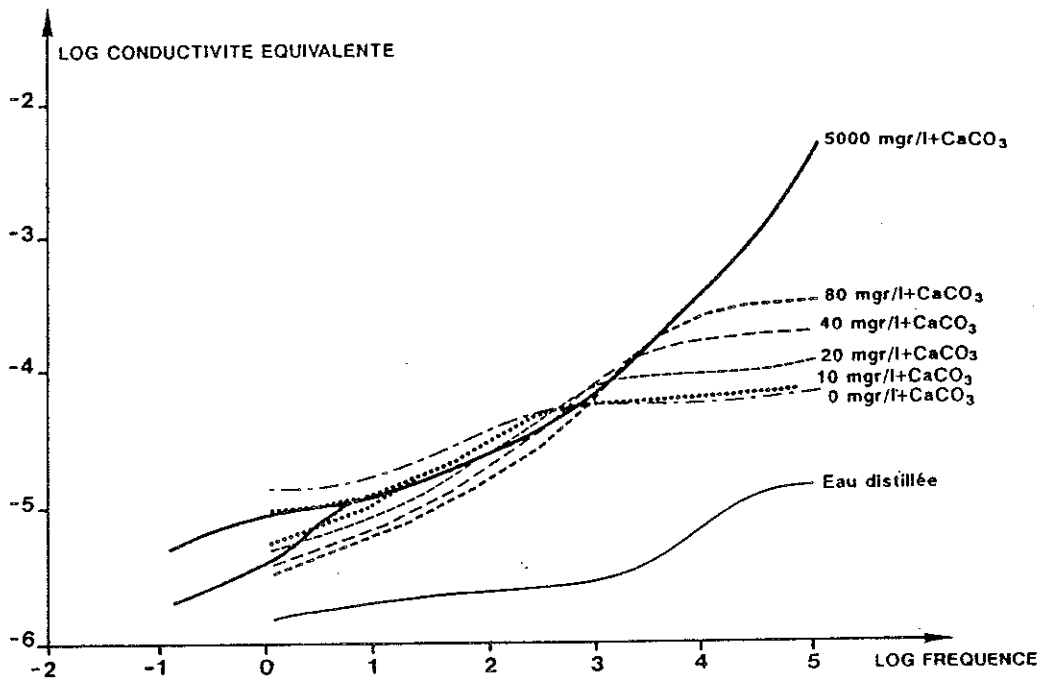


a) solutions nitratées de concentrations croissantes

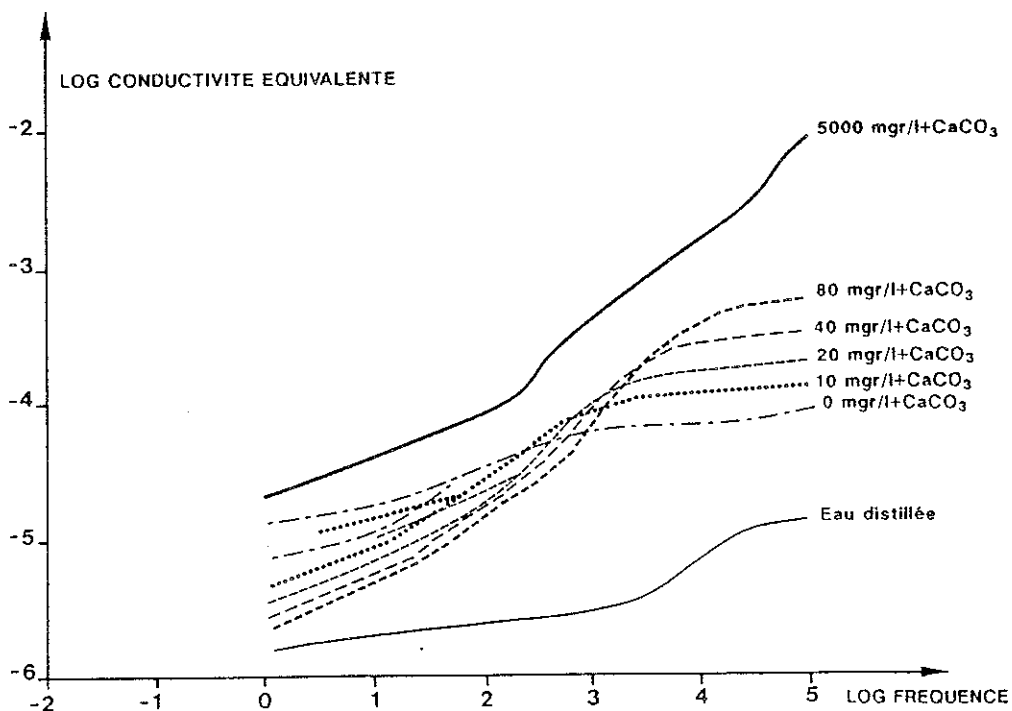


b) solutions chlorurées de concentrations croissantes

figure III.10: balayages de fréquence, capteur universel, température de thermostatisation: 31°C

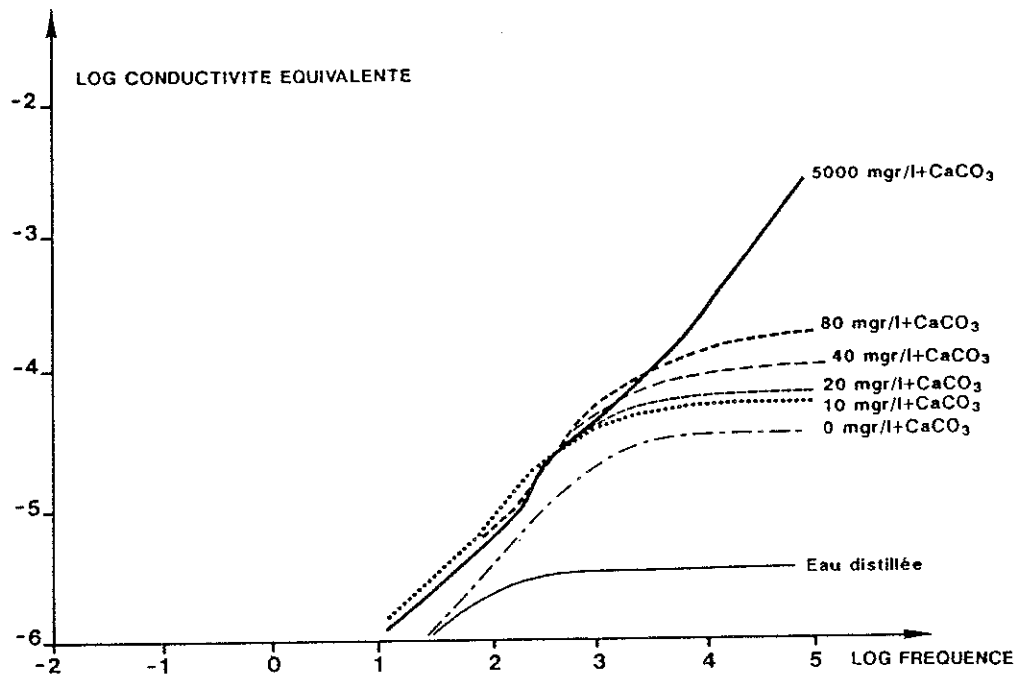


a) solutions nitratées de concentrations croissantes

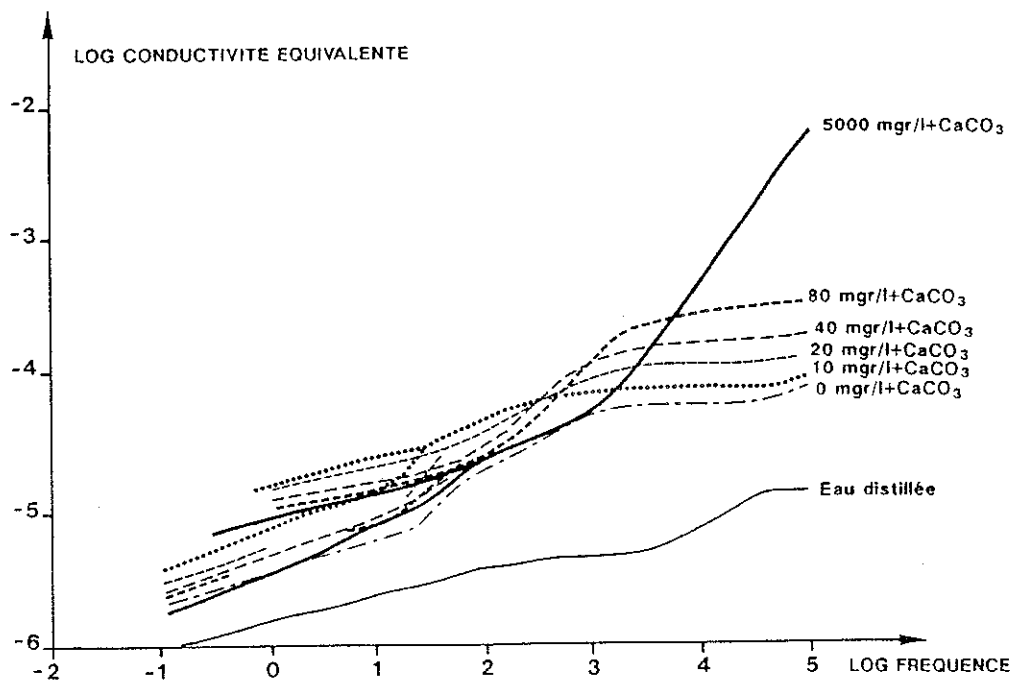


b) solutions chlorurées de concentrations croissantes

figure III.11: balayages de fréquence, capteur haute conductivité, température de thermostatisation: 31°C

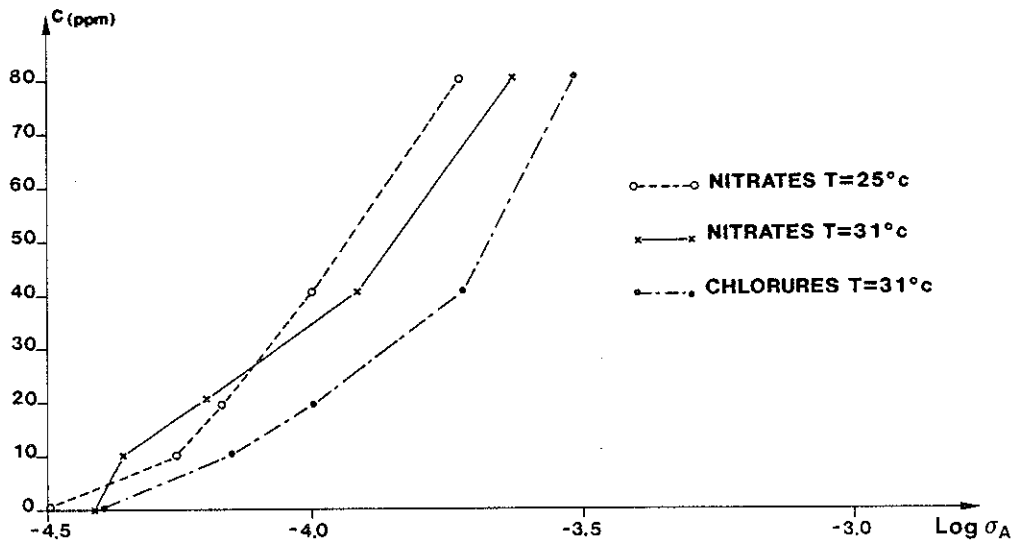


a) capteur universel

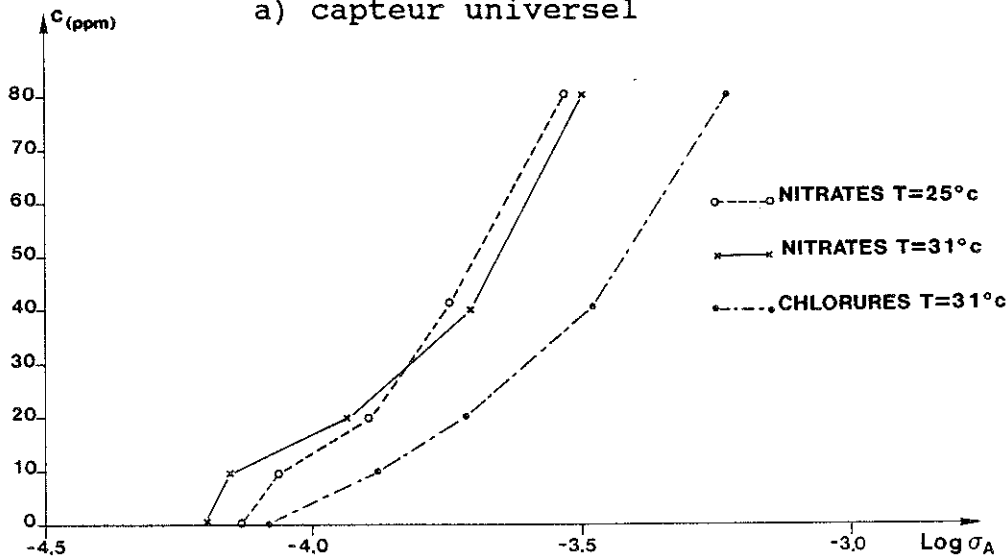


b) capteur haute conductivité

figure III.12: balayages de fréquence, solutions nitratées de concentration croissante, température de thermostatisation: 25°C



a) capteur universel



b) capteur haute conductivité

figure III.13: courbes d'étalonnage de la conductivité apparente

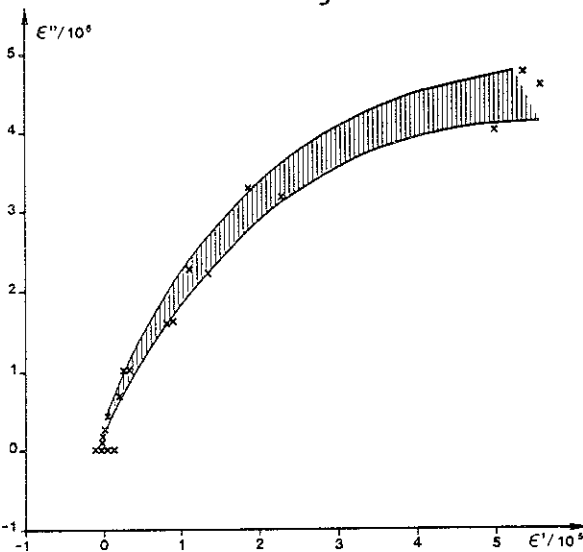


figure III.14: diagramme Cole-Cole ($\epsilon'' - \epsilon'$) pour une solution nitratée.

III.3. CARACTERISATION DE LA CRAIE POREUSE.

Nous avons vu que, dans la craie, la quantité de pores est très importante et joue un rôle non négligeable sur le transport aux échelles macro et mégascopiques. Il est donc important de caractériser ses propriétés pour faire une globalisation correcte.

III.3.a) Quantification de la diffusion dans les pores.

Puisque la circulation d'eau dans les pores est faible, la diffusion y joue un rôle important. Dans cette section, nous nous proposons d'évaluer le coefficient de diffusion associé à la matrice poreuse. Dans ce but, nous avons procédé à des essais simples, sans mise en pression.

III.3.a.1) Mode opératoire.

Le dispositif utilisé pour l'essai est représenté figure III.15. Il comporte un réservoir de solution nitraté de concentration c_0 (1) auquel est raccordée, par un tuyau d'amenée (2), une gaine en viton (3). L'éprouvette cylindrique à tester (4) (longueur 40 mm, diamètre 25 mm) est saturée (en eau) sous vide puis introduite dans la gaine. Le gradient de pression interstitielle est maintenu nul par l'intermédiaire d'un tuyau de retour (5) contenant de l'eau saturée en carbonate de calcium et ne contenant pas de nitrates. Cette eau est en équilibre chimique avec la matrice crayeuse; on évite ainsi de modifier la structure et donc les propriétés de la porosité.

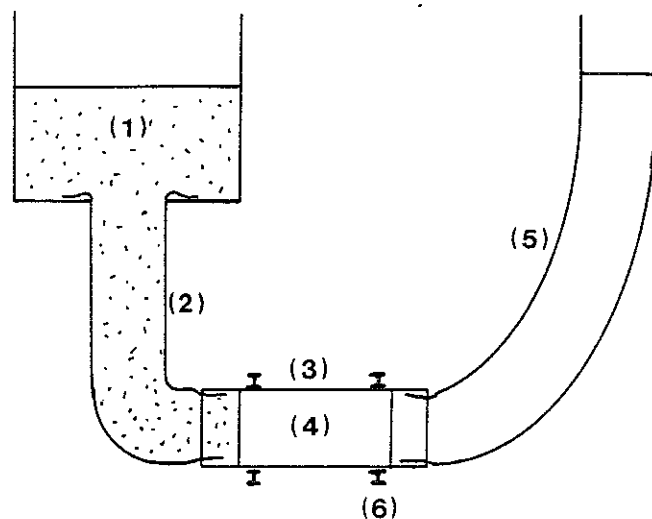


figure III.15: dispositif utilisé pour les tests de diffusion moléculaire sur la craie poreuse.

Pour maintenir correctement l'étanchéité latérale, l'éprouvette est enduite d'un verni siliconé et maintenue par des colliers de serrage (6). Les concentrations imposées aux frontières de l'éprouvette sont constantes car le taux de dilution est faible puisqu'un bulleur homogénéise la solution. Toutefois, pour les expériences de longue durée, les solutions en (1) et (5) sont renouvelées tous les 3 jours.

Lorsque l'expérience de diffusion est terminée, l'éprouvette est immédiatement tronçonnée, de telle sorte que le processus de diffusion est immédiatement stoppé. Chaque portion est alors séchée à l'étuve puis broyée le plus finement possible (100 % de passant au tamis de 63 microns). Les nitrates sont ensuite récupérés en lessivant à l'eau les solides broyés. Un dosage par électrode spécifique est réalisé sur les solutions ainsi obtenues.

III.3.a.2) Présentation des résultats.

Nous avons procédé à des mises en contact de durée croissante (8h20', 1 jour, 3 jours, 7 jours) avec des solutions nitratées de concentration c_0 égale à 50 g/l. Les résultats correspondants sont repris figure III.16 où sont également indiquées les valeurs de porosité des éprouvettes (image de la similitude des échantillons).

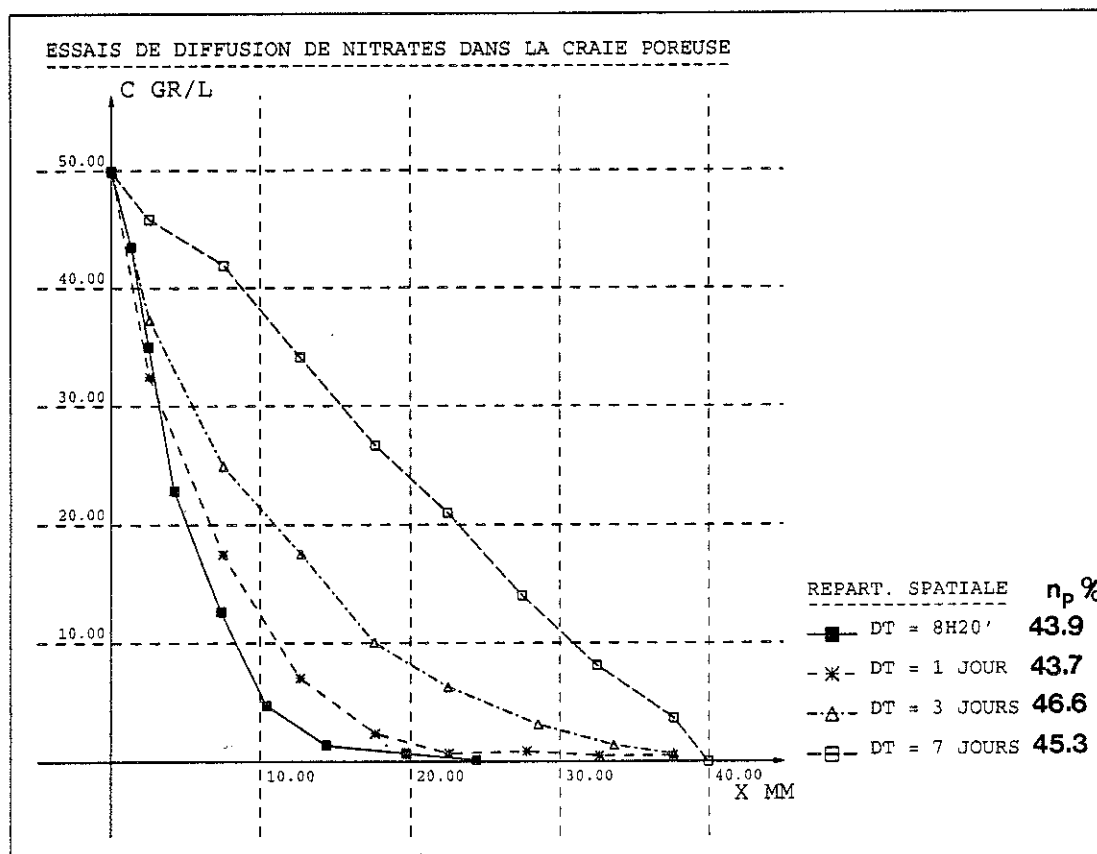


figure III.16: résultats bruts des essais de diffusion moléculaire sur craie poreuse.

On constate qu'une portion de plus en plus importante de l'éprouvette est contaminée au fil du temps. Finalement, après une semaine, un régime permanent de diffusion s'installe (pente constante de la courbe $c-x$) et le débit constant de nitrate pénétrant dans l'échantillon est égal au débit évacué à très faible concentration à l'autre extrémité de l'éprouvette.

Ceci montre l'importance du renouvellement des solutions dans le réservoir et le tuyau de retour. Pour l'expérience de 7 jours, les solutions ont été récupérées et dosées après leur mise en contact avec la craie. On obtient le tableau suivant:

temps écoulé (jours)	c (x = 0 mm) c réservoir entrée (ppm)	c (x = 40 mm) c tuyau de retour (ppm)
3	48990	91
6	45900	142
7	47960	161

tableau III.1: concentrations aux bornes de l'éprouvette lors d'une diffusion de 7 jours.

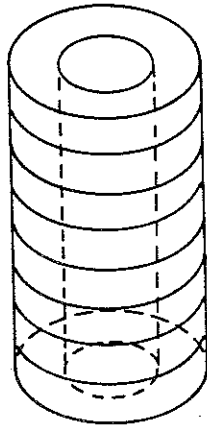
On remarquera que le contraste de concentration entre les solutions est faible, mais qu'il augmente au cours du temps. Ceci est normal puisque, parallèlement, le gradient de concentration diminue à l'entrée et augmente à la sortie.

Signalons que, pour vérifier l'homogénéité de la concentration sur une tranche de l'éprouvette, le découpage est effectué conformément au schéma III.17a et que les dosages sur les pelures et les coeurs ne montrent pas de différences significatives (figure III.17b).

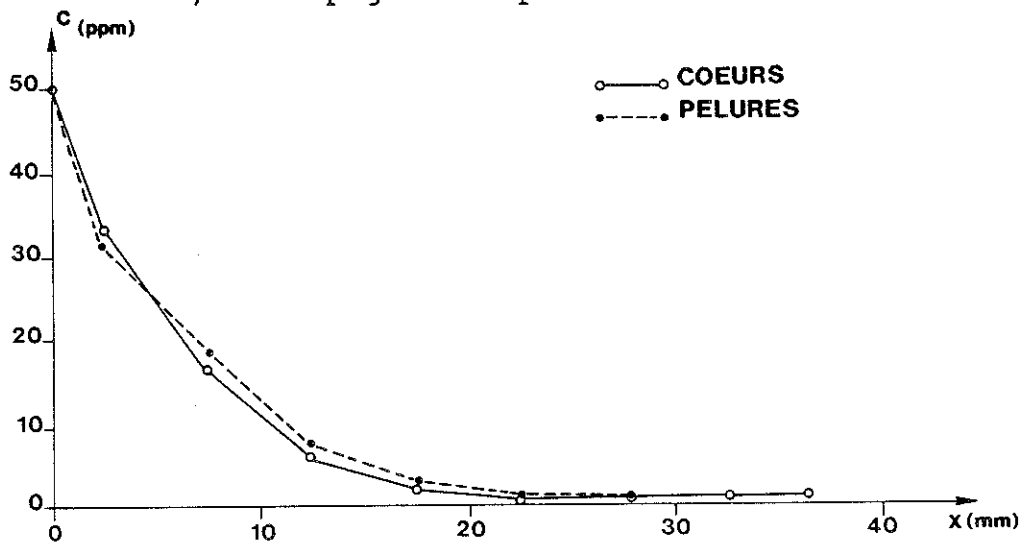
Enfin, pour juger de la reproductibilité de la méthode, l'essai de 3 jours a été recommencé avec un nouvel échantillon. On constate bien une faible variation du profil expérimental (figure III.18) et ceci malgré une différence significative de porosité totale (4,6 %). Il semble donc que la tortuosité des chenaux poreux soit peu influencée par une variation de la quantité totale de pores.

III.3.a.3) Interprétation.

Les expériences que nous venons de décrire correspondent bien à un système dans lequel le transport se fait de manière unidimensionnelle. La convection étant absente, il n'y a pas non plus de dispersion mécanique et il n'est pas nécessaire de distinguer 2 types d'eau (mobile et immobile).



a) découpage des éprouvettes



b) comparaison des profils (coeurs et pelures)

figure III.17: vérification de l'homogénéité latérale de la concentration lors des tests de diffusion moléculaire

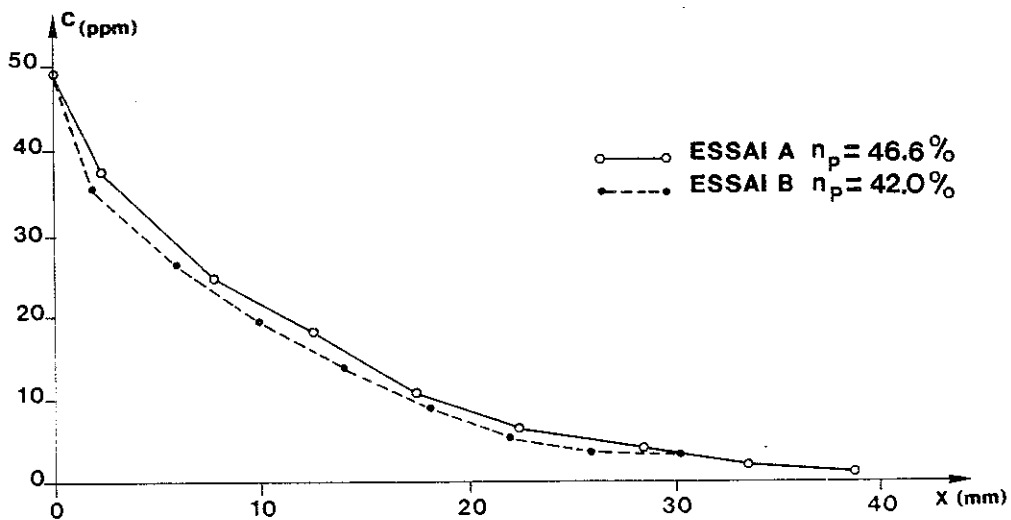


figure III.18: reproductibilité d'un essai de diffusion moléculaire sur craie poreuse.

Lorsque l'adsorption est réversible et linéaire, les équations correspondantes s'écrivent:

$$R_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} - D_m \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{III.7a})$$

$$F = K_d \cdot c \quad (\text{III.7b})$$

$$\text{avec } R_d = 1 + (1-n)/n \cdot \rho_s \cdot K_d$$

$$D_m = d_m \cdot T$$

$$n = \text{porosité totale du milieu}$$

Comme il n'a pas été possible d'individualiser la fraction adsorbée,²⁶ nous préférons remplacer ce système par l'équation suivante:

$$\frac{\partial c_T}{\partial t} - D_{ma} \cdot \frac{\partial^2 c_T}{\partial x^2} = 0 \quad (\text{III.8})$$

D_{ma} désigne ici un coefficient apparent de diffusion moléculaire (m^2/s), approximativement égal au rapport D_m/R_d ; c_T désigne la teneur totale en nitrate de l'échantillon ramenée au volume poreux.

L'équation purement diffusive (III.8) peut bien évidemment être résolue par le logiciel mis au point (méthode F.U.P.G. ou H.E.L.M.). Lorsque le nombre d'éléments est suffisant (20 dans notre cas) et que le pas de temps est assez petit (1 heure), le résultat est rigoureusement identique à la solution analytique du problème, à savoir:

$$c(x,t) = c_0 \cdot \text{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{D_{ma} \cdot t}} \right] \quad (\text{III.9})$$

Les résultats de la calibration du modèle sur les résultats expérimentaux sont visualisés figure III.19. Les coefficients de diffusion correspondants sont donnés par le tableau suivant (en regard de la porosité totale de l'échantillon testé).

durée de l'essai	n (%)	D_{ma} (m^2/s)
8 h 20'	43.9	$6.75 \cdot 10^{-10}$
1 jour	43.7	$3.50 \cdot 10^{-10}$
3 jours	46.6	$3.50 \cdot 10^{-10}$
7 jours	45.3	$6.75 \cdot 10^{-10}$

tableau III.2: coefficients apparents de diffusion obtenus par calibration des tests.

²⁶ Si nous supposons que l'adsorption est essentiellement réversible, il est clair qu'un lessivage collecte aussi bien les nitrates de l'eau interstitielle que ceux adsorbés à la surface du solide.

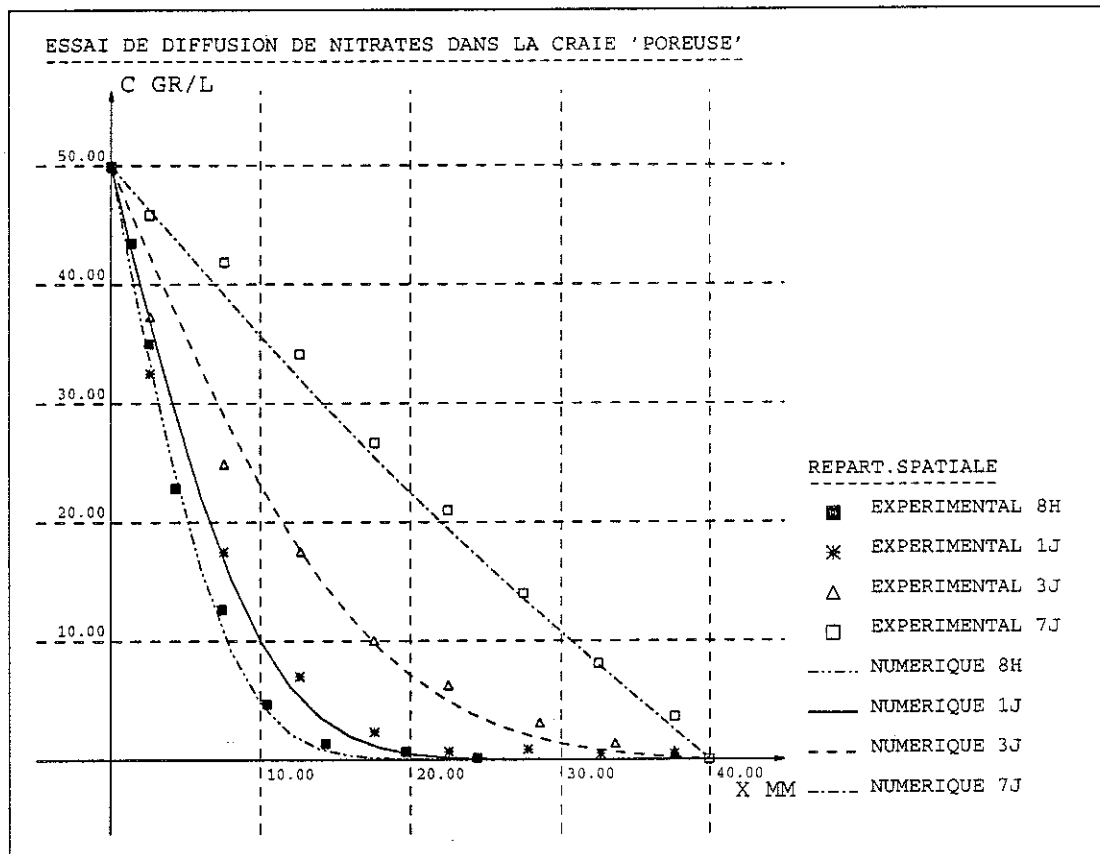


figure III.19: résultats de la calibration des tests de diffusion moléculaire sur craie poreuse.

On constate qu'il n'est pas possible de calibrer les 4 essais avec une même diffusion moléculaire. Cet état de fait n'est pas lié à la valeur de la porosité totale. Nous pensons plutôt à une variation de tortuosité des chenaux poreux. Si l'adsorption des nitrates sur la craie est supposée négligeable, il est possible de chiffrer cette tortuosité T ; elle varierait entre 0.44 et 0.84. La craie poreuse satisferait donc à la condition énoncée par Santalo (1976) selon laquelle la tortuosité est comprise entre 0 et 1.

III.3.b) Influence de la circulation d'eau dans les pores.

Les gradients de hauteur piézométrique existant dans la nappe de Hesbaye sont de l'ordre de quelques pour-cents. Même si la convection qui en résulte dans les pores est faible, elle peut être suffisante pour engendrer une dispersion mécanique non négligeable par rapport à la diffusion.

Pour cette raison, il était nécessaire de quantifier la dispersivité de la craie poreuse. Muller, dans le cadre de son travail de fin d'études (1990), a réalisé des essais sur craie poreuse avec une légère mise en pression. Dans cette section, ces tests sont présentés et discutés.

III.3.b.1) Mode opératoire.

Pour imposer un léger gradient de hauteur piézométrique, un dispositif plus élaboré a été réalisé. Il est représenté figure III.20.

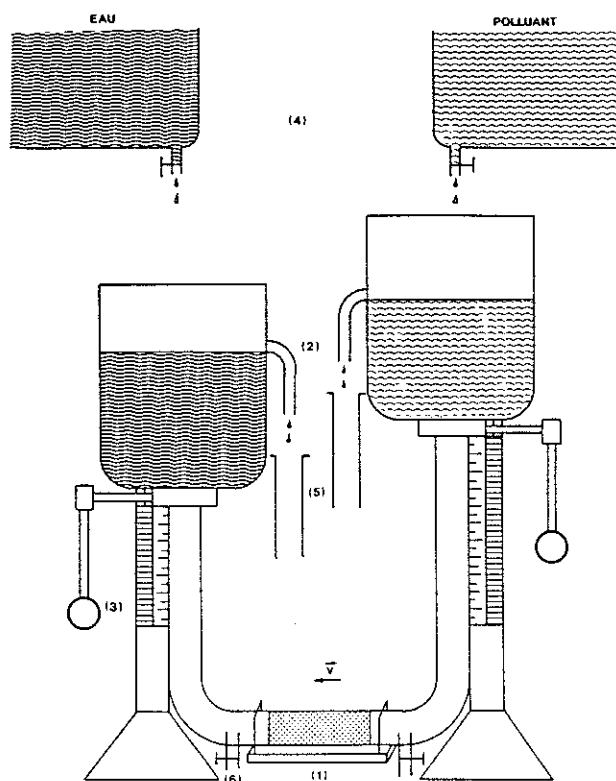


figure III.20: dispositif utilisé pour les tests de dispersion sur craie poreuse.

Le gradient constant agissant sur l'éprouvette horizontale (1) est déterminé par le niveau de 2 réservoirs à trop-plein (2). Les réservoirs sont montés sur des leviers à réglage précis (3) permettant un ajustement au mm. Ils sont alimentés par des réservoirs supérieurs (4), à plus grande capacité, qui assurent un apport en solution et une constance des concentrations pour les essais de longue durée. Le trop-plein de solution qui déborde des réservoirs inférieurs est récupéré en (5) pour alimenter les réservoirs supérieurs, la dilution constatée étant tout à fait négligeable. Pour assurer l'étanchéité latérale, les mêmes précautions que pour l'essai de diffusion ont été prises (vernis siliconé et colliers de serrage autour de la gaine en viton).

Lorsque l'essai est terminé, les solutions sont vidangées par l'intermédiaire des purges (6). Celles-ci possèdent des vannes de réglage qui permettent de ne pas modifier la pression interstitielle dans l'échantillon au cours de l'opération. Ensuite, le traitement de l'éprouvette recueillie est rigoureusement identique à celui effectué lors des essais de diffusion.

III.3.b.2) Présentation des résultats.

La première série de tests a consisté à injecter une solution nitraté de concentration $c_0 = 50$ g/l avec des gradients croissants de hauteur piézométrique: 0.123, 0.243, 0.366, 0.854 (carottes n° 1, 2, 3 et 4). L'effet sur la répartition spatiale des nitrates après 24 heures d'un tel traitement, est clairement visualisé à la figure III.21a où on reprend également l'essai de diffusion simple. Déjà pour un gradient de 12 %, la concentration mesurée peut varier du simple au double.

Pour le gradient de hauteur piézométrique de 36%, l'expérience a été répétée pendant 48 et 72 heures (figure 21b, carottes n° 5 et 6). Là encore, l'accroissement de la contamination est important. Pour l'essai de 72 heures, elle dépasse même la contamination maximale qu'il est possible d'observer dans un cas purement diffusif (distribution $c-x$ linéaire). La convection semble donc avoir un rôle plus important par rapport à ce qu'on suspectait a priori. Ceci peut être justifié par la présence occasionnelle de microfissures. Pour asseoir cette hypothèse, nous avons testé, dans les mêmes conditions que le premier essai ($i = 12\%$), une éprouvette dont la porosité est supérieure de 2 % (carotte n° 7). Malheureusement, elle a été mal serrée et une contamination latérale s'est produite. Ceci rend incertaine la comparaison représentée figure III.22a (même s'il semble que l'éprouvette la plus poreuse ne soit pas plus influencée par la convection).

Nous avons alors envisagé des éprouvettes plus longues (80 mm: carottes n°9 et 10 au lieu de 40 mm: carottes n° 3 et 8) en espérant rencontrer davantage de microfissures²⁷. Les résultats de ces essais (réalisés avec un gradient de 36%) sont repris figure III.22b. Ils montrent que les tests sont reproductibles et qu'il n'y a pas de contraste de dispersion entre les 2 types d'éprouvettes. Seul le premier échantillon que nous avons testé dans des conditions similaires (carotte n°3) présente un net écart par rapport aux autres et on peut se demander si cet échantillon n'était pas microfissuré.

III.3.b.3) Interprétations.

Dans son travail, Muller interprète les essais que nous venons de décrire en considérant que les répartitions spatiales obtenues résultent d'un processus purement dispersif. Outre une adsorption négligeable, il suppose qu'une grande proportion de la porosité est accessible à l'écoulement ($n_{eff} = 35$ à 40%), et que les autres phénomènes n'influencent pas le transport. Il admet que l'effet des 5 % d'eau immobile est négligeable et constate que le trajet convectif reste faible (l'action directe de la convection sur les résultats ne serait pas à considérer puisque la vitesse de convection v est, pour une telle porosité efficace, du même ordre de grandeur que la vitesse de Darcy soit 10^{-8} m/s).

²⁷ Il n'est pas toujours facile de distinguer les microfissures à l'oeil nu car elles peuvent être confondues avec des veines de calcite recristallisée qui sont beaucoup moins accessibles aux fluides.

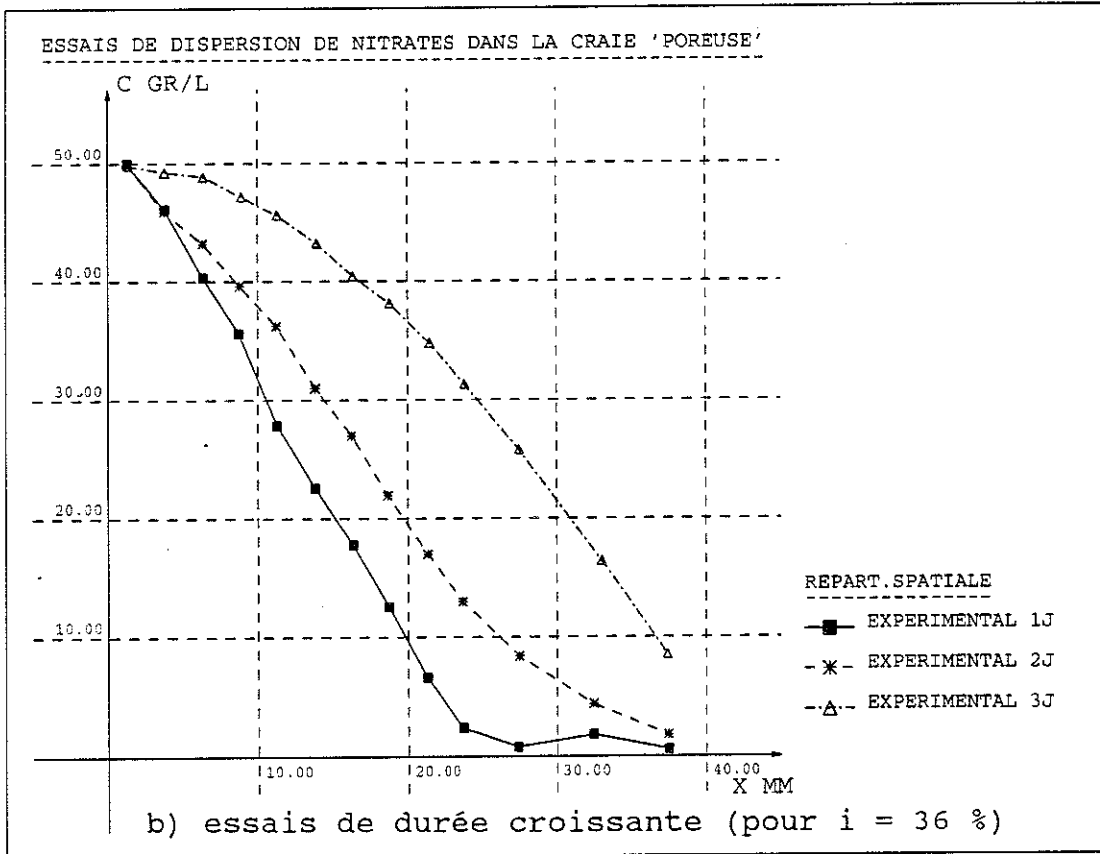
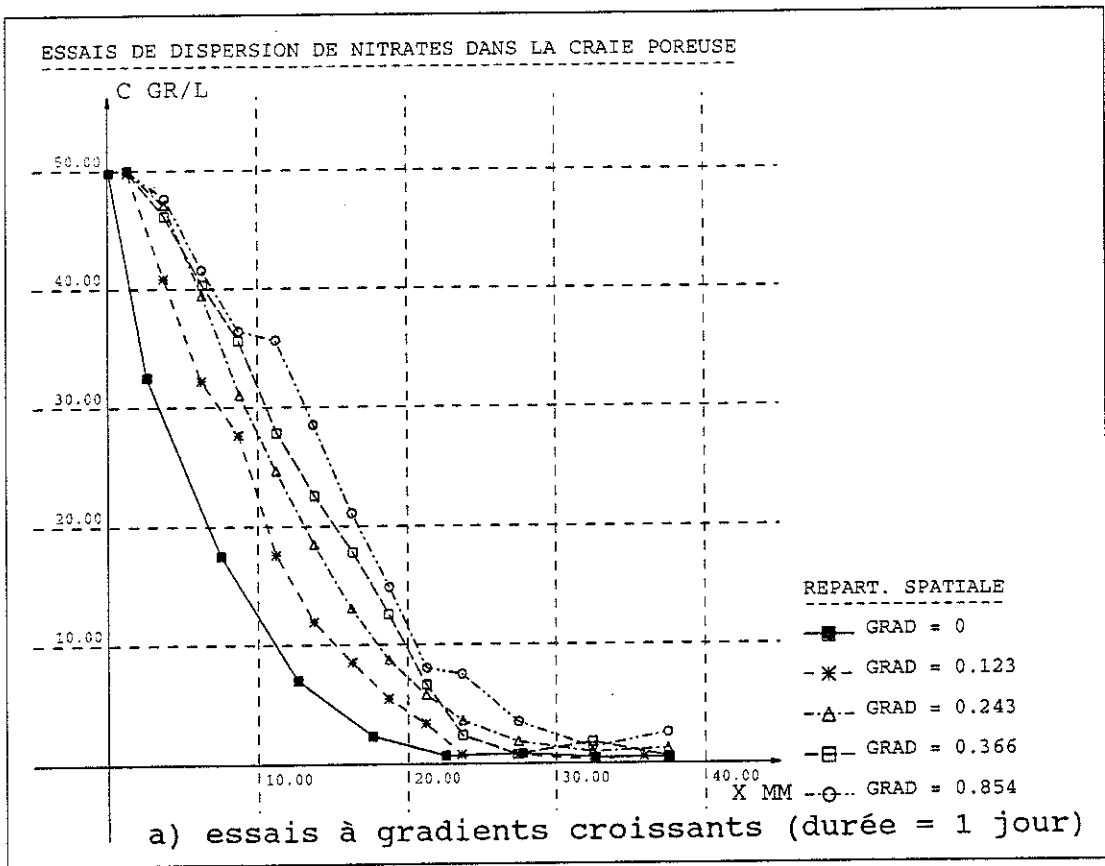
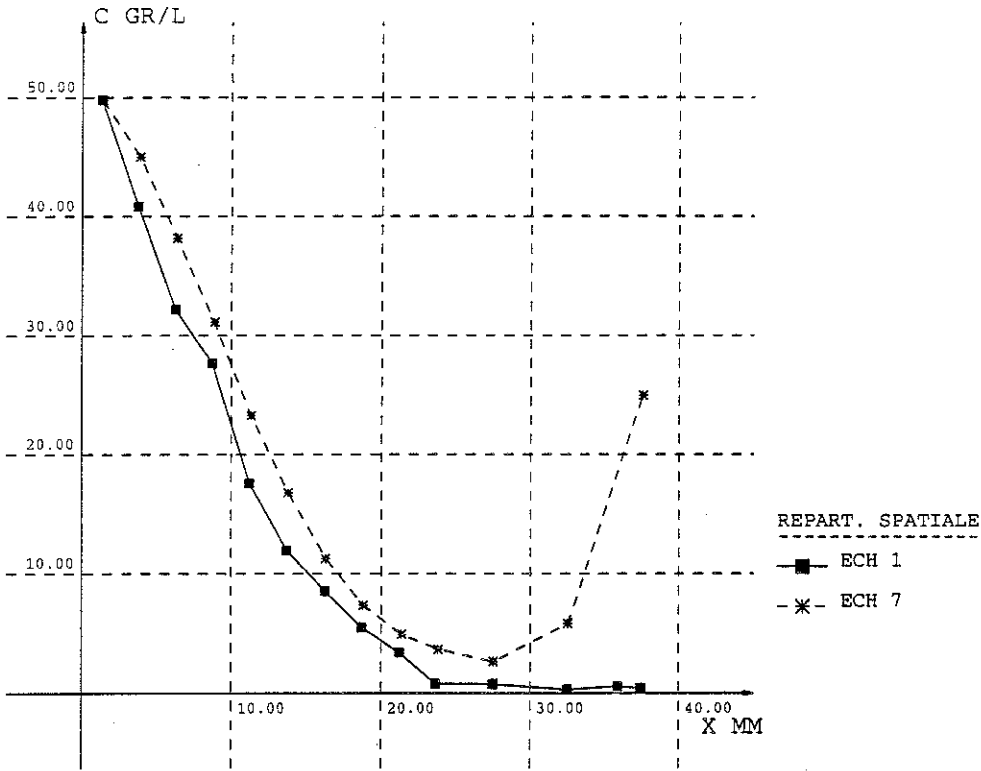


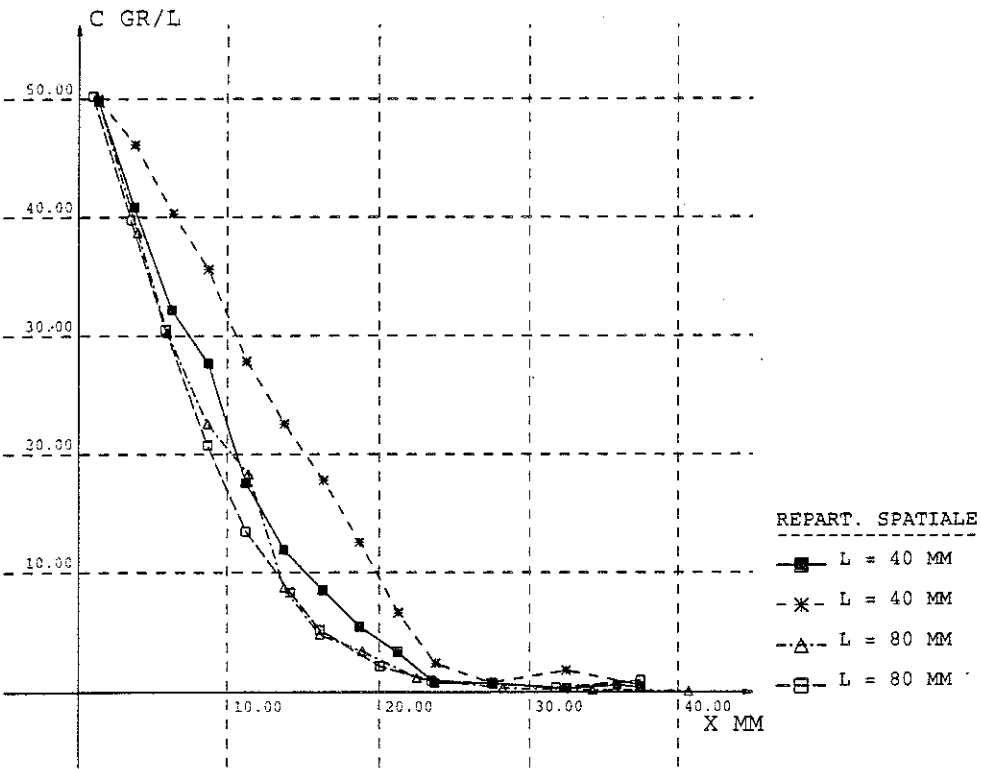
figure III.21: résultats bruts des essais de dispersion sur craie poreuse.

ESSAIS DE DISPERSION DE NITRATES DANS LA CRAIE POREUSE



a) reproductibilité de l'essai de 1 jour avec $i = 12 \%$

ESSAIS DE DISPERSION DE NITRATES DANS LA CRAIE POREUSE



b) essais sur des éprouvettes de longueurs différentes $i = 36 \%$

figure III.22: résultats bruts des essais de dispersion sur craie poreuse.

Finalement, Muller obtient les caractéristiques suivantes:

n° test	n _{eff} (%)	u (m/s)	v (m/s)	aL (mm)
1	35.6	1.2 10 ⁻⁹	3.4 10 ⁻⁹	150
2	36.9	2.3 10 ⁻⁹	6.2 10 ⁻⁹	140
3	34.7	3.5 10 ⁻⁹	1.0 10 ⁻⁸	110
4	34.8	8.2 10 ⁻⁹	2.4 10 ⁻⁸	70
5	35.2	3.6 10 ⁻⁹	1.0 10 ⁻⁸	120
6	35.2	3.6 10 ⁻⁹	1.0 10 ⁻⁸	===
7	34.6	2.4 10 ⁻⁹	6.9 10 ⁻⁹	110
8	36.9	3.6 10 ⁻⁹	9.8 10 ⁻⁹	90
9	36.3	3.6 10 ⁻⁹	9.9 10 ⁻⁹	100
10	36.2	3.6 10 ⁻⁹	9.9 10 ⁻⁹	100

tableau III.3: paramètres hydrodispersifs (convection et dispersion) obtenus par la première calibration des tests (Muller 1990)

$$n_{im} = \theta_{im} = 7\% , \alpha_d^* = 0 \text{ s}^{-1} , \\ D_{ma} = 4.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} .$$

En procédant de la sorte, il est clair que la répartition spatiale observée pour la carotte n° 6 (essai de 72 heures) ne peut être représentée par le modèle. En outre, la dispersivité correspondante est assez élevée par rapport à la taille de l'échantillon ($aL/L = 25\%$) et on peut se demander si ce dernier est toujours représentatif.

Enfin, les porosités efficaces choisies sont similaires à celles rencontrées lorsqu'on soumet les éprouvettes de craie poreuse à un gradient de hauteur piézométrique égal à 1000 (voire 10.000 et même plus). Ces gradients, nécessaires pour des tests géomécaniques en cellule triaxiale,²⁸ sont très nettement supérieurs aux valeurs que nous avons choisies.

Pour toutes ces raisons, nous préférons considérer que la porosité efficace est moindre et que la convection n'est pas négligeable. Mais, dans ce cas, il convient d'interpréter les essais avec un effet d'eau immobile. Le système d'équations qui y correspond est le suivant:

$$R_{dm} \cdot \frac{\partial C_m}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial C_m}{\partial x} - D_{hL} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + \alpha_m \cdot (C_m - C_{im}) = 0 \quad (\text{III.10a})$$

$$R_{dim} \cdot \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \alpha_{im} \cdot (C_{im} - C_m) = 0 \quad (\text{III.10b})$$

$$F = K_d \cdot p \cdot C_{im} + K_d \cdot (1-p) \cdot C_m \quad (\text{III.10c})$$

²⁸ Dans des conditions de gradients élevés, contrairement aux gradients faibles, les forces de pression qui s'opposent aux forces de capillarité (retenant le fluide immobile dans les interstices du solide) sont nettement prédominantes.

$$\begin{aligned}
\text{avec } R_{dm} &= 1 + \theta_s / \theta_m \cdot \rho_s \cdot (1-p) \cdot K_d \\
R_{dim} &= 1 + \theta_s / \theta_{im} \cdot \rho_s \cdot p \cdot K_d \\
\alpha_m &= \alpha_d^* / \theta_m \\
\alpha_{im} &= \alpha_d^* / \theta_{im} \\
D_{hL} &= a_L \cdot v + D_m
\end{aligned}$$

Ou encore, lorsqu'on considère à priori qu'il n'y a pas d'adsorption:

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + v_a \cdot \frac{\partial C_m}{\partial X} - D_{hLa} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial X^2} + \alpha_{ma} \cdot (C_m - C_{im}) = 0 \quad (\text{III.11a})$$

$$\frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \alpha_{ima} \cdot (C_{im} - C_m) = 0 \quad (\text{III.11b})$$

$$\begin{aligned}
\text{avec } v_a &= v / R_{dm} \\
D_{hLa} &= a_L \cdot v_a + D_{ma} \\
\alpha_{ma} &= \alpha_d^* / (\theta_m \cdot R_{dm}) \\
\alpha_{ima} &= \alpha_d^* / (\theta_{im} \cdot R_{dim})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{et si } p/(1-p) &= \theta_{im} / \theta_m, \\
R_{dm} &= R_{dim} = R_d \\
\alpha_{ma} &= \alpha_{da}^* / \theta_m \\
\alpha_{ima} &= \alpha_{da}^* / \theta_{im} \\
\alpha_{da} &= \alpha_d / R_d
\end{aligned}$$

Nous avons utilisé la méthode F.U.P.G. pour résoudre ce système (en effet, pour le pas de temps choisi: 1 heure, le nombre de Courant est largement inférieur à 1). Le domaine est discrétisé en 20 éléments.

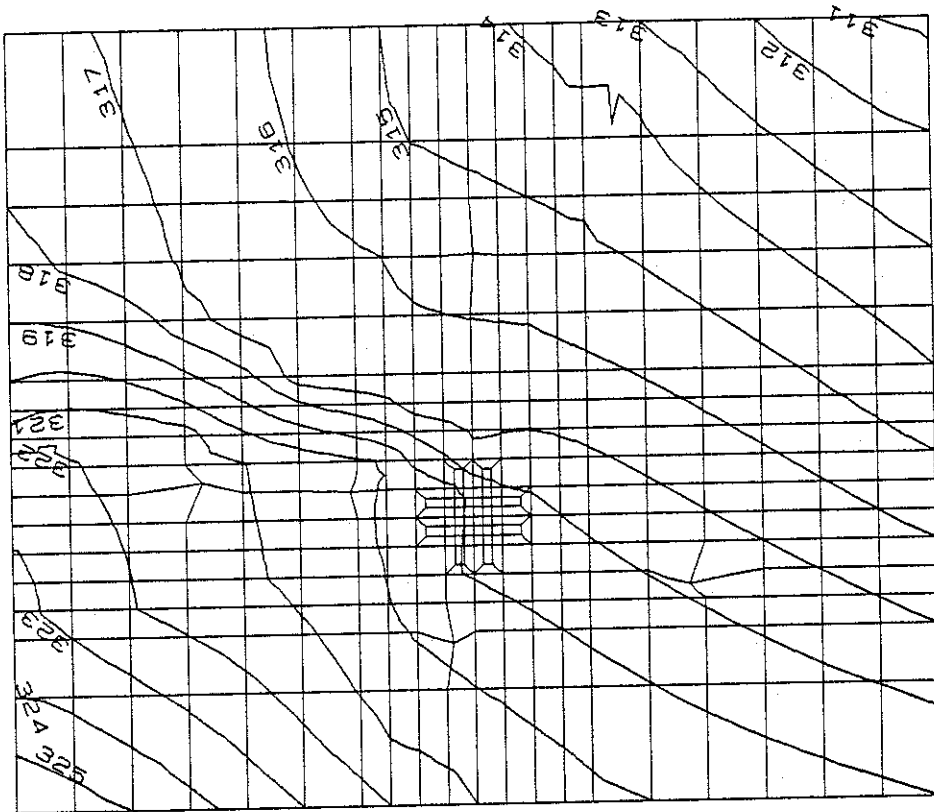
Envisageons d'abord les éprouvettes 3, 5 et 6 correspondant aux expériences de durée croissante avec un gradient de 36%. Les paramètres obtenus pour la calibration sont les suivants (tableau III.4):

n°test	α_{da}^* (s ⁻¹)	θ_{im} (%)	θ_m (%)	v_a (m/s)	a_L (mm)	D_{ma} (m ² /s)
3	4.0 10 ⁻⁶	10	15	4.9 10 ⁻⁸	30	4.9 10 ⁻¹⁰
5	4.0 10 ⁻⁶	10	15	4.9 10 ⁻⁸	30	4.9 10 ⁻¹⁰
6	1.1 10 ⁻⁵	10	2	5.5 10 ⁻⁷	10	4.9 10 ⁻¹⁰

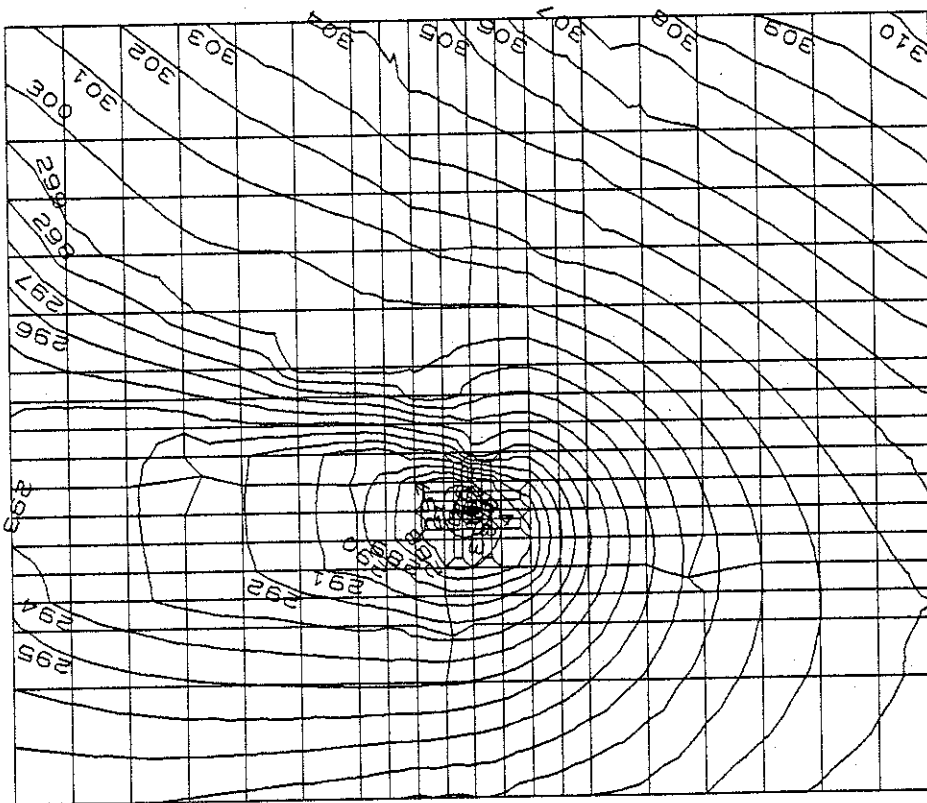
tableau III.4 : paramètres de transport obtenus par la seconde calibration des essais de durée croissante.

Les répartitions spatiales correspondant à ces modèles sont représentés figure III.23. On constate que:

- les valeurs de dispersivité obtenues sont plus "raisonnables" par rapport à celles déterminées par la première calibration;
- la carotte n° 6 correspond à une porosité efficace et à une dispersivité apparente plus faibles que les deux autres. Par contre, l'effet d'eau immobile semble y être plus important. Ceci peut se comprendre si on admet que l'éprouvette est traversée par une ou plusieurs microfissures.

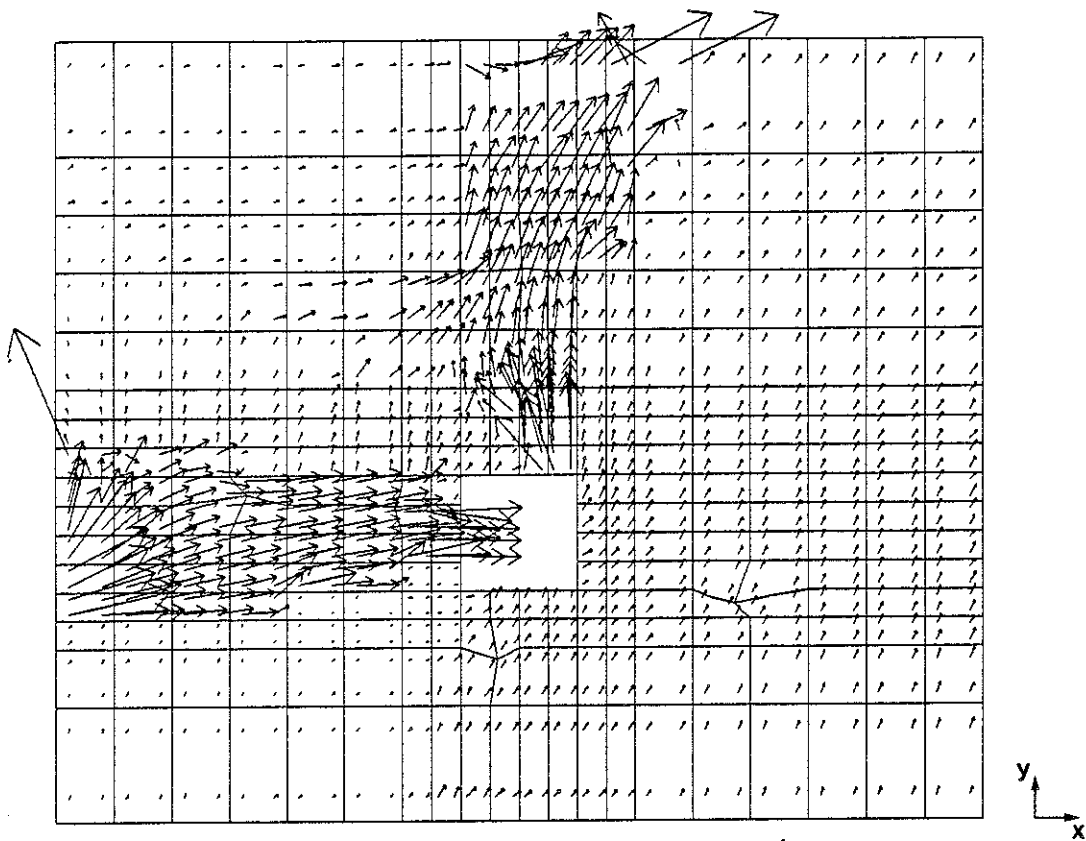


a) piézométrie naturelle ($\Delta h = 10$ cm)

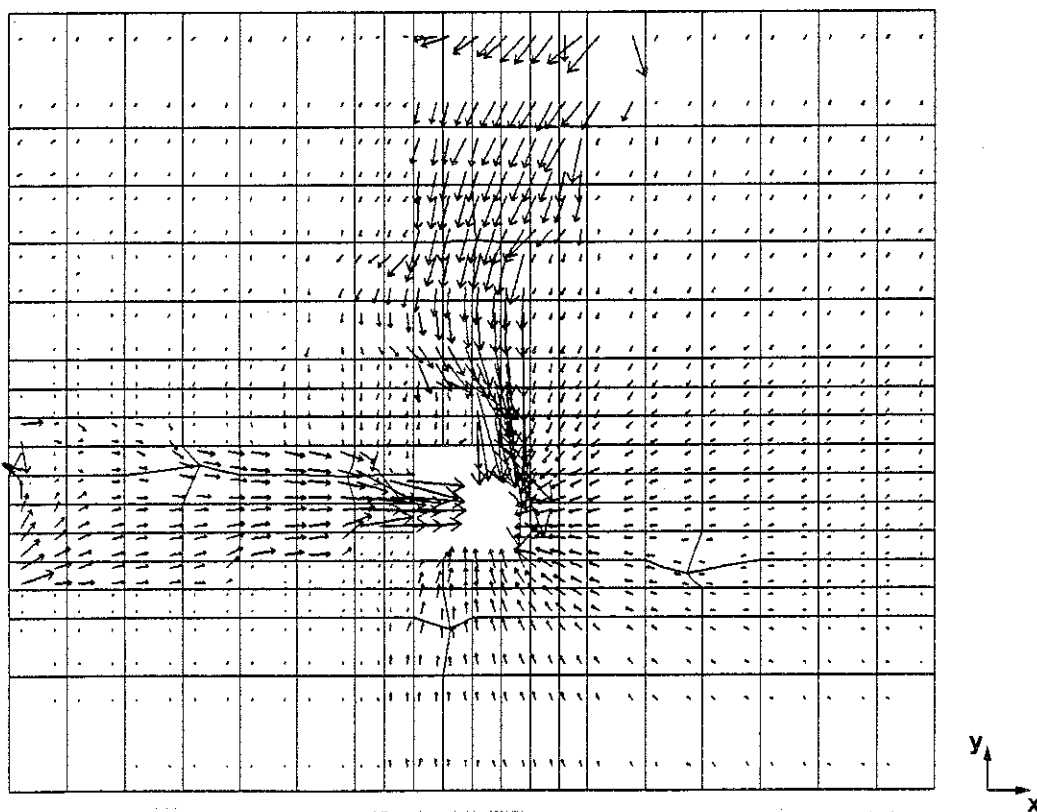


b) piézométrie en régime stabilisé de pompage ($\Delta h = 10$ cm)

figure IV.35: site de Bertrée, nappe du Crétacé (premier test), piézométrie calculée par le modèle écoulement.



a) écoulement naturel ($f_{Dmax} = 3.1 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$)



b) écoulement en régime stabilisé de pompage
($f_{Dmax} = 9.4 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$).

figure IV.36: site de Bertrée, nappe du Crétacé (premier test), flux calculés par le modèle écoulement.

Les courbes de restitution au puits ont été déterminées pour l'uranine, le nitrate (NO_3^-), l'iodure (I^-), le potassium (K^+), le lithium (Li^+), le sodium (Na^+). Quelques échantillons ont également été analysés pour le chlorure (Cl^-). Les résultats sont représentés à la figure IV.37.

On peut en tirer quelques interprétations qualitatives:

- la restitution est très rapide pour les traceurs injectés en Pz10 (I^- , NO_3^- , K^+). Pour ceux du Pz12 (Li^+ , Na^+ , Cl^-), elle est plus lente et plus étalée. Comme la direction testée est approximativement la même, il est vraisemblable que cette différence soit provoquée essentiellement par un séjour plus long du traceur dans un milieu dont les actions convectives et dispersives sont identiques. La dispersion agissant plus longtemps influence davantage l'étalement de la courbe.
- le comportement du chlorure est fort similaire à celui du sodium (et du lithium). Ce résultat semble indiquer un comportement qui obéit à l'hypothèse de Ditmar, valable pour l'eau de mer. Cette hypothèse exprime que, lorsqu'on envisage des migrations d'eau de mer, les proportions des espèces ioniques principales qui déterminent la salinité (concentration massique en sels) restent approximativement constantes;
- il en va apparemment de même pour le potassium et le nitrate. Par contre, l'iodure se différencie assez nettement de ces derniers (la position du maximum est décalée);
- dans l'ensemble, même pour l'uranine injectée en continu pendant 10 heures, les courbes sont fortement dissymétriques avec une montée rapide en concentration et une décroissance plus progressive, vraisemblablement due à un effet d'eau immobile important.
- Lorsqu'on compare les restitutions dans le Crétacé à celles obtenues dans le Landénien, on constate qu'une plus grande proportion du traceur est restituée rapidement. Nous pensons qu'il s'agit essentiellement d'un effet de la convection (plus importante pour ce test) qui se traduit également par une amélioration des taux de restitution (tableau IV.26).

traceur	M_0 (kg)	r (%)
uranine	$4.78 \cdot 10^{-2}$	27
Na^+	9.91	79
Li^+	$3.33 \cdot 10^{-1}$	65
K^+	4.37	94
NO_3^-	6.10	92
I^-	1.65	77

tableau IV.26: masses injectées et taux de restitution des traceurs (Crétacé, Bertrée)

- signalons encore que les bruits de fond pour les éléments majeurs sont moins importants que dans la nappe phréatique (5.1 ppm pour NO_3^- , 1.4 ppm pour K^+ , 7.9 ppm pour Na^+). Ceci démontre que l'aquifère crétacé est, grâce à la couche de marne, mieux protégé vis-à-vis des infiltrations de surface (épandages d'engrais et de sels routiers notamment).

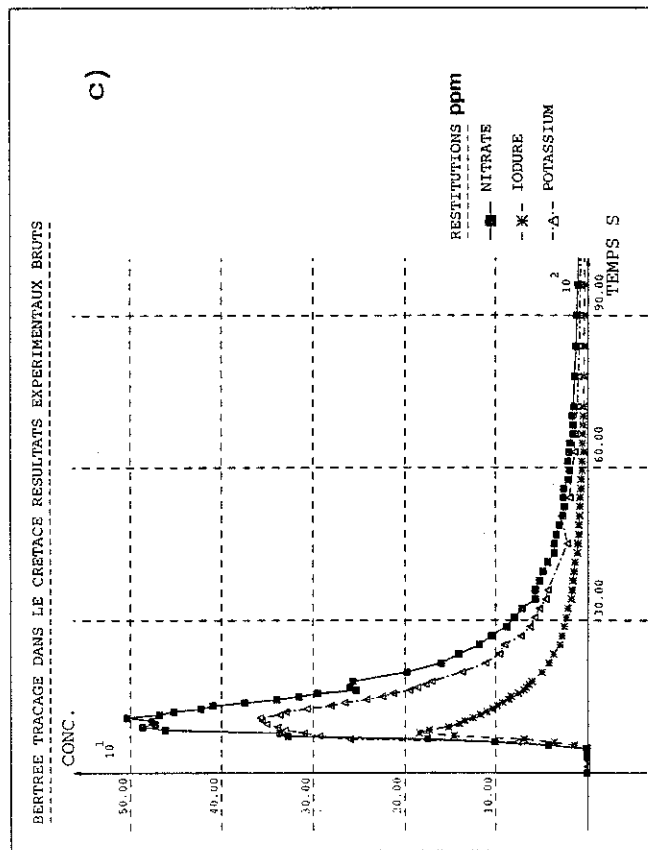
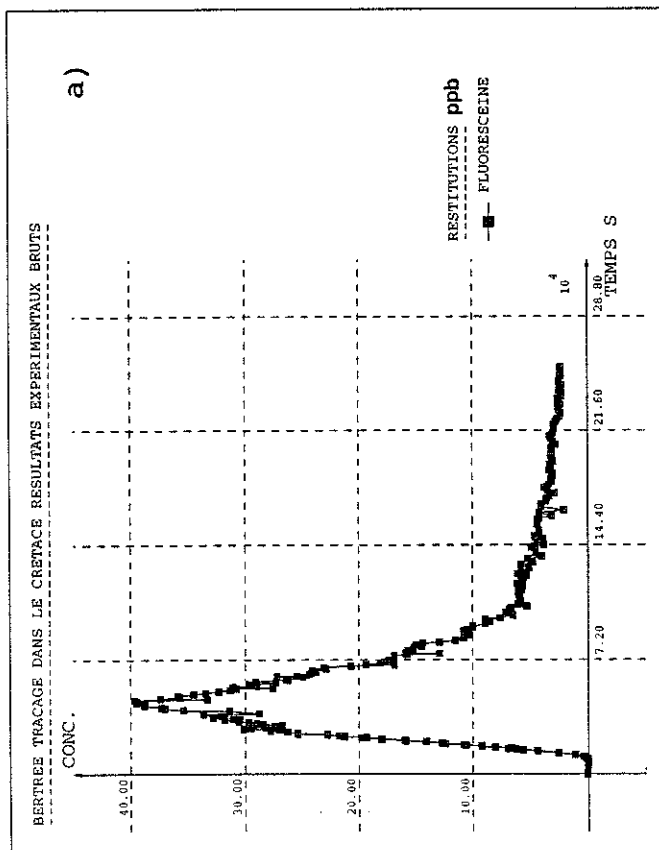
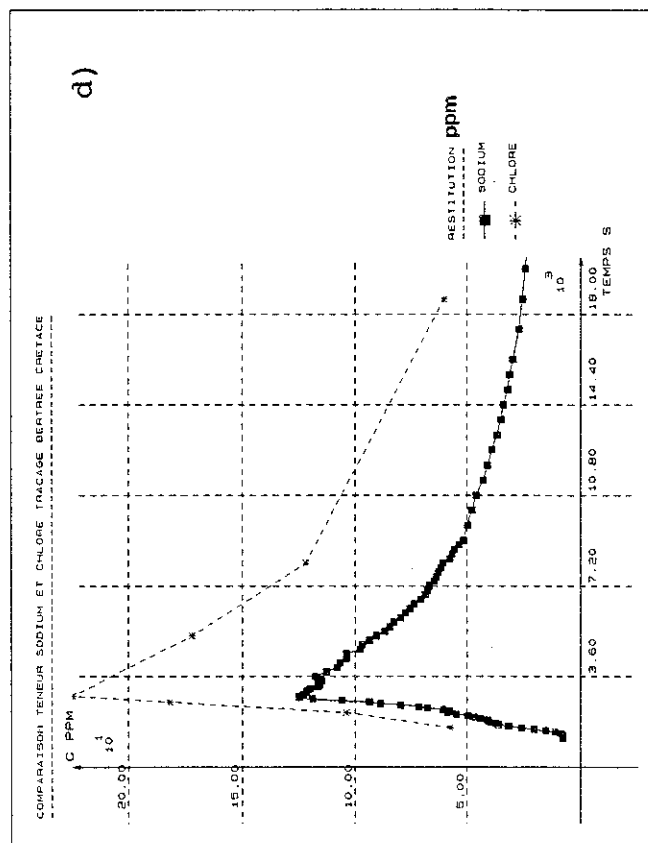
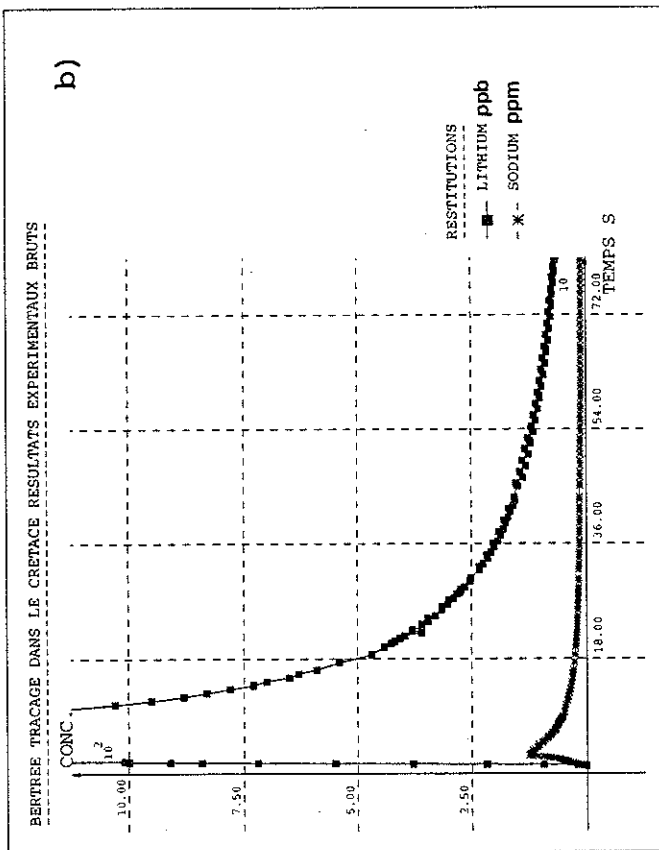


figure IV.37: site de Bertrée, nappe du Crétacé (premier multi-tracage), courbes de restitution au puits P2.

- a) uranine
- b) lithium et sodium
- c) iodure, nitrate, et potassium
- d) chlore et sodium

IV.2.c.4) Modélisation des traçages.

Pour chaque injection, nous envisageons une discrétisation (F.U.P.G.) différente adaptée à l'échelle du domaine concerné (figure IV.38). Nous y avons conservé 3 matériaux correspondant respectivement à la zone peu perméable, aux axes fissurés, et au reste du domaine de transmissivité intermédiaire. Les flux d'eau interpolés à partir du modèle écoulement sont également représentés. On y remarquera l'action néfaste du lissage au voisinage immédiat du puits de pompage (nous supposons que cet effet parasite influe peu le résultat obtenu).

Dans les paragraphes qui suivent, nous présentons les résultats des traçages correspondants.

1°) Traçages à partir du piézomètre Pz10: nitrate, potassium, iodure (figures IV.39 et IV.40).

Comme nous l'avons signalé, l'injection s'est faite en 2 temps. Nous la représenterons par un double créneau en ce qui concerne la concentration au piézomètre (c_{out}). La concentration dans la nappe au même point (c_{in}) suit cette tendance avec toutefois un effet différé dû à la dispersion et à l'effet d'eau immobile (figure IV.39a). Les courbes de restitution modélisées sont comparées aux courbes expérimentales (pour les 3 traceurs: figures IV.39b, c et d). On constate que la calibration des résultats est cette fois un peu moins bonne. Nous ne sommes pas parvenus à obtenir une restitution aussi étroite et aussi dissymétrique que celle qui a été observée.

Pour expliquer cet état de fait, nous invoquons 2 causes:

- tout d'abord, puisque la dispersion n'agit pas longtemps, le problème est essentiellement influencé par la convection et le mode de résolution des équations pourrait devenir imprécis (c'est une cause numérique).
- ensuite, la distance injection → pompage est de 6,69 m et cela peut correspondre à un domaine étudié dont la taille est inférieure à celle de l'élément de volume représentatif (c'est une cause conceptuelle).

Nous mentionnons toutefois les paramètres qui ont permis d'obtenir ces résultats, car ils s'approchent de ceux qui pourraient être déterminés à une échelle plus grande.

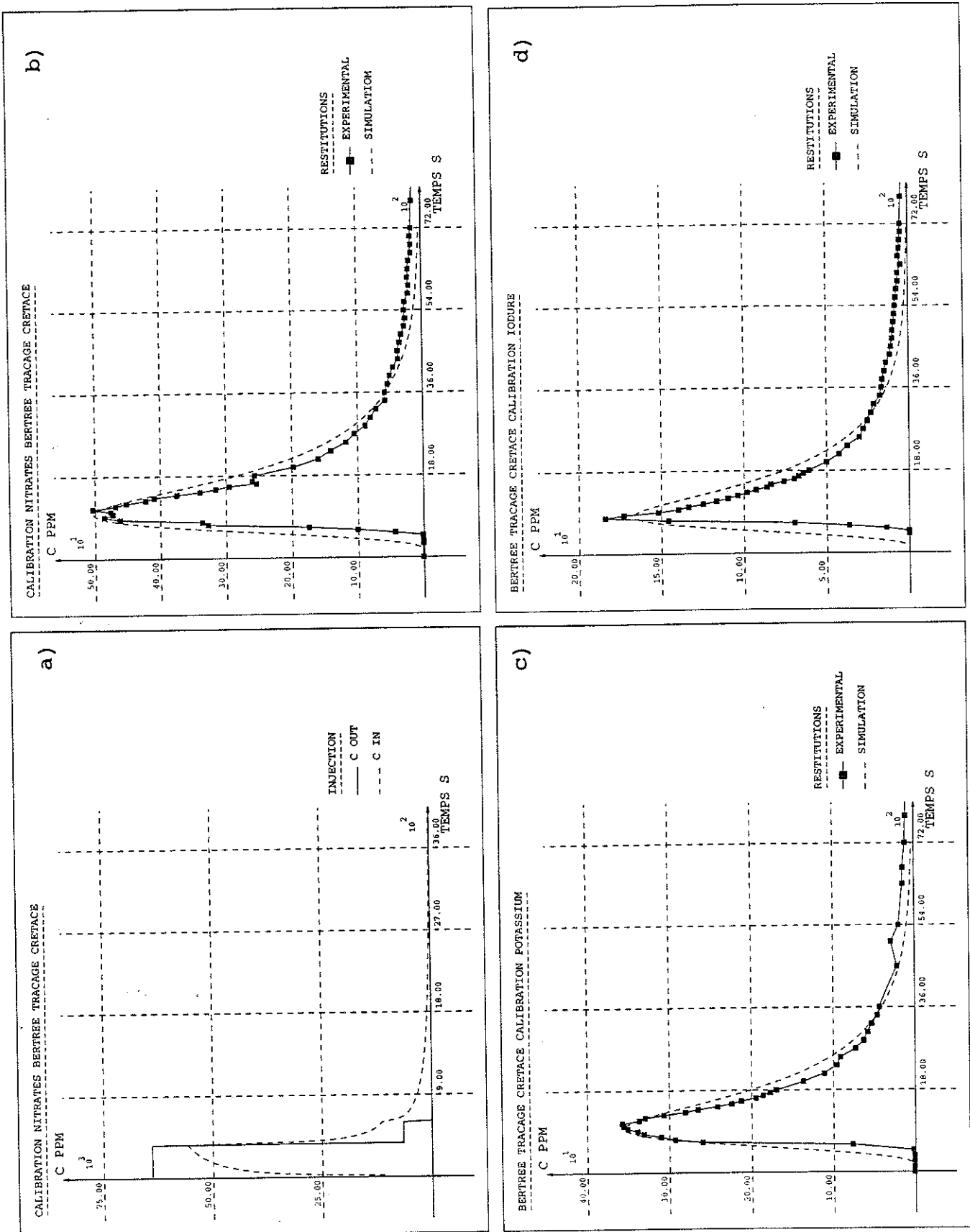
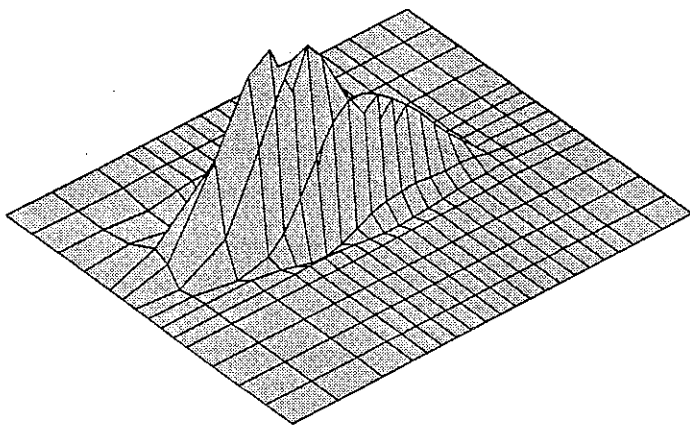
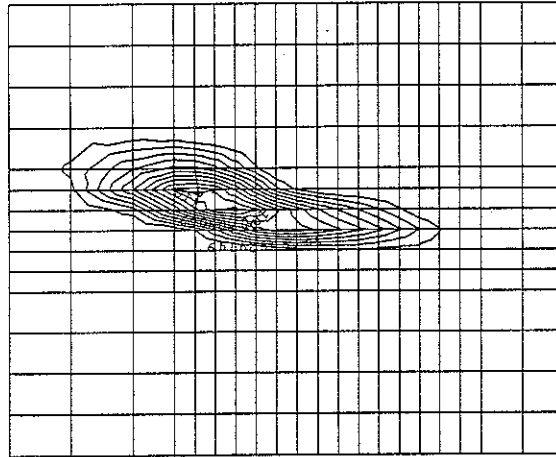


figure IV.39: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçages à partir Pz10, évolution temporelle des concentrations.

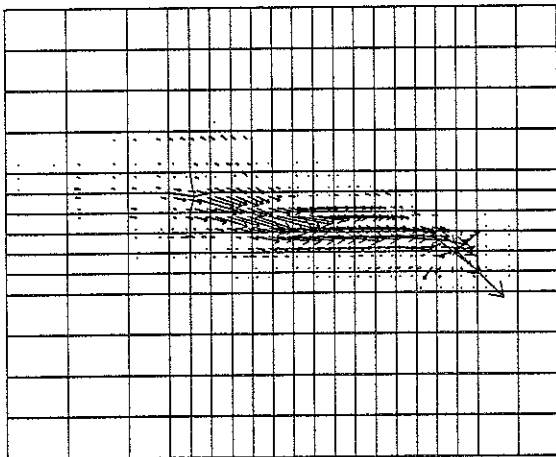
- a) injection (concentrations dans le piézomètre Cout et dans l'aquifère cin): cas des nitrates
- b) restitutions du nitrate au puits P2
- c) restitutions du potassium au puits P2
- d) restitutions de l'iodure au puits P2



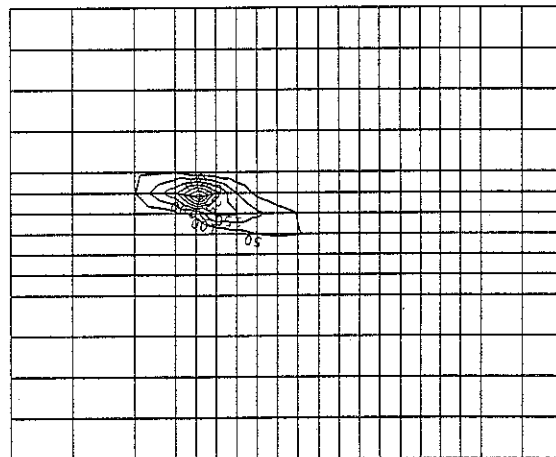
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 100$ ppm



b) flux totaux
 $f_{\max} = 8.9 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 50$ ppm

figure IV.40: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçage au nitrate, résultats de la simulation (après 10')

Pour le nitrate et le potassium, on a :

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2
a_T (m)	0.025	0.20
a_L^* (m)	0.25	2.00
α_d (s^{-1})	$9.0 \cdot 10^{-8}$	$2.7 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	2.5
θ_{im} (%)	12.0	15.0
R_{dm}	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0
paramètres d'injection		
v_{in} (m/s)	$2.3 \cdot 10^{-3}$	
v_{out} (m/s)	$7.0 \cdot 10^{-3}$	
$c_{out}^{NO_3}$ (ppm)	63850→6400	
c_{out}^K (ppm)	63850→6400	
e_{inj} (m)	5.0	

tableau IV.27: paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Bertrée), traçage au nitrate et au potassium.

Pour l'iode, le comportement est un peu différent, essentiellement un peu plus dispersif.

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2
a_T (m)	0.025	0.25
a_L^* (m)	0.25	2.50
α_d (s^{-1})	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$2.9 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	2.2
θ_{im} (%)	12.0	15.0
R_{dm}	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0
paramètres d'injection		
v_{in} (m/s)	$2.3 \cdot 10^{-3}$	
v_{out} (m/s)	$7.8 \cdot 10^{-3}$	
c_{out} (ppm)	19640→1950	
e_{inj} (m)	5.0	

tableau IV.28: paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Bertrée), traçage à l'iode.

Les caractéristiques utilisées pour le matériau 3 sont voisines de celles du matériau 2. Nous ne les présentons pas dans les tableaux car, comme le montre la figure IV.40, le traceur n'atteint pas les zones où ce matériau est présent. En fait, il se répartit essentiellement dans la zone fissurée (matériau 2) sous forme d'un nuage très allongé, plus étendu pour l'eau mobile que pour l'eau immobile.

Les flux sont davantage dans le sens de la convection, conformément à ce qu'on pourrait prédire. On peut encore constater que les paramètres de transport sont, pour le matériau 1 (peu fissuré) très similaires à ceux déterminés en laboratoire. Par contre, pour la zone fissurée, la porosité efficace et l'effet d'eau immobile sont doublés, tandis que la dispersion est multipliée par dix. Enfin, l'épaisseur de cette zone fissurée serait de 5 mètres et correspondrait à l'extension verticale des nuages de traceur.

2°) Traçages à partir du piézomètre Pz12: lithium, sodium (figures IV.41 et IV.42).

Le piézomètre Pz12 est plus éloigné du puits de pompage que le piézomètre Pz10, mais à peu près dans le même axe. On peut donc penser que les traçages faits à partir de ce point sont plus représentatifs de la zone fissurée.

Les paramètres obtenus par calibration sont:

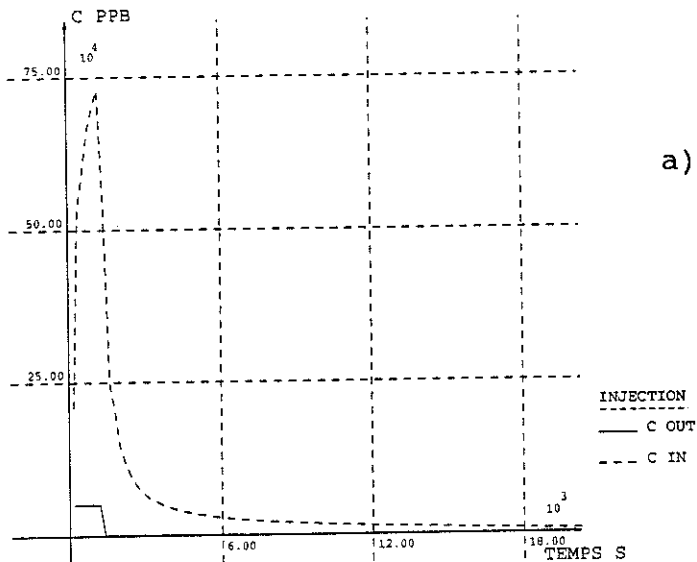
paramètres de transport	matériau 1	matériau 2
a_r (m)	0.025	0.40
a_l (m)	0.25	4.00
α_d (s^{-1})	$2.0 \cdot 10^{-7}$	$6.0 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	2.0
θ_{im} (%)	17.0	20.0
R_{dm}	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0
paramètres d'injection		
v_{in} (m/s)	$1.2 \cdot 10^{-3}$	
v_{out} (m/s)	$1.1 \cdot 10^{-1}$	
v_{out}^{Li} (m/s)	$1.2 \cdot 10^{-1}$	
c_{out}^{Na} (ppm)	50.5	
c_{out}^{Li} (ppm)	1502	
e_{inj}^{Na} (m)	5.0	

tableau IV.29: paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Bertrée), traçage au lithium et au sodium.

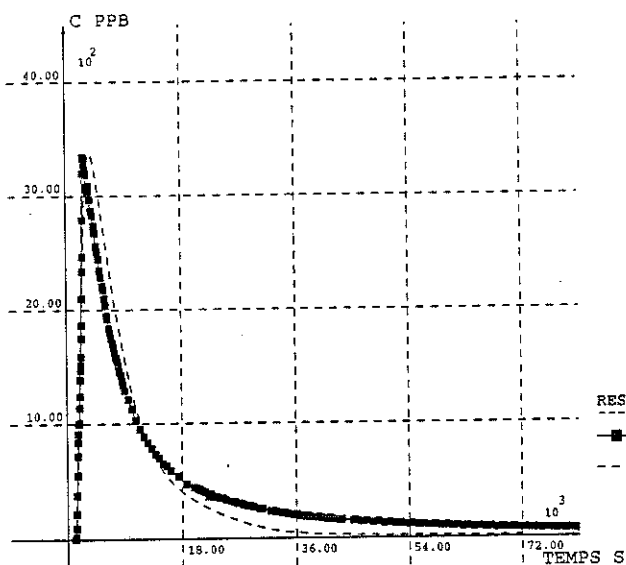
La dispersivité, le coefficient de transfert α_d^* et la porosité non efficace θ_{im} sont plus grands et on peut penser que le comportement est mieux globalisé (effet d'échelle). Les calibrations obtenues sont d'ailleurs nettement meilleures (figures IV.41b, c).

On observera également la valeur très élevée de la vitesse d'injection v_{out} et la faible concentration c_{out} dans le piézomètre. Elles correspondent au débit de chasse très important que nous avons utilisé. Avec une telle force de propulsion, le traceur s'accumule dans l'aquifère et il y correspond une concentration c_m très élevée au départ (figure IV.41a).

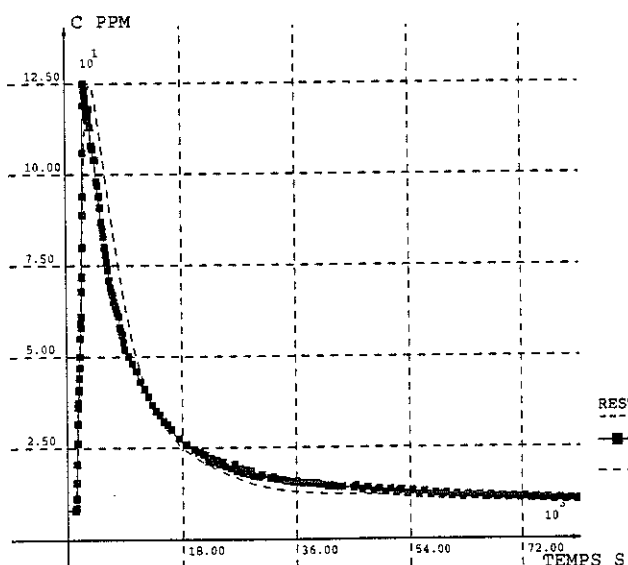
Ensuite, la répartition spatiale du traceur qui s'établit possède une géométrie similaire à celle du test précédent (voir figure IV.42).



a) injection (concentrations dans le piézomètre C_{out} et dans l'aquifère C_{in}): exemple du lithium

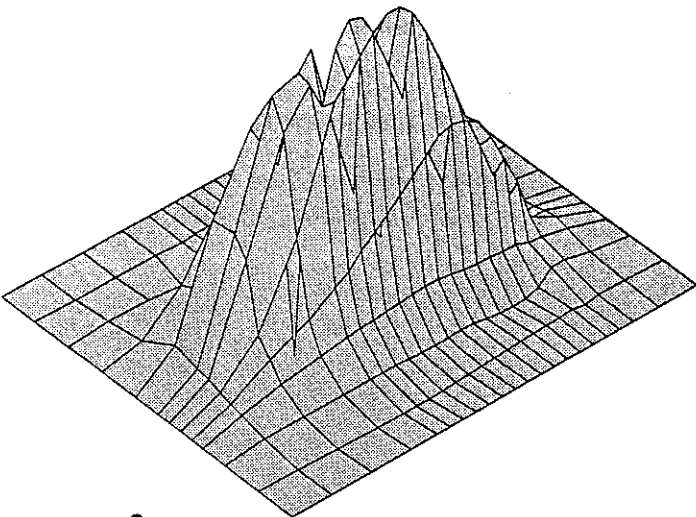


b) restitutions du lithium au puits P2 (expérimentale et modélisée).



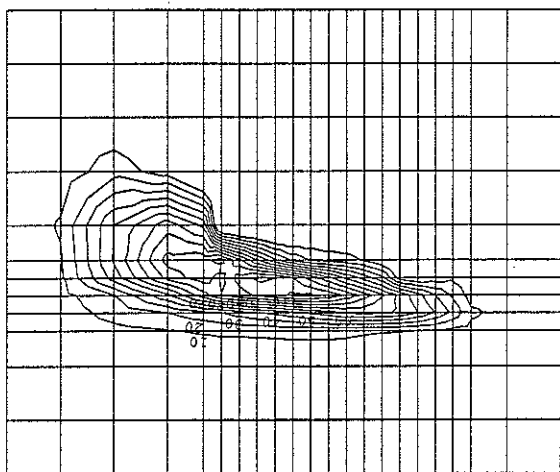
c) restitutions du sodium au puits P2 (expérimentale et modélisée).

figure IV.41: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçages à partir Pz 12, évolution temporelle des concentrations.



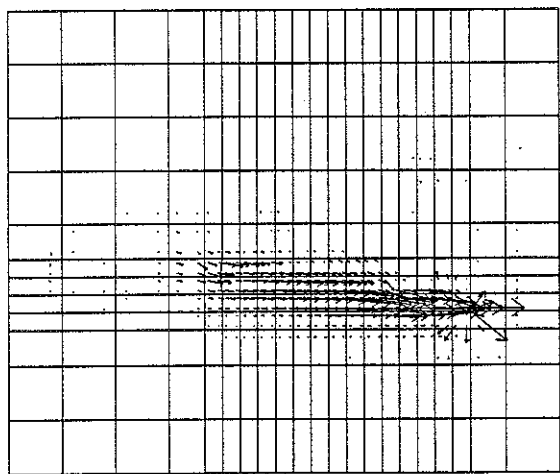
Y C X

a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



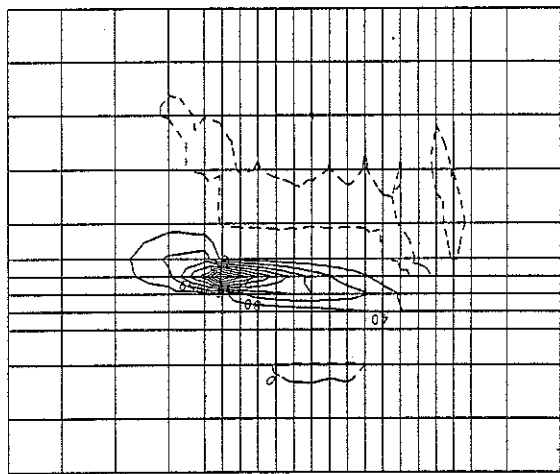
Y X

c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 40$ ppb



Y X

b) flux totaux
 $f_{max} = 5.7 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



Y X

d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 100$ ppb

figure IV.42: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçage au lithium, résultats de la simulation (après 8h)

3°) Traçage à partir du piézomètre Pz2:
uranine (figures IV.43 et IV.44).

Pour ce dernier modèle, le nuage de traceur se répartit sur les trois matériaux et sa forme est donc influencée par cette hétérogénéité (figure IV.44c). Les paramètres obtenus sont donnés au tableau suivant.

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3
a_T (m)	0.04	0.40	0.20
a_L (m)	0.40	4.00	2.00
α_d (\bar{s}^{-1})	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$7.5 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	0.6	7.5	3.0
θ_{im} (%)	37.0	40.0	38.0
R_{dm}	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection			
v_{in} (m/s)	$1.96 \cdot 10^{-4}$	tableau IV.30: paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Bertrée), traçage à l'uranine.	
v_{out} (m/s)	$1.6 \cdot 10^{-3}$		
c_{out} (ppb)	2000		
e_{inj} (m)	20.0		

Les caractéristiques du matériau 2 sont très différentes de celles obtenues pour les modèles précédents. Ceci est compréhensible car nous avons affaire à une zone fissurée différente dont l'extension horizontale et verticale (20 m) est plus importante. Les fissures peuvent donc s'y agencer différemment, mais surtout, le volume testé est encore plus grand. Ceci explique les valeurs plus élevées de n_{eff} et α_d . Quant aux grandes valeurs de θ_{im} , nous les justifions par la durée plus importante du traçage qui favorise l'accessibilité des pores à la diffusion. Quoiqu'il en soit, la calibration est excellente (figure IV.43d) si on tient compte de la variation de la concentration c_{out} injectée dans le piézomètre et de son effet sur la concentration de la nappe au même endroit c_{in} (figure IV.43b).

IV.3. MULTITRACAGE EN ECOULEMENT NATUREL
SUR LE SITE DE BERTREE (août 1992).

Nous avons pu remarquer que les traçages en écoulement convergent sont mal adaptés à la détermination de la dispersion latérale d'un traceur. Or, il importe de déterminer cette composante du transport dans la craie pour en tenir compte dans un modèle régional. Nous avons donc réalisé, à Bertrée, un multitraçage en écoulement naturel. Nous en exposons ici les principaux résultats.

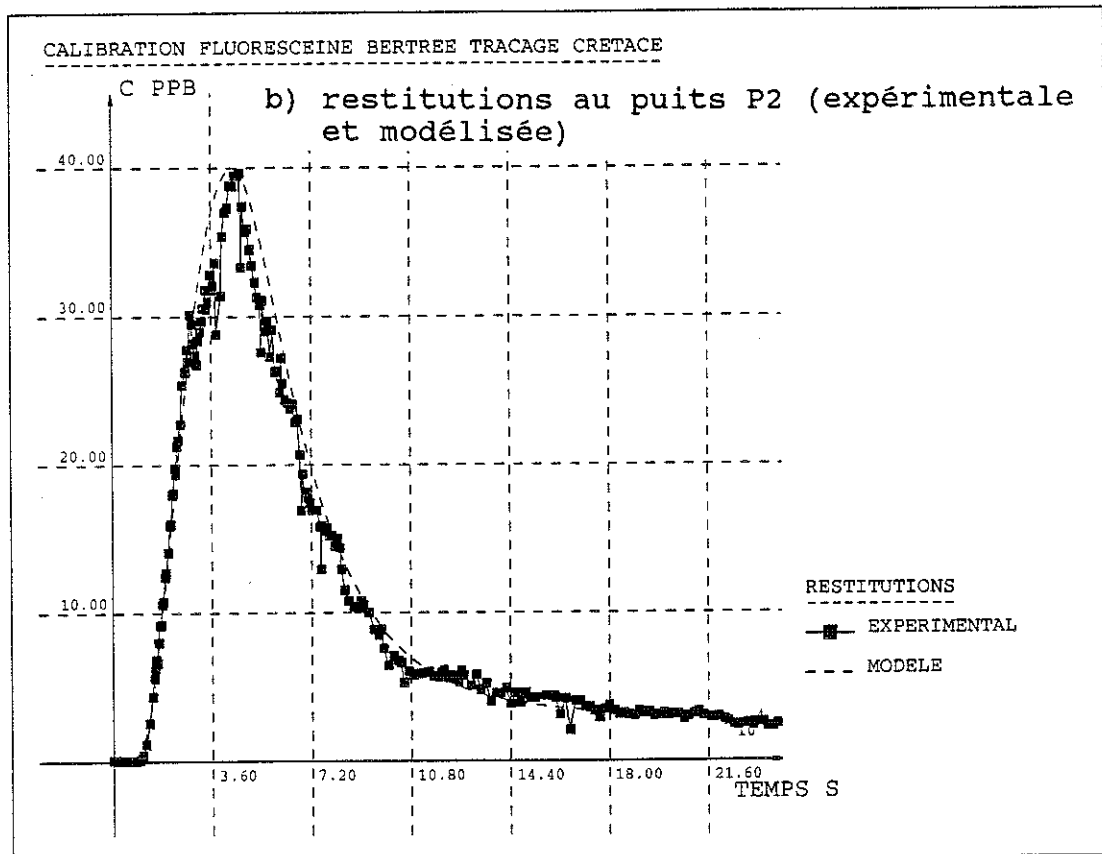
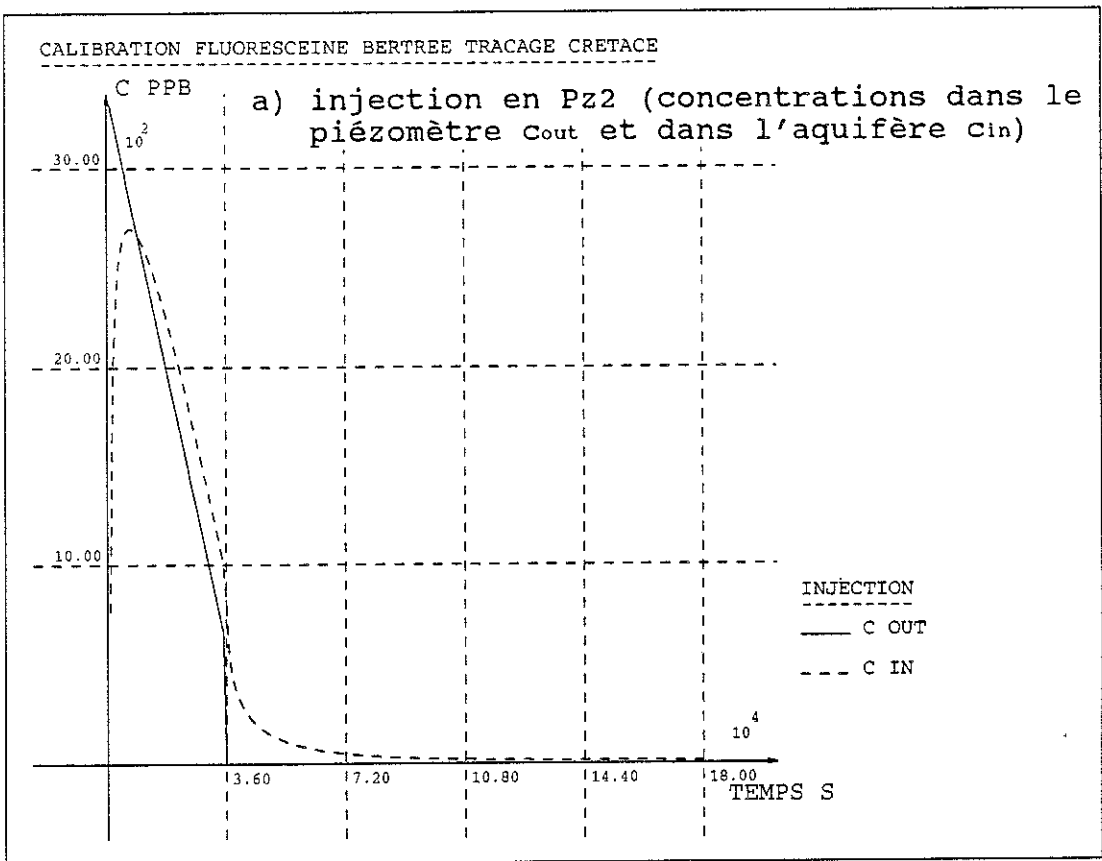
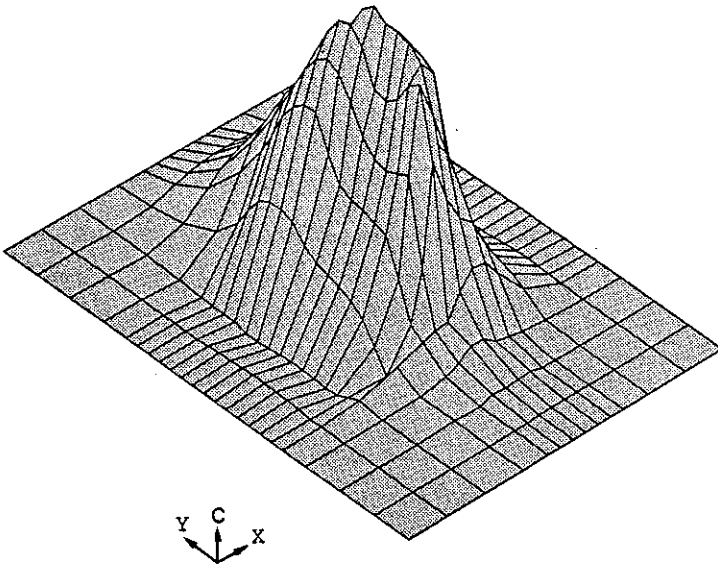
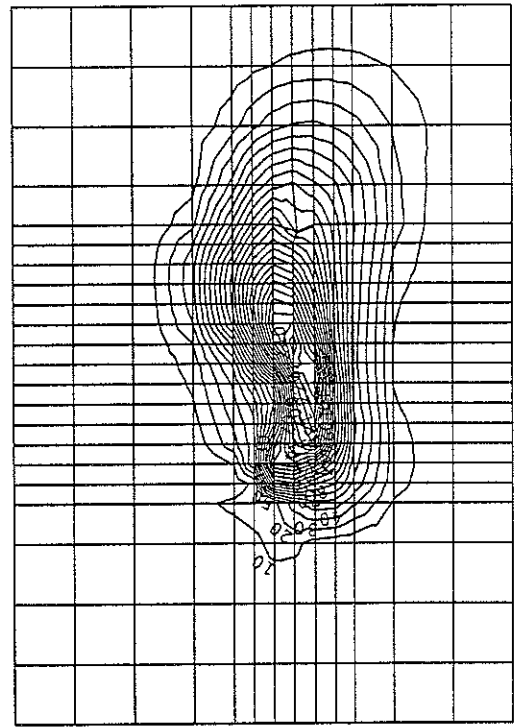


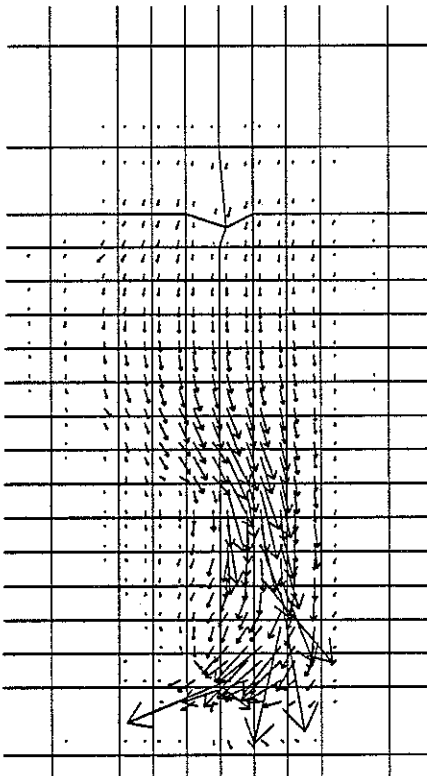
figure IV.43: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçage à l'uranine, évolution temporelle des concentrations.



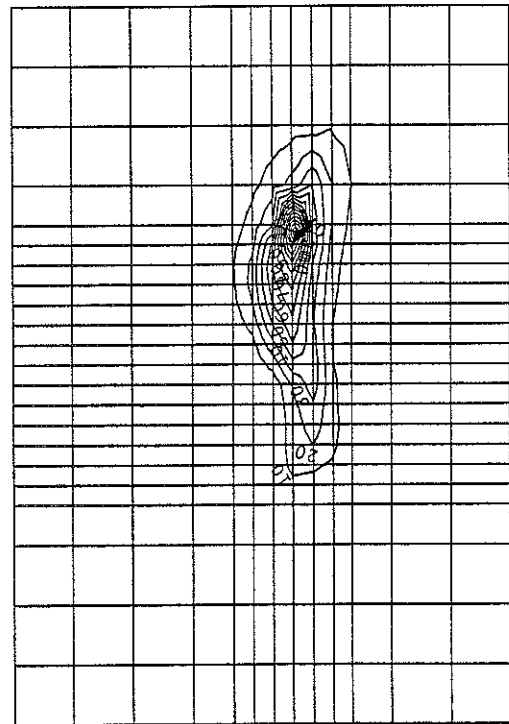
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 10$ ppb



b) flux totaux
 $f_{\max} = 1.6 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 10$ ppb

figure IV.44: site de Bertrée, premier test dans le Crétacé, traçage à l'uranine, résultats de la simulation (après 20h).

IV.3.a) Conditions hydrodynamiques.

L'écoulement qui existe naturellement dans la nappe du Crétacé à Bertrée a déjà été décrit précédemment. Il a même été modélisé puisqu'il s'agit de l'état initial à partir duquel on peut déterminer la piézométrie en régime permanent de pompage (figures IV.8 et IV.9).

Il suffisait donc d'actualiser ce modèle en tenant compte de la variation saisonnière de la piézométrie. Du point de vue pratique, nous avons mesuré régulièrement les niveaux d'eau dans les piézomètres pour nous assurer de la stabilité de l'écoulement au cours de l'essai.

La variation maximale qui a été observée est de 10 cm et s'est produite durant les 2 derniers jours du test. Cette variation est de l'ordre de grandeur de la précision numérique que nous pouvons atteindre et, par conséquent, nous la considérerons comme négligeable.

IV.3.b) Description des traçages.

Trois traceurs ont été injectés au piézomètre Pz10. Dans un premier temps, nous avons réalisé une injection de courte durée avec 10,01 kg de KNO_3 et 4,044 kg de LiCl . Les caractéristiques de cette injection sont les suivantes:

- $q_i = 0,270 \text{ m}^3/\text{h}$
- $q_p = 100 \text{ l}$ de solution en 10' (soit 6,15 kg de NO_3^- et 578 gr de Li^+ injectés)
- chasse = 20 litres d'eau en 1'.

Ensuite, après 20' d'attente, de l'uranine (solution de 150 g dilués dans 35 l) a été déversée par une injection prolongée. Les caractéristiques qui y correspondent sont:

- $q_i = 0,270 \text{ m}^3/\text{h}$
- $q_p = 3,55 \text{ l/h}$ de solution pendant 10 heures (soit 109.3 g d'uranine injectés)
- pas de chasse, mais prolongement de l'injection d'eau q_i pendant 1 heure après l'injection du traceur.

Cette démarche nous permettra de comparer l'injection courte et l'injection prolongée pour une même distance de transport.

Un traçage en écoulement naturel ne nécessite pas la mise en oeuvre d'un essai de pompage. Il en résulte un problème de prélèvement: d'une part, il convient d'extraire une quantité d'eau suffisante hors du piézomètre de prélèvement (pour mesurer une concentration représentative de la nappe c'est à dire non influencée par l'effet de capacité du piézomètre). D'autre part, le débit du prélèvement doit être suffisamment faible pour ne pas modifier l'écoulement naturel. Afin d'assurer un compromis entre ces deux exigences, les prélèvements au piézomètre Pz2 et au puits P2 ont été réalisés de manière dynamique avec de petites pompes à aspiration dont les débits sont relativement faibles (respectivement 6 l et 10 l par minute).

Au cours du test, les prélèvements ont été effectués après évacuation de 6, 12, puis 20 l hors du piézomètre. En fin de traçage, un dispositif semblable a été installé au piézomètre d'injection Pz10 pour évaluer la concentration qui persiste à cet endroit de la nappe. Par acquis de conscience, nous avons également prélevé aux piézomètres Pz4 et Pz8 de manière statique. Les courbes de restitution obtenues sont représentées aux figures IV.45a, b et c pour l'uranine, le nitrate NO_3 , et le lithium Li^+ .

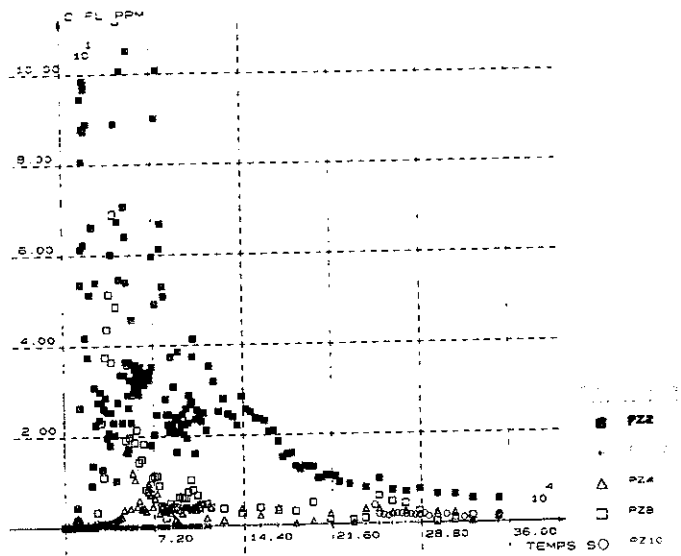
Plusieurs remarques peuvent être faites au sujet de ces résultats:

- les concentrations nulles observées au puits P2 résultent vraisemblablement d'une dilution importante et d'un contournement du puits par les lignes de courant. En d'autres termes, le débit de prélèvement est insuffisant par rapport à l'effet de capacité du puits.
- des résultats positifs ont été observés en Pz4 et Pz2. Ils témoignent d'une extension latérale importante des nuages de traceur. Ceci semble normal lorsque l'écoulement est naturel puisque la dispersion latérale n'est plus contrariée par la convergence des lignes de courant. Toutefois, d'importantes fluctuations dues à la méthode de prélèvement ont été observées. Il convient donc d'envisager avec circonspection les valeurs correspondantes de la concentration.
- les valeurs les plus fiables sont celles déterminées au piézomètre Pz2. On y constate une restitution très régulière pour le nitrate et le lithium (injection courte). Par contre, pour l'uranine (injection prolongée), les restitutions sont beaucoup plus irréguliers. Ces variations n'ont cependant pas la même origine que celles observées en Pz4 et Pz8 puisqu'elles ne concernent qu'un seul des traceurs. Il est possible qu'elles soient liées au mode d'injection et à ses conséquences sur le comportement du traceur au sein même de l'aquifère. On peut en effet comprendre que, lorsque l'injection est continue, le nombre de chenaux poreux accessibles au traceur est plus important. Comme la sollicitation convective n'est pas forcée (contrairement aux écoulements convergents), aucun de ces trajets n'est privilégié et tous peuvent être empruntés par le traceur. Ce dernier arrive alors par "bouffées" au point de prélèvement, ce qui explique le comportement observé.

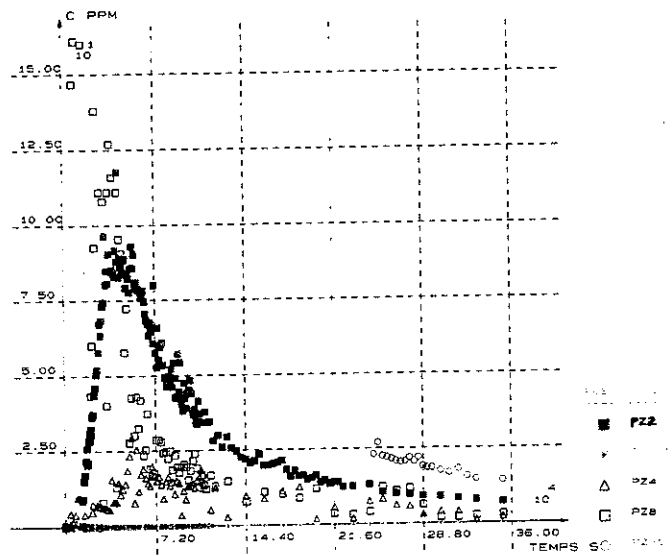
IV.3.c) Modélisation des traçages.

La discrétisation utilisée pour les 3 traçages comporte 552 éléments F.U.P.G. Elle est représentée à la figure IV.46a.

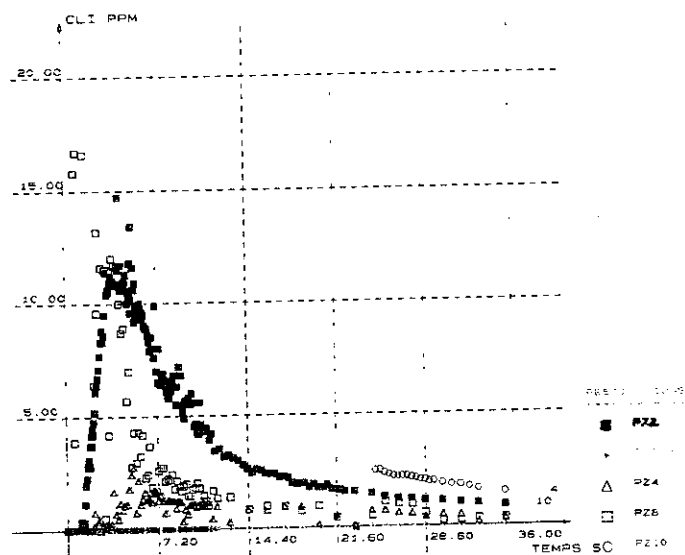
Les 3 matériaux distingués lors des tests en écoulement convergent ont été repris. Les flux de Darcy interpolés sont dessinés à la figure IV.46b. Ils sont bien évidemment plus réguliers qu'en régime de pompage. La concentration sur la frontière est imposée à la valeur du bruit de fond, uniquement aux endroits où les flux de Darcy sont rentrant dans le domaine. Nous calibrerons les modèles sur base de la restitution au piézomètre Pz2 (où les résultats sont les plus fiables).



a) uranine

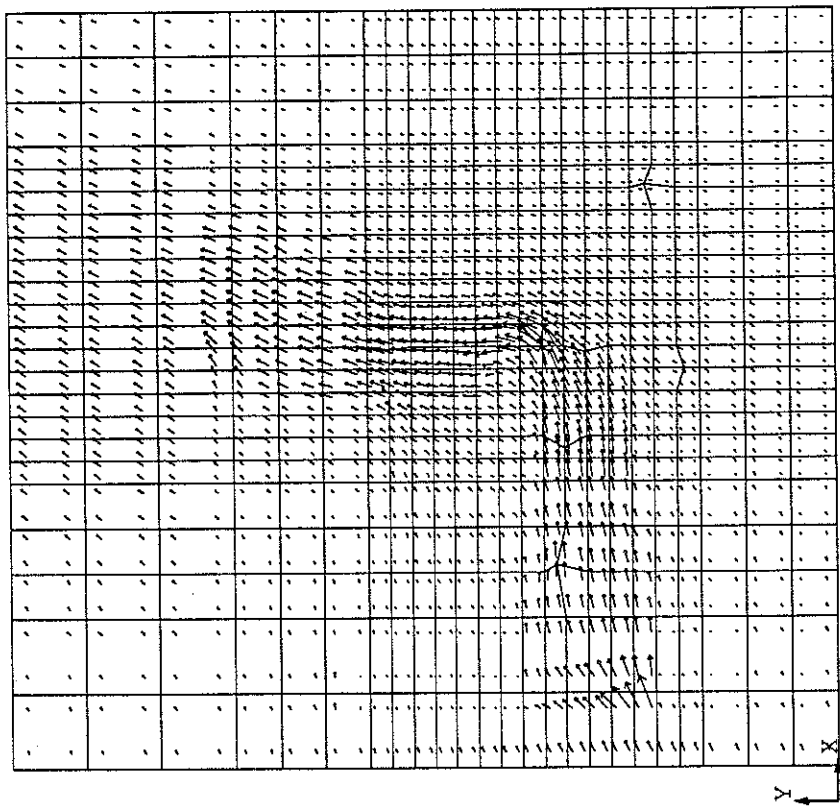


b) nitrate

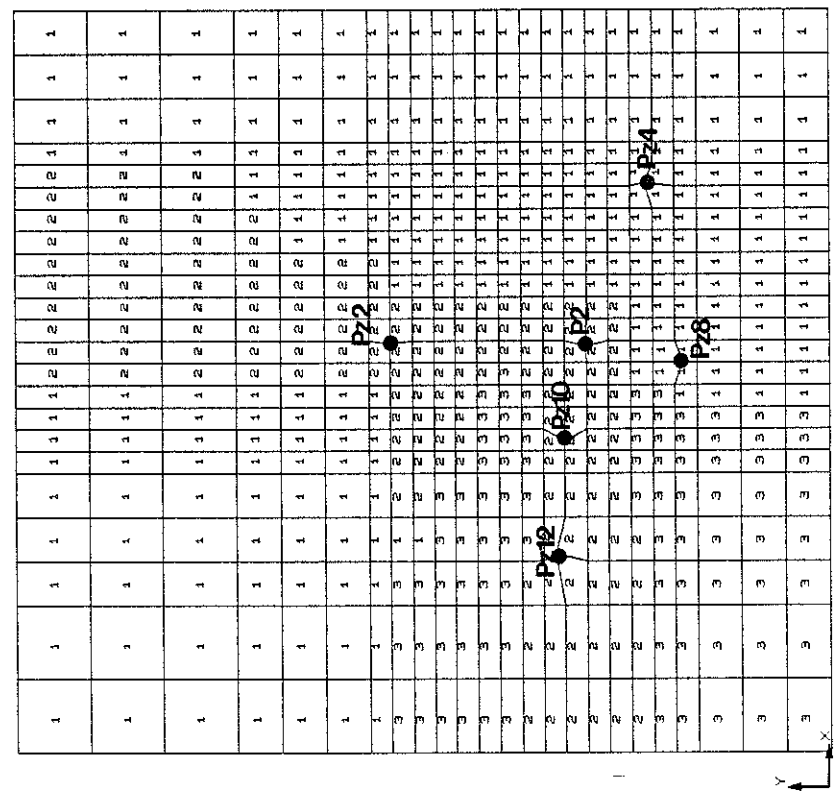


c) lithium

figure IV.45: site de Bertrée, nappe du Crétacé, courbes de restitution du second multitraçage (en écoulement naturel).



b) flux de Darcy interpolées
 $f_{Dmax} = 2.7 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$



a) discrétisation

figure IV.46: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, sollicitation convective.

IV.3.c.1) Traçages au lithium et au nitrate
(figures IV.47 à IV.51).

Les paramètres obtenus après calibration sont donnés par les 2 tableaux suivants:

paramètres de transport	matériau 3	matériau 2	matériau 1
ar (m)	0.125	1.00	0.50
al (m)	0.50	4.00	2.00
α_d (s^{-1})	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$9.0 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	7.0	2.0
θ_{im} (%)	13.0	15.0	15.0
R _{dm}	1.0	1.0	1.0
R _{d_{im}}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection			
V _{in} (m/s)	$1.78 \cdot 10^{-4}$	tableau IV.31: paramètres de calibration, test en écoulement naturel (Crétacé, Bertrée), traçage au nitrate.	
V _{out} (m/s)	$3.0 \cdot 10^{-4}$		
C _{out} (ppm)	62100		
e _{inj} (m)	9.0		

paramètres de transport	matériau 3	matériau 2	matériau 1
ar (m)	0.125	1.10	0.55
al (m)	0.50	3.60	1.80
α_d (s^{-1})	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$9.0 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	7.0	2.0
θ_{im} (%)	13.0	15.0	15.0
R _{dm}	1.0	1.0	1.0
R _{d_{im}}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection			
V _{in} (m/s)	$1.78 \cdot 10^{-4}$	tableau IV.32: paramètres de calibration, test en écoulement naturel (Crétacé, Bertrée), traçage au lithium.	
V _{out} (m/s)	$3.4 \cdot 10^{-4}$		
C _{out} (ppm)	6740		
e _{inj} (m)	9.0		

Nous constatons que les simulations conduisent à une dispersivité latérale importante ($a_l/a_r = 3$ à 4) et on peut se demander si, à l'échelle considérée, la craie fracturée ne présente pas une faible anisotropie (à suspecter, d'après Bear 1990, si a_l/a_r est inférieur à 5). On peut également penser que la dispersion latérale est surestimée par notre modèle bidimensionnel qui néglige l'effet d'une dispersion verticale du traceur. Pour trancher cette question, il faudrait mettre au point un code tridimensionnel et faire la simulation complète dans l'espace.

En ce qui concerne les autres paramètres de transport, ils sont tout à fait similaires à ceux obtenus par le traçage en écoulement convergent (si on tient compte d'une moyenne sur l'ensemble des 2 zones fissurées tracées lors de ce test).

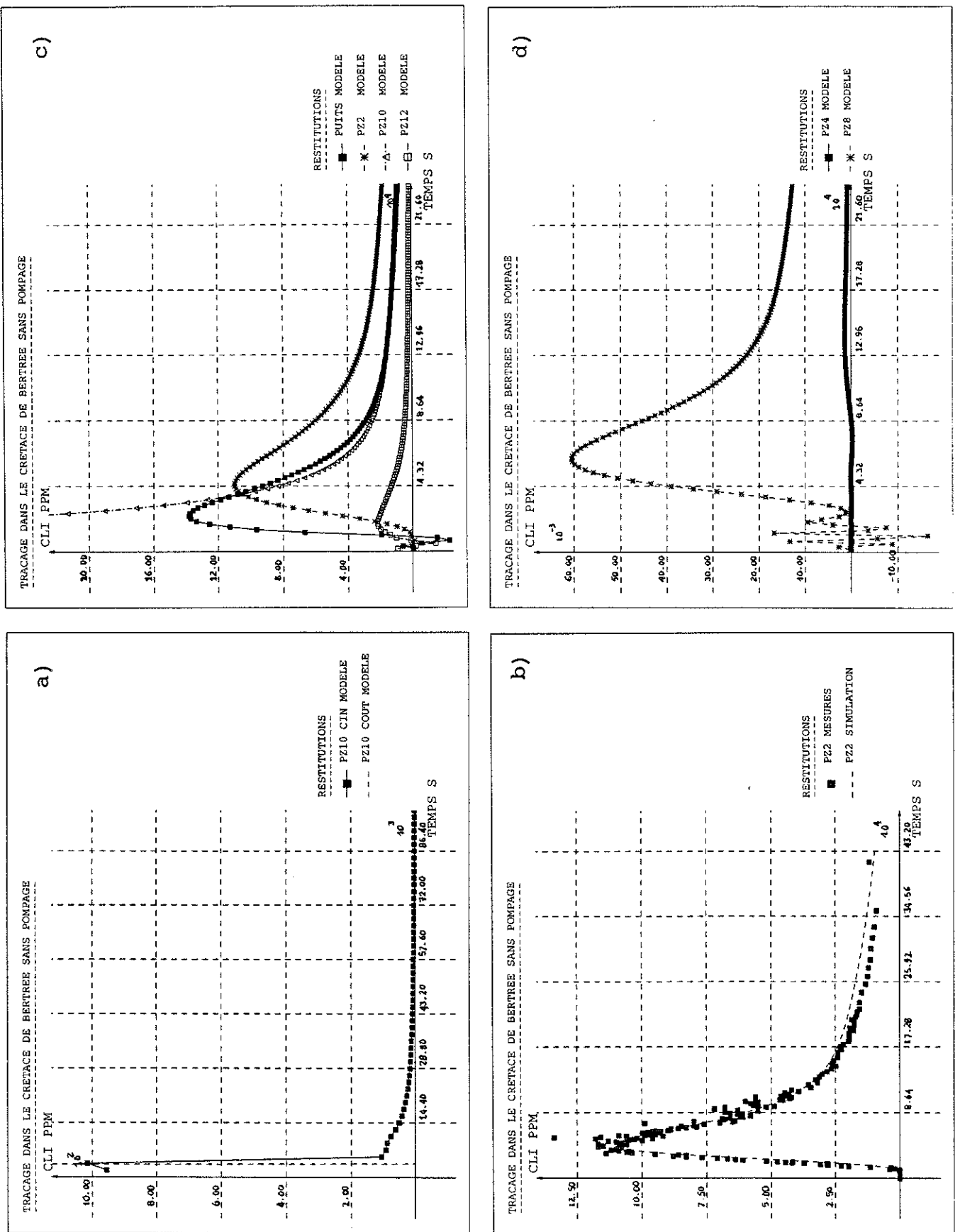


figure IV.47: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage au lithium, évolution temporelle des concentrations.

- a) injection en Pz10 (concentrations dans le piézomètre cout et dans l'aquifère cin)
- b) restitutions au piézomètre Pz2 (expérimentale et mesurée)
- c) restitutions au puits P2 et aux piézomètres Pz2, Pz10, et Pz12
- d) restitutions aux piézomètres Pz4 et Pz8

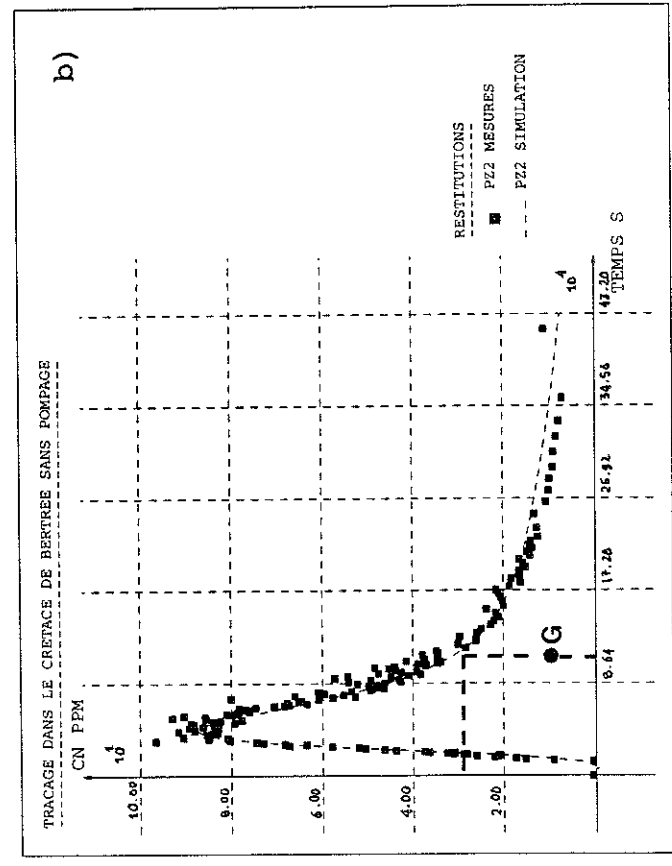
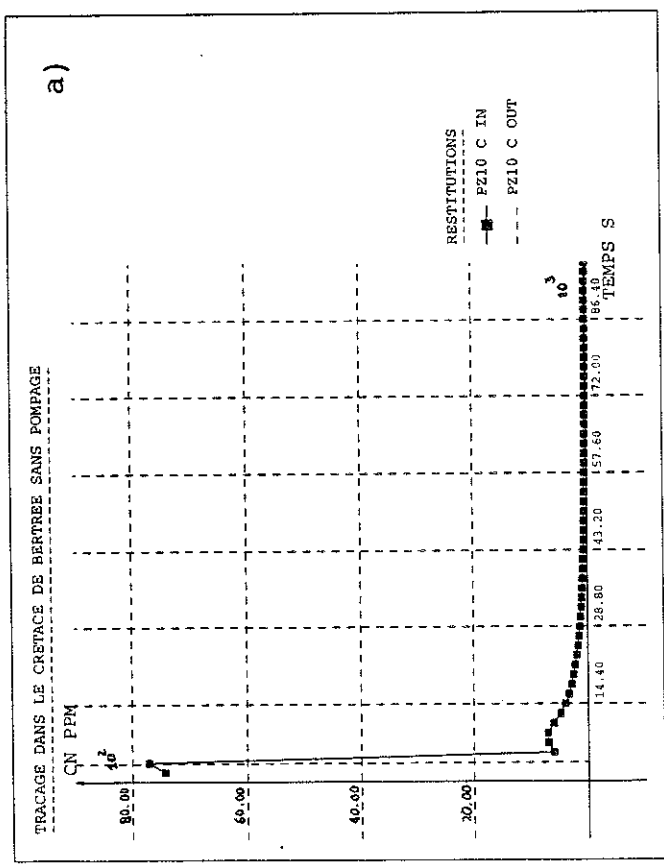
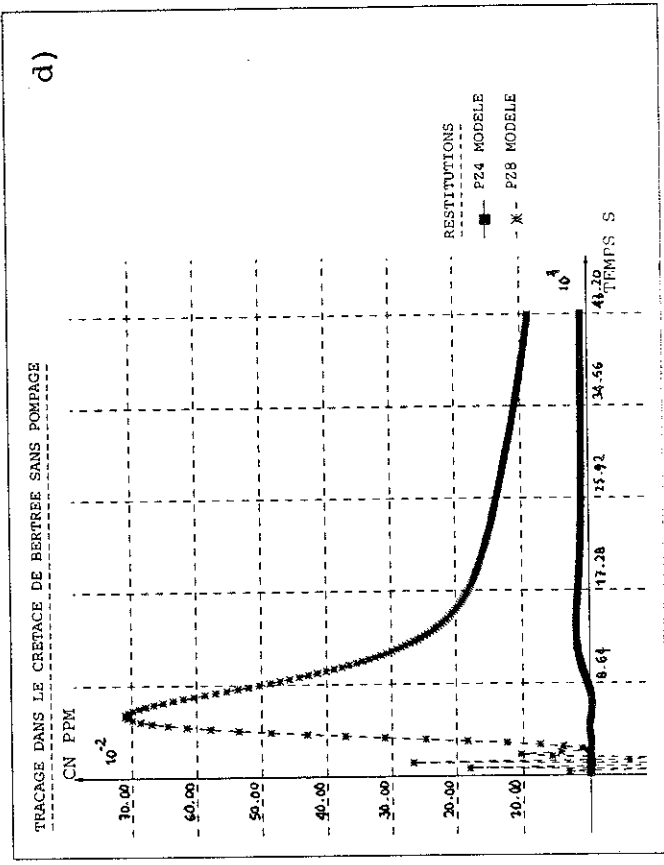
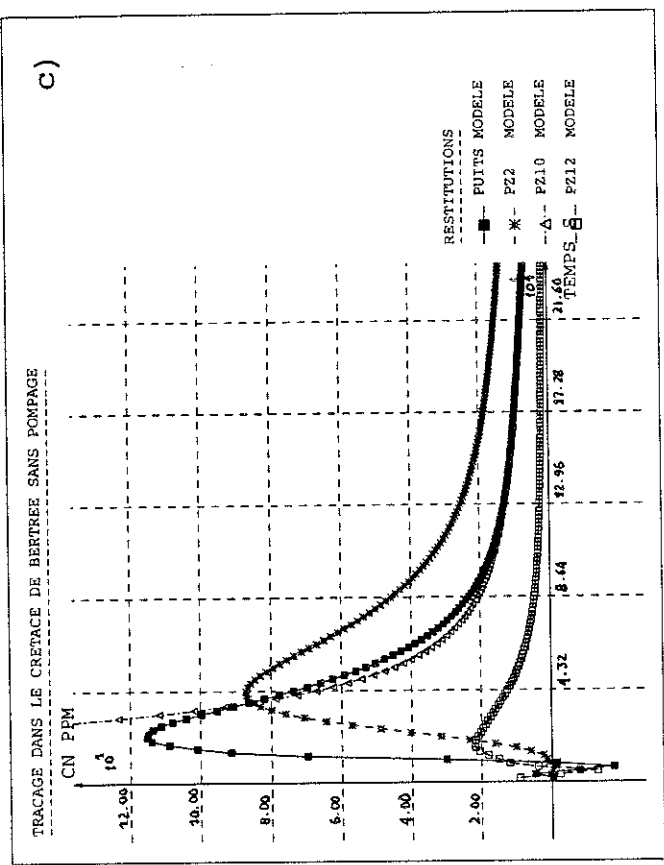


figure IV.48: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage au nitrate, évolution temporelle des concentrations.

- a) injection en Pz10 (concentrations dans le piézomètre cout et dans l'aquifère cin)
- b) restitutions au piézomètre Pz2 (expérimentale et mesurée)
- c) restitutions au puits P2 et aux piézomètres Pz2, Pz10, et Pz12
- d) restitutions aux piézomètres Pz4 et Pz8

La calibration obtenue au piézomètre Pz2 est excellente (figures IV.47b et IV.48b).

L'injection montre très clairement un caractère convectif avec de petites oscillations, mais aussi une dispersion non négligeable (figures IV.47a et IV.48a). Ces oscillations temporelles se visualisent également au piézomètre Pz12 et au puits P2 étant donné leur proximité du point d'injection (figures IV.47c et IV.48c).

On remarque également les très faibles valeurs calculées en Pz4 et Pz8 (figures IV.47d et IV.48d), peu en rapport avec les teneurs mesurées. On pourrait donc objecter que notre calibration est tout à fait insuffisante. Toutefois, une autre tentative de modélisation a été faite en prolongeant vers Pz4 et Pz8 les axes fissurés. Il en a résulté une calibration moins bonne pour le modèle écoulement et des concentrations plus grandes en Pz4 et Pz8, mais toujours très insuffisantes.

Pour cette raison, nous préférons imaginer quelques fissures locales qui confèreraient aux concentrations observées un caractère non représentatif (figure IV.49). Cette hypothèse devrait être étayée par de nouvelles investigations (diagraphies, nouveaux traçages). Si elle se confirmait, nous devrions en conclure que l'échelle à laquelle nous travaillons est peut-être un peu petite par rapport à l'élément de volume représentatif.

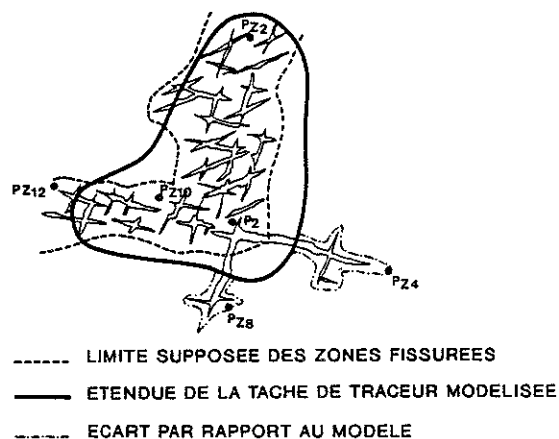
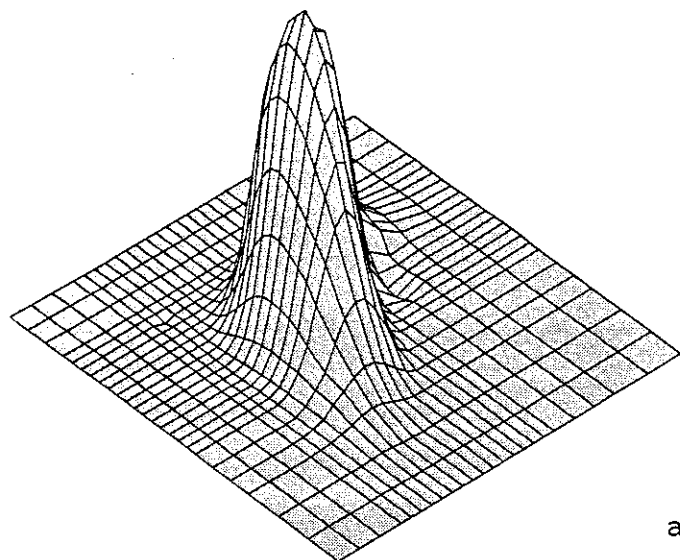


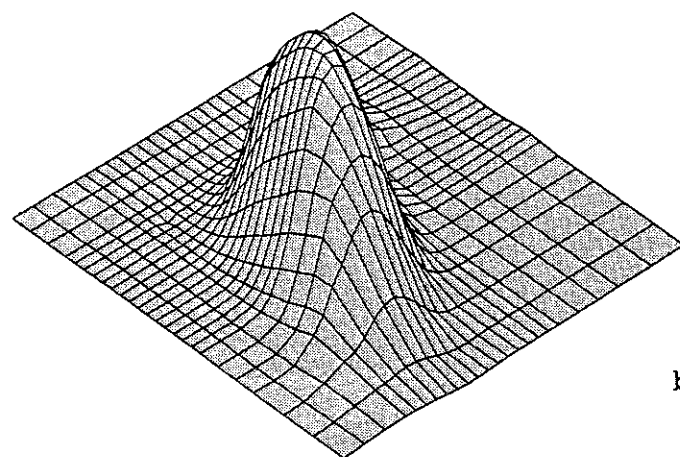
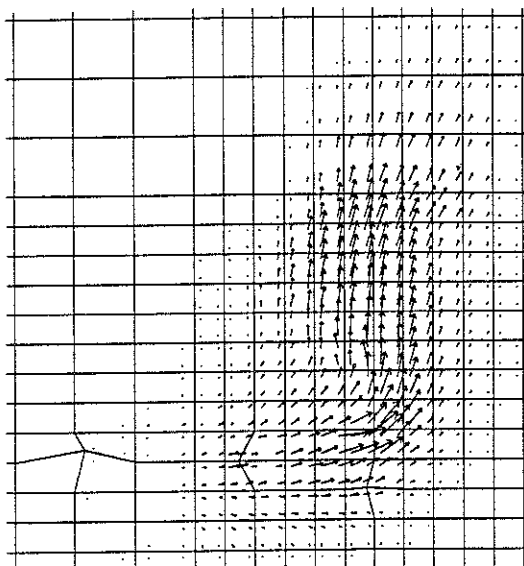
figure IV.49: schéma de fissuration pouvant expliquer la répartition du traceur lors du deuxième test dans l'aquifère crétacé.

Quoiqu'il en soit, la répartition spatiale du traceur permet de tirer quelques conclusions intéressantes (figures IV.50 et IV.51):

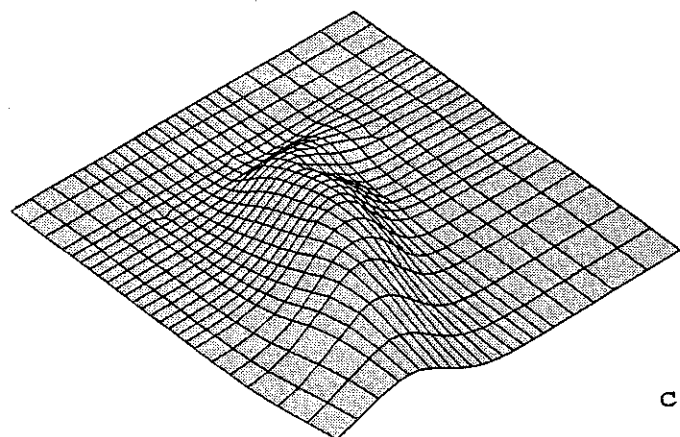
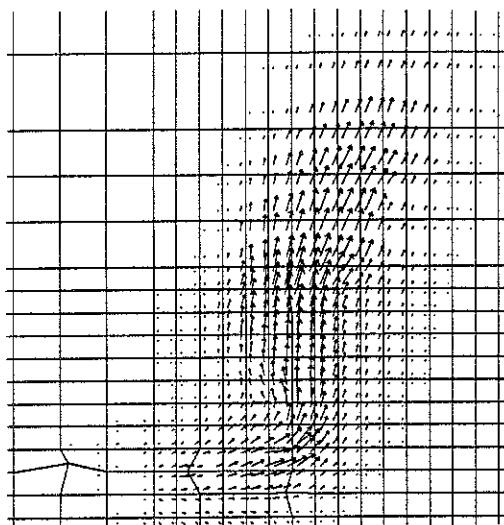
- conformément à ce qu'on pouvait prédire, le maximum spatial des concentrations dans l'eau mobile continue de migrer au-delà du point de prélèvement. On constate que, lorsque le maximum se trouve en Pz2, le temps écoulé correspond approximativement à l'abscisse du centre de gravité G associé à l'aire de restitution (figure IV.48b).



a)



b)



c)

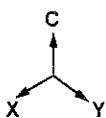
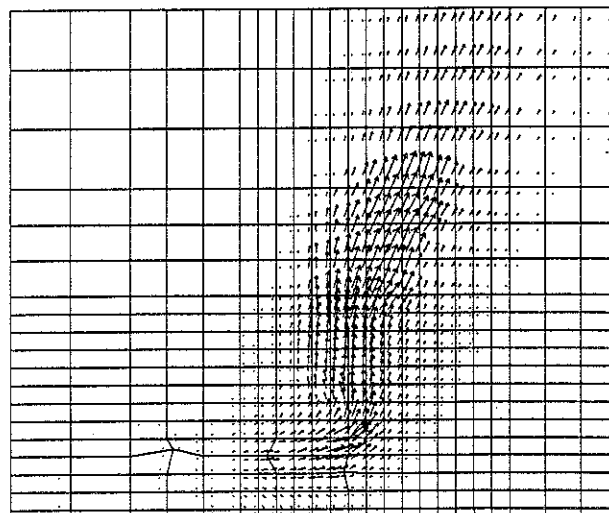


figure IV.50: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage au nitrate, concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective) et flux totaux.

- a) situation après 12 h ($f_{\max} = 2.4 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2/\text{s}$)
- b) situation après 24 h ($f_{\max} = 7.0 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$)
- c) situation après 108 h ($f_{\max} = 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$)

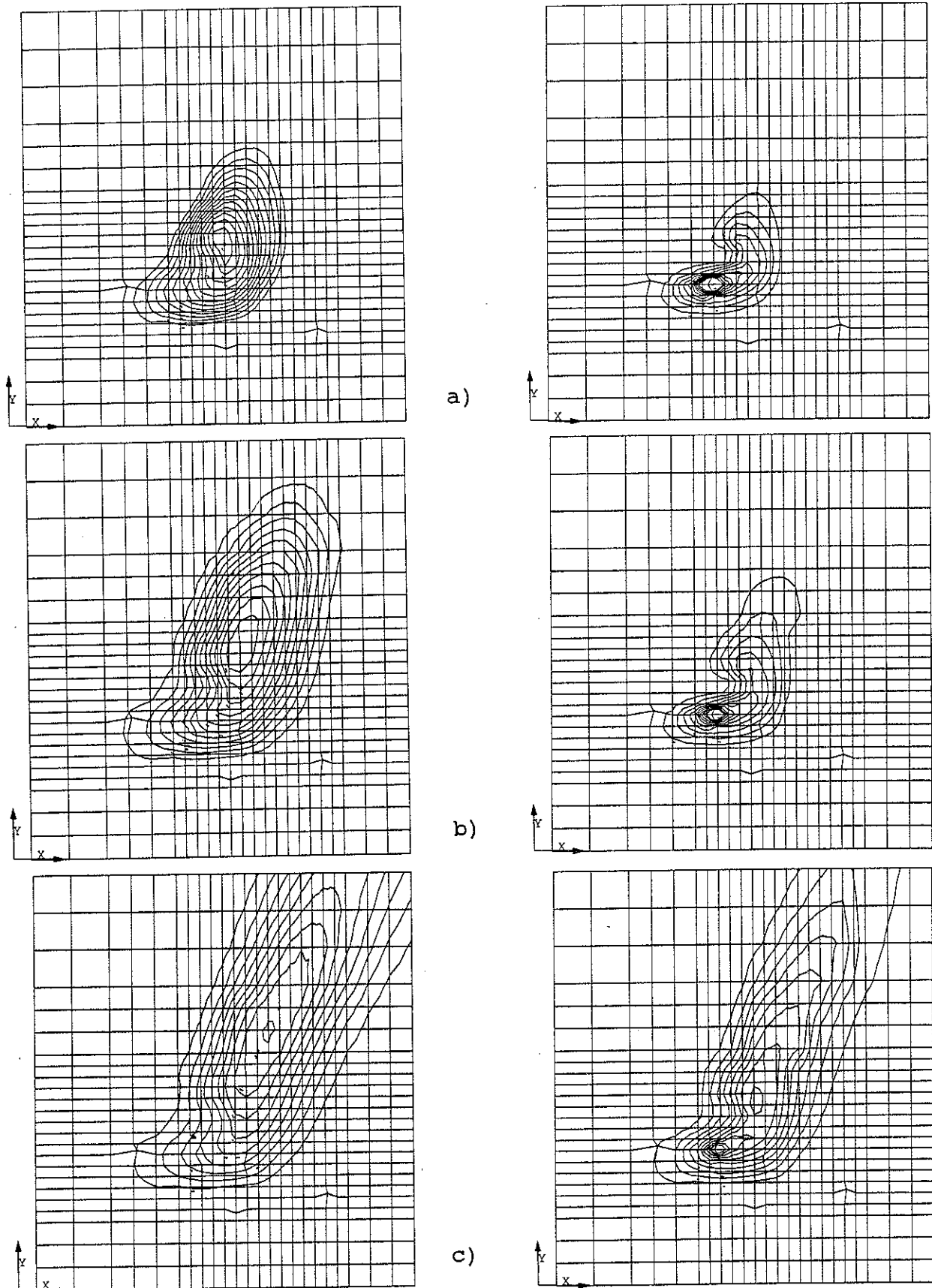


figure IV.51: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage au nitrate, concentrations dans l'eau mobile et dans l'eau immobile

- a) situation après 12 h ($\Delta c_m = \Delta c_{im} = 10$ ppm)
- b) situation après 24 h ($\Delta c_m = 4$ ppm, $\Delta c_{im} = 10$ ppm)
- c) situation après 108 h ($\Delta c_m = 1$ ppm, $\Delta c_{im} = 2$ ppm)

- dans l'eau immobile, le nuage de traceur est également plus répandu. Deux maxima peuvent être observés: le premier à proximité du point d'injection, le second plus éloigné, mais toujours en retrait par rapport à celui existant dans l'eau mobile.
- enfin, la migration du traceur est lente par rapport à nos prévisions calculées sur base de la vitesse moyenne d'écoulement. Lorsqu'on examine le schéma de fissuration en forme de coude (figure IV.49), on comprend que le traceur, poussé par le courant convectif, ait tendance à s'accumuler au bord de la zone fissurée. Il ne trouve un exutoire qu'après un temps plus long, soit en se dirigeant vers l'autre axe fissuré, soit en pénétrant dans la zone moins perméable et en s'y propageant. Nous trouvons là 2 chemins différents qui pourraient expliquer l'irrégularité de la courbe de restitution pour l'uranine.

IV.3.c.2) Tracage à l'uranine (figures IV.52 et IV.53).

Il est bien évidemment plus difficile d'effectuer une calibration sur une courbe de restitution aussi irrégulière que celle de l'uranine. Toutefois, on peut calculer une courbe qui privilégie les fortes densités de points expérimentaux (figure IV.52b). Il y correspond les paramètres suivants:

paramètres de transport	matériau 3	matériau 2	matériau 1
a_T (m)	0.20	1.53	0.77
a_L (m)	0.60	4.60	2.30
α_d (s^{-1})	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$3.5 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	7.0	2.0
θ_{im} (%)	13.0	15.0	15.0
R_{dm}	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection		<u>tableau IV.33</u> : paramètres de calibration, test en écoulement naturel (Crétacé, Bertrée), tracage à l'uranine.	
v_{in} (m/s)	$1.33 \cdot 10^{-4}$		
v_{out} (m/s)	$1.5 \cdot 10^{-4}$		
c_{out} (ppb)	3390		
e_{inj} (m)	13.0		

L'injection prolongée présente également une dominante convective avec une dispersion non négligeable (figure IV.52a). Toutefois, les oscillations numériques persistantes sont beaucoup plus faibles. Cette stabilité accrue se remarque également sur les restitutions aux différents piézomètres (figures IV.52c et IV.52d).

La répartition spatiale (figure IV.53) est similaire à celle des nitrates. On remarquera toutefois que le nuage de traceur est un peu plus étendu (ce qui est normal puisque les dispersivités introduites dans le modèle sont un peu plus élevées). En outre, la position du maximum de concentration (eau mobile) est moins éloignée du piézomètre Pz10; ceci résulte du caractère non instantané de l'injection.

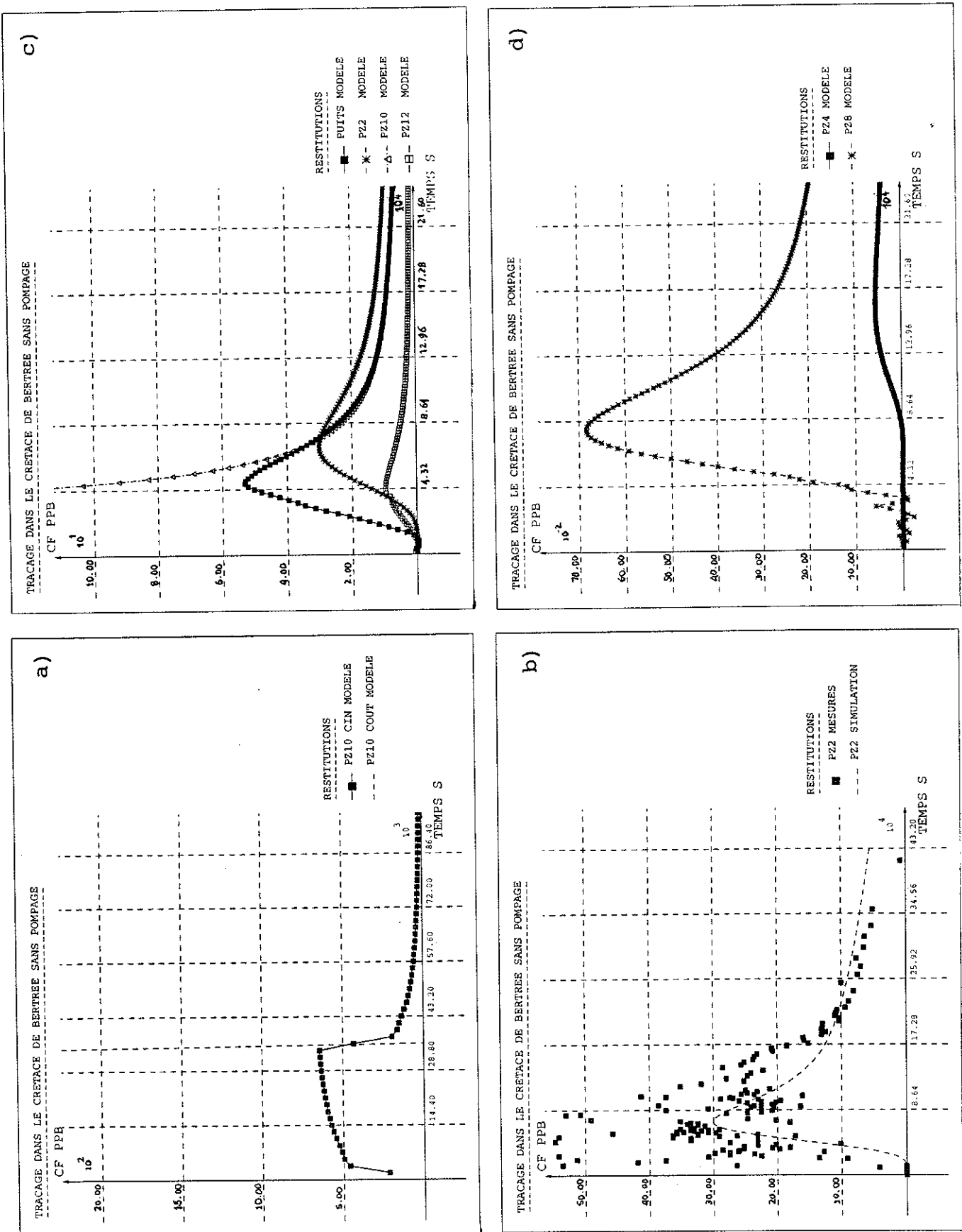
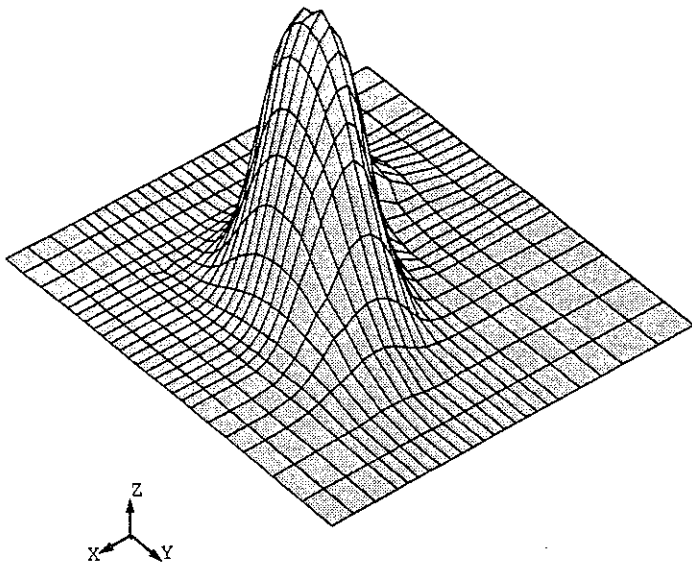
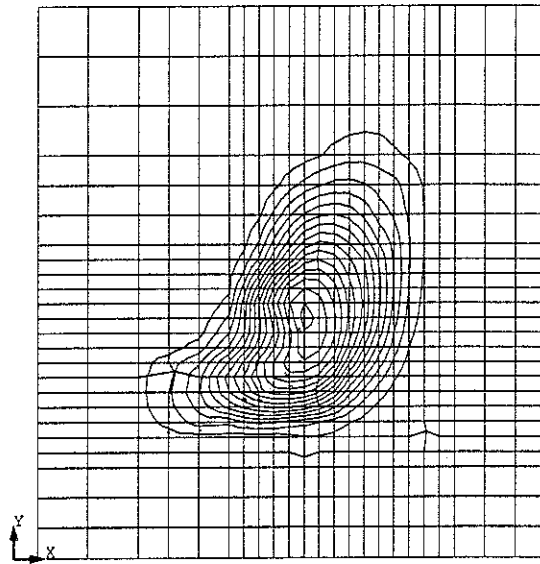


figure IV.52: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage à l'uranine, évolution temporelle des concentrations.

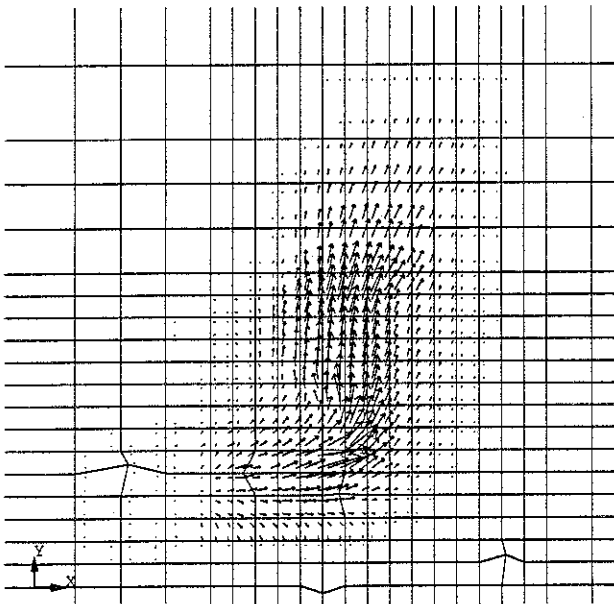
- a) injection en Pz10 (concentrations dans le piézomètre Cout et dans l'aquifère C1n)
- b) restitutions au piézomètre Pz2 (expérimentale et mesurée)
- c) restitutions au puits P2 et aux piézomètres Pz2, Pz10, et Pz12
- d) restitutions aux piézomètres Pz4 et Pz8



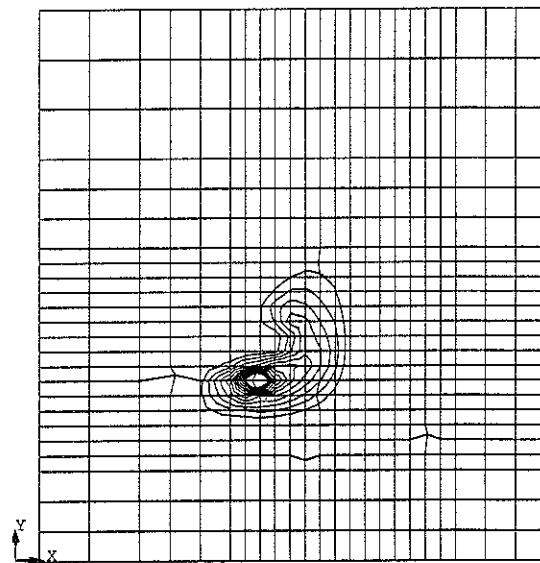
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta C_m = 25$ ppb



b) flux totaux
 $f_{\max} = 8.9 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta C_{im} = 5$ ppb

figure IV.53: site de Bertrée, second test dans le Crétacé, traçage à l'uranine, résultats de la simulation (après 24 h.)

IV.4. DEDUCTIONS LIEES A L'ENSEMBLE DES TRACAGES REALISES SUR LE SITE DE BERTREE.

Dans cette section, nous résumons les principaux points qui ont été mis en évidence par l'interprétation des 4 multitraçages réalisés à Bertrée.

IV.4.a) Comparaison des 2 aquifères.

Nous avons pu tester, à une même échelle, deux aquifères forts différents.

Le premier aquifère (formations gréseuses et sableuses du Landénien) est le siège d'une nappe phréatique. Il est fort hétérogène et il n'est pas certain que l'on puisse le caractériser de manière globale. Certains auteurs (Sanchez-Vila, Carrera, ...) prétendent notamment que, lorsque de telles hétérogénéités se présentent, les dispersivités ne tendent jamais vers une valeur asymptotique lorsque le volume testé augmente. Toutefois, lorsqu'un domaine d'investigation est choisi, les valeurs des paramètres peuvent caractériser le comportement du milieu à cette échelle. En outre, ces paramètres permettent d'évaluer l'influence des hétérogénéités sur l'écoulement et le transport.

Le second (craies multiporeuses du Crétacé) constitue une importante réserve d'eau en nappe semi-captive voire captive. Il est davantage homogène. Il est toutefois affecté par une fissuration qui joue un rôle essentiel dans l'écoulement et le transport. Plus cette fissuration est importante, plus la probabilité de rencontrer des hétérogénéités majeures (distribuées de manière irrégulière) est grande et, par conséquent, plus le volume testé devra être important pour effectuer une globalisation correcte du transport. Cette conclusion s'applique également à l'écoulement mais dans une moindre mesure. Comme cas extrêmes, on peut envisager une craie peu fissurée pour laquelle les paramètres de transport évalués en laboratoire sont semblables à ceux déterminés in situ et une craie très karstifiée pour laquelle une globalisation⁴⁰ de comportement est quasiment impossible à réaliser.

Grâce aux tests de Bertrée, nous avons pu évaluer les paramètres d'écoulement et de transport qui correspondent à ces aquifères (tableau IV.34). Pour l'aquifère landénien, nous n'avons pas envisagé de processus de dégradation⁴¹ et l'adsorption n'a pu être correctement évaluée. Pour l'aquifère crétacé, nous avons distingué différents comportements suivant le degré de fissuration. Dans le cas où la craie est très fissurée, il n'est pas certain que le domaine testé soit un élément représentatif d'une zone plus étendue.

⁴⁰ En Hesbaye, les zones très karstifiées sont peu fréquentes et leur extension est limitée.

⁴¹ Dans le cas des nitrates, il est possible que cette dégradation existe, mais nous avons supposé que sa cinétique était lente par rapport aux autres processus influençant le transport.

Ces objections mises à part, les coefficients déterminés sont fiables puisque les simulations correspondantes tiennent compte des particularités des tests effectués.

	Landenien	Crétacé fissuration faible	Crétacé fissuration moyenne	Crétacé fissuration importante
paramètres d'écoulement				
K (m/s)	$10^{-3} \rightarrow 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	$3.2 \cdot 10^{-4}$
S	$\pm 10^{-3}$	entre $5 \cdot 10^{-4}$ et $3 \cdot 10^{-3}$		
paramètres de transport				
a_r (m)	====	0.15	0.5	1.0
a_L (m)	$2.5 \rightarrow 7.0$	0.5	2.0	4.0
α_d (s^{-1})	$3 \cdot 10^{-8} \rightarrow 6 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$
θ_m (%)	$0.5 \rightarrow 6.0$	1.0	2.5	7.5
θ_{im} (%)	$1.0 \rightarrow 20.0$	15.0	20.0	30.0
R _{dm}	>1	1.0	1.0	1.0
R _{dim}	>1	1.0	1.0	1.0

tableau IV.34: tableau comparatif des 2 aquifères testés (écoulement et transport)

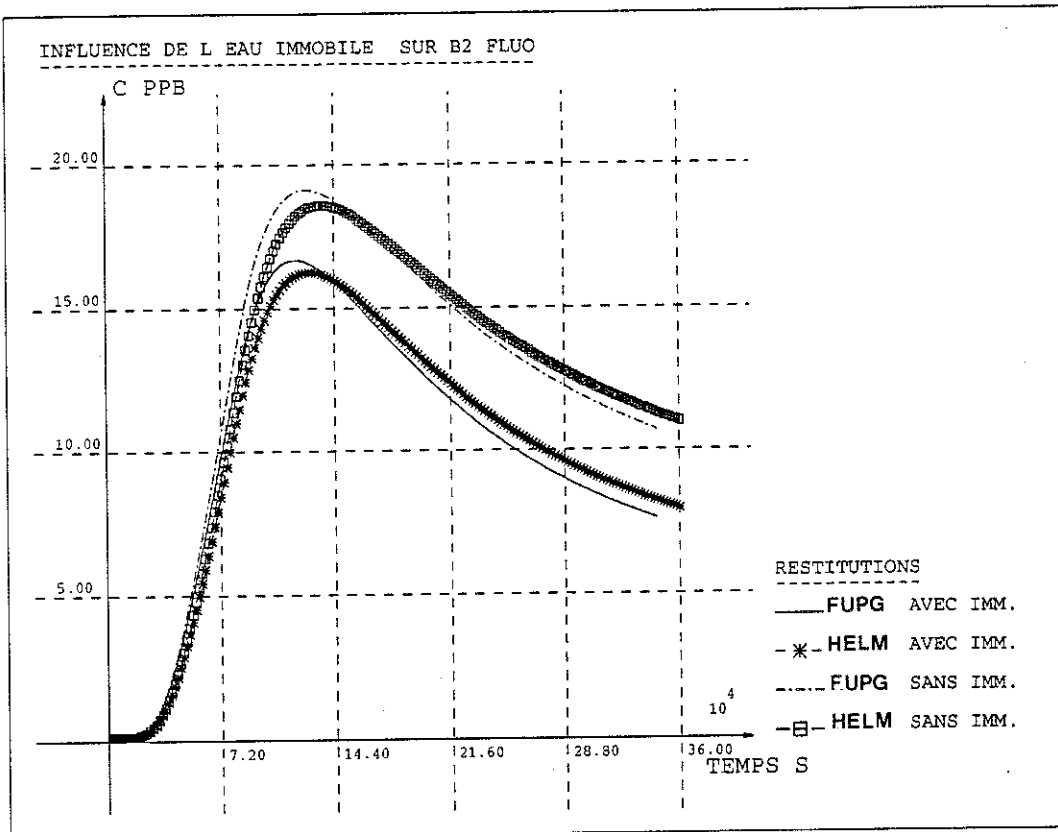
En comparant ces valeurs, il semble que l'aquifère landénien est globalement moins perméable et plus dispersif. Il est vraisemblable que la structure de son système multiporeux soit très différente de celle qui existe dans l'aquifère crétacé.

Ceci se traduit d'ailleurs très nettement sur l'effet d'eau immobile qui est beaucoup plus important dans la craie du Crétacé. Pour s'en convaincre, on peut recommencer la simulation des traçages à l'uranine dans les deux aquifères (avec écoulement convergent) en annulant l'effet d'eau immobile. On constate alors que la modification relative de la courbe de restitution est beaucoup plus importante pour le Crétacé (figure IV.54a) que pour le Landénien (figure IV.54b). Ceci est valable quelle que soit la technique utilisée pour résoudre le problème (les résultats F.U.P.G et H.E.L.M. étant similaires à la figure IV.54, on peut écarter l'hypothèse d'une erreur numérique sur le résultat).

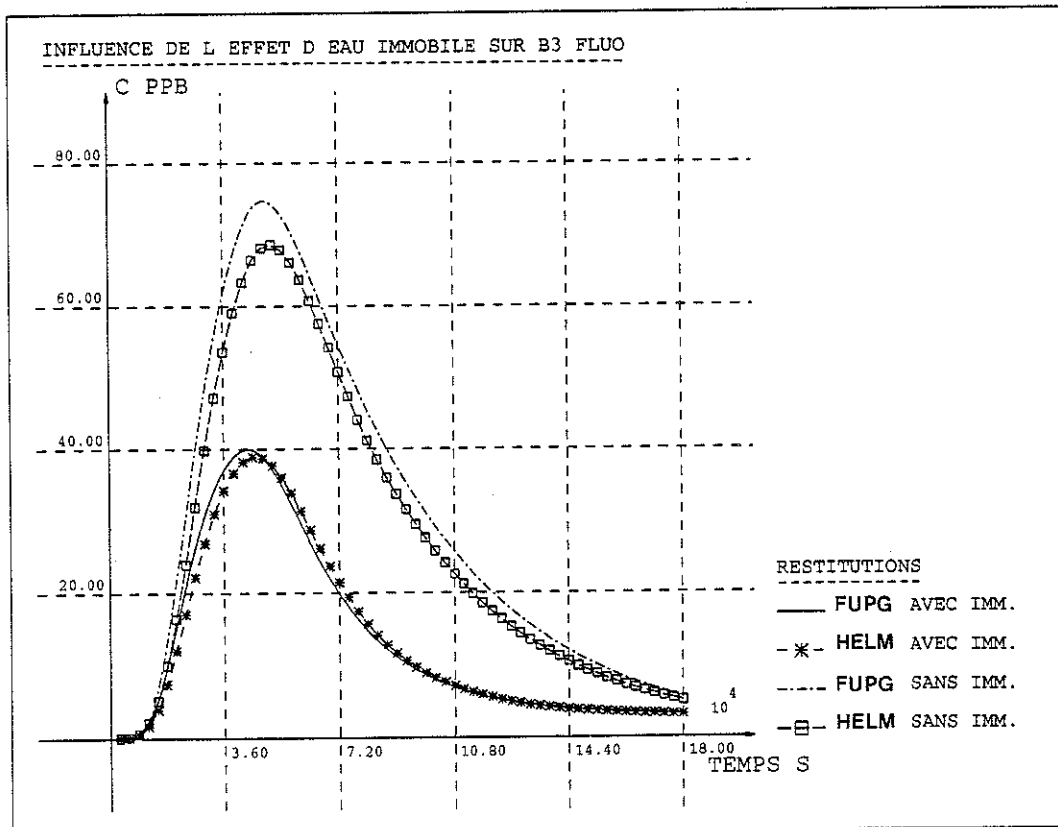
Enfin, insistons sur le fait que les paramètres déterminés peuvent varier en fonction du traceur utilisé mais que, pour des traceurs salins, cet effet est secondaire par rapport à celui des hétérogénéités du milieu.

IV.4.b) Comparaison des tests en écoulement naturel et en écoulement convergent.

Grâce à l'interprétation numérique, il est possible de représenter très précisément l'écoulement qui existe dans l'aquifère. Outre les hétérogénéités spatiales qui peuvent influencer considérablement la répartition des traceurs, nous avons pu représenter 2 types de sollicitations convectives.



a) dans le Landenien (second traçage)



b) dans le Crétacé (premier traçage)

figure IV.54: influence de l'effet d'eau immobile sur la restitution de l'uranine dans les deux aquifères.

La première consiste à forcer le trajet du traceur vers un puits de pompage. Il en résulte un écoulement convergent dont la vitesse croît au fur et à mesure qu'on se rapproche du point de pompage.

La seconde correspond à l'écoulement naturel de la nappe en l'absence de pompage. Elle est plus uniforme et généralement plus lente.

Pour comparer ces deux types de test, nous avons repris les restitutions calibrées des traçages à l'uranine dans le Crétacé en rapportant ces courbes à une même masse injectée (100 gr)⁴². On remarque (figure IV.55a) que, pour un écoulement convergent, la restitution est plus rapide, la concentration plus importante, et la courbe moins étalée. Ceci peut se comprendre puisque la dispersion longitudinale agit moins longtemps dans le premier cas. De plus, l'action de la dispersion transversale y est contrecarrée par la convergence de l'écoulement.

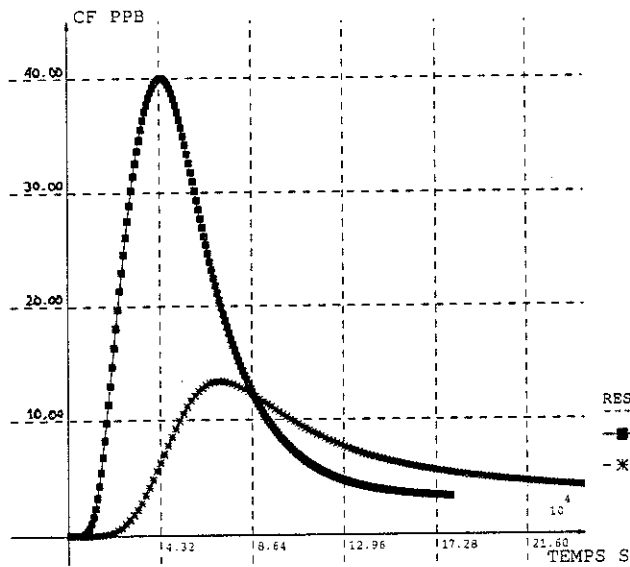
Pour étayer ce second argument, nous avons envisagé l'effet d'une variation importante de la dispersivité latérale sur les restitutions obtenues (figure IV.55b). On observe seulement une faible variation relative en écoulement convergent (10 % au niveau du pic). Par contre, en écoulement naturel, l'effet est radical (30 à 40 % sur l'ensemble de la courbe).

Au vu de ces résultats, on pourrait se demander si l'effet d'eau immobile influence de la même manière les deux tests. La figure IV.55c permet de répondre à cette question. On y constate que, pour les deux tests, la simulation sans effet d'eau immobile conduit à des concentrations deux fois plus élevées. Ce n'est qu'en fin de traçage que la tendance est inversée. Ceci traduit bien un important déficit de masse qui est associé au stockage temporaire du traceur dans l'eau immobile.

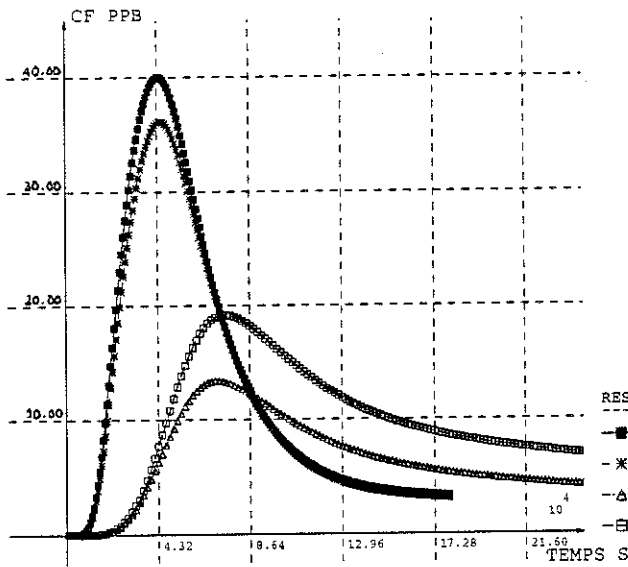
On constatera également que le maximum de la courbe est observé plus tardivement lorsque l'eau immobile n'agit pas. Ce phénomène, apparemment contradictoire, avait déjà été observé par Raven en 1988 (voir figure II.8, p.76). Il résulte d'une différence entre les vitesses de transfert de l'eau mobile vers l'eau immobile d'une part (partie croissante de la courbe) et de l'eau immobile vers l'eau mobile d'autre part (partie décroissante de la courbe). Cette différence est liée au contraste entre les fractions volumiques occupées par ces deux types d'eau.

Enfin, rappelons que les maxima des courbes de restitution ne correspondent pas à l'arrivée par convection du pic de traceur. Dans le cas d'un écoulement convergent, ce pic n'arrive que très tardivement au point de prélèvement. Dans le cas d'un écoulement naturel, il arrive après que le maximum temporel soit observé, à un instant équivalent à l'abscisse du centre de gravité de l'aire de restitution (figure IV.56). On comprend dès lors le caractère subjectif des courbes normées.

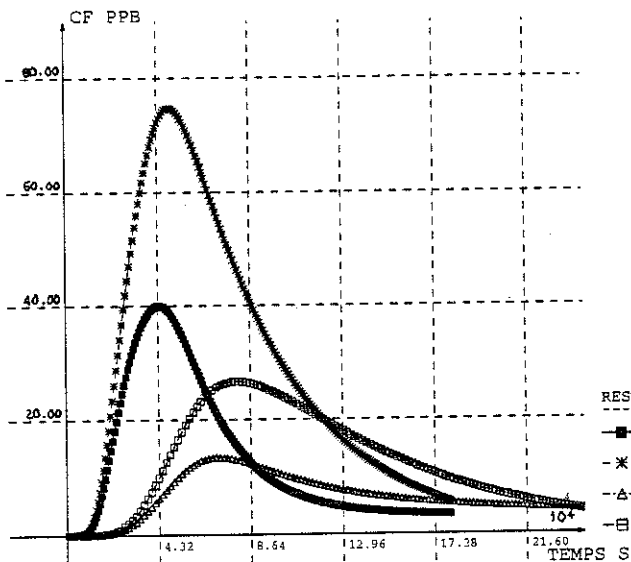
⁴² Ces restitutions sont comparables puisqu'elles correspondent à une distance semblable entre le point d'injection et le point de prélèvement.



a) courbes de restitution calibrées



b) influence de la dispersivité transversale



c) influence de l'effet d'eau immobile

figure IV.55: comparaison des traçages à l'uranine dans le Crétacé, écoulements uniforme et convergent.

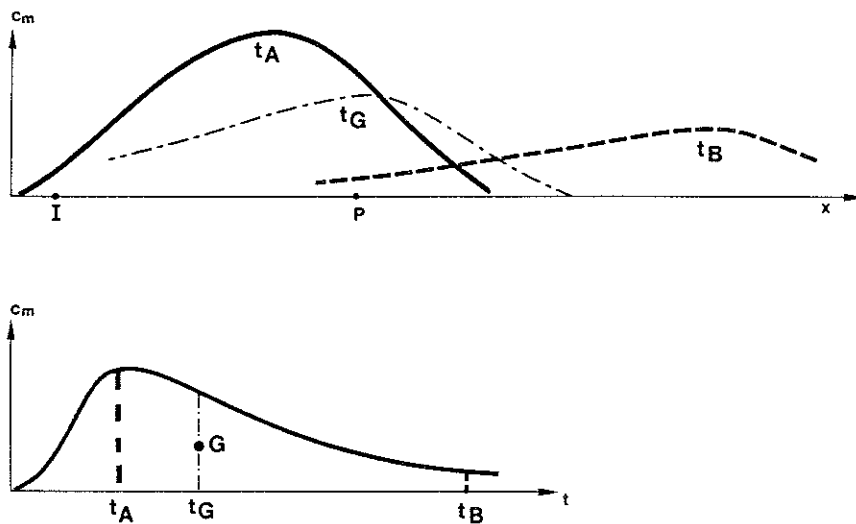


figure IV.56: correspondance entre maximum spatial et maximum temporel pour un traçage en écoulement naturel.

IV.4.c) Influence des différents modes d'injection.

Au cours des simulations, nous avons pu constater que les résultats obtenus peuvent dépendre des paramètres d'injection. Il en est de même dans la réalité. Il convient donc, dans un premier temps, de maîtriser le mieux possible les conditions d'injection (utilisation de pompes doseuses pour les injections prolongées, déversement rapide avec chasse importante pour les injections courtes) et, dans un second temps, de les modéliser de façon rigoureuse.

Grâce à l'élément spécial de frontière que nous avons mis au point, nous avons pu représenter la pénétration naturelle du traceur dans la nappe sous l'action simultanée de la convection et de la dispersion. Nous avons également simulé la surpression engendrée par l'injection du traceur et par le débit de chasse ainsi qu'une éventuelle rétrodiffusion du traceur vers le piézomètre d'injection.

Dans le cas de l'aquifère landénien, nous avons même dû supposer qu'une certaine quantité de traceur était stockée dans ce piézomètre et que, suite à une faible circulation d'eau à cet endroit, elle n'était libérée que très progressivement. Le phénomène se produit également dans l'aquifère crétacé, mais à une échelle de temps⁴³ beaucoup plus réduite (environ 10 minutes selon la figure IV.57)⁴³. C'est pourquoi, en général, nous avons négligé cet effet dans nos simulations.

⁴³ Cette constatation a pu être établie par Meus et Valentini (voir Valentini 1992) qui ont surveillé la conductivité dans les piézomètres d'injection, pour des traçages en milieu crayeux réalisés dans la région de Hannut.

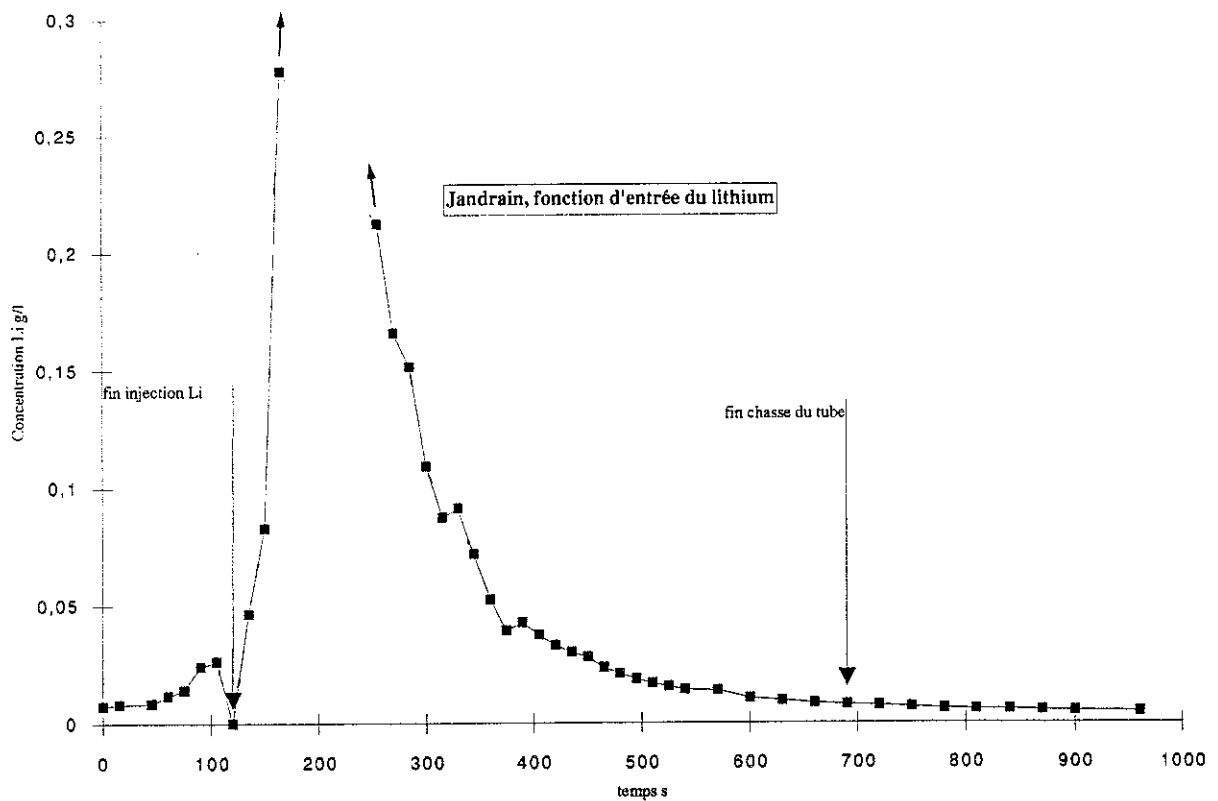


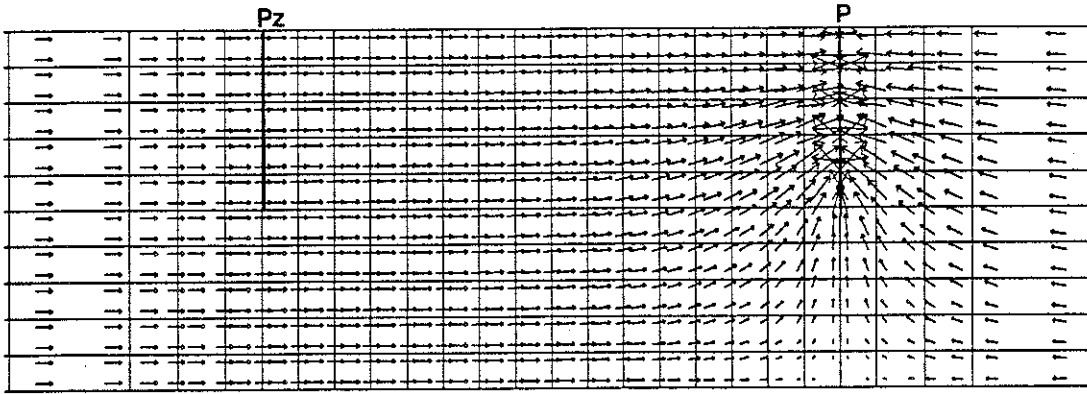
figure IV.57: concentration dans le piézomètre au niveau du point d'injection (traçage dans la craie du Crétacé à Jandrain) d'après O.Valentini.

Une autre hypothèse que nous avons prise consistait à découpler le transport et l'écoulement. Cette approximation est bien évidemment correcte pour des substances comme le lithium ou l'uranine détectés en faibles teneurs. Toutefois, lorsqu'on injecte 25 kg de NaCl dans un piézomètre, les concentrations observées dans la nappe au niveau de l'injection atteignent 63 ‰ et on peut se demander s'il n'en résulte pas des écoulements gravitaires.

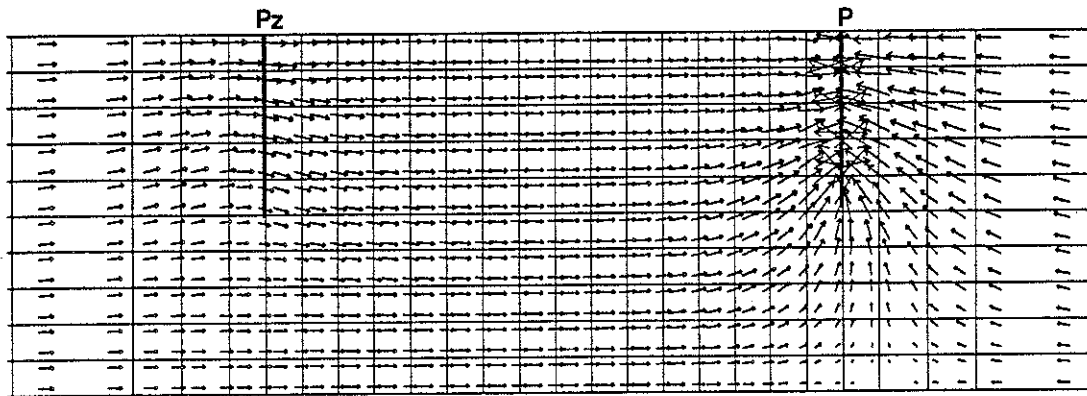
Pour juger qualitativement de cette influence, nous avons réalisé une simulation simple.

Considérons une nappe captive de 20 m d'épaisseur dont la perméabilité est de 10^{-4} m/s. Sur la moitié de son épaisseur, on réalise une tranchée dans laquelle on pompe un débit q par mètre de longueur. L'écoulement cylindrique qui s'établit alors dans la nappe est celui représenté à la figure IV.58a où l'intensité des flux dépend de la valeur de q .

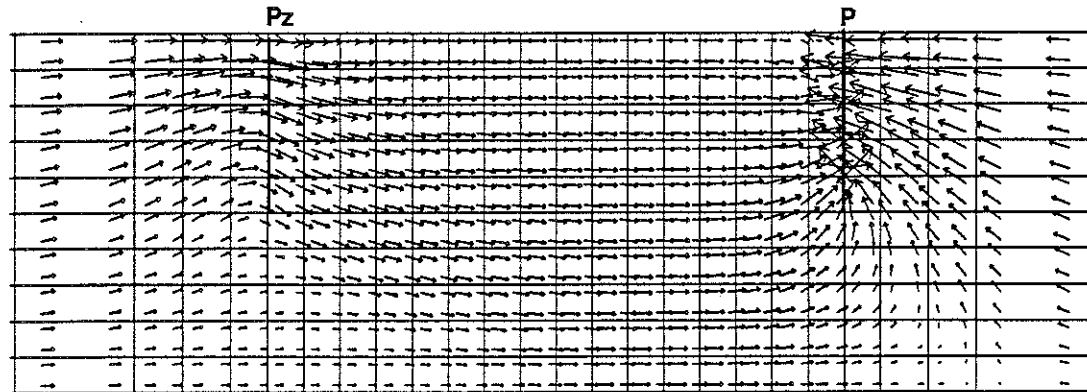
Envisageons alors, à 50 mètres de là, une autre tranchée similaire dans laquelle on injecte, en permanence, une saumure dont la concentration est de 70 ‰. Cette saumure va se propager dans l'aquifère suivant une loi de convection-dispersion ($n_{eff} = 3.5 \%$, $a_L = 4$ m, $a_T = 0.4$ m).



a) résolution découplée, si $q = 25 \text{ m}^2/\text{h} \Rightarrow V_{D\max} = 1.28 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$
 si $q = 12.5 \text{ m}^2/\text{h} \Rightarrow V_{D\max} = 6.4 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$



b) injection continue d'une solution à 70 %, pompage à $25 \text{ m}^2/\text{h}$,
 résolution semi-couplée, situation après 20 jours,
 $V_{D\max} = 1.31 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$



c) injection continue d'une solution à 70 %, pompage à $12.5 \text{ m}^2/\text{h}$,
 résolution semi-couplée, situation après 20 jours.
 $V_{D\max} = 6.9 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$

figure IV.58: effet de la densité sur la circulation des fluides pompés.

Etant donné la valeur élevée de la concentration, il peut en résulter un effet gravitaire dont l'importance dépend du débit q pompé. Les figures IV.58b et IV.58c illustrent les écoulements calculés par le modèle semi-couplé lorsque $q = 25 \text{ m}^2/\text{h}$ et $12,5 \text{ m}^2/\text{h}$ respectivement. Les distributions de concentrations relatives qui y correspondent sont représentées à la figure IV.59 en regard de celle obtenue par la résolution découplée.

On constate que, lorsque $q = 25 \text{ m}^2/\text{h}$, l'effet gravitaire est très localisé. Par contre, lorsque q diminue, il prend plus d'importance. En ce qui concerne les injections de traceur, nous en concluons que ce phénomène se produit lorsque la vitesse d'écoulement est faible à proximité du piézomètre et que l'injection est prolongée.

Dans notre cas, la vitesse de Darcy au piézomètre est élevée ($2,4 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ contre $6,9 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$ dans la simulation couplée avec $q = 25 \text{ m}^3/\text{h}$) et l'injection est de courte durée (20 minutes). En conséquence, nous pouvons considérer l'effet gravitaire comme négligeable.

IV.4.d) Mode de résolution de l'équation de transport.

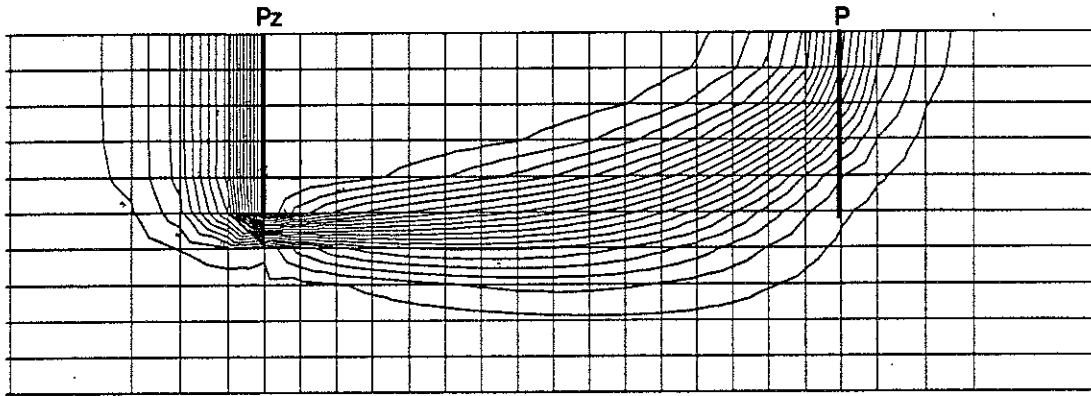
Toutes les simulations de traçage ont été réalisées par la méthode F.U.P.G. en effectuant un grand nombre de pas de temps (pour garder un nombre de Courant inférieur à l'unité). Il en résulte un temps C.P.U. non négligeable et variable suivant les discrétisations utilisées (entre 7 et 35 minutes pour une VAX STATION modèle 60). On pourrait se demander s'il n'est pas possible, en utilisant la méthode H.E.L.M., de réduire ce temps de calcul.

Cependant, cette méthode fonctionne mal lorsque le nombre de Courant est inférieur à l'unité. Par conséquent, lorsque la variation spatiale des vitesses d'écoulement est importante, on se trouve face à un dilemme:

- soit, on accepte d'avoir, pour un certain nombre d'éléments, des nombres de Courant inférieurs à 1;
- soit, on utilise des grands pas de temps et la dispersion est mal représentée, au profit de la convection.

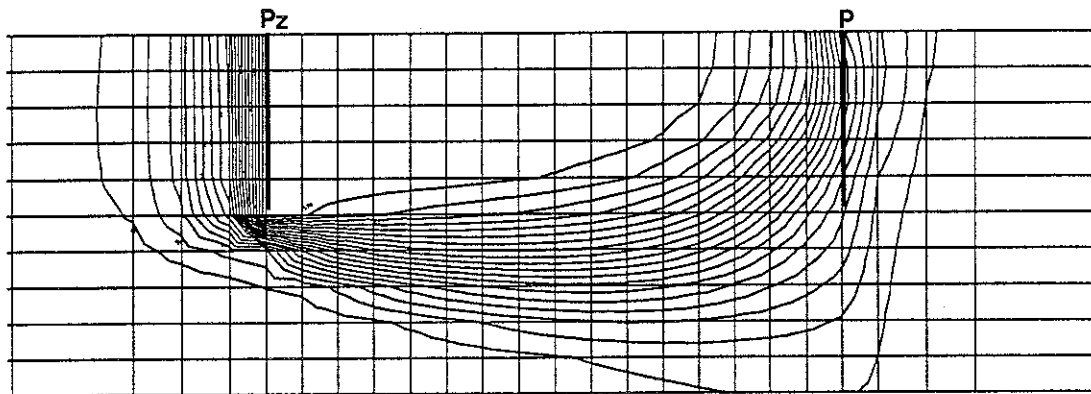
Pour éviter ce problème, nous proposons l'utilisation de maillages mixtes avec certains éléments de type F.U.P.G., d'autres de type H.E.L.M.

Le morcellement de la structure s'effectue comme suit. Après avoir modélisé l'écoulement, on calcule les nombres de Courant associés à chaque élément. Il est alors facile de déterminer lesquels d'entre eux doivent être de type H.E.L.M. ($Cr > 1$) et de type F.U.P.G. ($Cr < 1$). En procédant de la sorte, la routine de détermination du trajet convectif inverse ne doit être activée que pour certains noeuds et on économise du temps de calcul.



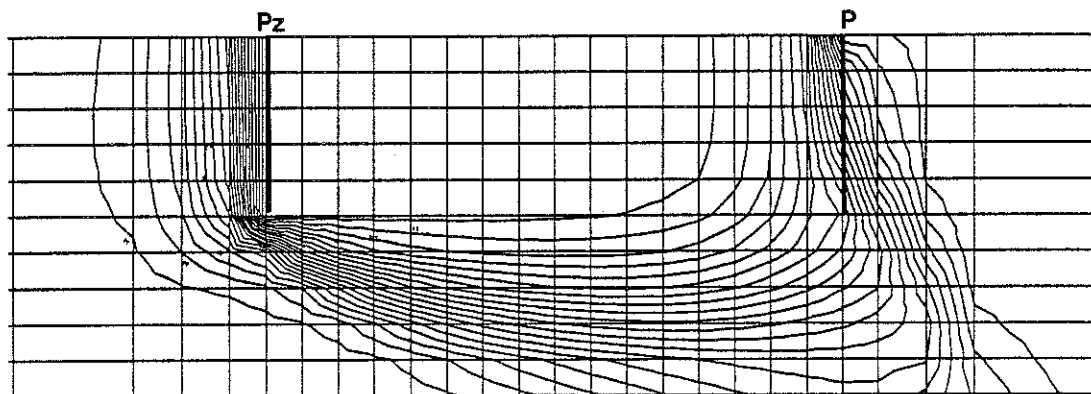
y
x

a) résolution découplée, régime permanent atteint



y
x

b) résolution semi-couplée, pompage à $25 \text{ m}^2/\text{h}$



y
x

c) résolution semi-couplée, pompage à $12.5 \text{ m}^2/\text{h}$

Figure IV.59: effet de la densité sur la répartition de la substance miscible, concentrations relatives après 20 jours, $\Delta c_R = 0.1$.

On peut se demander si ce processus hybride n'est pas dangereux, notamment en ce qui concerne la continuité inter-élément. Toutefois, les deux types d'éléments possèdent les mêmes fonctions de forme et nous ne changeons que la fonction de pondération spatio-temporelle dont le choix n'est pas limité à de telles contraintes géométriques.

Pour tester ce mode de résolution, nous reprenons la simulation du traçage à l'uranine lors du pompage dans le Crétacé. Par la méthode F.U.P.G., 200 pas de 900 secondes ont été nécessaires pour déterminer la courbe de restitution. Les figures IV.60a, b, c montrent les courbes obtenues par la méthode mixte pour différents types de maillage adaptatif ($I_{zoom} = 0, 1, 2, 3$), pour différents degrés de précision dans la détermination du trajet convectif (1, 2, 3 ou 4 sous-intervalles de temps δt par élément), et enfin pour différents pas de temps (3000, 6000 ou 12000 s, soit 60, 30 ou 15 pas).

On constate que des résultats tout à fait similaires peuvent être obtenus moyennant les conditions suivantes:

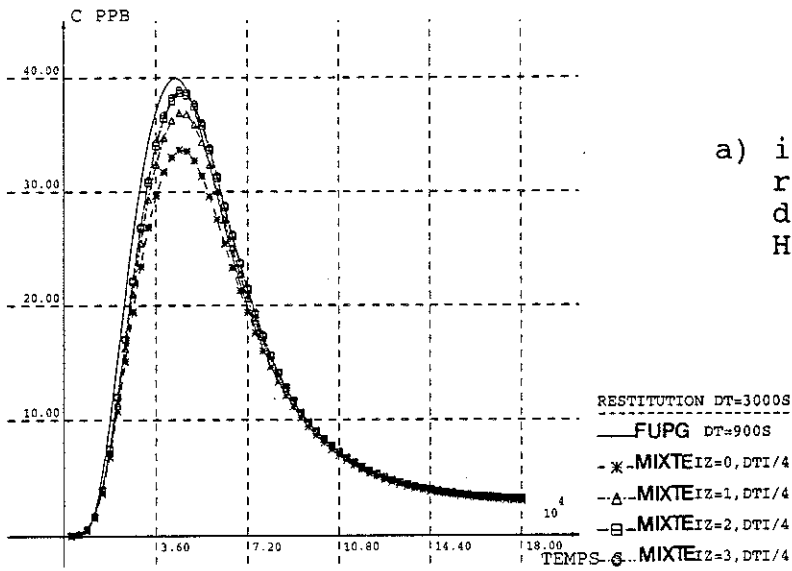
- 1°) le maillage est suffisamment raffiné quand une forte variation de concentration est constatée ($I_{zoom} = 2$).
- 2°) le trajet convectif inverse est déterminé de façon suffisamment précise (3 sous-intervalles de temps par élément).
- 3°) le pas de temps n'est pas trop grand (3000 s sinon la diffusion est mal représentée).

Nous avons relevé les temps de calcul qui correspondent à toutes ces simulations.

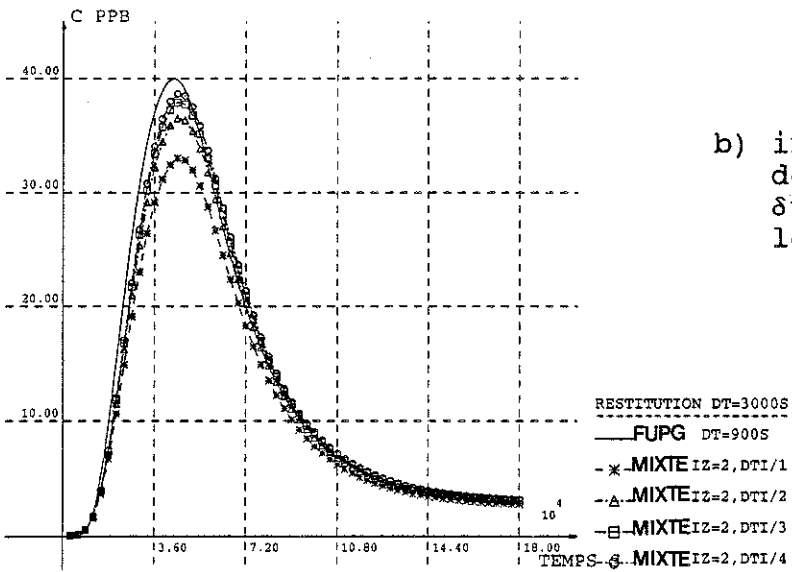
On obtient le tableau suivant:

type de simulation	temps C.P.U.
F.U.P.G., 200 pas	9'28"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=0$, 4 δt	3'01"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=1$, 4 δt	4'58"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=2$, 4 δt	9'59"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=3$, 4 δt	29'08"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=2$, 1 δt	7'00"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=2$, 2 δt	7'43"
mixte, 60 pas, $I_{zoom}=2$, 3 δt	8'48"
mixte, 30 pas, $I_{zoom}=2$, 4 δt	6'37"
mixte, 15 pas, $I_{zoom}=2$, 4 δt	4'12"

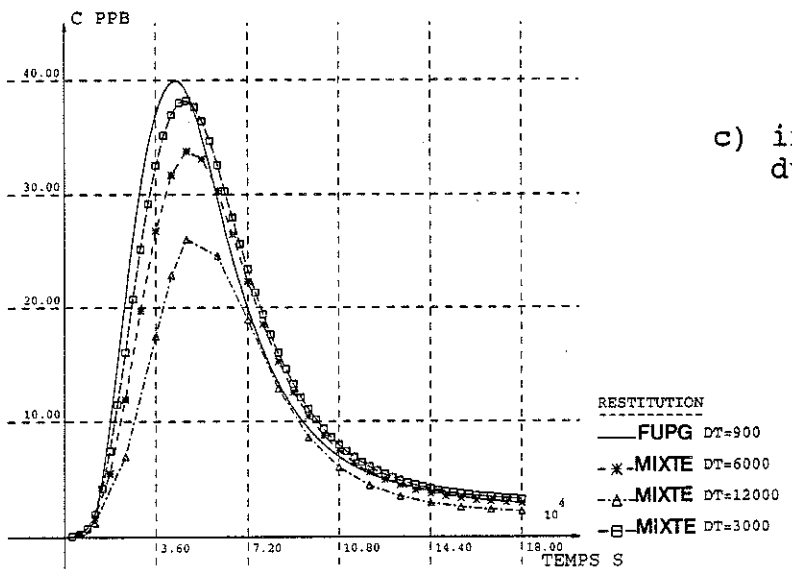
tableau IV.35: temps de calcul (VAX STATION modèle 60) nécessaires pour résoudre le problème de l'uranine (Bertrée, Crétacé, écoulement convergent).



a) influence du degré de raffinement du maillage dans les éléments H.E.L.M. (Izoom)



b) influence du nombre de sous-intervalles δt pour parcourir les éléments H.E.L.M.



c) influence de la taille du pas de temps

figure IV.60: comparaison des méthodes de résolution F.U.P.G. et mixte F.U.P.G.- H.E.L.M.

D'après ces valeurs, il est clair que, pour un problème qui n'est pas essentiellement gouverné par la convection, l'utilisation d'une structure mixte avec éléments H.E.L.M. ne permet pas de faire une économie significative sur le coût C.P.U. Ceci justifie à posteriori l'utilisation de la méthode F.U.P.G. puisque, sans accroître énormément le temps de calcul, elle permet de se placer du côté de la sécurité en évaluant plus souvent les concentrations.

Enfin, ces modes de résolution numérique constituent une amélioration certaine par rapport aux interprétations analytiques (voir chapitre II). En effet, ces dernières approximent l'injection brève par une fonction de Dirac et elles ne tiennent pas compte de l'effet d'eau immobile.

Pour s'en convaincre, nous avons comparé les deux types de modèle (analytique et numérique) pour un traçage en écoulement convergent (lithium, premier test dans le Landénien) et pour un traçage en écoulement naturel (nitrate, second test dans le Crétacé). On constate (figure IV.61) que les modèles analytiques ne permettent pas de représenter valablement la partie décroissante de la courbe de restitution. En outre, les paramètres de transport qui y sont utilisés pour calibrer au mieux les résultats sont assez différents de ceux du modèle numérique. On obtient les paramètres suivants:

- $a_L = 4.75$ m, $n_{eff} = 2.5$ % pour l'aquifère landénien,
- $a_r = 0.6$ m, $a_L = 4$ m, $n_{eff} = 5.5$ % pour l'aquifère crétacé.

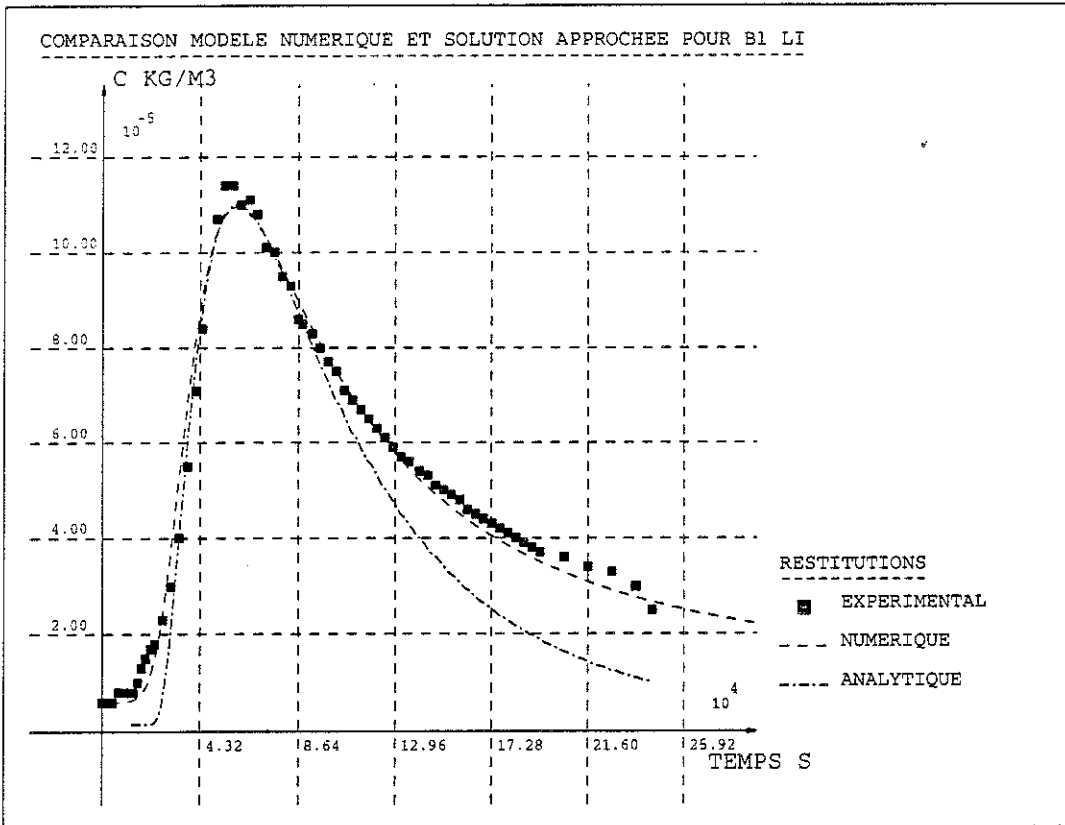
IV.5. ETUDE DE LA VARIABILITE SPATIALE DES PROPRIETES DE TRANSPORT DANS LA CRAIE.

Pour confirmer les résultats obtenus sur le site de Bertrée, il est important d'étudier d'autres situations. Nous décrivons ici les principaux résultats qui ont été obtenus en testant ailleurs l'aquifère crayeux du Crétacé.

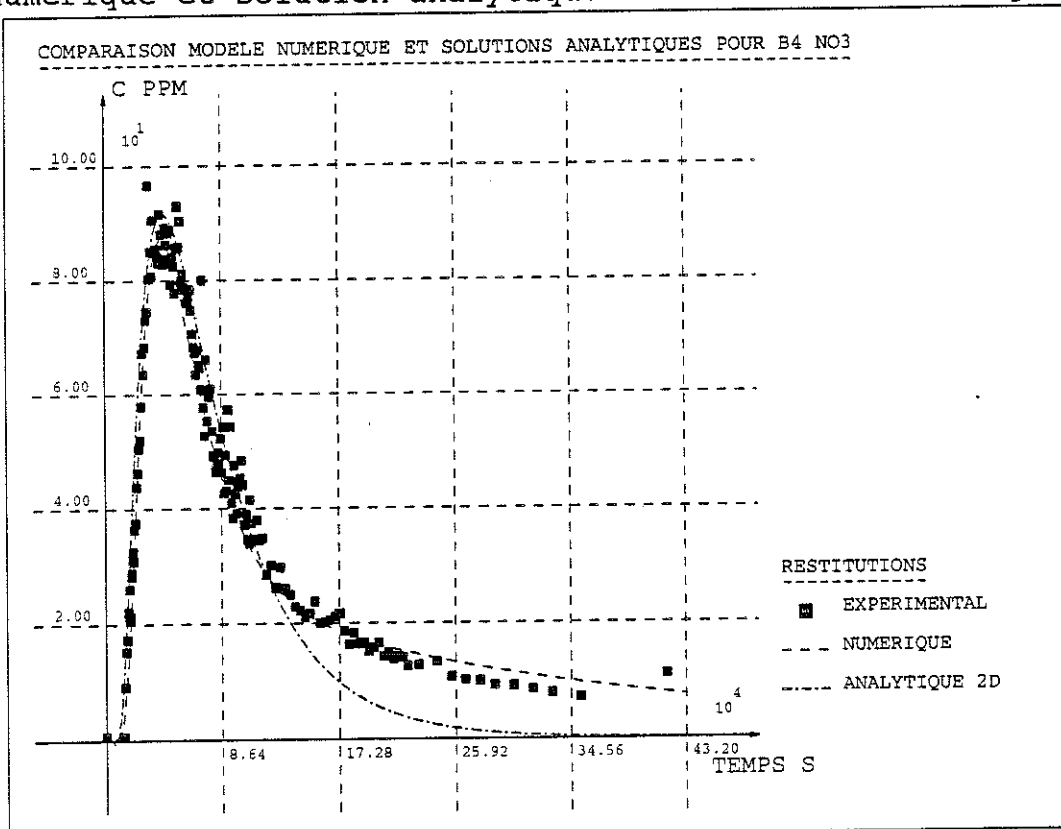
IV.5.a) Description du site de Crisnée.

Crisnée est une localité située au coeur même de la Hesbaye (figure IV.62a), à proximité d'une vallée sèche principale. Par photo-interprétation, on peut déceler dans cette région d'importants linéaments traduisant vraisemblablement une fissuration importante (figure IV.62b). Près de cette localité, la Société Wallonne de Distribution d'Eaux (S.W.D.E.) a implanté un puits (PE) destiné à capter les eaux du Crétacé, un puits de reconnaissance (PR), et 2 piézomètres de surveillance (Pz1 et Pz2 voir figure IV.62c). Ce site était idéal pour obtenir des informations complémentaires: la fissuration y est plus importante, la distance entre puits et piézomètres est plus grande, et la situation par rapport au bassin versant étudié est meilleure.

Grâce à la collaboration de la S.W.D.E., nous avons pu injecter des traceurs lors des essais de pompage réalisés sur le site, ce qui nous a permis de préciser le comportement de l'aquifère à cet endroit.

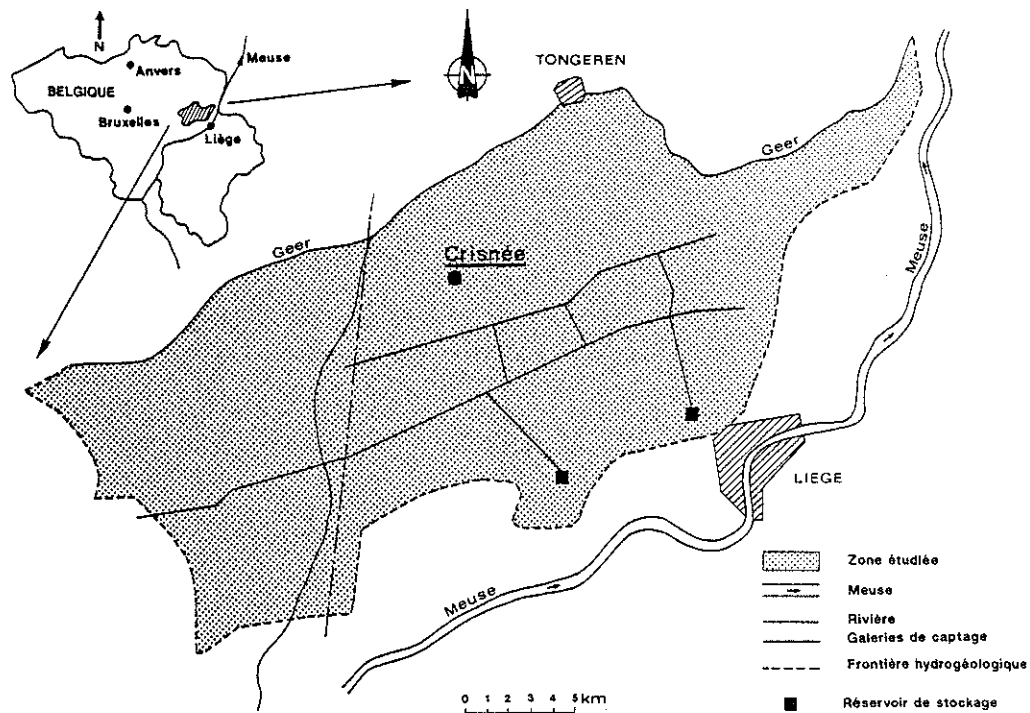


a) premier traçage au lithium dans le Landenien, calibration numérique et solution analytique en écoulement convergent

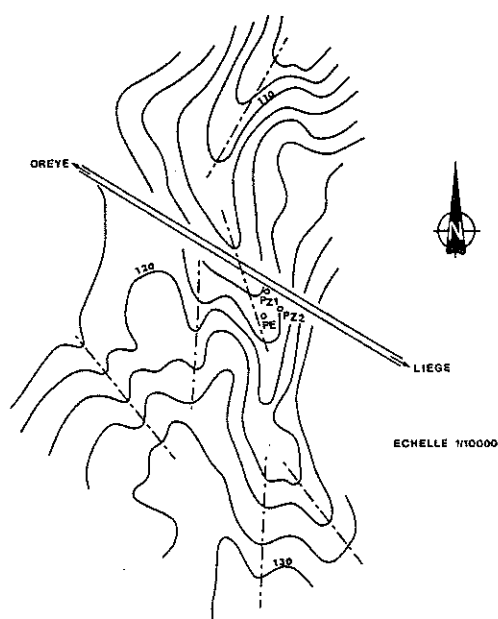


b) second traçage au nitrate dans le Crétacé, calibration numérique et solution analytique en écoulement uniforme

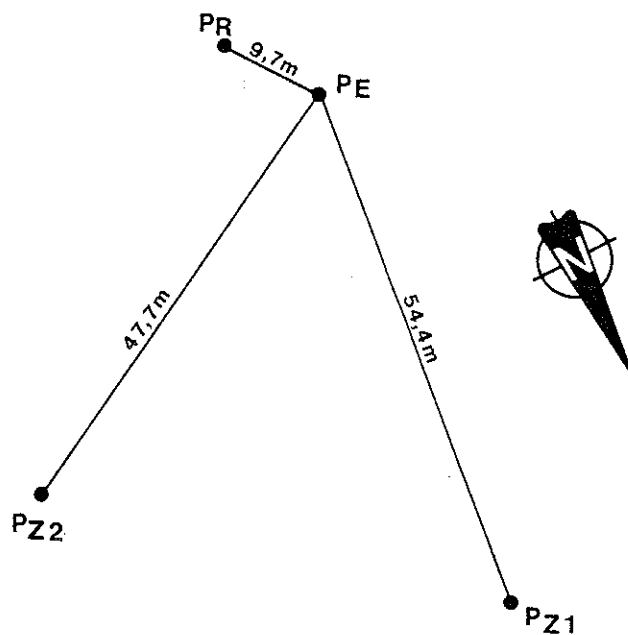
figure IV.61: comparaison entre l'interprétation numérique et l'interprétation analytique.



a) situation en Hesbaye



b) détection des zones fissurées
(photo-interprétation)
d'après N.Garcet



c) équipement

figure IV.62: description du site de Crisnée

A Crisnée, la séquence lithologique se présente comme suit (figure IV.63):

- le socle rocheux est situé à -56 m; il est constitué de schistes en plaquettes d'âge carbonifère;
- ce socle est surmonté d'une couche imperméable de silt quartzo-argileux appelée smectite de Herve;
- au-dessus, on observe les formations de craies du Crétacé. On distingue, à la base, environ 20 m de craies relativement compactes contenant des silex et au sommet environ 10 mètres de craie plus fissurée (particulièrement dans la vallée);
- à -23 m, on se trouve en présence d'une passée plus argileuse (1,50 m) dont l'origine n'est pas déterminée;
- au-dessus de -21 m, on rencontre alors 7 mètres de conglomérats à silex, résidus de dissolution du Maastrichtien supérieur;
- la séquence se termine par une épaisse couche de limons (14 m) dont la partie inférieure présente des fragments de craie blanche et de silex.

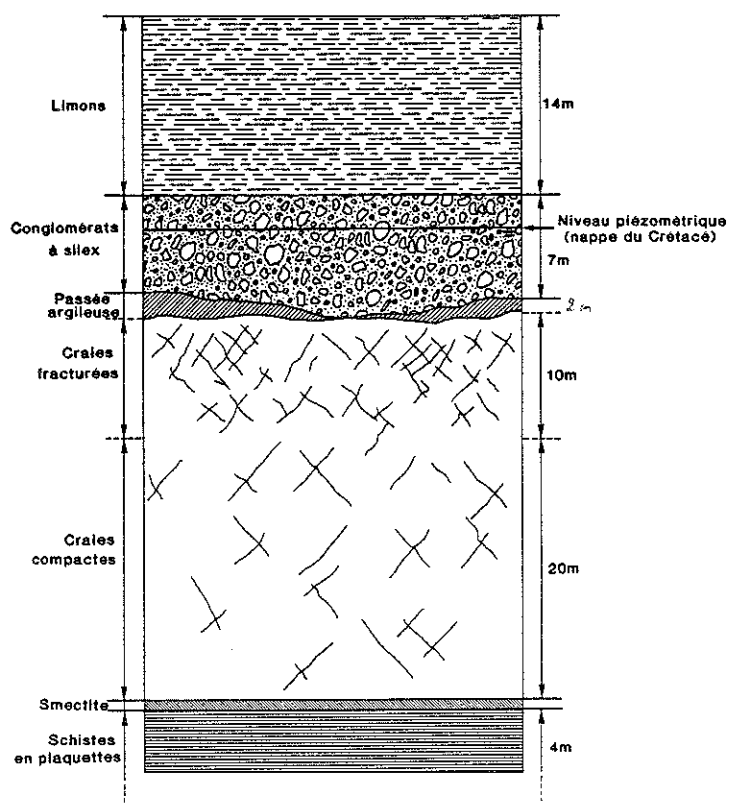


figure IV.63: séquence lithologique sur le site de Crisnée

L'aquifère crétacé est limité à sa base par la couche de smectite. Son niveau d'eau a été relevé à -18 m, au milieu de la couche de conglomérat. Il est donc vraisemblable qu'il ait un comportement semi-captif, d'autant plus que nous avons repéré une passée plus argileuse à la base du conglomérat.

A partir des niveaux piézométriques mesurés aux puits et aux piézomètres (tableau IV.36), nous pouvons supposer une direction globale Est-Ouest, voire même Sud-Est/Nord-Ouest, de l'écoulement naturel. Le gradient régional qui y correspond est plus faible qu'à Bertrée (1 % à Crisnée contre 3 % à Bertrée).

piézomètre ou puits	h _i (m)
Pz1	14.050
Pz2	14.225
PR	14.290
PE	14.080

tableau IV.36: hauteurs piézométriques naturelles dans la nappe du Crétacé à Crisnée (niveau de référence = -32m sous la surface du sol au puits PE).

Pour mieux comprendre la répartition de la fissuration et son influence sur l'écoulement, N. Garcet a réalisé, dans le cadre de son travail de fin d'études (1992), une prospection géo-électrique du site. Elle a pu établir une carte de résistivité apparente (figure IV.64). On y distingue 5 classes de résistivité associées à différents degrés de fissuration.

Sur base de cette interprétation, elle tire les conclusions suivantes:

- la zone Nord du site est davantage fissurée;
- il existe un axe de fissuration dans la direction Pz1-PE parallèle aux axes régionaux visualisés par photo-interprétation.

Elle nuance toutefois ces affirmations en considérant que l'épaisseur des limons peut varier et affecter aussi la résistivité apparente mesurée.

IV.5.b) Traçage en écoulement convergent sur le site de Crisnée (janvier 1992).

IV.5.b.1) Description de l'essai de pompage.

Etant donné les distances entre puits et piézomètres, il était nécessaire de pomper à un débit important pour recueillir les traceurs injectés.

Pour cette raison, nous avons profité de la réalisation, par la S.W.D.E., d'un essai de pompage à 125 m³/h. Il a duré 140 heures et on peut estimer que la stabilisation du régime d'écoulement a été approximativement atteinte après 16 heures. Les hauteurs piézométriques et rabattements correspondants sont repris ci-après.

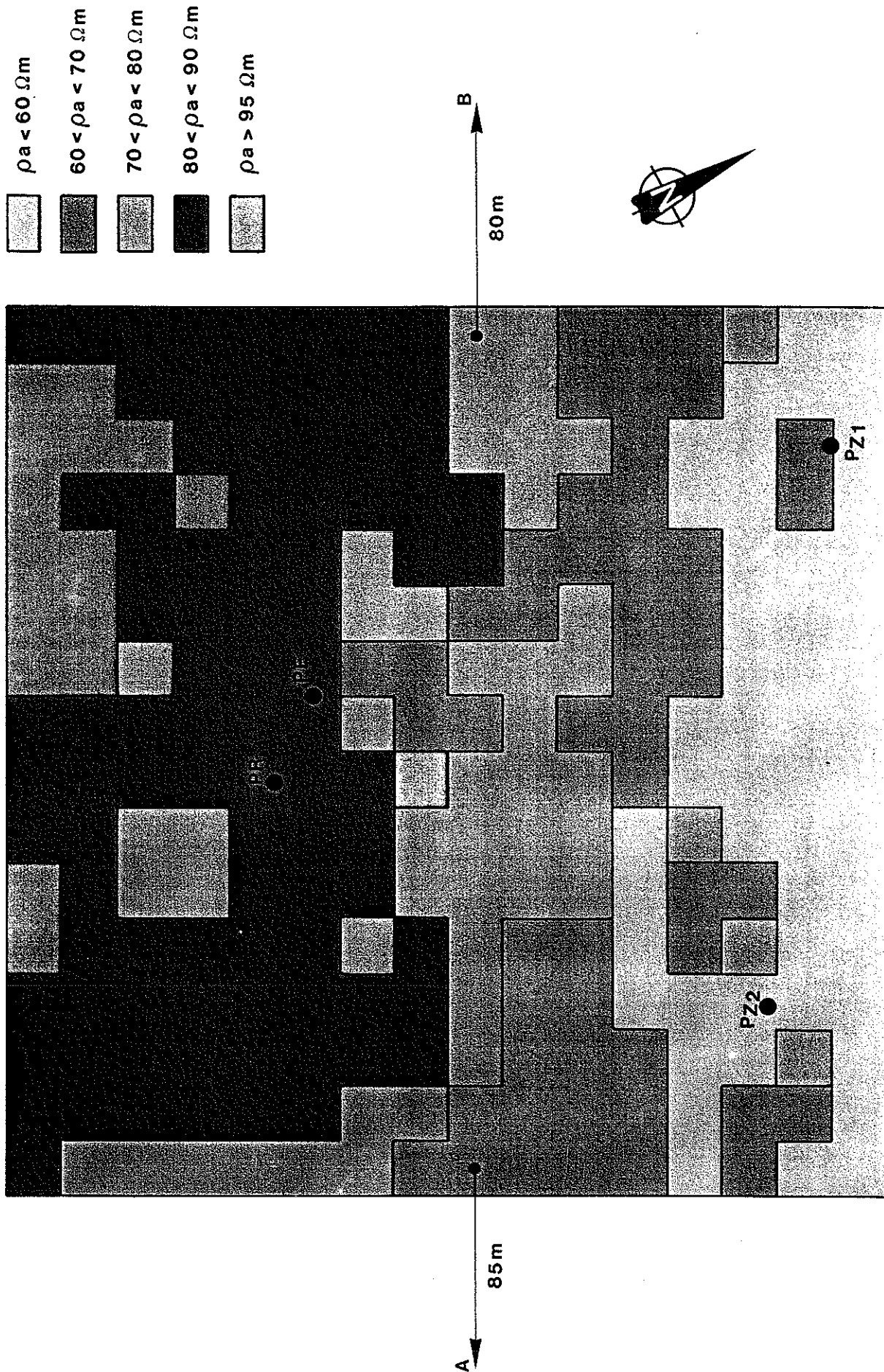


figure IV.64: variation spatiale de la résistivité apparente sur le site de Crisnée (d'après N.Garcet).

piézomètre ou puits	h _r (m)	s _r (m)
Pz1	13.070	0.980
Pz2	13.015	1.210
PR	12.070	2.220
PE	2.040	12.040

tableau IV.37: piézométrie en fin de pompage dans la nappe du Crétacé (Crisnée).

Remarquons la valeur très élevée du rabattement au puits d'exploitation. Elle correspond en fait à l'établissement d'une hauteur de suintement (pertes de charges quadratiques au puits) que l'on peut chiffrer de deux manières:

- en extrapolant graphiquement l'allure du cône de rabattement à partir des piézomètres. La différence entre la valeur interpolée et la valeur mesurée fournit alors une hauteur de suintement égale à 7 mètres;
- en utilisant la formule de Babbitt et Caldwell (Recordon 1979), on obtient une valeur plus faible égale à 2,5 mètres.

Les données de pompage ont été interprétées par trois méthodes:

- la méthode de Dupuit pour une nappe captive en régime permanent (en évaluant le rayon d'influence à 320 m);
- la méthode de Dupuit pour une nappe libre en régime permanent (avec un rayon d'influence identique);
- la méthode de Jacob en régime transitoire.

Les valeurs de transmissivité et de perméabilité obtenues sont répertoriées aux tableaux suivants.

piézomètre ou puits	T Dupuit libre (m ² /s)	T Dupuit captif (m ² /s)	T Jacob (m ² /s)
Pz1	2.3 10 ⁻³	9.6 10 ⁻³	2.1 10 ⁻²
Pz2	2.0 10 ⁻³	8.5 10 ⁻³	1.8 10 ⁻²
PR	2.1 10 ⁻³	8.5 10 ⁻³	1.9 10 ⁻²
PE	8.9 10 ⁻⁴	3.5 10 ⁻³	7.6 10 ⁻³

tableau IV.38: transmissivités de l'aquifère crétacé à Crisnée.

piézomètre ou puits	K Dupuit libre (m/s)	K Dupuit captif (m/s)	K Jacob (m/s)
Pz1	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-4}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$
Pz2	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$
PR	$2.1 \cdot 10^{-4}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$
PE	$8.9 \cdot 10^{-5}$	$3.5 \cdot 10^{-4}$	$7.6 \cdot 10^{-4}$

tableau IV.39: coefficients de perméabilité de l'aquifère crétacé (test de Crisnée).

23
33

Dans notre interprétation, nous avons supposé que l'épaisseur effective de l'aquifère était de 10 mètres. Ceci suppose que la majorité de l'eau écoulee provient de la zone fissurée. Pour la méthode de Jacob, nous avons choisi de déterminer les transmissivités sur base des variations de rabattement en début du pompage. Nous supposons, en effet, que le rabattement pour des temps plus longs est influencé par des phénomènes secondaires dont ne tient pas compte la solution de Jacob. Parmi ceux-ci, citons les influences de l'écoulement régional, de la drainance verticale, mais surtout de l'hétérogénéité de l'aquifère.

En effet, lorsqu'on compare les graphiques de Jacob obtenus à Bertrée et à Crisnée, on constate des évolutions fort différentes bien que, dans les deux cas, l'écoulement naturel et la drainance verticale agissent (figure IV.65). Nous expliquons cette différence par la position relative du puits par rapport aux zones les plus perméables.

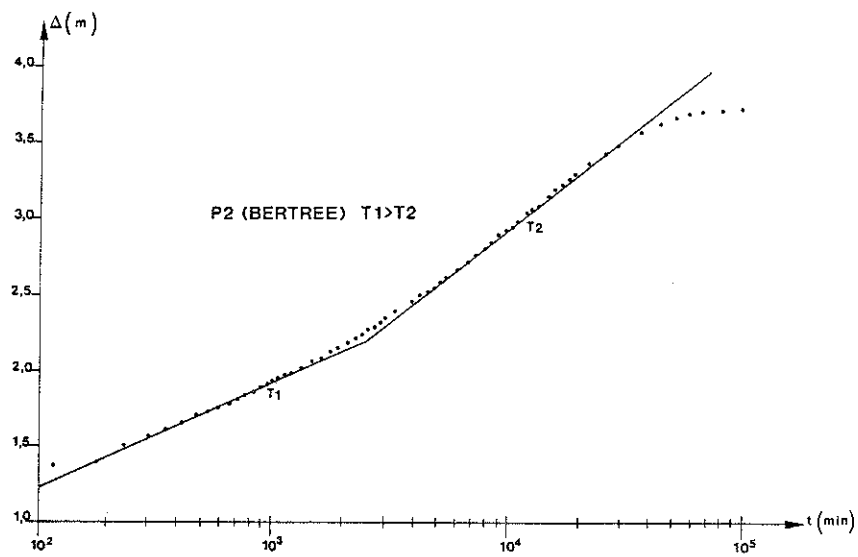
Dans le cas de Bertrée, le puits de pompage est dans la zone fissurée et, lorsque cône de rabattement se développe, on atteint des zones moins transmissives. Il en résulte une augmentation de pente sur le diagramme de Jacob.

Dans le cas de Crisnée, le puits se trouve dans une zone relativement moins transmissive et l'effet inverse est observé.

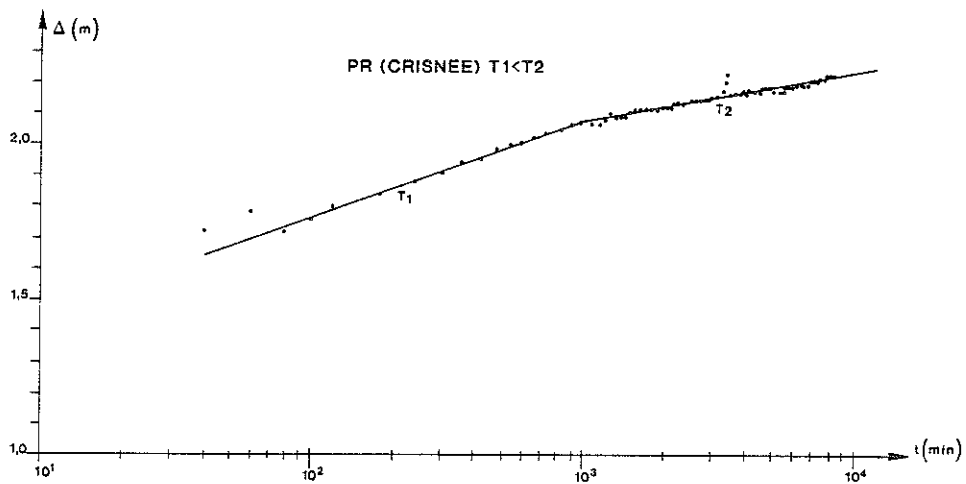
Quoiqu'il en soit, les transmissivités observées sont plus grandes à Crisnée et on peut dire que, globalement, l'aquifère y est plus perméable (le site se trouve en effet à proximité d'une petite vallée sèche). Signalons également que l'emmagasinement calculé est de 10^{-3} , ce qui correspond bien au comportement semicaptif de la nappe. Enfin, la teneur en nitrates a été mesurée. Elle est plus élevée qu'à Bertrée (41.4 ppm), ce qui peut être expliqué par le contexte d'agriculture intensive de la région.

IV.5.b.2) Modélisation de l'essai de pompage.

La simulation a été réalisée en reprenant les mêmes hypothèses que pour Bertrée. Mais cette fois, l'hypothèse de Dupuit est moins bien vérifiée au voisinage du puits d'exploitation.



a) site de Bertrée ($Q = 20 \text{ m}^3/\text{h}$)



b) site de Crisnée ($Q = 125 \text{ m}^3/\text{h}$)

figure IV.65: comparaison des diagrammes de Jacob obtenus par essai de pompage sur les 2 sites étudiés.

Sur base de la prospection géoélectrique, nous distinguerons 5 matériaux. La discrétisation est représentée à la figure IV.66. On remarquera que la répartition des matériaux au voisinage du piézomètre Pz2 est différente de ce qu'on pourrait supposer sur base des résistivités électriques apparentes.

Cette différence se justifie par l'orientation de l'écoulement. On peut ainsi visualiser un second axe fissuré parallèle au premier.

L'épaisseur influencée par le pompage n'est pas connue et nous travaillons toujours avec des transmissivités. Après calibration, les valeurs obtenues sont les suivantes:

matériau	T (m ² /s)
1	1.0 10 ⁻⁴
2	4.0 10 ⁻⁴
3	1.7 10 ⁻³
4	2.0 10 ⁻³
5	3.0 10 ⁻³

tableau IV.40: transmissivités utilisées dans le modèle écoulement pour l'aquifère crétacé à Crisnée.

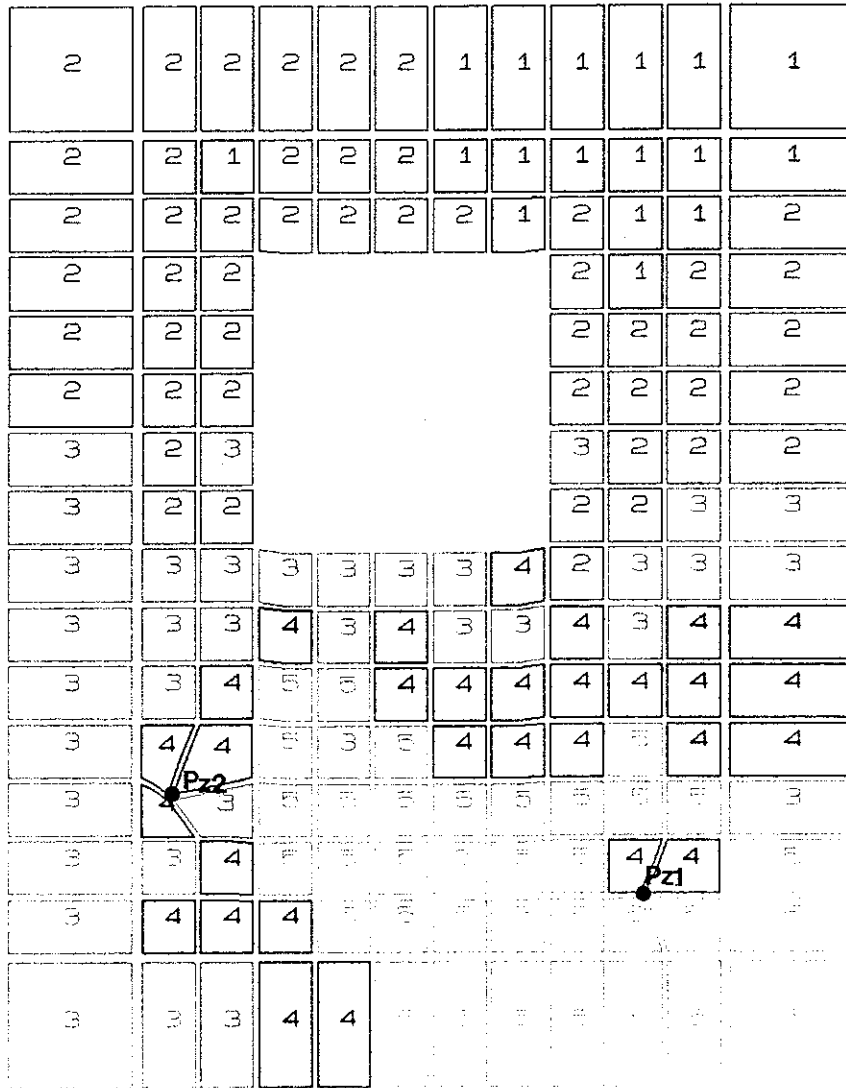
Ces valeurs sont plus faibles que celles calculées par la solution analytique de Jacob, mais sont du même ordre de grandeur que celles calculées par les formules de Dupuit.

Elles aboutissent à une piézométrie correctement calibrée si on soustrait les pertes de charge quadratiques au puits dont on ne peut tenir compte dans le modèle (4,3 m de hauteur de suintement selon les chiffres du tableau IV.41).

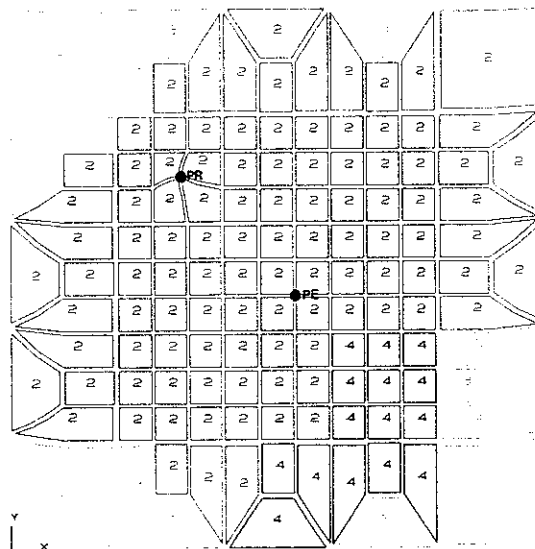
piézomètre ou puits	h _{i cal} - h _{i mes} (cm)	h _{f cal} - h _{f mes} (cm)
Pz1	- 4.0	+ 2.5
Pz2	+ 1.5	+ 6.5
PR	+ 2.5	- 8.5
PE	+ 11	+ 432

tableau IV.41: écarts entre le modèle écoulement et les mesures (Crétacé, Crisnée)

Les cartes piézométriques calculées sont représentées à la figure IV.67. On constate qu'en régime stabilisé de pompage, il existe, à environ 50 m du puits, un col de partage entre l'écoulement convergent et l'écoulement naturel de la nappe. Il est clair que ce phénomène va jouer un rôle important dans la répartition du traceur injecté au piézomètre Pz1.



a) vue d'ensemble



b) à proximité du puits PE

figure IV.66: site de Crisnée, nappe du Crétacé, discrétisation pour le modèle écoulement.

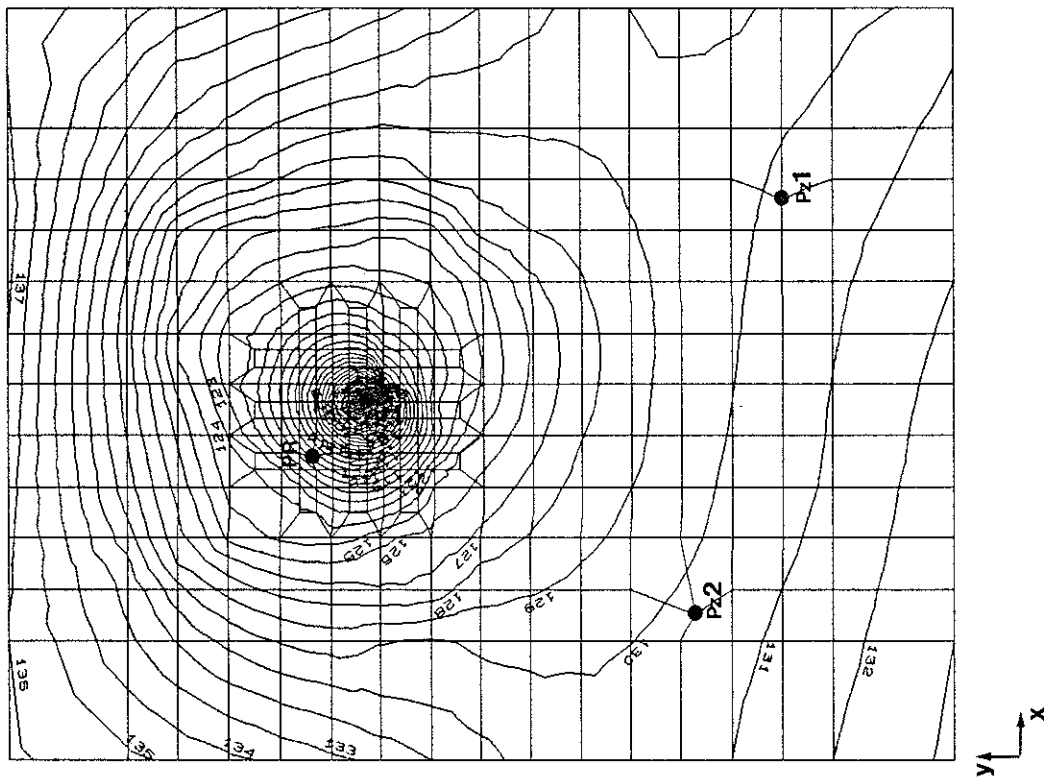
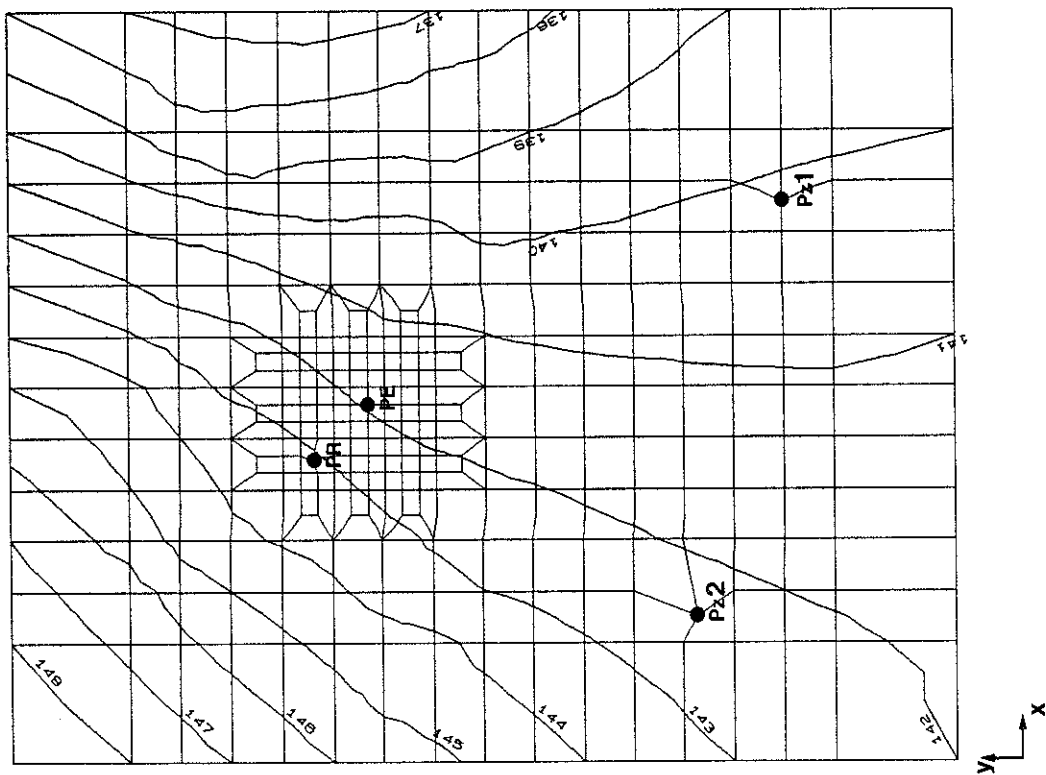


figure IV.67: site de Crisnée, nappe du Crétacé, piézométrie calculée par le modèle écoulement.

Les cartes de flux sont représentées à la figure IV.68. Elles illustrent également cette influence. On voit qu'en régime stabilisé de pompage, une certaine quantité d'eau s'écoule hors du domaine ⁴⁴. On visualise aussi la zone Nord-Est plus fissurée où l'eau s'écoule plus vite.

IV.5.b.3) Description des traçages.

Après 18 heures de pompage, les traceurs ont été injectés dans les piézomètres Pz1 et Pz2 ainsi que dans le puits de reconnaissance PR:

- au piézomètre Pz1, on a introduit 50 g d'uranine dilués dans 4,5 l. Le débit d'injection d'eau q_i est faible: 0,1 m³/h environ. Une chasse de 50 l a été envoyée dans le tube plongeur. Ces opérations ont duré 20 minutes.
- au piézomètre Pz2, 2 kg de LiCl dilués dans 50 l ont été déversés. L'injection s'est faite dans les mêmes délais et on peut supposer que le débit de traceur était un peu plus élevé.
- au puits de reconnaissance PR, 75 g de naphthionate et 805 g de KI ont été injectés. Comme la distance PR-PE est faible en regard du rayon d'influence du pompage, la restitution de ces traceurs a été très rapide et peu influencée par la dispersion. Pour cette raison, nous ne les interpréterons pas avec le modèle qui, rappelons-le, fonctionne moins bien en convection pure.

Les courbes de restitution au puits pour l'uranine et le lithium sont représentées à la figure IV.69. Malgré des distances semblables entre les points d'injection et le point de prélèvement (47 et 54,4 m), la restitution du lithium est beaucoup plus rapide que celle de l'uranine. Ce contraste s'explique par la nature de l'écoulement. En effet, la restitution du lithium est favorisée par l'écoulement régional, tandis que l'uranine est injectée à proximité de la crête de partage. Cette différence influence également la régularité de la courbe et le taux de restitution (tableau IV.42).

traceur	M ₀ (kg)	r (%)
uranine	5.00 10 ⁻²	17
Li ⁺	8.25 10 ⁻¹	58

tableau IV.42: masses injectées et taux de restitution des traceurs (Crétacé, Crisnée)

IV.5.b.4) Modélisation des traçages.

Les discrétisations utilisées sont représentées à la figure IV.70. Les flux de Darcy interpolés sont dessinés à la figure IV.71. Comme nous connaissons déjà (sur base des traçages réalisés à Bertrée) l'ordre de grandeur des paramètres de la craie, les 5 matériaux ont pu être différenciés du point de vue du transport. Les paramètres qui y correspondent, après calibration, sont donnés aux tableaux ci-après.

⁴⁴ à cet endroit, la concentration ne sera pas imposée sur la frontière du modèle de transport.

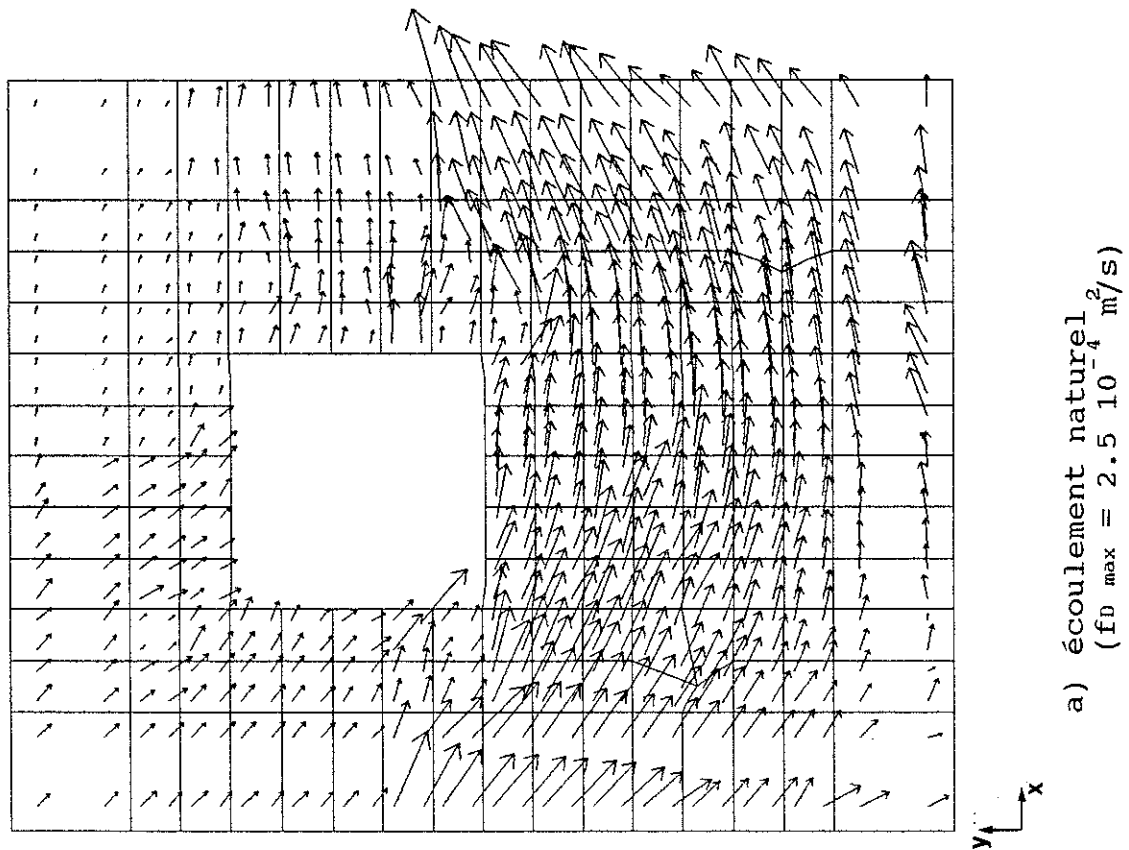
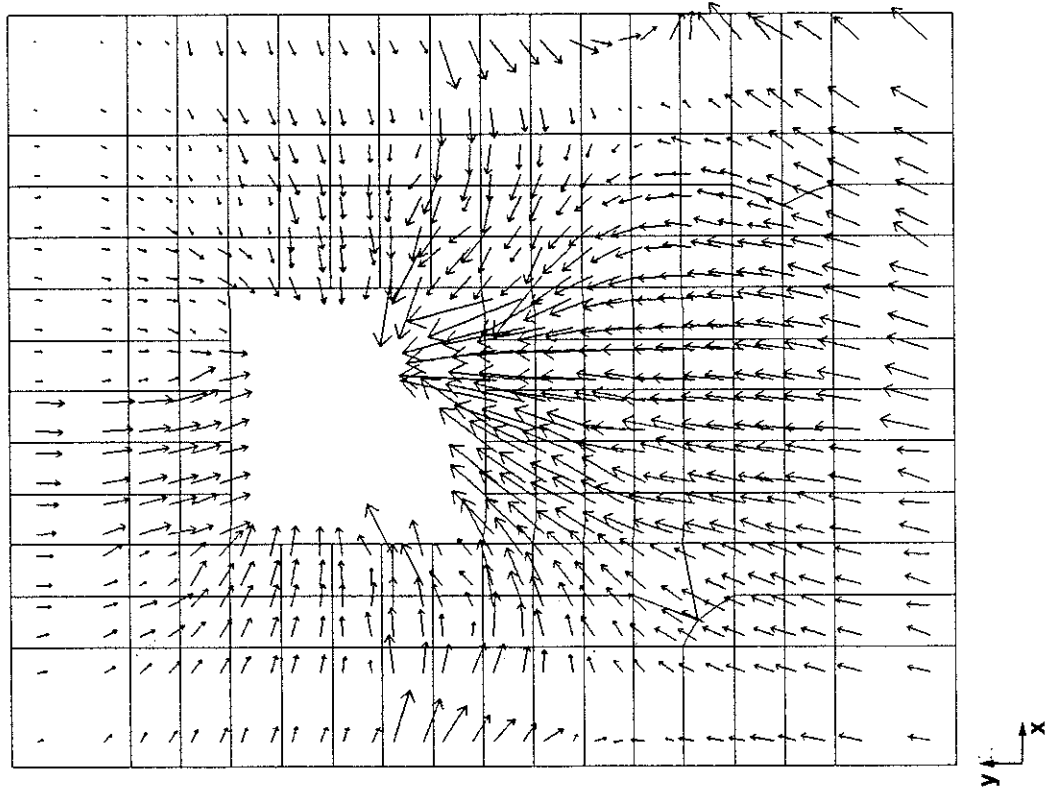
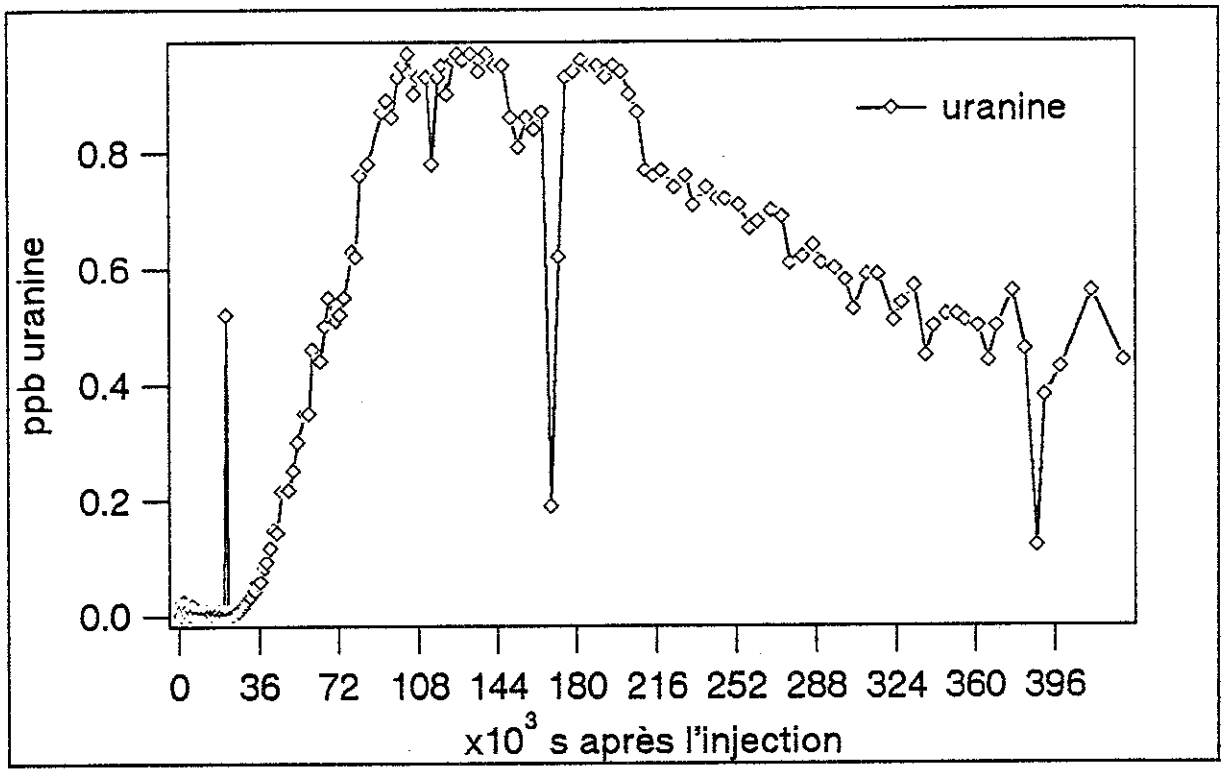
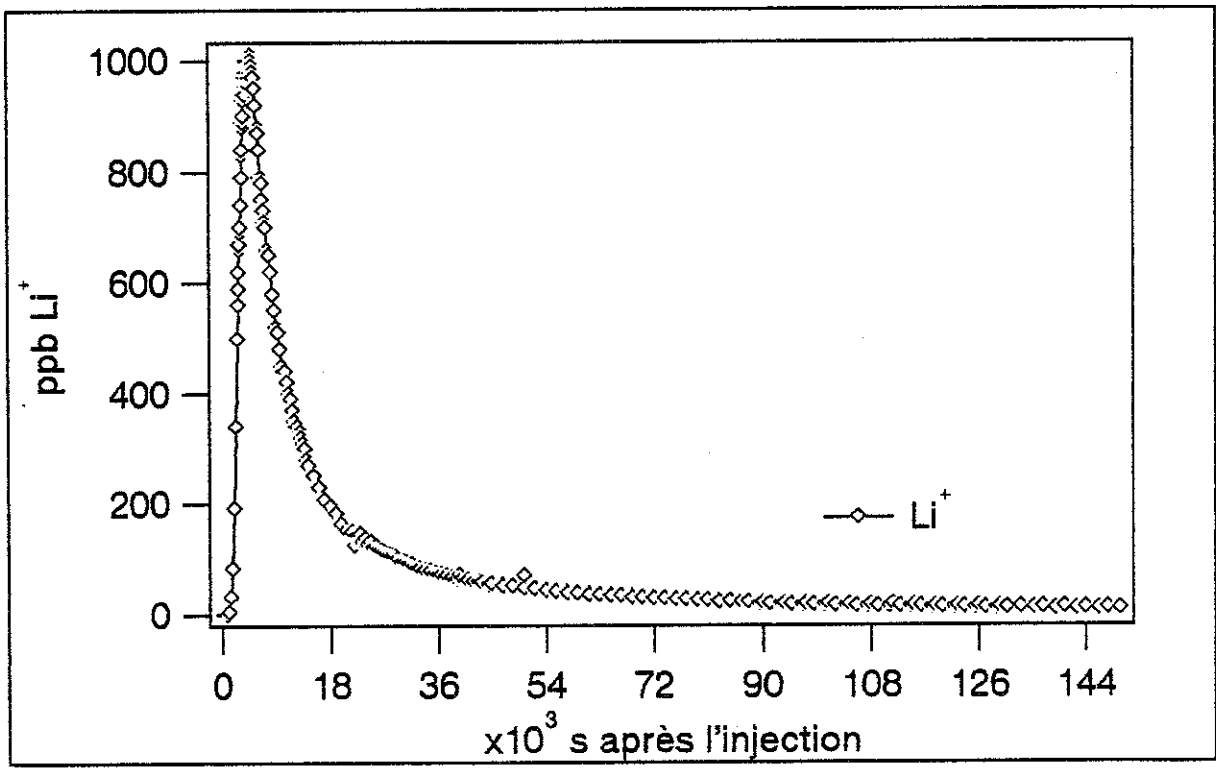


figure IV.68: site de Crisnée, nappe du Crétacé, flux calculés par le modèle écoulement,

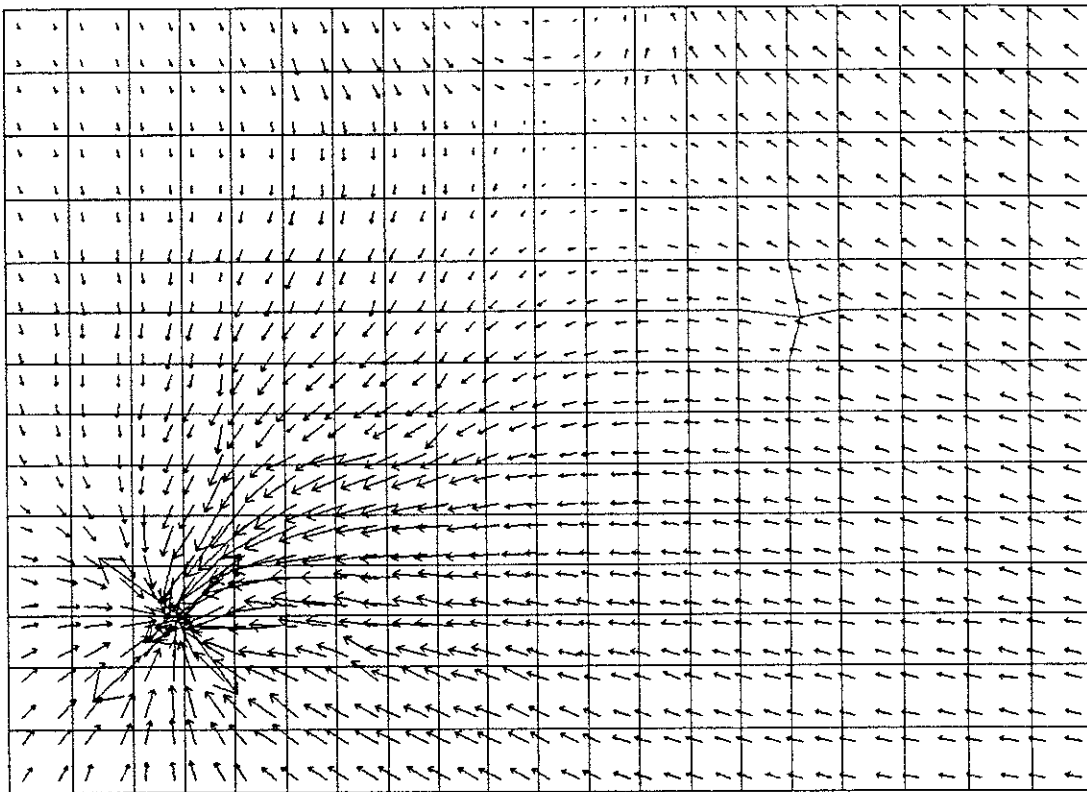


a) lithium (injecté en Pz2)

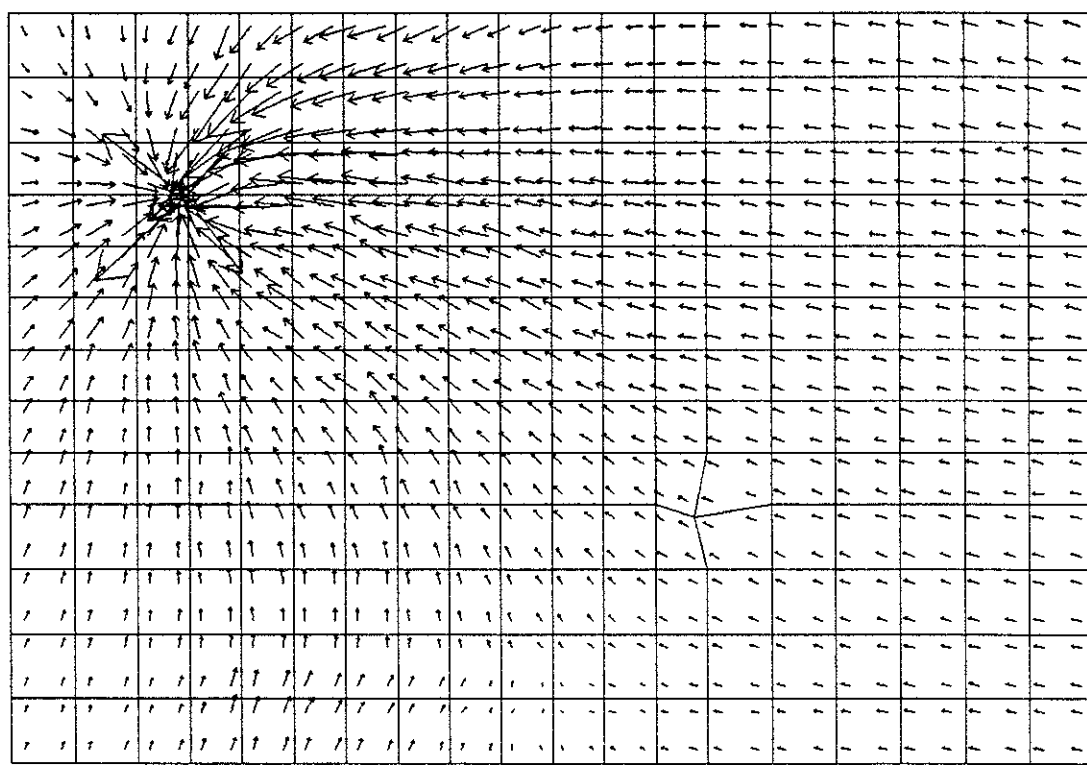


b) uranine (injectée en Pz1)

figure IV.69: site de Crisnée, nappe du Crétacé, courbes de restitution, au puits PE, du lithium et de l'uranine.



b) uranium
 $(f_{Dmax} = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s})$



a) lithium
 $(f_{Dmax} = 2.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s})$

figure IV.71: site de Crisnée, nappe du Crétacé, flux de Darcy interpolés pour les modèles de transport.

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3	matériau 4	matériau 5
a_T (m)	0.05	0.25	0.32	0.50	0.65
a_L (m)	0.50	2.50	3.20	5.00	6.50
α_d (\bar{s}^{-1})	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$1.2 \cdot 10^{-7}$	$2.5 \cdot 10^{-7}$	$5.0 \cdot 10^{-7}$	$6.0 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	0.3	0.5	1.0	1.5	2.0
θ_{im} (%)	8.0	10.0	13.0	18.0	20.0
R_{dm}	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
e_{fiss}	15.0	7.5	4.0	4.0	4.0
paramètres d'injection		<u>tableau IV.43</u> : paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Crisnée), traçage au lithium.			
v_{in} (m/s)	$2.8 \cdot 10^{-3}$				
v_{out} (m/s)	$5.8 \cdot 10^{-3}$				
c_{out} (ppm)	1750 → 79				
e_{inj} (m)	4.0				

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3	matériau 4	matériau 5
a_T (m)	0.05	0.32	0.50	0.70	0.95
a_L (m)	0.50	3.20	5.00	7.00	9.50
α_d (\bar{s}^{-1})	$1.0 \cdot 10^{-7}$	$3.7 \cdot 10^{-7}$	$6.7 \cdot 10^{-7}$	$7.9 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$
θ_m (%)	0.3	1.5	2.7	5.3	11.3
θ_{im} (%)	8.0	19.0	24.0	31.0	42.0
R_{dm}	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
e_{fiss}	15.0	10.0	15.0	15.0	15.0
paramètres d'injection		<u>tableau IV.44</u> : paramètres de calibration, test en écoulement convergent (Crétacé, Crisnée), traçage à l'uranine.			
v_{in} (m/s)	$2.3 \cdot 10^{-3}$				
v_{out} (m/s)	$2.3 \cdot 10^{-3}$				
c_{out} (ppm)	152 → 6				
e_{inj} (m)	15.0				

Dans ces tableaux, nous avons également repris l'épaisseur e_{fiss} de la zone fissurée à travers laquelle nous supposons que le traceur se propage. Jusqu'à présent, nous avons considéré cette valeur comme constante et égale à l'épaisseur e_{inj} dans laquelle le traceur s'engouffre au piézomètre d'injection. C'est approximativement le cas pour l'uranine mais pas pour le lithium. En effet, le traçage s'est fait perpendiculairement à un axe fissuré et nous avons voulu en tenir compte en faisant varier e_{fiss} .

Cette façon de faire donne les vitesses effectives de convection de manière très approximative. Ceci explique peut-être que la calibration de la courbe correspondante soit nettement moins bonne (figure IV.72) et que les paramètres de transport soient très différents de ceux déterminés pour l'uranine. On pourrait également voir dans cette différence la manifestation d'une anisotropie.

Quoiqu'il en soit, la répartition spatiale des traceurs dans l'eau mobile reflète deux comportements distincts (figures IV.73 et IV.74).

Le nuage de lithium a une forme régulière avec une crête allongée, située dans une zone plus proche du piézomètre d'injection que du puits de pompage. Ceci s'explique par la vitesse de migration du traceur qui diminue en même temps que le degré de fissuration des zones successivement rencontrées.

Le nuage d'uranine est plus large et s'étire dans deux directions. La première correspond à une zone fissurée dans l'axe Pz1-PE, la seconde correspond à l'écoulement régional. Quant au maximum spatial, il se situe approximativement au col de partage entre ces deux écoulements.

En ce qui concerne l'eau immobile, le traceur reste stocké essentiellement au voisinage du piézomètre d'injection (figure IV.75).

Enfin, les flux sont principalement dominés par la convection (figure IV.76).

IV.5.b.5) Simulation complémentaire pour le traçage au lithium.

Nous avons mentionné que la modélisation du traçage au lithium sur le site de Crisnée n'était pas tout à fait objective puisque l'épaisseur d'aquifère accessible au traceur n'est pas constante.

Pour visualiser ce phénomène, nous proposons une simulation verticale dans l'axe Pz2-PE. Pour restaurer une image objective des vitesses de convection, nous avons également simulé l'écoulement. La discrétisation utilisée est représentée à la figure IV.77a. On visualise clairement l'extension verticale de la zone fissurée. On voit également que le puits de pompage est représenté par des éléments tuyaux qui servent à répartir correctement le débit entre la partie fissurée et le reste de l'aquifère.

Le pompage n'est pas représenté directement par le débit Q mais bien par une hauteur piézométrique imposée en un ensemble de noeuds (également indiqués sur la figure IV.77a). Cette façon de faire est justifiée car le modèle vertical n'est pas axisymétrique. La piézométrie imposée est celle qui est déterminée par le modèle horizontal calibré.

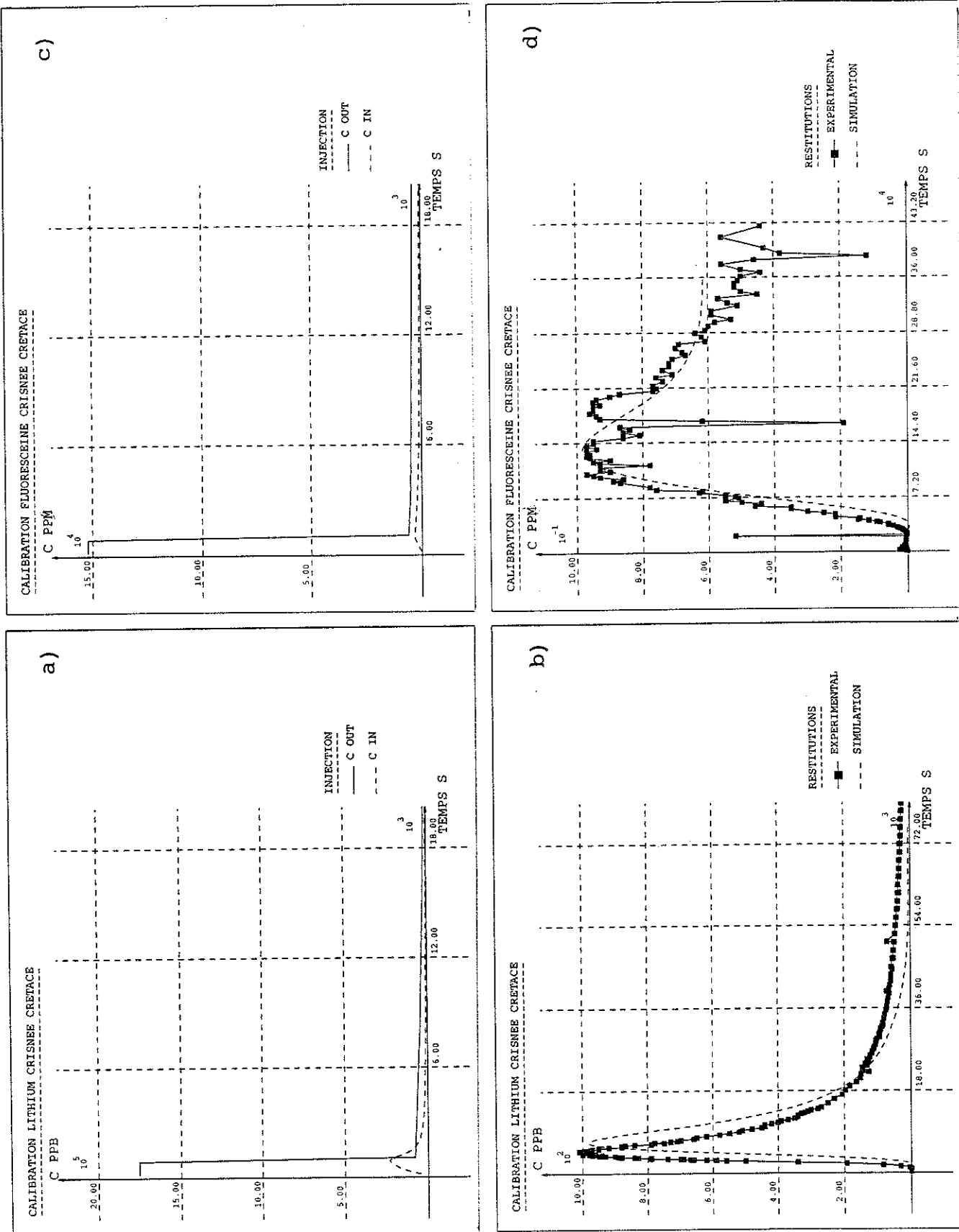
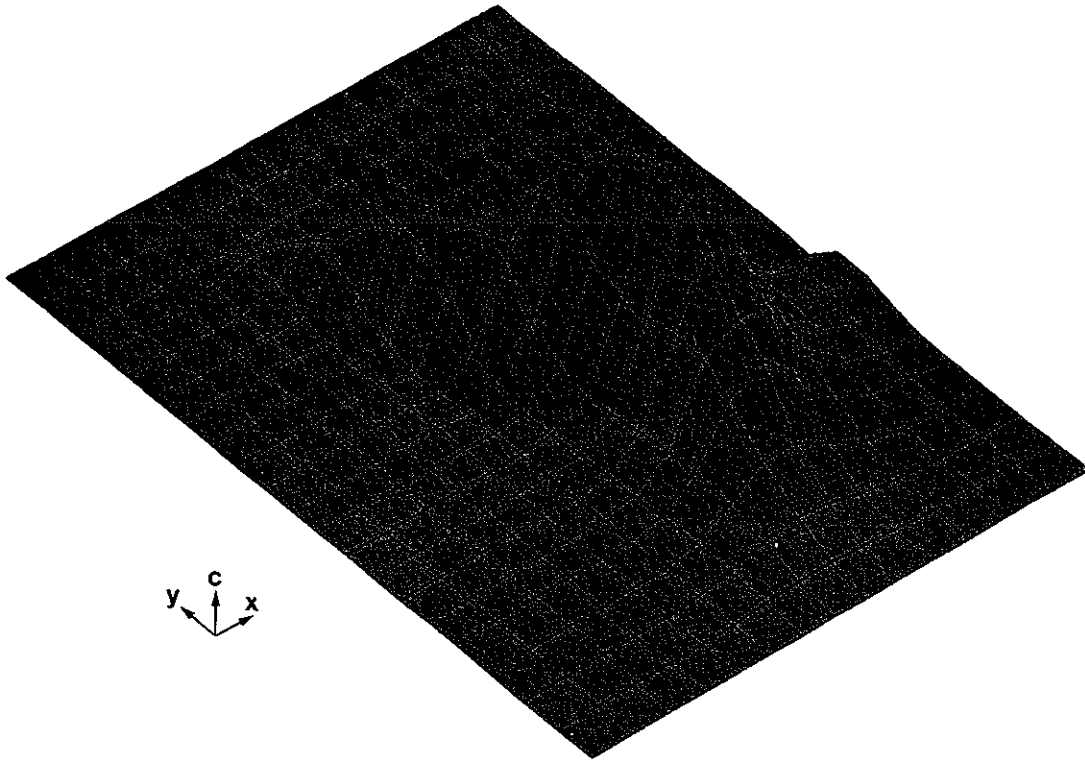
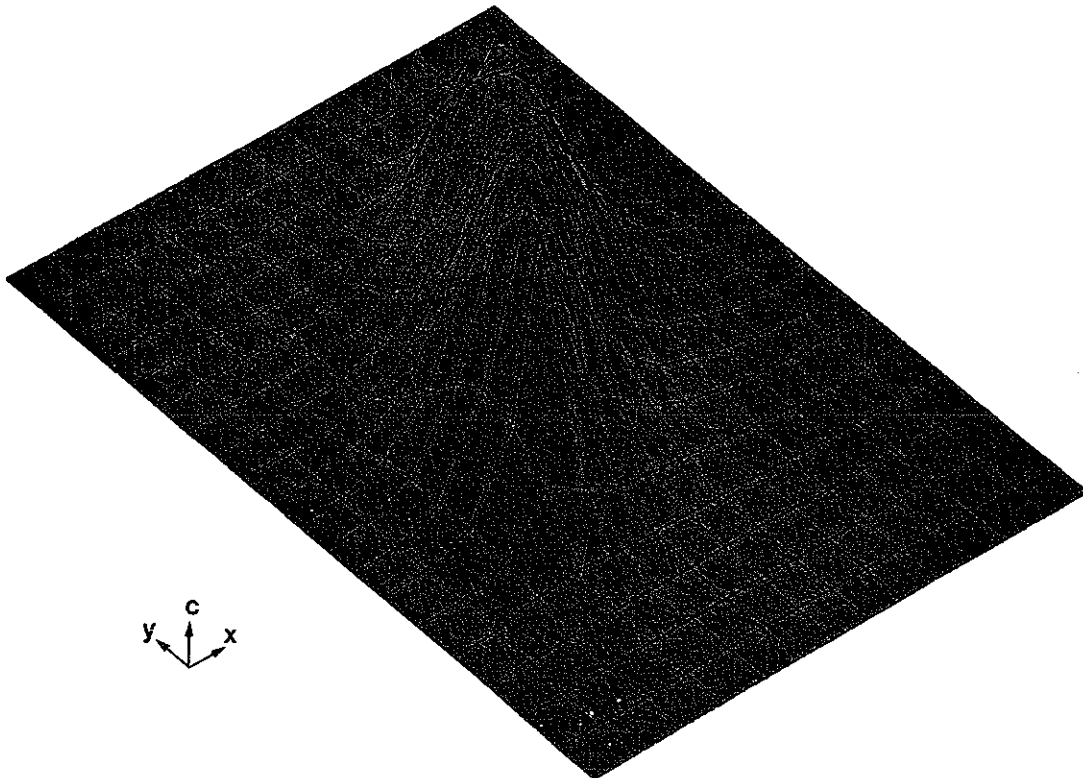


figure IV.72: site de Crisnée, nappe du Crétacé, traçages au lithium et à l'uranine, évolution temporelle des concentrations.

- a) injection du lithium en Pz2
- b) restitutions du lithium au puits PE
- c) injection de l'uranine en Pz1
- d) restitutions de l'uranine au puits PE



a) traçage à l'uranine (après 100 h.)



b) traçage au lithium (après 12 h.)

figure IV.73: site de Crisnée, nappe du Crétacé, concentrations dans l'eau mobile (vues en perspective)



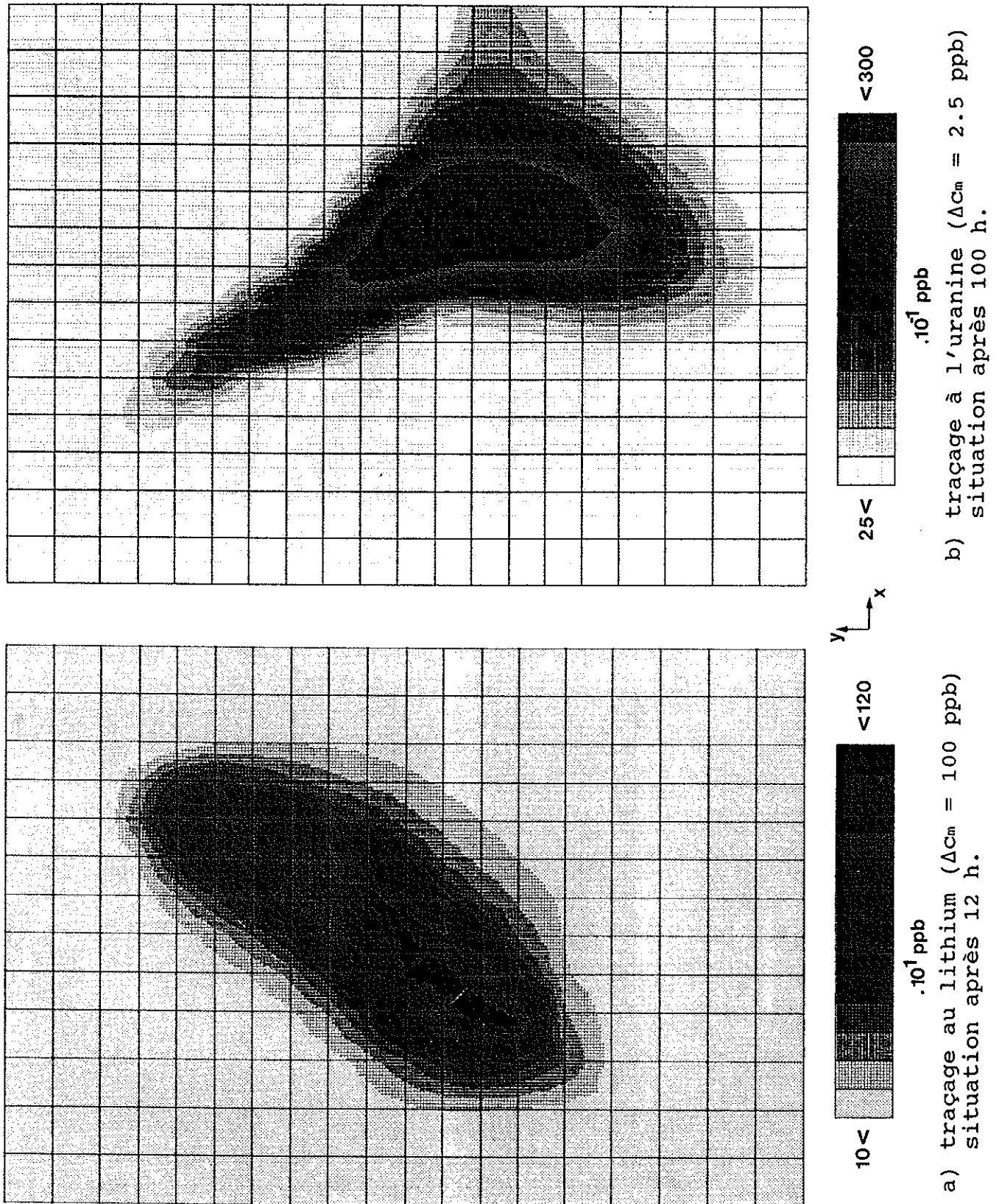


figure IV.74: site de Crisnée, nappe du Crétacé, concentrations dans l'eau mobile (courbes d'isovaleurs)

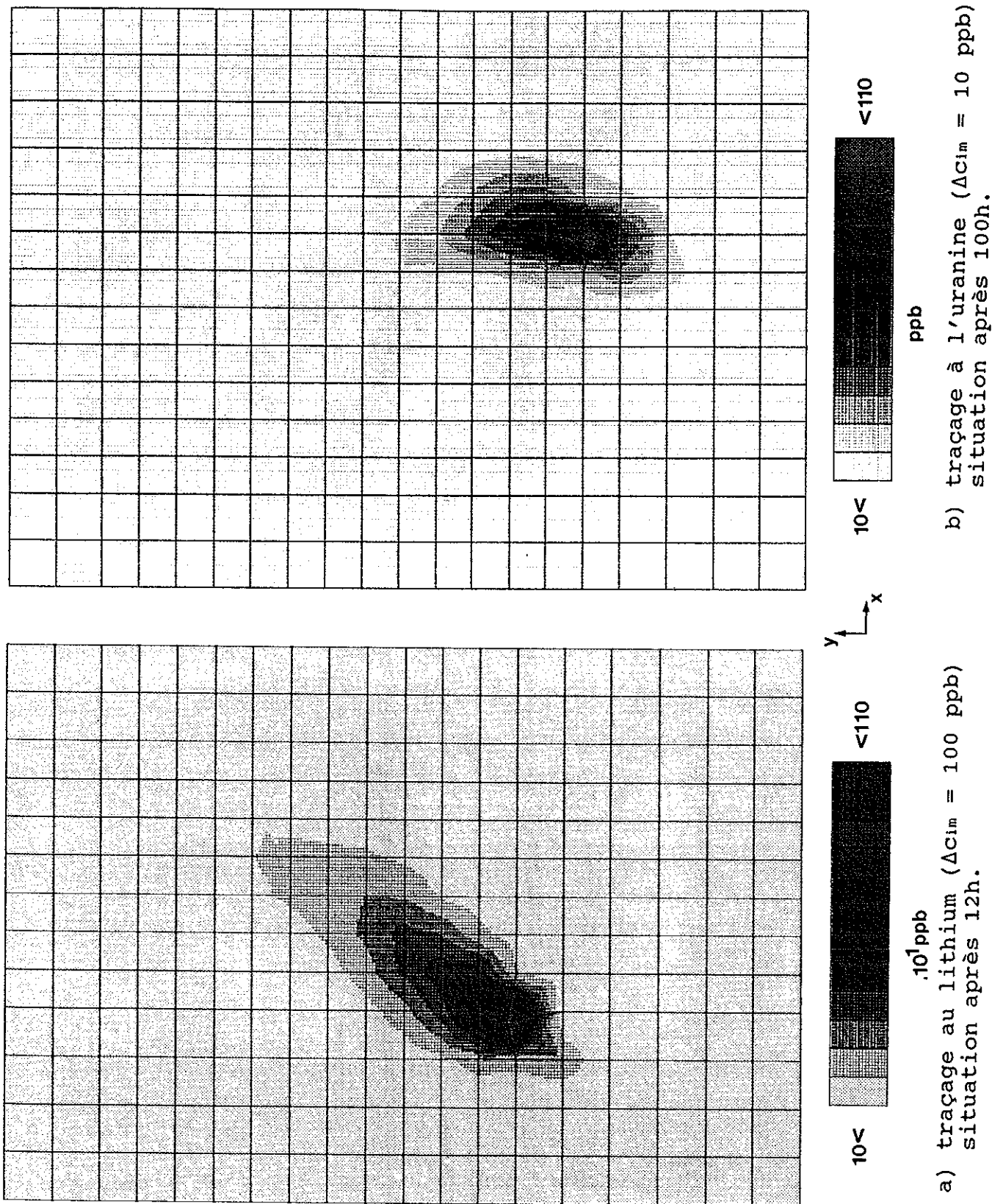
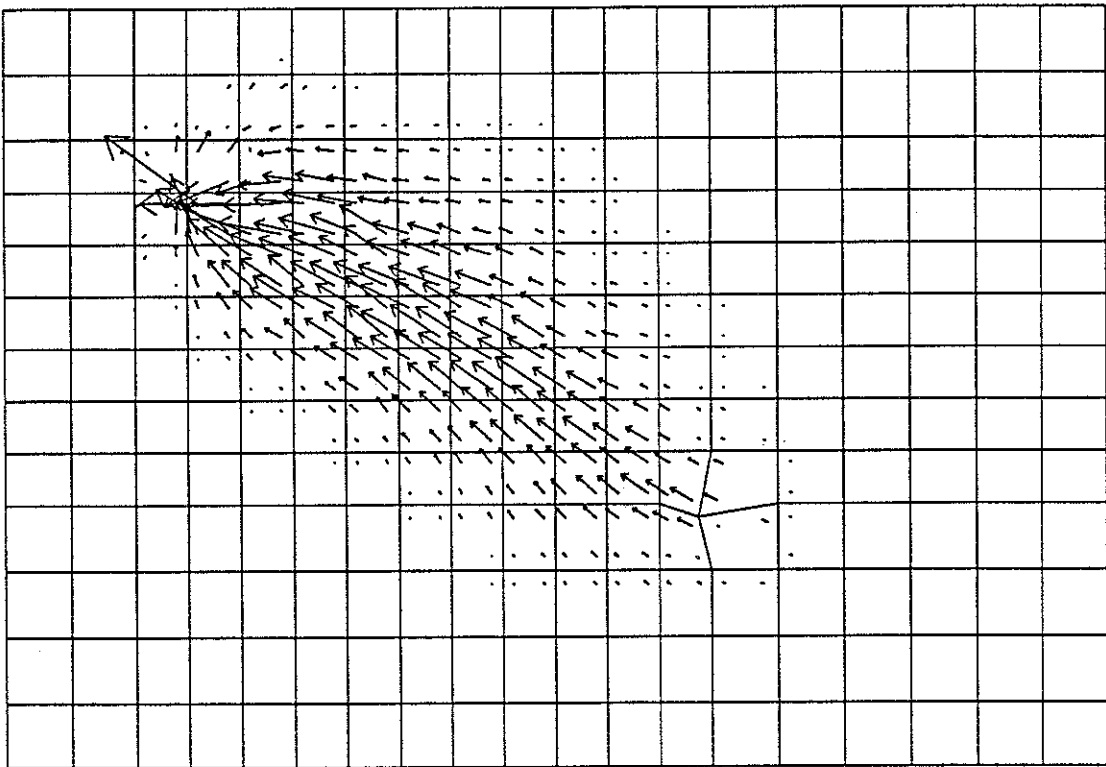
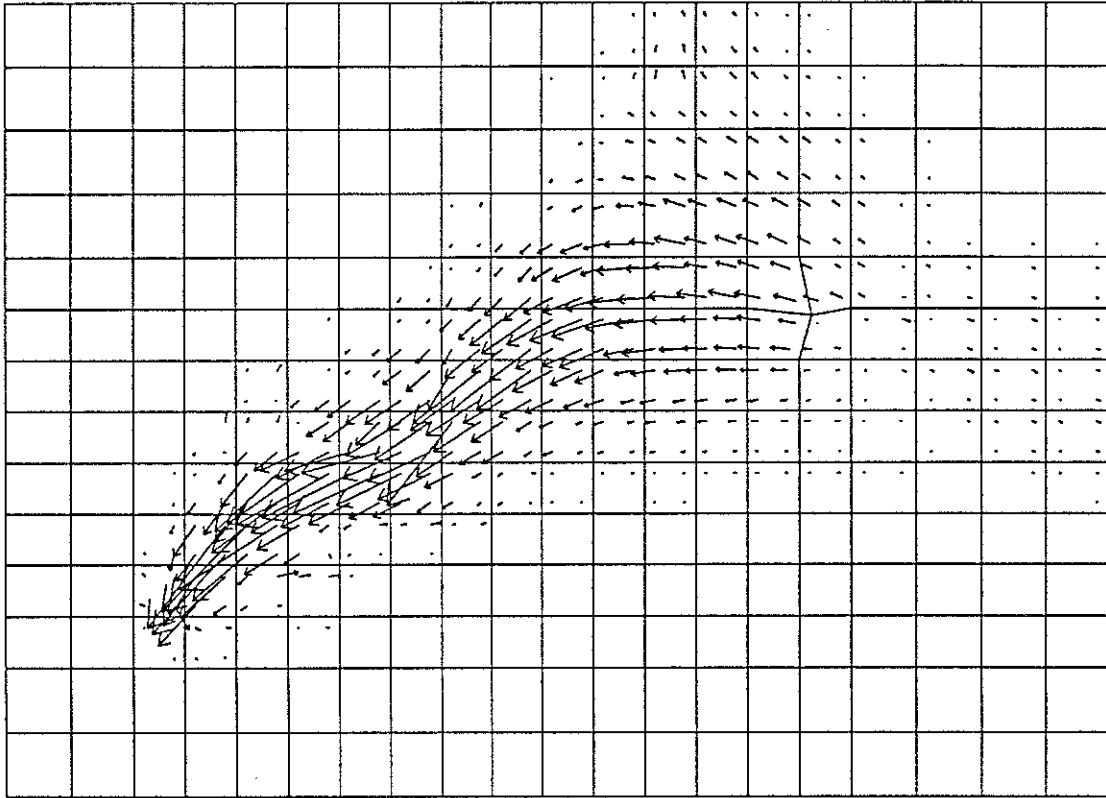


figure IV.75: site de Crisnée, nappe du Crétacé, concentrations dans l'eau immobile (courbes d'isovaleurs)



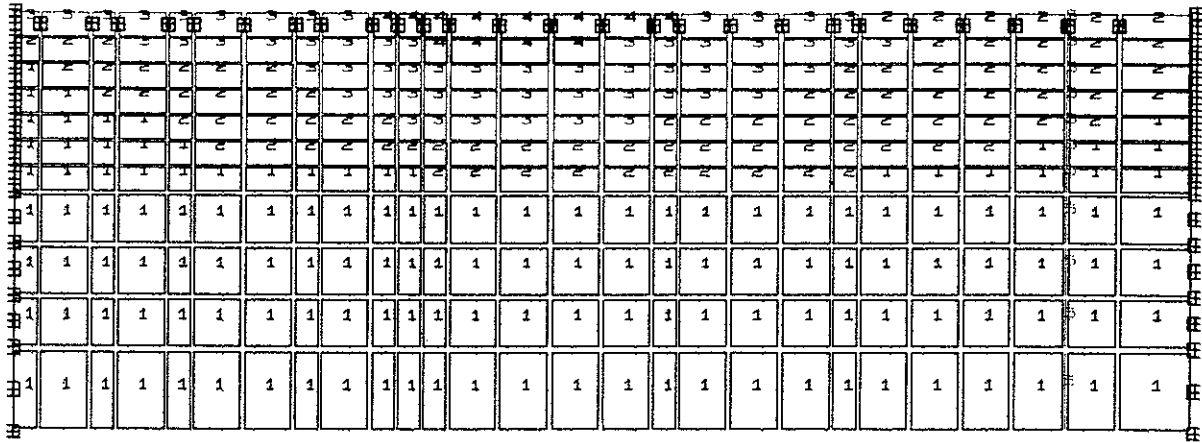
a) traçage au lithium ($f_{\max} = 8.8 \cdot 10^{-8} \text{ kg/m}^2/\text{s}$)
situation après 12 h.



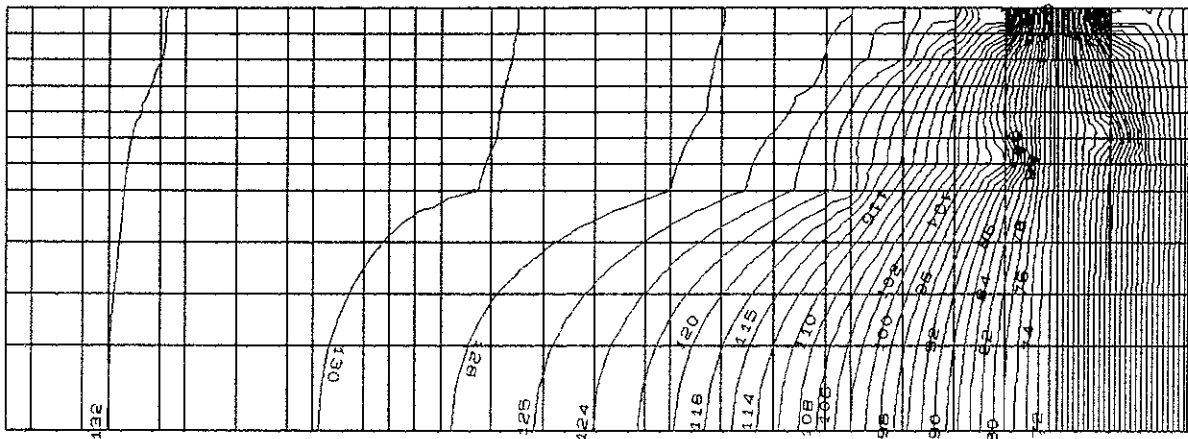
b) traçage à l'uranine ($f_{\max} = 1.1 \cdot 10^{-8} \text{ kg/m}^2/\text{s}$)
situation après 100 h.

x
y

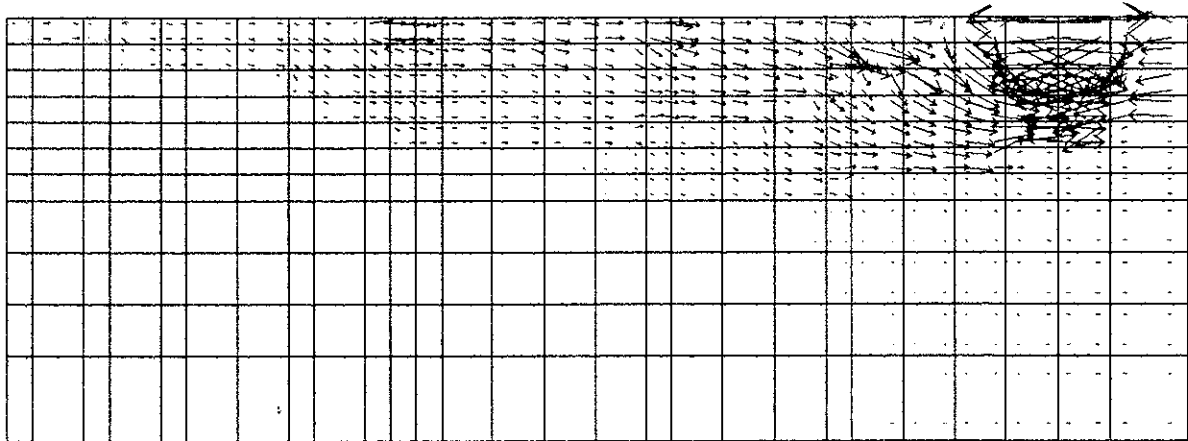
figure IV.76: site de Crisnée, nappe du Crétacé, flux totaux



a) discrétisation (avec noeuds à potentiel imposé)



b) piézométrie calculée, $\Delta h = 20$ cm



c) vitesses de Darcy calculées, $v_{Dmax} = 5.0 \cdot 10^{-4}$ m/s

figure IV.77: site de Crisnée, nappe du Crétacé, modèle vertical d'écoulement entre Pz2 et PE.

Les coefficients de perméabilité utilisés pour ce modèle sont données au tableau suivant.

matériau	K (m/s)
1	$2.8 \cdot 10^{-6}$
2	$4.0 \cdot 10^{-5}$
3	$2.8 \cdot 10^{-4}$
4	$3.5 \cdot 10^{-4}$
5	$1.0 \cdot 10^{-1}$

tableau IV.45: coefficients de perméabilité utilisés dans le modèle vertical de l'écoulement dans l'aquifère crétacé à Crisnée.

La piézométrie obtenue est représentée à la figure IV.77b. Les flux correspondants sont dessinés à la figure IV.77c. Ces résultats doivent être regardés de manière globale. Ils montrent l'influence de l'hétérogénéité verticale de l'aquifère sur l'écoulement de l'eau (flux importants dans la zone fissurée et brisure des isopièzes à la frontière entre les différents matériaux).

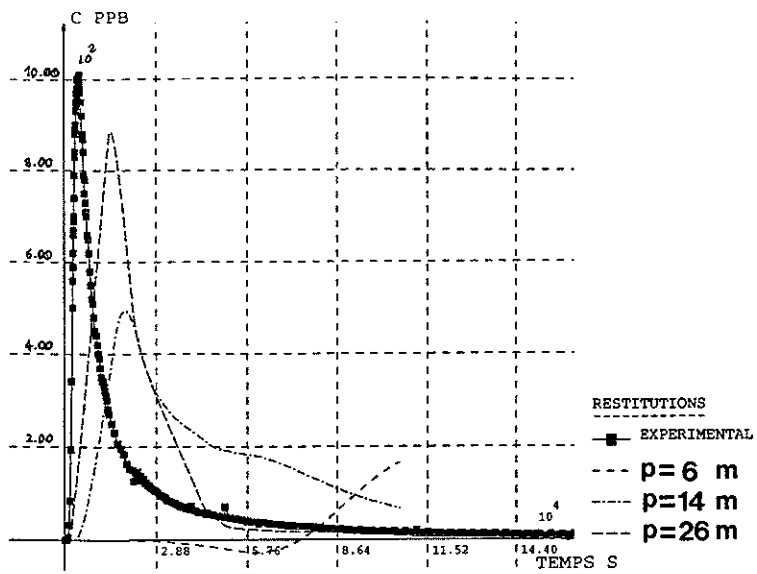
Sur base de cet écoulement, nous avons simulé le transport en injectant le lithium par 8 éléments de frontière à 2 noeuds. Pour tenir compte de sa distribution dans l'espace tridimensionnel, nous avons imposé, entre le piézomètre d'injection et le puits de pompage, (à -3 mètres de profondeur), une concentration qui suit l'évolution calculée par le modèle horizontal. Les caractéristiques de transport sont identiques pour les deux modèles.

La restitution obtenue au pompage, à 3 profondeurs différentes (6, 14 et 26 mètres), est comparée à la restitution expérimentale globale (figure IV.78a).

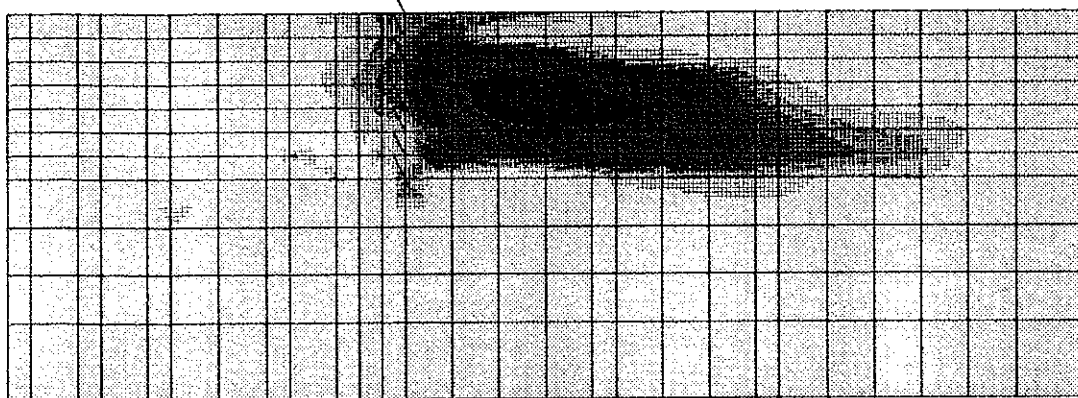
Bien évidemment, les résultats ne sont pas calibrés. En effet, cette simulation ne tient pas compte de la convergence de l'écoulement de l'eau dans un plan horizontal. On comprend alors qu'un modèle bidimensionnel horizontal est meilleur qu'un modèle bidimensionnel vertical.

Toutefois, la simulation dans le plan vertical permet d'apprécier l'influence des hétérogénéités sur la répartition du traceur dans un même plan (figures IV.78b et c). On constate qu'une proportion non négligeable du traceur se déplace très vite vers le puits de pompage, le reste étant retardé et s'accumulant au niveau des zones plus fissurées (dans l'eau mobile) et près du piézomètre d'injection (dans l'eau immobile). Au vu de ces résultats, il apparaît qu'un modèle tridimensionnel est nécessaire pour bien simuler ce test.

Signalons enfin que ces derniers résultats sont insuffisants pour distinguer l'influence d'une hétérogénéité verticale de l'effet d'anisotropie que nous pourrions suspecter. Nous supposons toutefois que l'effet d'anisotropie est secondaire en se référant aux valeurs de dispersivité transversale obtenues à Bertrée.



a) restitutions au puits PE



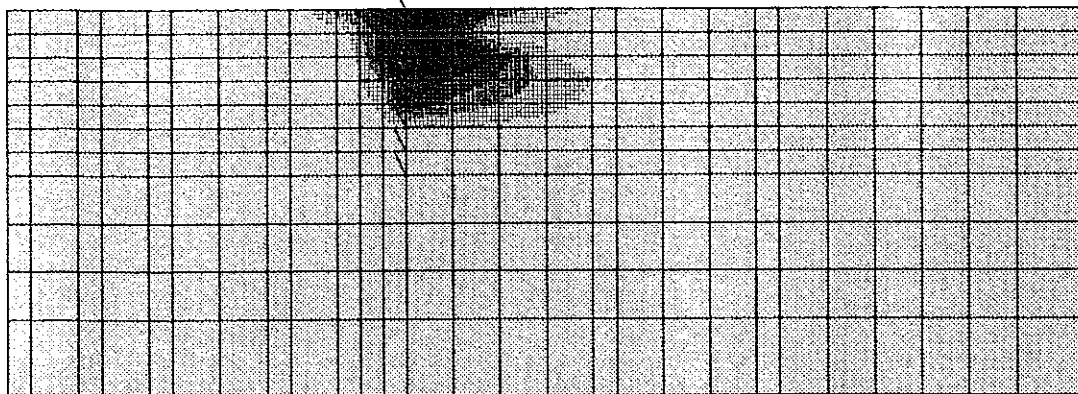
>650



<50

$\cdot 10^1$ ppb

b) concentrations dans l'eau mobile après 50 h. ($\Delta c_m = 500$ ppb)



c) concentrations dans l'eau immobile après 50 h. ($\Delta c_{im} = 500$ ppb)

figure IV.78: site de Crisnée, nappe du Crétacé, modèle vertical de transport.



IV.5.c) Comparaison du site de Crisnée avec le site de référence (Bertrée) et conclusions.

A priori, sans distinguer les hétérogénéités de l'aquifère crétacé, on pourrait dire que les valeurs plus élevées des paramètres de transport, observées à Crisnée, sont dues à une taille plus grande du domaine testé (effet d'échelle). Toutefois, lorsqu'on essaye de distinguer la position géométrique des axes fissurés, on remarque que cet effet intervient de manière secondaire (puisque la taille des domaines fissurés est similaire dans les 2 cas). C'est surtout l'intensité et la structure de la fissuration qui déterminent l'importance de la perméabilité, de la dispersion, et de l'effet d'eau immobile.

Pour illustrer ces constatations, nous avons établi une corrélation entre les différents paramètres obtenus par les modèles. L'intensité de la fissuration peut être assimilée à la porosité efficace. En effet, les valeurs trouvées correspondent assez bien aux mesures in situ effectuées par O. Muller (1990).⁴⁵

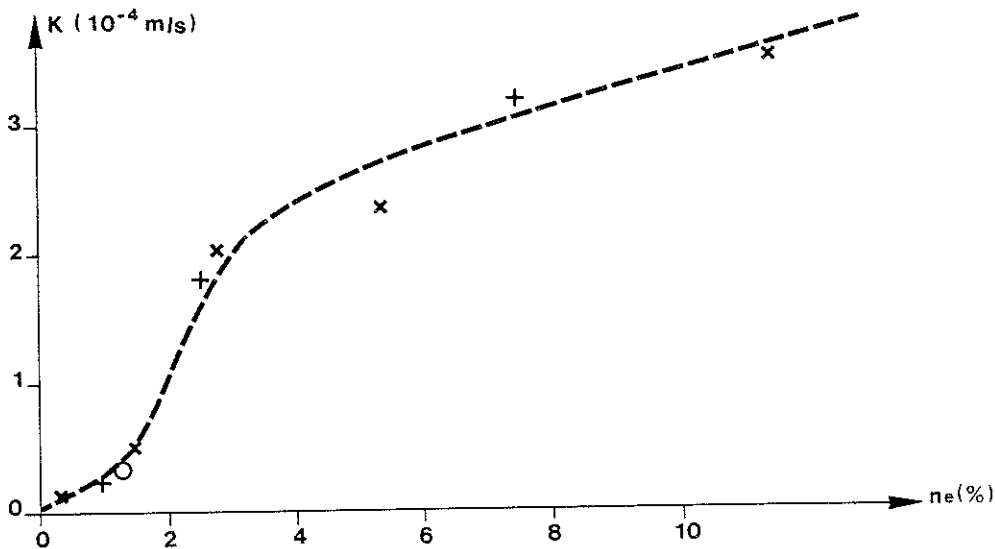
La perméabilité (figure IV.79a) est évaluée par le rapport de la transmissivité à l'épaisseur de la zone fissurée. Il est donc difficile de tirer des conclusions puisque cette épaisseur n'est pas connue avec précision. Toutefois, en supposant qu'elle varie entre 5 et 20 m à Bertrée et qu'elle vaut en moyenne 8,50 m à Crisnée, on obtient une évolution monotone de la perméabilité en fonction de la porosité efficace avec une inflexion lorsque cette porosité atteint 2 %.

Les formules classiques, déterminées par Louis en 1968 (formules I.19a p.19 et I.47 p.36), ne permettent pas d'obtenir un schéma de fissures qui donnerait simultanément de telles valeurs de perméabilité et de porosité. Ceci n'est pas étonnant puisque l'expression de la perméabilité (en fonction du cube de l'ouverture des fissures) postule que le massif crayeux ne contienne qu'un seul réseau de fissures parallèles continues. La formule établie par Kiraly en 1978 (I.19b p.20), basée sur les chenaux d'intersection des fissures, est peut-être plus appropriée pour justifier théoriquement les valeurs du coefficient de perméabilité que nous avons calculées.

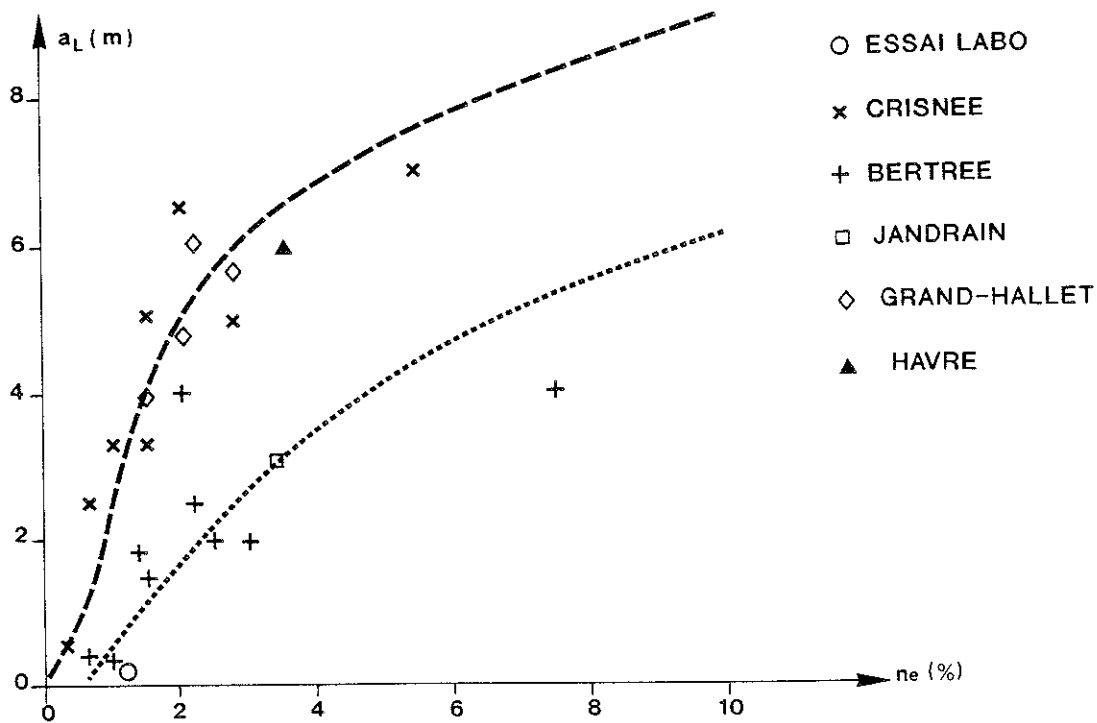
Il se peut également que la craie soit affectée de réseaux de fissures emboîtés qui sont appréhendés lorsque la taille du domaine étudié augmente. Cet argument pourrait expliquer le ressaut observé sur le graphe.

Plus intéressants sont les résultats de la corrélation dispersivité-porosité efficace (figure IV.79b). On constate que les points représentatifs des deux sites s'alignent sur 2 courbes de régression différentes.

⁴⁵ Par la méthode de l'indice de continuité (voir chapitre III), O. Muller détermine, à partir de sondages sismiques, une porosité de fissures égale à 4.5 % sur un site dont la fissuration est moyenne (carrière de Lixhe).



a) corrélation entre le coefficient de perméabilité (K) et la porosité efficace ($n_e = \theta_m$)



b) corrélation entre la dispersivité longitudinale (a_L) et la porosité efficace ($n_e = \theta_m$)

figure IV.79: corrélations des paramètres d'écoulement et de transport dans l'eau mobile.

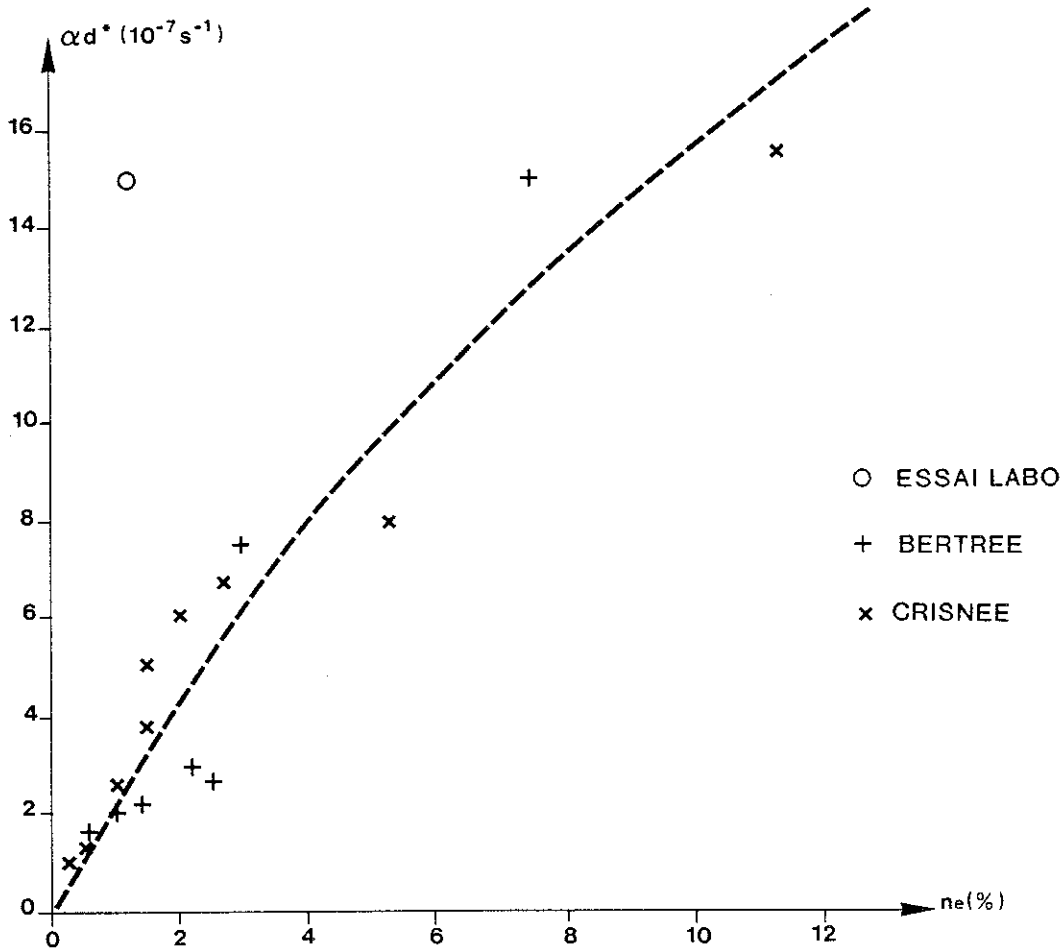
Il semble donc que, même si la dispersivité est une fonction globalement croissante de la porosité efficace, la morphologie et l'agencement de cette porosité jouent un rôle considérable sur la tortuosité des chenaux et donc sur les valeurs de la dispersion mécanique.

Dans ce diagramme, nous avons également repris les interprétations d'autres campagnes de traçage réalisées en Belgique (à Grand-Hallet et à Jandrain, par Meus, 1993 et Valentini, 1992; à Havré, par Laurent, 1982). Les interprétations de ces tests sont toutes analytiques et donc globales; elles ne prennent pas en compte l'effet d'eau immobile. Pour les sites de Grand-Hallet et Jandrain, les courbes de restitution sont très précises (50 à 100 points); ces résultats sont donc fiables. Il n'en est pas de même pour le site de Havré où la courbe de restitution est interprétée sur base de 10 points de mesure seulement.

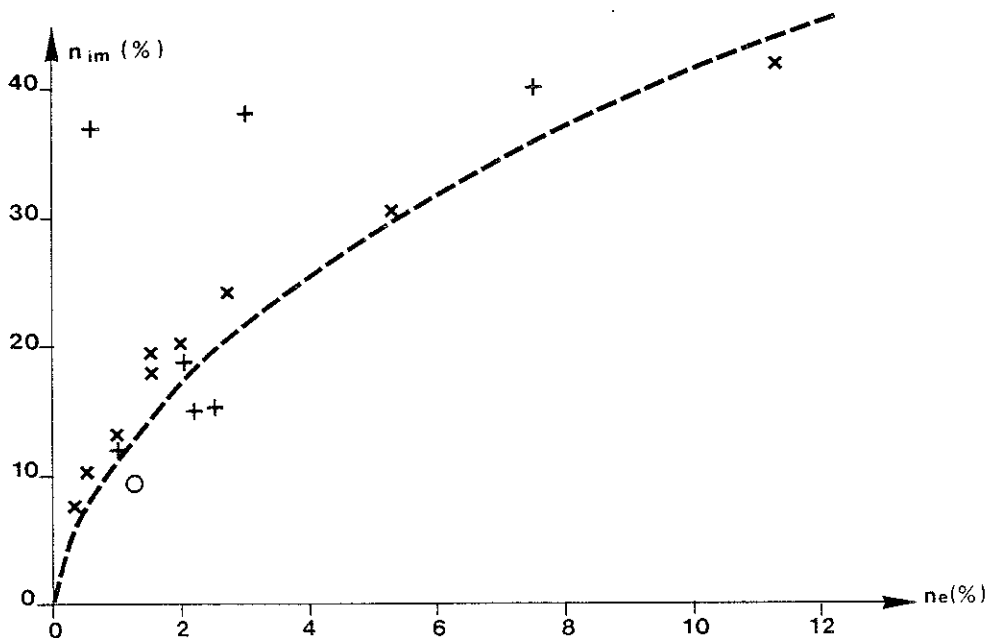
En comparant ces résultats globaux avec ceux des modélisations, il est cependant intéressant de constater que les points qui correspondent aux sites où les circulations d'eau sont rapides (Grand Hallet, Havré) s'ajustent bien sur la courbe de régression obtenue à Crisnée. Par ailleurs, le site de Jandrain (où la transmissivité est moins importante) obéit plutôt à la loi de corrélation obtenue à Bertrée.

Enfin, les paramètres d'eau immobile (α_d^* et θ_{im}) ont également été corrélés avec la porosité efficace (figures IV.80a et b). A partir de ces résultats, il semblerait que ces paramètres suivent une évolution croissante en fonction de la porosité efficace et que cette relation dépend moins de l'agencement de la fissuration.

Cette relation croissante peut se comprendre car, lorsque la proportion d'eau mobile augmente par rapport à celle de l'eau immobile, la surface de contact entre ces deux types d'eau augmente également. Il s'ensuit que le transfert peut se faire plus rapidement de l'une à l'autre et que la portion de fluide immobile atteinte par le traceur est croissante.



a) corrélation entre le coefficient de transfert (α_d^*) et la porosité efficace ($n_e = \theta_m$)



b) corrélation entre la porosité d'eau immobile (θ_{im}) et la porosité efficace ($n_e = \theta_m$)

figure IV.80: corrélations des paramètres caractérisant le transport dans l'eau immobile avec la porosité efficace.

CONCLUSIONS GENERALES

les résultats que nous avons décrits tout au long de cet ouvrage marquent le début d'une recherche dont les implications pratiques peuvent se révéler fondamentales. pour cette raison, après avoir résumé l'état d'avancement des travaux, les conclusions seront principalement axées sur leurs prolongements possibles.

1. OBJECTIFS ATTEINTS.

Pour souligner la contribution originale de cette thèse, nous énumérons les principaux résultats obtenus dans les différents domaines abordés.

1.a) Mécanismes du transport dans la craie de Hesbaye.

Grâce à une bonne synthèse théorique et de nombreuses expérimentations, nous avons pu distinguer les principaux processus qui régissent le transport de composés ioniques dans la craie hesbignonne saturée.

Nous avons quantifier une composante de dispersion mécanique importante, en compétition avec une composante de convection déterminée à partir de l'écoulement. Ces processus dépendent essentiellement de l'importance et de la structure de la porosité efficace de fissures.

Toutefois, la porosité de pores joue également un rôle important sur la répartition des substances ioniques dans la craie. Un important effet de porosité double été mis en évidence. Ce mécanisme englobe un certain nombre de composantes agissant au niveau des pores: diffusion moléculaire, dispersion mécanique, voire même adsorption sur la matrice solide.

1.b) Détermination des coefficients de transport pour la craie.

Après identification des processus importants, nous avons quantifié les coefficients correspondants à un E.V.R., dans le cadre de la théorie déterministe qui a été développée.

Pour rappel, les ordres de grandeur, établis à partir des essais de traçage in-situ, sont repris au tableau suivant.

composante du transport	coefficient	ordre de grandeur
convection	K $\theta_m = n_{eff}$	0.25 à 3.5 10^{-4} m/s 0.5 à 12 %
dispersion	α_L α_T	0.5 à 8 m 0.12 à 2 m
effet d'eau immobile	α_d^* $\theta_{im} = n_{im}$	0.1 à 1.6 10^{-6} s $^{-1}$ 10 à 40 %

tableau 1: paramètres de transport dans la craie du Crétacé de Hesbaye.

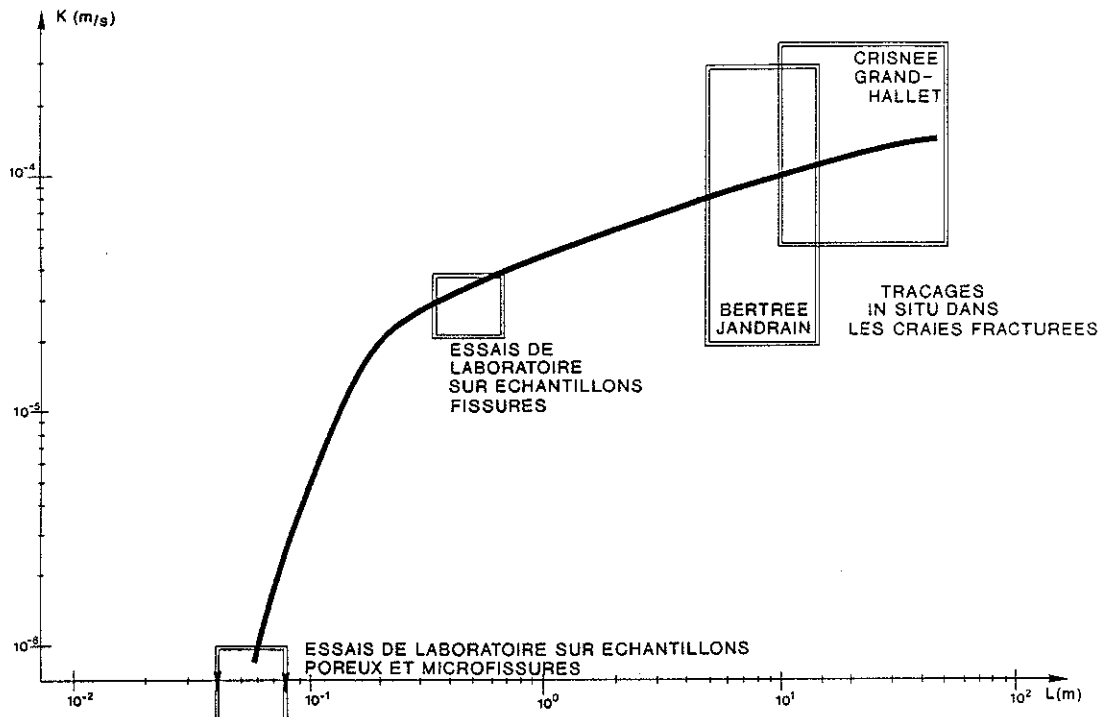
Ces valeurs sont concordantes avec celles déterminées par d'autres auteurs dans les massifs crayeux français. Citons Porel (1988) qui évalue α_L entre 1 et 6 m et n_{eff} entre 1 et 6 %, et Hanich (1991) qui mentionne une dispersivité de 9.7 m pour un massif fort fracturé.

Nous avons également mis en évidence l'influence de l'effet d'échelle sur l'écoulement et le transport. Pour un milieu fissuré comme la craie, cet aspect est fondamental et en testant des domaines de taille croissante, la nécessité de travailler à l'échelle mégascopique de l'expérience in-situ est apparue.

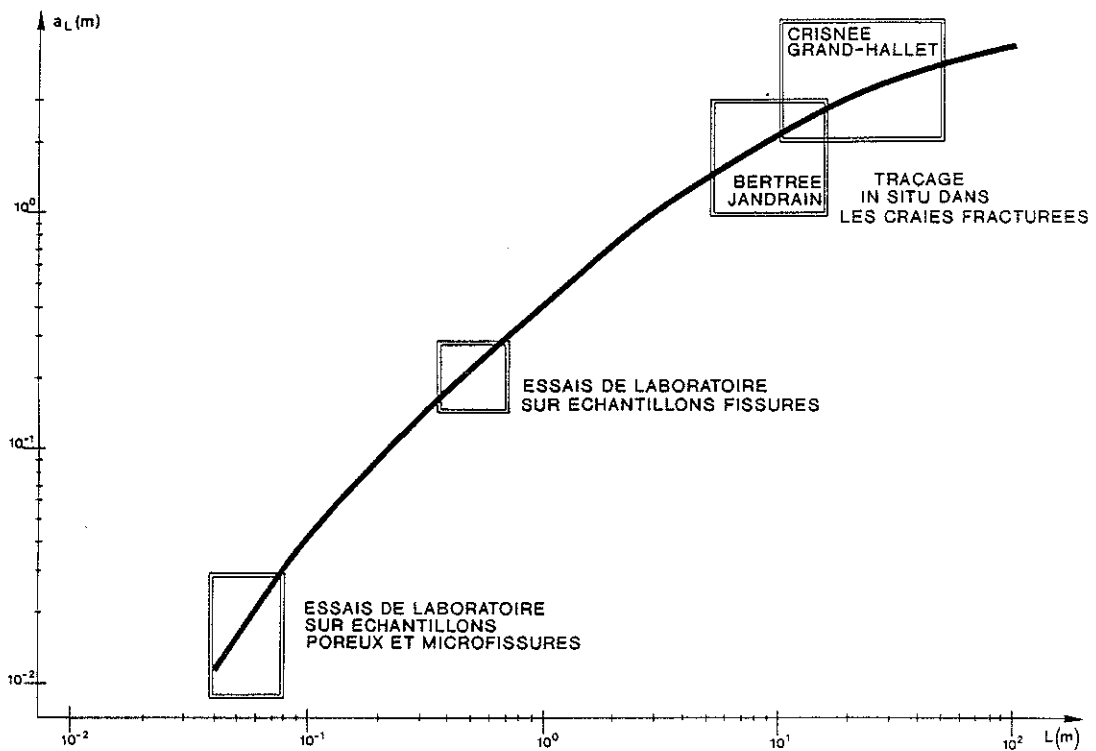
En reprenant les valeurs du coefficient de perméabilité (K) et de la dispersivité longitudinale (α_L), obtenues pour chaque type de tests, on peut élaborer les diagrammes synthétiques 1a et 1b.

On constate qu'une stabilisation relative (correspondant à la représentativité du coefficient déterminé) est plus rapidement atteinte pour l'écoulement (paramètre K) que pour la dispersion (représentée par α_L). Ce résultat est logique puisque cette dernière est davantage influencée par l'agencement de la porosité. Dans le cas d'une craie très fissurée, on peut même voir qu'un essai de traçage sur une distance de 50 m est à peine suffisant pour déterminer des paramètres de dispersion objectifs.

Pour le coefficient de transfert vers l'eau immobile, les valeurs trouvées ne montrent pas une tendance régulière. Il semblerait qu'il soit moins influencé par la taille du domaine investigué. Ceci peut se comprendre puisque ce processus résulte essentiellement du stockage au niveau des pores qui sont déjà très bien représentés à l'échelle de l'échantillon de laboratoire.



a) corrélation $K - L$



b) corrélation $a_L - L$

figure 1: influence de l'échelle d'investigation sur les valeurs mesurées des paramètres hydrodispersifs de la craie du Crétacé de Hesbaye.

1.c) Mise au point d'un logiciel de simulation des processus de transport miscible.

Nous avons également intégré, dans le code LAGAMINE, deux méthodes numériques pour résoudre objectivement des équations bidimensionnelles linéarisées mais complètement transitoires⁴⁶ de convection-dispersion-dégradation avec effet d'eau immobile. Dans la littérature, cette dernière composante, pourtant importante dans de nombreuses situations, est rarement envisagée.

Les éléments finis associés aux deux méthodes ont été testés dans de nombreuses situations. Ils se sont avérés suffisamment robustes pour autant que le problème ne soit pas purement convectif. Les deux procédés sont tout à fait complémentaires l'un de l'autre: la méthode par décentrage complet (F.U.P.G.) s'accommode très bien de petits pas de temps (nombres de Courant inférieurs à l'unité) et la méthode eulérienne lagrangienne hybride (H.E.L.M.) convient mieux pour des pas de temps plus grands (nombres de Courant supérieurs à l'unité). Ceci permet d'envisager des discrétisations temporelles indépendantes des discrétisations spatiales. Pour des convections variables dans l'espace, nous avons même pu résoudre des problèmes avec un maillage mixte composé des deux types d'éléments, ce qui assouplit encore le choix du pas de temps.

Le logiciel obtenu a permis d'interpréter les différents types d'essais en tenant compte de la plupart de leurs particularités. Ceci confère aux coefficients de transport ainsi déterminés une objectivité rarement rencontrée dans la pratique.

Ce programme peut également servir d'outil prévisionnel, en tout cas pour des pollutions miscibles suffisamment localisées. Il est prévu de l'utiliser, très prochainement, pour déterminer, de manière objective, les périmètres de protection d'ouvrages de captage.

2. PROLONGEMENT DES TRAVAUX DANS LE DOMAINE NUMERIQUE.

La résolution numérique des équations de convection-dispersion-dégradation est un vaste domaine de recherche, en constante évolution. Force est de reconnaître qu'actuellement aucune méthode numérique par éléments finis n'est apparue comme suffisamment générale pour s'imposer par rapport aux autres (voir synthèse actuelle, chapitre II).

⁴⁶ par complètement transitoire, nous sous-entendons que la sollicitation convective peut également varier au cours du temps.

On pourrait proposer une étude théorique plus poussée qui permettrait d'obtenir des résultats encore plus précis et plus stables, notamment dans le cas des problèmes dominés par la convection. Il s'agirait de rechercher des fonctions de décentrage plus objectives et de tester d'autres méthodes eulériennes lagrangiennes (méthode E.L.L.A.M.).

Toutefois, nos applications ne font pas partie du domaine purement convectif. C'est pourquoi, à l'heure actuelle, d'autres objectifs nous semblent plus importants. Il s'agit de:

- tester davantage les modèles avec des structures mixtes. Si leur applicabilité se confirmait, on pourrait alors unifier les 2 théories en un seul élément qui comporterait une gestion dynamique de la fonction de pondération et qui fonctionnerait de manière optimale pour un problème dont les sollicitations convectives sont transitoires. Ce type de modèle impliquerait également une modification de l'élément de frontière pour imposer des conditions aux limites avec effet convectif également transitoire.
- construire de nouveaux éléments qui permettraient une plus grande souplesse géométrique et éventuellement une amélioration des résultats. Nous pensons essentiellement à des triangles à 3 et 6 noeuds et des quadrilatères curvilignes à 9 noeuds. Ces derniers comporteraient 4 coefficients de décentrage pour la méthode "upwind" (d'après Codina et al. 1990) et un "particle-tracking" plus évolué pour la méthode H.E.L.M. (selon Yeh 1990).
- généraliser le code pour travailler dans un espace à 3 dimensions et élargir ainsi son champ d'application. Bien que les éléments tridimensionnels soient calqués sur ceux à 2 dimensions, cette opération n'est pas simple. En effet, elle s'accompagne d'un accroissement important du temps de calcul. Par conséquent, il conviendra d'optimiser au mieux le programme et de gérer convenablement le potentiel de résolution mis à disposition.
- compléter les lois de transport en y introduisant des non linéarités pour les processus de dégradation, d'adsorption, et d'eau immobile. Cette opération exige un formalisme plus complexe car, lorsque les équations de bilan deviennent non linéaires, elles ne peuvent plus être simplifiées comme nous l'avons proposé dans nos développements. Il convient alors de gérer simultanément les 3 bilans (pour l'eau mobile, l'eau immobile, et le solide) et de garder 3 inconnues par noeud (C_m , C_{im} , F) dans le programme. En arrivant à ce résultat, on pourrait s'intéresser aux migrations dans des milieux moins perméables et plus réactifs, par exemple, les lits d'argile qui imperméabilisent les sites de décharge.

3. PROLONGEMENT DES TRAVAUX DANS LE DOMAINE EXPERIMENTAL.

Tant en laboratoire que sur le terrain, il serait important de confirmer les résultats obtenus en améliorant la qualité des expérimentations, mais surtout, en accumulant un plus grand nombre de tests. C'est en effet essentiellement la quantité d'information qui fait défaut, pour envisager de façon fiable un modèle régional de transport en Hesbaye.

3.a) Expérimentation en laboratoire.

Pour confirmer les déductions portant sur la migration des nitrates dans la craie fissurée, il serait utile de développer l'expérimentation en laboratoire. Nous envisageons les points suivants:

- perfectionner le dispositif de mesure diélectrique (protection du capteur et multiplexage) pour pouvoir doser, de manière non destructive, les nitrates à l'intérieur d'un échantillon crayeux soumis à un courant de percolation. Cette amélioration permettrait de mesurer la dispersivité transversale sur une dalle de craie fissurée et de visualiser, en direct, la répartition des ions au sein de celle-ci.
- refaire des cycles de pollution-dépollution pour confirmer les valeurs de dispersivité, suivre de manière plus précise l'effet d'eau immobile, et mettre en évidence une éventuelle non linéarité de ce processus.
- augmenter la taille de l'échantillon fissuré, même s'il n'est pas d'un seul tenant, pour se rapprocher de l'élément de volume représentatif tout en évitant les problèmes engendrés par l'expérimentation in situ (à savoir, la maîtrise des conditions aux limites).

Il serait également intéressant d'étudier les processus de dénitrification et de réduction pour des eaux peu mobiles, non aérées (conditions réductrices du déplacement nitrate-nitrite); mais une telle étude relève plutôt de l'hydrochimie spécialisée.

3.b) Expérimentation in situ.

Les investigations sur site pourraient également être développées.

Pour déceler une éventuelle anisotropie, liée à la structure de la fissuration, nous pourrions étudier la propagation tridimensionnelle des traceurs. Mais, dans cette optique, il ne suffirait pas de posséder un logiciel permettant une simulation à 3 dimensions. L'acquisition des données devrait, elle aussi, être pluridirectionnelle.

Ceci implique de mieux contrôler l'injection des traceurs: on utiliserait un dispositif avec "packers" pour confiner la substance dans une zone précise et on surveillerait son évacuation grâce à une sonde de conductivité. Il faudrait également multiplier les points de prélèvement dans de nombreux piézomètres et à des profondeurs différentes.

Aux Etats-Unis, une expérience de ce type a été réalisée dans le Massachusetts, à Cape Cod⁴⁷. Il s'agissait de tester un aquifère graveleux et sableux, sur une distance d'environ 400 m. Le test a été réalisé en écoulement naturel, il a duré 17 mois. Plus de 30.000 analyses ont été effectuées sur les nombreux échantillons provenant des 656 points de prélèvement à niveau multiple.

On pourrait également proposer l'étude de plusieurs sites sélectionnés en Hesbaye. En multipliant les expériences de traçage, on pourrait constituer une base de données plus riche. Il serait alors possible de comprendre, de manière plus approfondie la variabilité des coefficients de transport. Ces nouveaux travaux permettraient d'envisager, sur des bases solides, un modèle régional en Hesbaye.

Toutefois, il importerait alors de recenser, de manière complète, les concentrations en nitrates dans la nappe. Cette opération a déjà été réalisée en 1984-1985 (Ghysel et al 1985). Durant cette période, on a prélevé par pompage dans une centaine de piézomètres de surveillance et on a échantillonné les percolats dans les galeries de captage. Les analyses ont permis d'évaluer approximativement l'état de la nappe (voir annexe).

Malheureusement, depuis cette date, peu d'informations locales ont été recueillies, les teneurs en nitrates étant évaluées plus globalement. Il serait donc utile d'effectuer un nouveau recensement qui permettrait de dégager l'évolution globale de la nappe au cours des 10 dernières années.

Une étude des sols hesbignons (avec une interprétation par un modèle unidimensionnel vertical en zone désaturée) serait également la bienvenue pour nous renseigner sur les "inputs" à introduire dans la simulation. Une étude de ce genre a déjà été réalisée par la F.U.L. (Fondation Universitaire Luxembourgeoise) pour le bassin hydrographique du Sud-Luxembourg (Tychon et al. 1989).

⁴⁷ Etude faite par l'U.S. Geological Survey, en collaboration avec le Massachusetts Institute of Technology (Department of Civil Engineering), et publiée dans Water Resources Research (Garabedian 1991 et Leblanc 1991).

4. AUTRES RECHERCHES POSSIBLES.

D'autres domaines concernant la migration des polluants méritent également d'être envisagés. Citons ici:

- la quantification des phénomènes d'adsorption sur le solide: si ces processus sont bien connus, ils ne sont pas toujours linéaires et les coefficients associés à leur cinétique ne sont pas souvent évalués.
- l'étude de la réactivité des polluants et la formation de systèmes poly-composés dont les équations de transport sont couplées par des équilibres chimiques (voir Rubin 1983 et Celia 1989).
- la représentation des écoulements polyphasiques avec des zones de transition régies par des phénomènes de capillarité; cette théorie est en effet applicable aux écoulements dans les réservoirs pétroliers et dans la zone non saturée des aquifères libres, mais aussi aux pollutions par des substances non₄₈ aqueuses (N.A.P.L.: non aqueous phase liquid en anglais)
- l'approche des transferts de composants entre phases, en fonction de la composition chimique de ces dernières (lois de la thermodynamique chimique dont les coefficients sont évalués pour certains problèmes de "reservoir engineering").

Ces exemples démontrent que les possibilités de recherche sont très nombreuses dans le domaine en plein essor des pollutions du sous-sol. Ce n'est qu'en comprenant un minimum de ces bases théoriques et phénoménologiques et en visualisant correctement les processus invoqués qu'il est possible d'envisager avec succès les opérations d'assainissement qui constituent, faut-il le rappeler, l'objectif final à atteindre.

P. Biver

Liège, avril 1993.

⁴⁸ On trouvera de nombreuses informations sur ces modèles chez des auteurs comme Young L.C., Pinder ou Koch.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ABRAMOVITZ M., STEGUN E., 1972, Handbook of mathematical functions, Dover Publications, Inc. N.Y., 1045 p.

ABRIOLA L.M., PINDER G.F., 1985, A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 1. Equations development, Water resources research, vol.21, n°1, pp. 11-18.

BEAR J., 1972, Dynamics of fluids in porous media, American Elsevier Publishing Company, 764 p.

BEAR J., BACHMAT Y., 1990, Introduction to modeling of transport phenomena in porous media, Kluwer Academic Publishers, 553 p.

BEAR J., VERRUIJT A., 1987, Modeling groundwater flow and pollution, Reidel Publ. Company, 415 p.

BECKERS J.M., 1992, Analytical linear numerical stability conditions for an anisotropic three-dimensional advection-diffusion equation, SIAM journal numer. anal., vol.29, n°3, pp. 701-713.

BECKERS J.M., 1992, La Méditerranée occidentale: de la modélisation mathématique à la simulation numérique, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences appliquées, Université de Liège.

BILLE J.Ph., HABRAKEN A.M., CHARLIER R., LI X., 1993, Brochure descriptive du programme Lagamine, rapport interne M.S.M.

BIVER P., 1989, Recherche phénoménologique sur la propagation des polluants dans un milieu poreux et application à un cas concret, rapport de synthèse du premier mandat I.R.S.I.A. (non publié).

BIVER P., 1990, Recherche phénoménologique et numérique sur la propagation de polluants miscibles dans un milieu poreux et application à un cas concret, rapport de synthèse du deuxième mandat I.R.S.I.A. (non publié)

BIVER P., 1991, Recherche phénoménologique et numérique sur la propagation de polluants miscibles dans un milieu poreux et application à un cas concret, rapport de synthèse du troisième mandat I.R.S.I.A. (non publié)

BIVER P., 1991, Modeling transport in a double porosity medium: an alternative approach, first international conference: water pollution: modeling, measuring, and prediction, Computational Mechanics Publications, Elsevier, pp. 43-57.

BIVER P., DASSARGUES A., 1993, La simulation du transport de nitrates dans un aquifère crayeux du Crétacé en Belgique: approche expérimentale et numérique, Hydrogéologie, n°2.

BIVER P., MEUS Ph., 1992, The use of tracer tests to identify and quantify the transport processes in an heterogeneous aquifer, Tracer hydrology, A.A.Balkema, Rotterdam, pp. 415-421.

BLANPAIN , 1984, Notes du cours de thermodynamique chimique, à l'usage des étudiants en deuxième candidature ingénieur, Université de Liège.

BROOKS A.N., HUGHES T.J.R., 1982, Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, Computer methods in applied mechanics and engineering, vol.32, pp. 199-259.

BROOKS R.H., COREY A.T., 1964, Hydraulic properties of porous media, Colorado State University, Hydrology papers, 3, pp.1-27.

BRUCH J.C., STREET R.L., 1967, Two dimensional dispersion, Journal of the sanitary engineering division (Proceedings of the A.S.C.E.)

CAJOT O., MONJOIE A., 1980, Réinjection dans le sol des effluents d'une station d'épuration, région de Hannut, première phase, rapport L.G.I.H., n°CEB801 (non publié).

CAJOT O., MONJOIE A., 1981, Réinjection dans le sol des effluents d'une station d'épuration, région de Hannut, seconde phase, rapport L.G.I.H., n°CEB811 (non publié).

CANTEKIN M.E., WESTERINK J.J., 1990, Non diffusive N+2 degree Petrov-Galerkin methods for two-dimensional transient transport computations, International journal for numerical methods in engineering, vol.30, pp. 397-418.

CASTANY G., 1967, Principes et méthodes de l'hydrogéologie, Dunod, Paris, 238 p.

CELIA M.A., KINDRED J.S., HERRERA I., 1989, Contaminant transport and biodegradation. 1, a numerical model for reactive transport in porous media, Water resources research, vol.25, n°6, pp 1141-1148.

CELIA M.A., RUSSEL T.F., HERRERA I., EWING R.E., 1990, An eulerian lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation, Advances in water resources, vol.13, n°4, pp 187-206.

CESCOTTO S., 1986, Notes de cours de mécanique du solide déformable, à l'usage des étudiants en deuxième candidature ingénieur, Université de Liège.

CHARLIER R., 1987, Approche unifiée de quelques problèmes non linéaires de mécanique des milieux continus par la méthode des éléments finis, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences appliquées, Université de Liège.

CHARLIER R., RADU J.P., DASSARGUES A., 1988, Numerical simulation of transient unconfined seepage problems, first international conference in computer methods and water resources, vol.1: groundwater and aquifer modelling, Computational Mechanics Publications, pp. 143-155.

CODINA R., ONATE E., CERVERA M., 1990, The intrinsic time for the S.U.P.G. formulation using quadratic elements, submitted to the International journal of computer methods in applied mechanics and engineering.

CRINE M., 1988, Hydrodynamique statistique des écoulements gaz-liquide dans les colonnes à garnissage (théorie et expérience), thèse d'agrégation, Université de Liège, Cebedoc.

CRUMP K.S., 1976, Numerical inversion of Laplace transform using Fourier series approximation, Journal of assoc. comput. mach., Vol.23(1), pp. 89-96.

CSANADY G.T., 1973, Turbulent diffusion in environment, D.Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, 248 p.

DAGAN G., 1989, Flow and transport in porous formations, Springer Verlag, 465 p.

DARCY H., 1856, Les fontaines publiques de la ville de Dijon, Dalmont, Paris.

DA SILVA, MONJOIE A., DEBANDE, SCHROEDER Ch., DETIEGE C., POOT B., 1985, Characterization and imbibition of chalks, North sea chalk symposium, Stavanger.

DASSARGUES A., 1991, Paramétrisation et simulation des réservoirs souterrains: discrétisation du domaine, préparation statistique de données, couplages et non linéarités des paramètres, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences appliquées, Université de Liège.

DASSARGUES A., 1991, Water table aquifers and finite element method: analysis and presentation of a case study, first international conference on computational modelling of free and moving boundary problems, vol.1: fluid flow, Computational Mechanics Publications, pp. 63-72.

DASSARGUES A., 1993, Transient simulation of water table aquifers using a pressure dependent storage coefficient, second international conference on computational modelling of free and moving boundary problems, vol.1: fluid flow, Computational Mechanics Publications (à paraître).

DASSARGUES A., MONJOIE A., 1993, Hydrogeology of the chalk of North-west Europe, chapitre 8: Chalk as an aquifer in Belgium, pp. 153-169, Oxford University Press.

DASSARGUES A., MONJOIE A., 1993, Les aquifères crayeux en Belgique, Hydrogéologie, n°2.

DASSARGUES A., MONJOIE A., LAMBERT J., PIERLOT A., 1991, Etude régionale par éléments finis d'une nappe libre située dans les craies du Crétacé en Belgique, Revue des sciences de l'eau, n°4, pp. 39-63.

DASSARGUES A., RADU J.P., CHARLIER R., 1988, Finite element modeling of a large water table aquifer in transient conditions, Advances in water resources, vol.11.

DAY D.R., 1987, Dielectric properties of polymeric materials, Micromet Instruments Publications, 51 p.

DEMARET P., 1989, Intégration des équations de la thermo-convection par une méthode de collocation de Tchebychev préconditionnée, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences appliquées, Université Catholique de Louvain.

DE MARSILY G., 1986, Quantitative Hydrogeology, Academic Press Inc., 440 p.

DERIJCKE F., 1987, Grounwater resources of the European Community, general survey volume and survey volume for Belgium, Verlag, 260 p.

DEVILLE M., 1984, Recent developments of spectral and pseudo-spectral methods in fluid dynamics, notes prepared for the lecture series on computational fluid dynamics, Von Karman Institute, Rhode St Genèse.

DICK E., 1983, Accurate Petrov-Galerkin methods for transient convective diffusion problems, International journal for numerical methods in engineering, Vol.19, pp. 1425-1433.

DIMOU N., ADAMS E.E., 1991, Representation of sources in a 3D eulerian-lagrangian mass transport model, first international conference: water pollution: modeling, measuring, and prediction, Computational Mechanics Publications, Elsevier, pp.251-264.

DONEA J., 1984, A Taylor-Galerkin method for convective transport problems, International journal for numerical methods in engineering, vol.20, pp.101-119.

ETIENNE J., 1985, Notes de cours d'analyse mathématique, à l'usage des étudiants en candidature ingénieur, Université de Liège.

FONDER G., 1986, Notes de cours de mécanique des structures (application des ordinateurs), à l'usage des étudiants ingénieur, Université de Liège.

FREUND J., SALONEN E.M., 1992, A logic for simple Petrov-Galerkin weighting functions, International journal for numerical methods in engineering, vol.34, pp. 805-822.

FRIND E.O., 1982, Simulation of long-term transient density dependent transport in groundwater, Advances in water resources, Vol.5, pp. 73-88.

3 ✖
GALEATI G., GAMBOLATI G., NEUMAN S.P., 1992, Coupled and partially coupled eulerian-lagrangian model of freshwater-seawater mixing, Water resources research, vol.28, n°1, pp.149-165.

GARABEDIAN S.P., LEBLANC D.R., 1991, Large scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts. 2, analysis of spatial moments for a non reactive tracer, water resources research, vol.27, n°5, pp. 911-924.

GARCET N., 1992, Détermination des propriétés de transport de la craie fissurée de Hesbaye (expérimentations in situ et interprétation analytique), travail de fin d'études présenté en vue de l'obtention du grade d'ingénieur civil géologue, Université de Liège.

GARTLING D.K., HICKOX C.E., 1985, A numerical study of the applicability of the Boussinesq approximation for fluid saturated porous media, International journal for numerical methods in fluids, vol.5, pp. 995-1013.

GASPAR C., JOZSA J., SIMBIEROWICZ P., 1991, Lagrangian modelling of the convective diffusion problem using unstructured grids and multigrid technique, first international conference: water pollution: modeling, measuring, and prediction, Computational Mechanics Publications, Elsevier, pp. 299-312.

GAUCHER G., 1968, Traité de pédologie agricole, le sol et ses caractéristiques agronomiques, Dunod, Paris, pp. 374-385.

GHYSEL P., 1985, Etude du Crétacé de Hesbaye, rapport Région Wallonne - C.I.L.E. (non publié).

GRESHO P.M., LEE R.L., 1979, Don't suppress the wiggles, they are telling you something, Finite element methods for convection dominated flows, ADM-Vol.34, pp. 37-61.

HABRAKEN A.M., 1989, Contribution à la modélisation du formage des métaux par la méthode des éléments finis, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences appliquées, Université de Liège.

HANNICH L., 1991, Les traçages d'essai en aquifère hétérogène: méthodes, intérêt, et limites, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en géosciences, Université de Lille-Flandres -Artois.

4 ✖
HASSANIZADEH S.M., LEIJNSE T., 1988, On the modeling of brine transport in porous media, Water resources research, vol.24, pp.321-330.

HASTED J.B., 1973, Aqueous dielectrics, London: Chapman et Hall (collection studies in chemical physics), 307 p.

5 ✖
HEINRICH J.C., HUYAKORN P.S., ZIENKIEWICZ O.C., MITCHELL A.R., 1977, An upwind finite element scheme for two-dimensional convective transport equation, International journal for numerical methods in engineering, vol.11, pp.131-143.

HENRY H.R., 1964, Effect of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers, U.S. Geological survey water supply paper 1613-C, pp. 70-84.

HENRY T.F., FOREE E.G., 1979, Dispersion modelling in time and two dimensions, Proceedings of the A.S.C.E., Journal of the environmental engineering division, 105, EE6, pp. 1131-1147.

HERRERA I., 1992, Localized adjoint method: topics for further research and some contributions, proceedings of the 9th international conference on computational methods in water resources, Vol.1, Numerical methods in water resources, Computational Mechanics Publications, pp 3-15.

HOGGE M., 1980, Secant versus tangent methods in non-linear heat transfer analysis, International journal for numerical methods in engineering, vol.16, n° , pp. 51-64.

HOGGE M., 1989, Notes du cours de modélisation des transferts de chaleur et de matière, à l'usage des étudiants ingénieur (techniques), Université de Liège.

HUGHES T.J.R., 1987, Recent progress in the development and understanding of S.U.P.G. methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations, International journal for numerical methods in fluids, vol.7, pp. 1261-1275.

HUGHES T.J.R., MALLET M., MIZUKAMI A., 1986, A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II, beyond S.U.P.G., computer methods in applied mechanics and engineering, vol.56, pp. 341-355.

HULL L.C., MILLER J.D., CLEMO T.M., 1987, Laboratory and simulation studies of solute transport in fracture networks, Water resources research, vol.23, n°8, pp. 1505-1513.

HUNT J.R., SITAR N., UDELL K.S., 1988, Non aqueous phase liquid transport and clean up, 1. Analysis of the mechanisms, Water resources research, vol.24, n°8, pp. 1247-1258.

HUSSAIN A.K.M., 1981, The laboratory determination of longitudinal and lateral dispersion coefficients in unidirectional groundwater flow., Ph.D.thesis, University of Newcastle Upon Tyne.

IDELSOHN S.R., 1989, Upwind techniques via variational principles, International journal for numerical methods in applied mechanics and engineering, Vol.28, pp.769-784.

KINDRED J.S., CELIA M.A., 1989, Contaminant transport and biodegradation. 2, Conceptual model and test simulations, Water resources research, vol.25, n°6, pp.1149-1159.

KINNEY R.B., MAHDI H.S., 1988, A new finite volume approach with adaptative upwind convection, International journal for numerical methods in engineering, vol.26, pp. 1325-1343.

- KINZELBACH W., 1986, Groundwater modeling, An introduction with sample programs in basic, Stuttgart University, Elsevier, 333 p.
- KIRALY L., 1978, La notion d'unité hydrogéologique: essai de définition, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur es sciences, Université de Neuchâtel.
- KOCH M., 1992, Numerical solution of the Buckley-Leverett equation by means of a new mesh-adaptative collocation technique, proceedings of the 9th international conference on computational methods in water resources, Vol.1, Numerical methods in water resources, Computational Mechanics Publications, pp 149-156.
- KRUSEMAN G.P., DE REDDER N.A., MEILHAC A., 1974, Interprétation et discussion des pompages d'essai, International Institute for Land Reclamation and Improvement, bulletin n°11, 213 p.
- LANDREAU A., 1990, Les nitrates dans les eaux souterraines, "Courants": Revue de l'eau et de l'aménagement, n°1, pp. 28-33.
- LAPIDUS L., AMUNDSON N.R., 1952, Mathematics of adsorption in beds VI. The effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns, journal of phys. chem., 56, pp. 984-988.
- LAURENT E., 1979, Déterminations des coefficients intrinsèques de dispersion d'un aquifère, Technique de l'eau et de l'assainissement, n°388, pp. 29-35.
- LAURENT E., 1982, Détermination du coefficient intrinsèque de dispersion radiale du Crétacé de la Haine à Havré. Fiabilité du modèle radial de dispersion basé sur ce coefficient, Technique de l'eau et de l'assainissement, n°432, pp. 9-16.
- LAVAL H., QUARTAPELLE L., 1990, A fractional-step Taylor-Galerkin method for unsteady incompressible flows, International journal for numerical methods in engineering, vol.11, pp. 501-513.
- LEBLANC D.R., GARABEDIAN S.P., HESS K.M., GELHAR L.W., QUADRI R.D., STOLLENWERK K.G., WARREN W.W., 1991, Large scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts. 1, experimental design and observed tracer movement, water resources research, vol.27, n°5, pp. 895-910.
- LEONARD B.P., 1979, A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic interpolation, Computer methods in applied mechanics and engineering, vol.19, pp. 59-98.
- LEPILLER M., MONDAIN P.H., 1986, Les traçages artificiels en hydrogéologie karstique, mise en oeuvre et interprétation, Hydrogéologie, n°1, pp. 33-52.
- LOUIS Cl., 1968, Etude des écoulements d'eau dans les roches fissurées et de leurs influences sur la stabilité des massifs rocheux, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur es sciences, Université de Karlsruhe, E.D.F., bulletin de direction des études et des recherches, série A, nucléaire, hydraulique, thermique, n°3, pp. 5-132.

MALOSZEWSKI P., ZUBER A., 1985, On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix, Journal of hydrology, 79, pp.333-358.

MARIOTTI A., LANDREAU A., 1986, Etude du transfert et de l'évolution des nitrates dans les aquifères au moyen du traçage isotopique naturel ^{15}N . Hydrogéologie, n°1, pp. 77-86.

MARLE C., 1978, Les écoulements polyphasiques en milieu poreux, cours de production de l'Institut Français du Pétrole, Technip., 300 p.

MEUS Ph., 1993, Hydrogéologie d'un aquifère karstique du calcaire carbonifère en Belgique (Néblon-Anthisnes). Apport des traçages à la connaissance des milieux fissurés et karstifiés. Thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en sciences, Université de Liège.

MILLER J.D., ALLMAN D.W., 1986, Dual permeability modeling of flow in a fractured geothermal reservoir, proceedings of the eleventh workshop on geothermal reservoir engineering, rep.SSPTR93, Stanford University, pp. 77-84.

MOLINARI J., 1976, Perspectives offertes par l'utilisation rationnelle des traceurs naturels et artificiels en hydrologie karstique. Commentaires de nombreux exemples récents de multitraçages, Annales sc., université de Besançon, deuxième colloque d'hydrologie en pays calcaire, fasc.25, série 3, pp. 275-306.

MOMIGNY J., 1984, Notes du cours de cinétique chimique, à l'usage des étudiants en deuxième candidature ingénieur, Université de Liège.

MONJOIE A., 1967, Observations nouvelles sur la nappe aquifère de la craie en Hesbaye (Belgique), Mémoires de l'Association Internationale des Hydrogéologues (I.A.H.), Istamboul.

MONJOIE A., 1981, Notes du cours d'hydrogéologie, Université de Liège.

MULLER O., 1990, Etude expérimentale et simulation numérique d'une pollution miscible dans un aquifère crayeux, travail de fin d'études présenté en vue de l'obtention du grade d'ingénieur civil géologue, Université de Liège.

MUNHOVEN S., 1992, Modélisation d'un aquifère salé, Travail de fin d'études présenté en vue de l'obtention du grade d'ingénieur civil des constructions, Université de Liège.

MUSY A., SOUTTER M., 1991, Physique du sol, Presses Polytechniques Romandes, 335 p.

* NEUMAN S.P., 1984, Adaptive eulerian-lagrangian finite element method for advection-dispersion, International journal for numerical methods in engineering, vol.20, pp. 321-337.

OGATA A., BANKS R.B., 1961, A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media, Fluid movement in earth materials, Geological Survey Professional Paper, U.S. government printing office, 7 p.

PATERA A.T., 1984, A spectral element method for fluid dynamics: Laminar flow in a channel expansion, Journal of computational physics, vol.54, pp. 468-488.

PLUMB O.A., WHITAKER S., 1988, Dispersion in heterogeneous porous media. 1, local volume averaging and large scale averaging, Water resources research, vol.24, n°7, pp. 913-926.

POREL G., 1988, Transfert de soluté en aquifère crayeux. Causes de modifications des résultats de traçages, thèse présentée en vue de l'obtention du grade de docteur en hydrogéologie, Université de Lille-Flandre-Artois.

RADU J.P., CHARLIER R., HALLET V., BOLLY P.Y., DASSARGUES A., MONJOIE A., 1987, Modélisation de la nappe aquifère de Hesbaye, rapport L.G.I.H.-M.S.M., n°HESB871 (non publié).

RAVEN K.G., NAVAKOWSKI K.S., LAPCEVIC P.A., 1988, Interpretation of field tracer tests of a single fracture using a transient solute storage model, Water resources research, vol.24, n°12, pp. 2019-2032.

RECORDON, 1979, Dynamique des eaux souterraines, notes de cours postgrade, Université de Neuchâtel.

REDDEL D.L., SUNADA D.K., 1970, Numerical simulation of dispersion in groundwater aquifers, Hydrology papers, Colorado State University, n°41, 79 p.

RENARD X., 1991, Simulation numérique d'un essai de traçage par la méthode des éléments finis et la méthode random-walk, travail de fin d'études présenté en vue de l'obtention du grade d'ingénieur civil géologue, Université de Liège.

RUBIN J., 1983, Transport of reacting solutes in porous media: relation between mathematical nature of the problem formulation and chemical nature of reactions, Water resources research, vol.19, n°5, pp. 1231-1252.

SAGAR B., RUNCHAL A., 1982, Permeability of fractured rocks: effect of fracture size and data uncertainties, Water resources research, vol.18, n°2, pp. 266-274.

SANCHEZ-VILA X., CARRERA J., 1992, Directional effects on convergent flow tracer tests, Tracer hydrology, A.A.Balkema, Rotterdam, pp. 407-414.

SANTALO L.A., 1976, Integral geometry and geometric probability, Addison Wesley.

SAUTY J.P., 1977, Contribution à l'identification des paramètres de dispersion dans les aquifères par interprétation des expériences de traçage, Ph.d. thesis, Université de Grenoble.

* SAUTY J.P., KINZELBACH W., 1988, On the identification of the parameters of groundwater mass transport, Groundwater flow and quality, E.Custodio et al.(editors), pp. 33-56.

SCHEIDEGGER A.E., 1961, General theory of dispersion in porous media, Journal of Geophysical resources, 66, pp 3273-3276.

SCHROEDER C., MONJOIE A., 1989, Caractéristiques mécaniques de craies du Crétacé supérieur, Journée Craie, Université de Lille.

STEVENSON I.L., 1964, Biochemistry of soils, in Chemistry of soils, Reynold Publishing Company, pp. 242-287.

SUDICKY E.A., 1989, The Laplace transform Galerkin technique: a time- continuous finite element theory and application to mass transport in groundwater, Water resources research, vol.25, pp.1833-1846.

SUDICKY E.A., MC LAREN R.G., 1992, The Laplace transform Galerkin technique for large scale simulation of mass transport in discretely fractured porous formations, Water resources research, vol.28, n°2, pp. 499-514.

TEZDUYAR T.E., PARK Y.J., 1986, Discontinuity capturing finite element formulations for non linear convection-diffusion-reaction equations, Computer methods in applied mechanics and engineering, vol.59, pp. 307-325.

THIERY D., SEGUIN J.J., 1986, Un modèle hydrologique global de transfert de nitrates dans un bassin versant (application aux sources de Provins et à la nappe de Beauce à Pithiviers), Hydrogéologie, n°1, pp 87-99.

TOUSSAINT Ch., 1986, Contribution au dosage ionométrique des nitrates dans les eaux, rapport de stage de l'école technique de chimie (Liège).

TYCHON B., GUIOT J., DEBBAUT V., VANDER BORGHT P., 1989, Transfert des nitrates dans un bassin hydrographique à vocation agricole du Sud-Luxembourg, documentation du Cebedeau, pub.VD/BT, 5 p.

UFFINK G.J.M., 1983, Modelling of dispersive solute transport with the random walk method, short courses notes, Université de Delft.

VALENTINI O., 1992, Essais de pompage et de traçage dans la craie fissurée (région de Hannut, Belgique), travail de diplôme présenté en vue de l'obtention du grade interuniversitaire en hydrologie et hydrogéologie.

VILLERMAUX J., VAN SWAAIJ W.P.M., 1969, Modèle représentatif de la distribution des temps de séjour dans un réacteur semi-infini à dispersion axiale avec zones stagnantes. Application à l'écoulement ruisselant dans des colonnes d'anneaux de Raschig,

Chem. eng. science, vol.24, pp. 1097-1111.

WANG H., EWING R.E., RUSSEL T.F., 1992, Eulerian-lagrangian localized adjoint methods for variable-coefficient convection-diffusion problems arising in groundwater applications, proceedings of the 9th international conference on computational methods in water resources, Vol.1, Numerical methods in water resources, Computational Mechanics Publications, pp 27-31.

WESTERINK J.J., SHEA D., 1989, Consistent higher degree Petrov-Galerkin methods for the solution of the transient convection-diffusion equation, International journal for numerical methods in engineering, vol.28, pp 1077-1101.

WILSON T.L., MILLER P.J., 1978, Two-dimensional plume in uniform ground water flow, proc. A.S.C.E., J. hydr. div., 104, HY 4, pp. 503-514.

YEH G.T., 1990, A lagrangian-eulerian method with zoomable hidden fine mesh approach to solving advection-dispersion equations, Water resources research, vol.26, n°6, pp.1133-1144.

YEH G.T., 1991, Application of hybrid lagrangian-eulerian finite element approach to contaminant transport, short courses notes, Pennstate University.

YOUNG L.C., 1984, A study of spatial approximations for simulating fluid displacements in petroleum reservoirs, Computer methods in applied mechanics and engineering, vol.47, pp. 3-46.

YU C.C., HEINRICH J.C., 1986, Petrov-Galerkin methods for the time dependent convective transport equation, International journal for numerical methods in engineering, vol.23, pp.833-901.

YU C.C., HEINRICH J.C., 1987, Petrov-Galerkin methods for multidimensional time dependent convective-diffusion equations, International journal for numerical methods in engineering, vol.24, pp.2201-2215.

ZIENKIEWICZ W., 1990, The finite element method, Mac Graw Hill, London, 785 p.

Environmental health criteria n°5, 1978 Geneva, Nitrates, nitrites, and n-nitroso-compounds, World Health Organization publications, 107 p.

Journal officiel des communautés européennes, Directive du conseil du 15 juillet 1980 relative à la qualité des eaux destinées à la consommation humaine.

Moniteur belge, Arrêté royal du 27 avril 1984 relatif à la qualité de l'eau distribuée par le réseau.

Transport phenomena in different aquifers (investigations 1987-1992) edited by the Association of Tracer Hydrology (A.T.H.)

La circulation se fait alors par ces chemins préférentiels moins distordus et le reste de la porosité est atteint de manière secondaire par la contamination (processus de diffusion).

- la calibration obtenue pour la carotte n°3 est moins satisfaisante. On peut justifier ce résultat en argumentant que les points expérimentaux correspondent à la quantité totale de nitrates contenus dans l'éprouvette alors que le modèle reprend uniquement la fraction mobile. Lorsqu'on sait que l'effet d'eau immobile est surtout important en début d'expérience (lorsque θ_{im} n'est pas encore contaminé), on comprend que cet essai soit moins bien calibré. Il se peut aussi que cette éprouvette soit légèrement microfissurée (comme nous l'avons mentionné précédemment) et qu'elle ait un comportement intermédiaire entre 5 et 6. Le second jeu de paramètres donne en effet, pour cet échantillon, une calibration moins bonne dans l'ensemble mais meilleure pour les premiers points expérimentaux.

Quoiqu'il en soit, nos calibrations sont tout aussi satisfaisantes que celles obtenues en considérant un transport purement dispersif. En outre, les paramètres obtenus sont plus représentatifs des phénomènes observés.

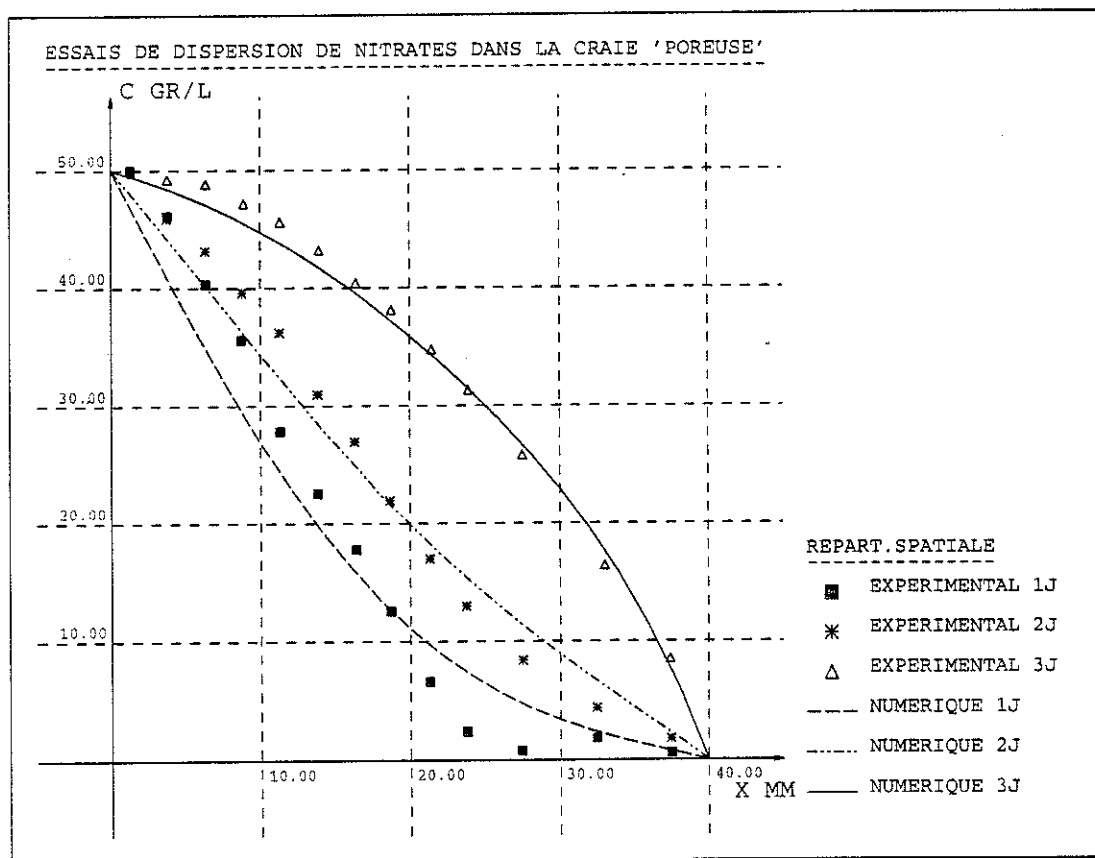


figure III.23: résultats de la calibration des tests de dispersion sur craie poreuse ($i = 36\%$, durées croissantes)

Les essais à gradients croissants de hauteur piézométrique (carottes n° 1, 2, 3 et 4) ont également été modélisés. Les paramètres obtenus sont répertoriés au tableau III.5.

n°test	α_{da}^* (s ⁻¹)	θ_{im} (%)	θ_m (%)	v_a (m/s)	a_L (mm)	D_{ma} (m ² /s)
1	$4.0 \cdot 10^{-6}$	10	12	$2.1 \cdot 10^{-8}$	30	$4.9 \cdot 10^{-10}$
2	$4.0 \cdot 10^{-6}$	16	15	$3.8 \cdot 10^{-8}$	30	$4.9 \cdot 10^{-10}$
3	$4.0 \cdot 10^{-6}$	10	15	$4.9 \cdot 10^{-8}$	30	$4.9 \cdot 10^{-10}$
4	$4.0 \cdot 10^{-6}$	10	13	$1.3 \cdot 10^{-7}$	15	$4.9 \cdot 10^{-10}$

tableau III.5: paramètres de transport obtenus par la seconde calibration des essais à gradients croissants.

L'effet résultant de cet accroissement d'infiltration sur la courbe de concentration modélisée est illustrée figure III.24a. Il est du même ordre de grandeur que celui qui est observé sur les résultats expérimentaux (figure III.21a). Ces deux diagrammes ne sont pas facilement superposables. On pourrait améliorer la calibration en considérant une dispersivité apparente a_a nettement plus faible (environ 3 mm) et un effet d'eau immobile nul ($\alpha_{da} = 0s^{-1}$). On obtient alors, par le modèle, l'allure plus sigmoïdale de la courbe expérimentale (modèle 2 - figure III.24b). Mais, les paramètres ainsi obtenus sont difficilement acceptables (forte convection sans effet d'eau immobile). Nous préférons donc l'interprétation correspondant au tableau III.5 (modèle 1 - figure III.24b).

III.3.c) Tentative de mise en évidence de l'adsorption sur la matrice poreuse.

Les expériences que nous avons relatées jusqu'à présent n'ont pas permis de mettre en évidence un effet d'adsorption. Ceci ne signifie pas pour autant que le phénomène n'existe pas. Pour trancher cette question, il importait de faire les essais un peu plus particuliers qui sont présentés dans cette section.

III.3.c.1) Mode opératoire.

Pour que le processus d'adsorption puisse s'exprimer de manière optimale, nous avons choisie saturer (sous vide) les éprouvettes de craie poreuse avec la solution polluante ($c_0 = 50$ g/l de nitrate ou d'iodure) et de laisser reposer l'ensemble pendant une période de 5 mois. Une fois ce délai passé, les éprouvettes entières sont rapidement lixiviées en cellule triaxiale avec un gradient de hauteur piézométrique élevé (≈ 2500), mais constant. Les solutions de lixiviations sont récoltées et dosées par l'électrode spécifique. L'éprouvette est récupérée, séchée, et broyée. L'extraction du soluté pouvant encore subsister dans la matrice solide se fait par lessivage prolongé de la poudre de calcite obtenue. Cette façon de procéder permet de mesurer la perméabilité de l'échantillon testé et de faire un bilan en polluant. De plus, le fait de travailler avec de hauts gradients confère à l'éprouvette une porosité efficace plus grande (environ 35 %) et l'effet d'eau immobile devient nettement moins important.

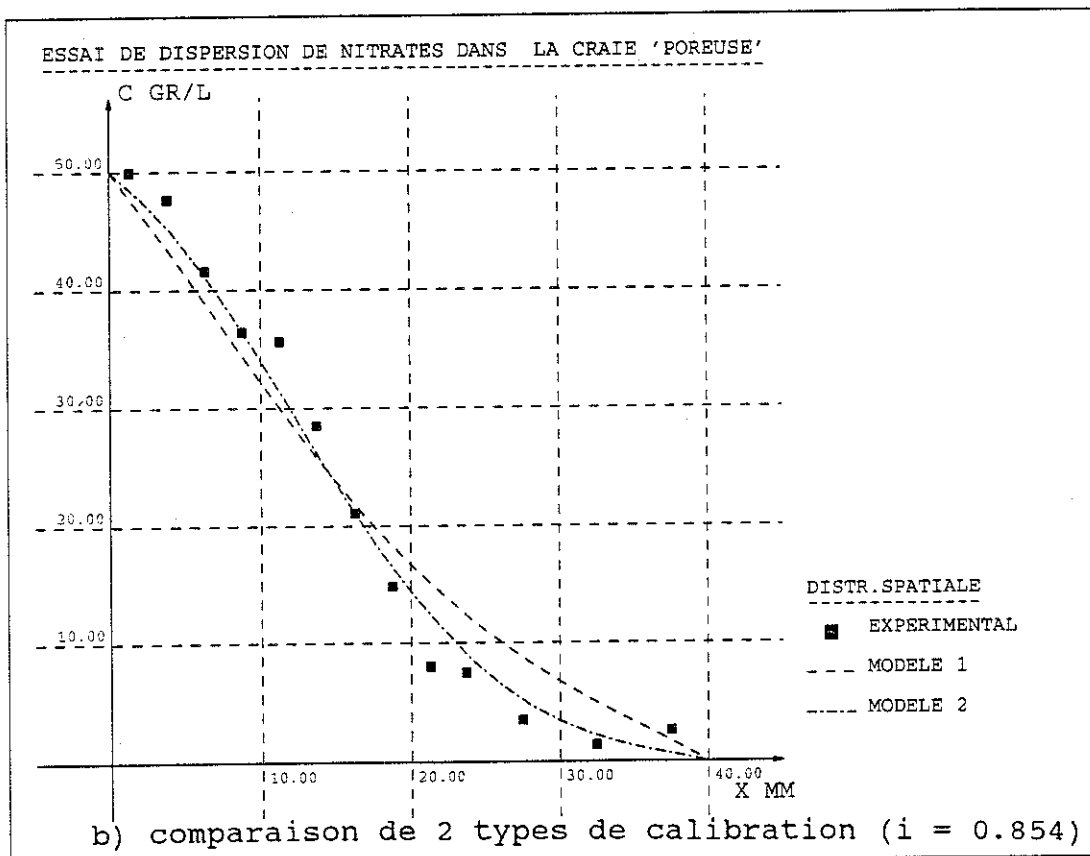
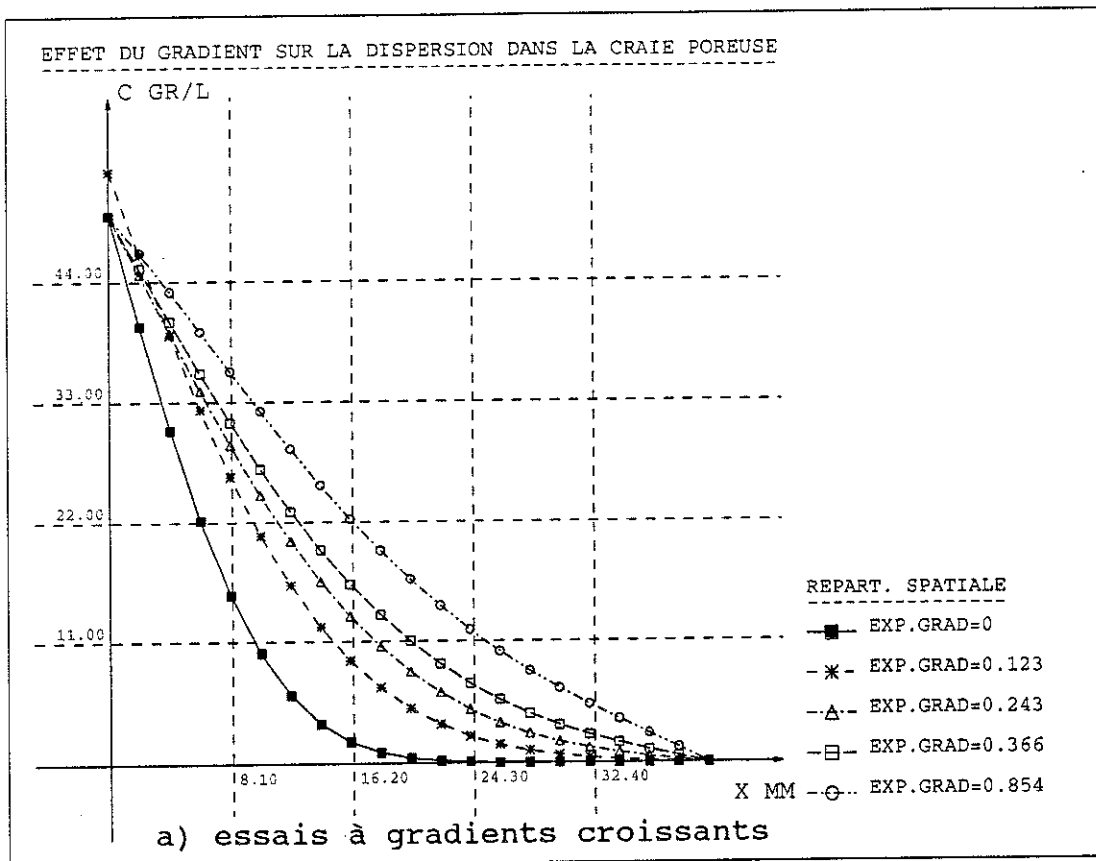


figure III.24: résultats de la calibration des tests de dispersion sur craie poreuse (durée = 1 j.)

III.3.c.2) Présentation des résultats.

Nous présentons ici les résultats de 4 lixiviations (2 pour les iodures ²⁹ et 2 pour les nitrates) sous forme de tableaux (III.6 à III.9) indiquant les débits Q et les vitesses de Darcy u pour les solutions récoltées, les concentrations moyennes \bar{c}_m de ces dernières, et la masse ΔM correspondant à la quantité de soluté extrait recueilli. La masse de polluant DM subsistant dans l'éprouvette est également donnée ainsi que la masse M_{in} initialement présente à saturation, la concentration c_o de la solution saturante, la durée Δt de la lixiviation, et le gradient i imposé. Enfin, la porosité totale n et la perméabilité K de l'éprouvette sont mentionnées.

n° ech.d'eau	Q (m ³ /s)	u (m/s)	\bar{c}_m (ppm)	ΔM (g)
1	2.56 10 ⁻⁸	6.12 10 ⁻⁵	18500	3.70 10 ⁻¹
2	2.35 10 ⁻⁸	5.56 10 ⁻⁵	1233	2.47 10 ⁻²
3	2.38 10 ⁻⁸	5.63 10 ⁻⁵	104	2.08 10 ⁻³
4	2.78 10 ⁻⁸	6.57 10 ⁻⁵	13	2.60 10 ⁻⁴
5	2.08 10 ⁻⁸	4.92 10 ⁻⁵	1	2.00 10 ⁻⁵

tableau III.6: résultats de la lixiviation n°1 (iodures, craie poreuse)

$$M_{out} = \Sigma \Delta M = 3.971 \cdot 10^{-1} \text{g}$$

$$DM = 0 \text{ g}$$

$$M_{in} = 3.970 \cdot 10^{-1} \text{g}$$

$$c_o = 52 \cdot 10^3 \text{ ppm}$$

$$\Delta t = 1\text{h } 05'48''$$

$$i = 3240$$

$$n = 44.1 \%$$

$$K = 1.78 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}$$

n° ech.d'eau	Q (m ³ /s)	u (m/s)	\bar{c}_m (ppm)	ΔM (g)
1	2.86 10 ⁻⁸	6.49 10 ⁻⁵	19430	3.89 10 ⁻¹
2	2.63 10 ⁻⁸	5.96 10 ⁻⁵	1169	2.34 10 ⁻²
3	2.70 10 ⁻⁸	6.12 10 ⁻⁵	105	2.10 10 ⁻³
4	2.78 10 ⁻⁸	6.30 10 ⁻⁵	9	1.80 10 ⁻⁴
5	=====	=====	2	4.00 10 ⁻⁵

tableau III.7: résultats de la lixiviation n°2 (iodures, craie poreuse)

$$M_{out} = \Sigma \Delta M = 4.15 \cdot 10^{-1} \text{g}$$

$$DM = 0 \text{ g}$$

$$M_{in} = 4.170 \cdot 10^{-1} \text{g}$$

$$c_o = 52 \cdot 10^3 \text{ ppm}$$

$$\Delta t = 1\text{h } 00'50''$$

$$i = 3246$$

$$n = 45.2 \%$$

$$K = 1.92 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}$$

²⁹ les iodures sont envisagés parallèlement aux nitrates pour déterminer la sélectivité du processus d'adsorption.

n° ech.d'eau	Q (m ³ /s)	u (m/s)	\bar{c}_m (ppm)	ΔM (g)
1	1.62 10 ⁻⁸	3.77 10 ⁻⁵	19120	3.83 10 ⁻¹
2	1.65 10 ⁻⁸	3.84 10 ⁻⁵	860	1.72 10 ⁻²
3	1.67 10 ⁻⁸	3.88 10 ⁻⁵	123	2.47 10 ⁻³
4	1.55 10 ⁻⁸	3.60 10 ⁻⁵	25	5.00 10 ⁻⁴
5	1.51 10 ⁻⁸	3.51 10 ⁻⁵	9	1.80 10 ⁻⁴

tableau III.8: résultats de la lixiviation n°3
(nitrates, craie poreuse)

$$\begin{aligned}
 M_{out} &= \sum \Delta M = 4.03 \cdot 10^{-1} \text{ g} \\
 DM &= 3.3 \cdot 10^{-3} \text{ g} \\
 M_{in} &= 4.140 \cdot 10^{-1} \text{ g} \\
 c_o &= 56 \cdot 10^3 \text{ ppm} \\
 \Delta t &= 1\text{h } 44' 19'' \\
 i &= 2492 \\
 n &= 40.8 \% \\
 K &= 1.49 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}
 \end{aligned}$$

n° ech.d'eau	Q (m ³ /s)	u (m/s)	\bar{c}_m (ppm)	ΔM (g)
1	4.61 10 ⁻⁸	1.02 10 ⁻⁴	17840	3.57 10 ⁻¹
2	4.05 10 ⁻⁸	9.00 10 ⁻⁵	2620	5.24 10 ⁻²
3	3.64 10 ⁻⁸	8.10 10 ⁻⁵	230	4.60 10 ⁻³
4	4.06 10 ⁻⁸	9.03 10 ⁻⁵	44	8.80 10 ⁻⁴
5	3.47 10 ⁻⁸	7.69 10 ⁻⁵	24	4.80 10 ⁻⁴

tableau III.9: résultats de la lixiviation n°4
(nitrates, craie poreuse)

$$\begin{aligned}
 M_{out} &= \sum \Delta M = 4.15 \cdot 10^{-1} \text{ g} \\
 DM &= 5.6 \cdot 10^{-3} \text{ g} \\
 M_{in} &= 4.310 \cdot 10^{-1} \text{ g} \\
 c_o &= 56 \cdot 10^3 \text{ ppm} \\
 \Delta t &= 0\text{h } 42' 26'' \\
 i &= 2480 \\
 n &= 41.4 \% \\
 K &= 3.55 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}
 \end{aligned}$$

En examinant ces tableaux, on peut tirer les conclusions suivantes:

- si on assimile DM à la quantité de polluant adsorbée de manière non réversible (hypothèse raisonnable), il est clair que la craie a un pouvoir d'adsorption "chimique" très faible pour les nitrates (de l'ordre du pour-cent de la masse totale) et nul pour les iodures;
- pour se prononcer en ce qui concerne l'adsorption réversible, il convient de modéliser les essais. Mais, l'évolution temporelle de la concentration n'est donnée que sous la forme d'un histogramme discret. C'est pourquoi nous effectuerons une régression à caractère exponentiel sur cet histogramme.

Ce type de fonction [$C_m \text{ reg} = K_0 + K_1 \cdot \exp(-K_2 \cdot t) + K_3 \cdot \exp(-K_4 \cdot t)$] semble bien correspondre à la physique du phénomène de transport à 2 vitesses (première exponentielle pour la convection et la dispersion, seconde exponentielle pour l'effet d'eau immobile). Le type de régression ainsi obtenu est illustré figure III.25.

Le tableau III.10 fournit les coefficients de la régression. Signalons que nous nous sommes assurés qu'elle est conservative (l'intégrale $A = \int c \cdot dt$ est inchangée).

Dt

n° lixiv.	K ₀	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄	A
1 (I ⁻)	0	1.7 10 ³	3.4 10 ⁻³	5.0 10 ⁴	3.3 10 ⁻³	1.6 10 ⁷
2 (I ⁻)	0	1.3 10 ⁴	3.5 10 ⁻³	3.9 10 ⁴	3.6 10 ⁻³	1.5 10 ⁷
3 (NO ₃ ⁻)	0	5.1 10 ⁴	1.6 10 ⁻⁴	5.6 10 ⁴	2.3 10 ⁻³	2.5 10 ⁷
4 (NO ₃ ⁻)	2.0 10 ¹	2.6 10 ⁴	4.0 10 ⁻³	3.0 10 ⁴	1.1 10 ⁻²	9.2 10 ⁶

tableau III.10: résultats de la régression des histogrammes de restitution.

III.3.c.3) Interprétations.

Nous admettrons que les concentrations régressées sont représentatives des expériences. Le système que nous considérons est celui qui correspond aux équations III.10. Etant donné une vitesse de Darcy nettement plus élevée, la méthode H.E.L.M. peut être utilisée pour modéliser ces expériences. Les éprouvettes seront discrétisées en 20 éléments et nous choisirons un pas de temps de 30 s ($Cr > 1$).

Les courbes ($c_m - t$) modélisées sont présentées figure III.26 pour les iodures, figure III.27 pour les nitrates. Le type de répartition spatiale qui y correspond est représenté figure III.28 pour la première lixiviation [I⁻(1)]. Les coefficients obtenus après calibration et l'aire sous la courbe modélisée sont donnés au tableau III.11.

Calibrer un modèle sur un histogramme possédant 3 points significatifs peut sembler audacieux. C'est pourquoi, ces coefficients doivent être considérés avec prudence. Toutefois, avec les vitesses de Darcy qui ont été mesurées, et en gardant une porosité efficace supérieure à 35 % et une dispersivité inférieure à 30 mm, il n'est pas possible d'obtenir un modèle de lixiviation suffisamment lent par rapport à l'histogramme expérimental. L'adsorption réversible semble bien être réelle et est représentée par des coefficients de retard de l'ordre de 3.

³⁰ La méthode F.U.P.G. peut également être utilisée avec un pas de temps plus petit. Une rapide vérification montre qu'on obtient alors des résultats identiques.

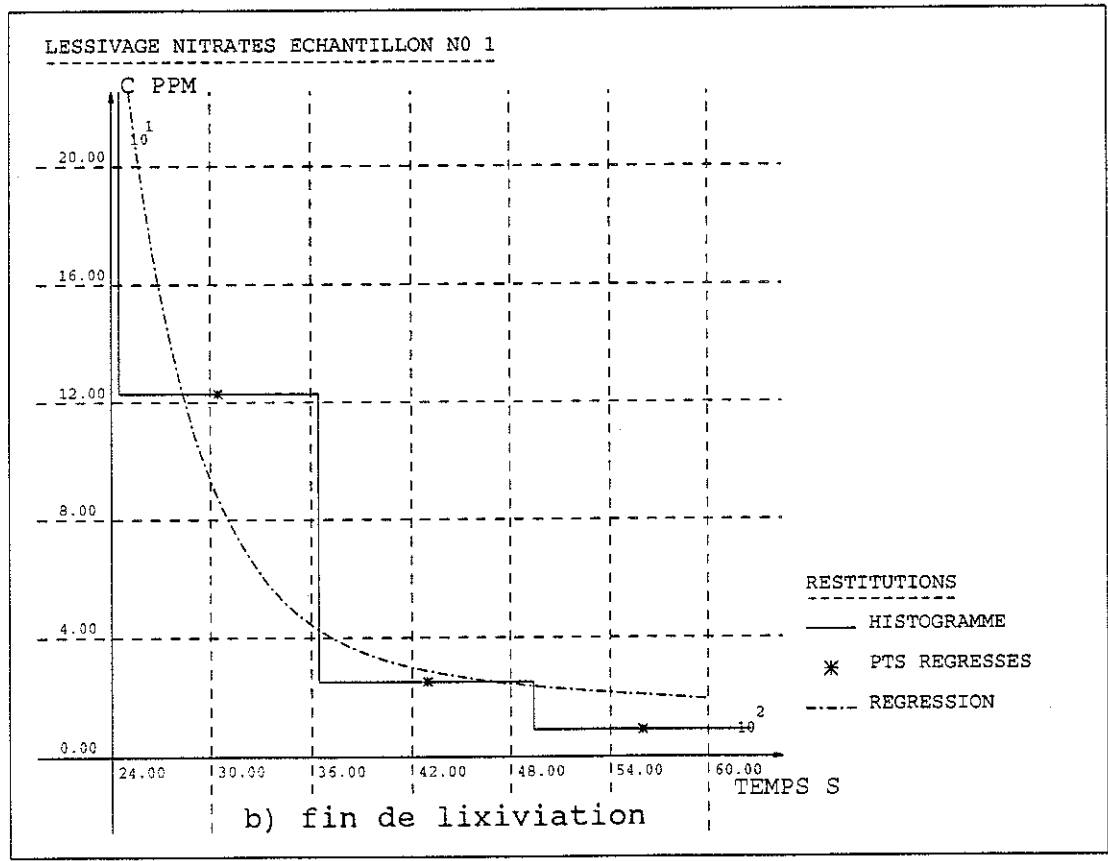
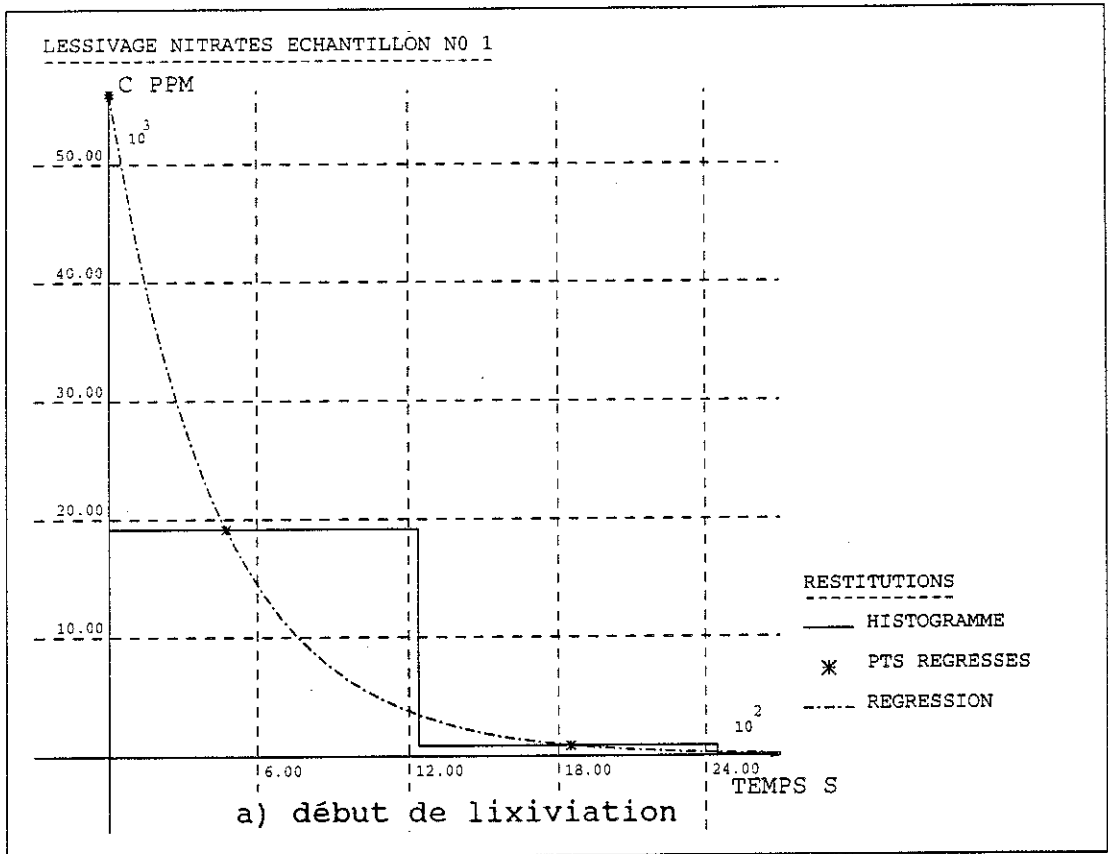


figure III.25: tests de lixiviation: exemple de régression de l'histogramme expérimental.

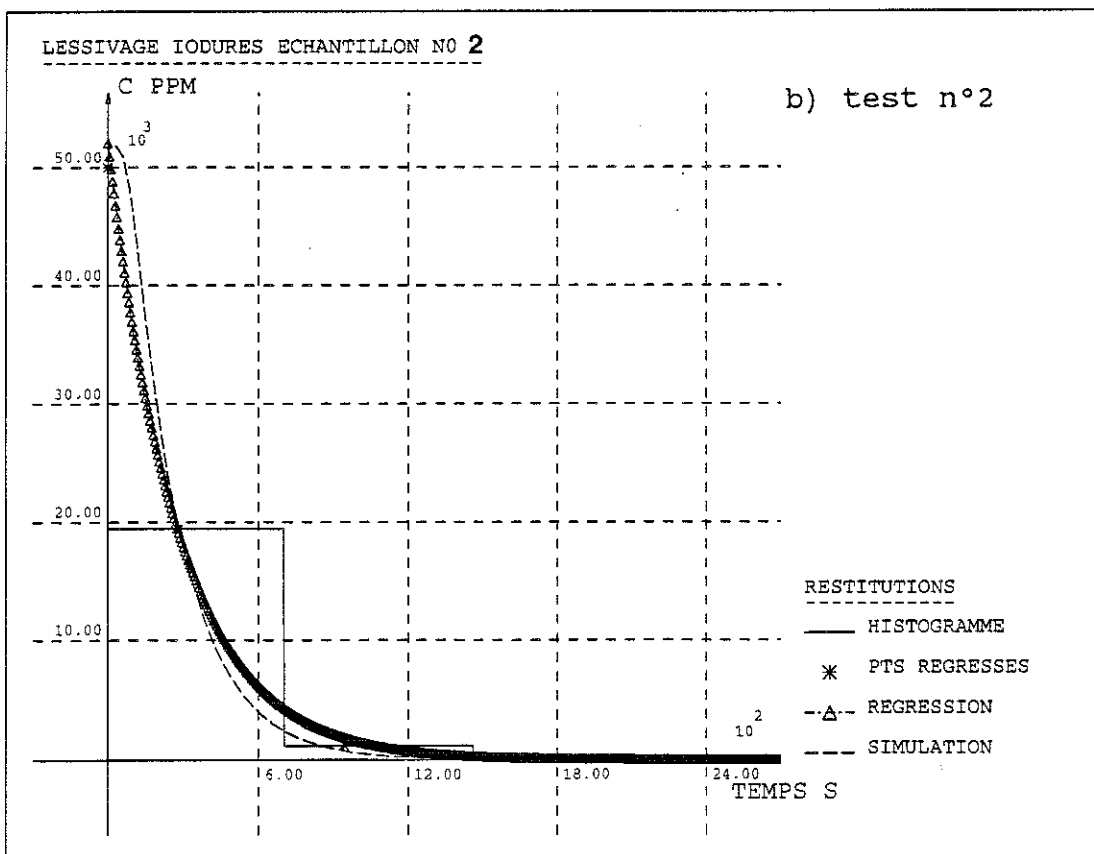
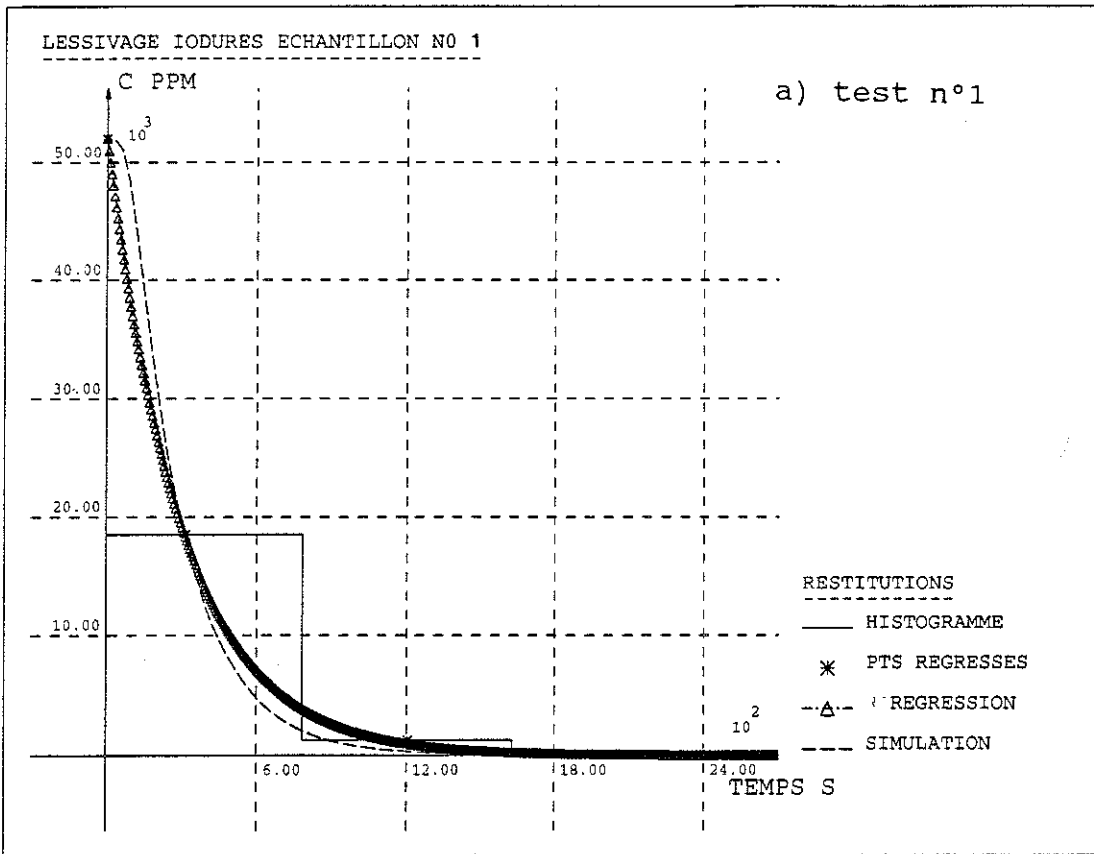


figure III.26: calibration des résultats des lixiviations: cas de l'iodure.

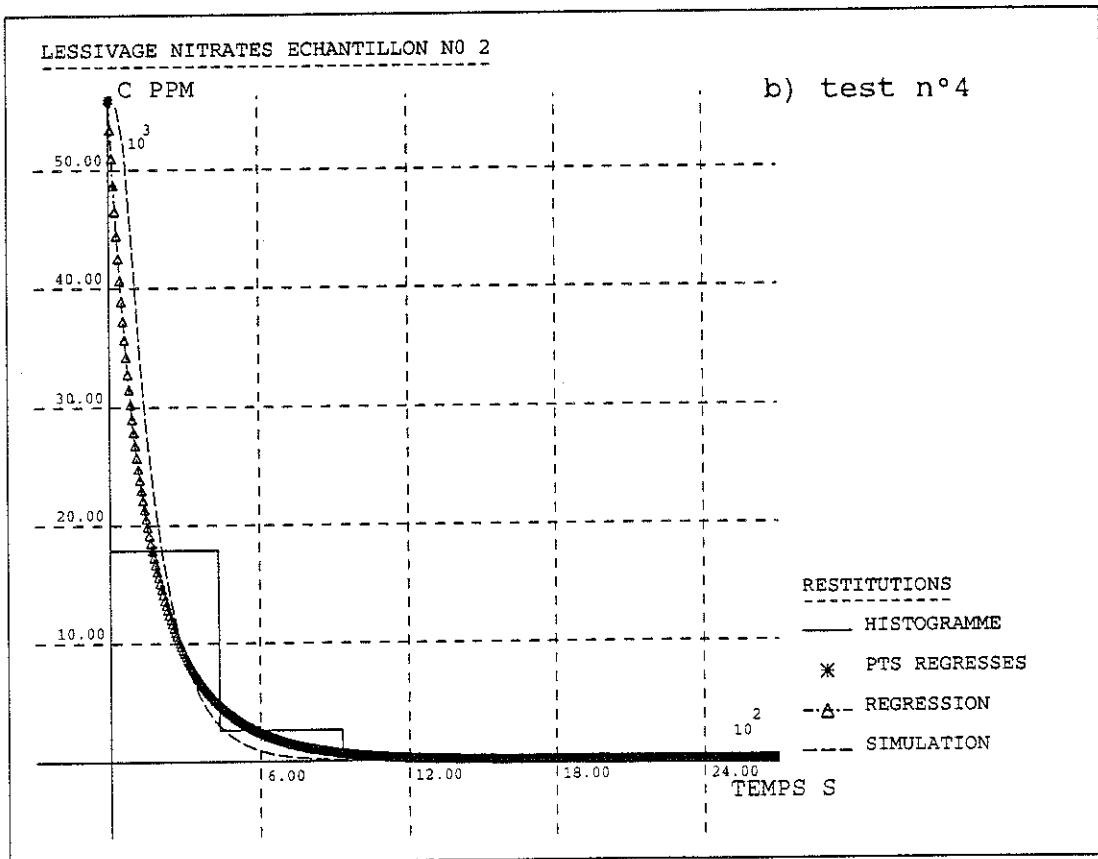
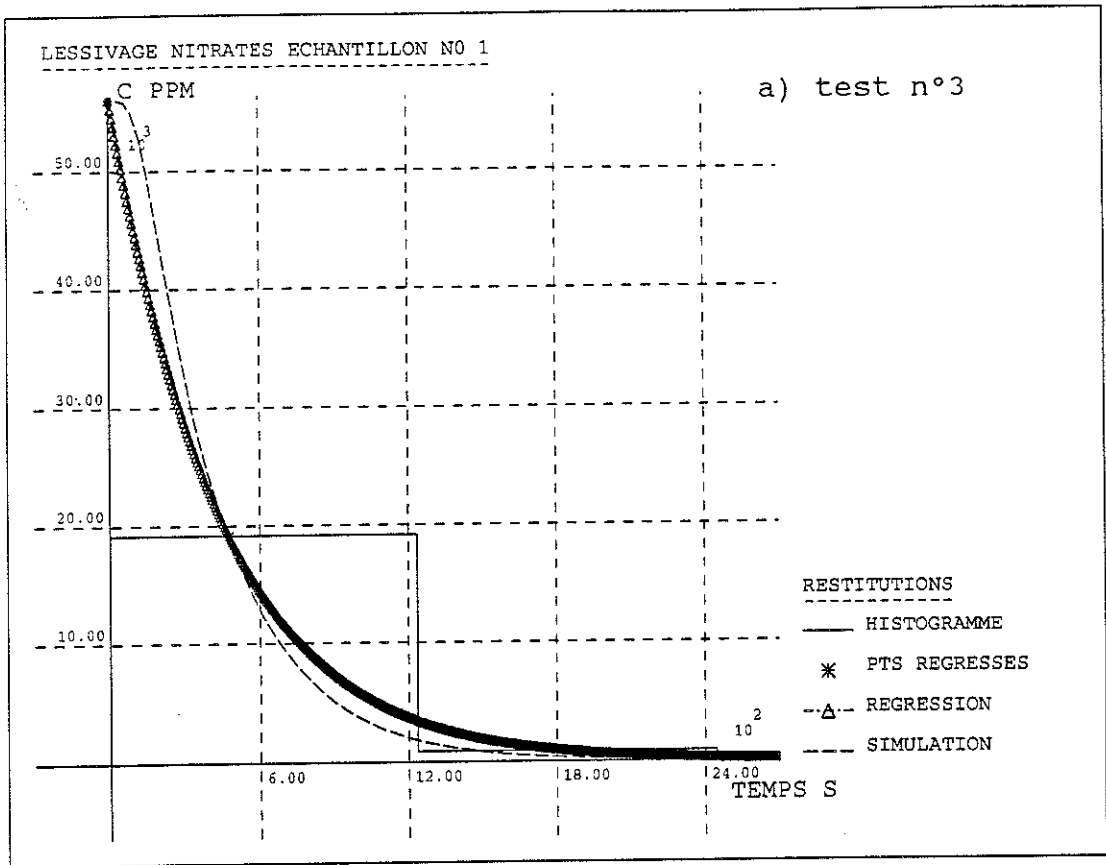


figure III.27: calibration des résultats des lixiviations: cas des nitrates.

paramètres hydrodispersifs				aire sous la courbe de restitution modélisée (g.s/m ³)
n° lixiv.	θ_m (%)	aL (mm)	D_m (m ² /s)	
1 (I ⁻)	39.0	40	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$1.4 \cdot 10^7$
2 (I ⁻)	37.0	40	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$1.3 \cdot 10^7$
3 (NO ₃ ⁻)	37.0	45	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$2.3 \cdot 10^7$
4 (NO ₃ ⁻)	36.5	50	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$8.8 \cdot 10^6$

paramètres d'eau immobile et d'adsorption				
n° lixiv.	θ_{im} (%)	R _{dim}	R _{dm}	α_d^* (s ⁻¹)
1 (I ⁻)	5.0	3.10	2.70	$1.2 \cdot 10^{-9}$
2 (I ⁻)	5.0	3.10	2.70	$1.2 \cdot 10^{-9}$
3 (NO ₃ ⁻)	5.0	3.45	3.00	$1.2 \cdot 10^{-9}$
4 (NO ₃ ⁻)	5.0	3.50	3.15	$1.2 \cdot 10^{-9}$

tableau III.11: paramètres de transport obtenus par la calibration des tests de lixiviation.

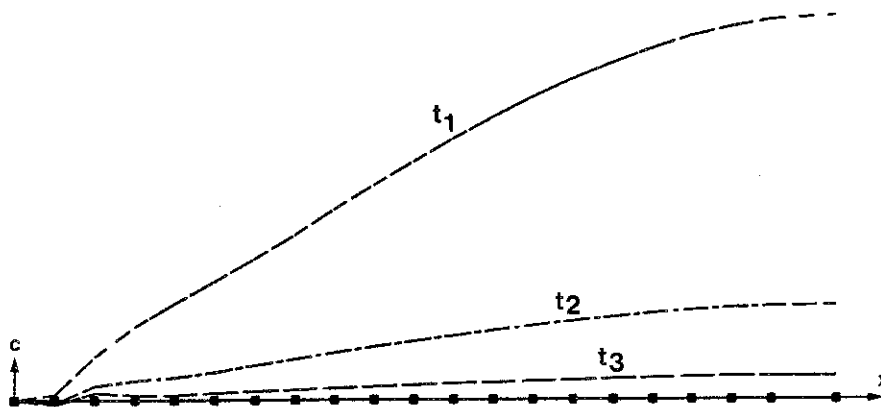


figure III.28: répartition spatiale lors des tests de lixiviation (test n°1).

Reprenons la définition des coefficients de retard:

$$R_{dm} = 1 + \theta_s / \theta_m \cdot \rho_s \cdot (1-p) \cdot K_d \quad (\text{III.12a})$$

$$R_{dim} = 1 + \theta_s / \theta_{im} \cdot \rho_s \cdot p \cdot K_d \quad (\text{III.12b})$$

Sachant que :

- $R_{dm} = 3.0$,
- $\rho_s = 2.65 \cdot 10^4 \text{ N/m}^3$,
- $\theta_m = 37.5 \%$,
- $R_{dim} = 3.5$,
- $\theta_s = 57.5 \%$,
- $\theta_{im} = 5.0 \%$

On obtient un système de 2 équations à 2 inconnues (p et K_d) dont la solution est:

$$p = 0.55$$

$$K_d = 1.49 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{N}$$

Extrapoler ces valeurs aux essais de diffusion et de dispersion est un pas délicat à franchir. En effet, les proportions d'eau mobile et immobile sont très différentes et, par conséquent, le rapport de leur surface de contact avec le solide peut changer radicalement. En outre, il semble que pour les essais de dispersion, seule une partie de l'eau immobile soit contaminée (le tiers environ). Ceci est compréhensible si on considère que l'eau immobile contaminée est celle qui se trouve à proximité des chemins préférentiels accessibles à l'eau en mouvement.

Pour cette raison, nous ne multiplierons pas les valeurs apparentes des paramètres obtenus (V_a , D_{ma} , α_{da}) par un coefficient de retard égal à 3 mais bien par une valeur plus petite (de l'ordre de 1.5 ou 2) qui correspond mieux aux proportions d'eaux mobile et immobile intervenant dans le transport à faible gradient de hauteur piézométrique.

Pour terminer, signalons encore que les faibles teneurs constatées dans les dernières solutions de lixiviation correspondent sans doute à l'effet d'eau immobile des 5 % de porosité non accessible à l'écoulement puisque le même palier de concentration est atteint par le modèle (figure III.29).

LESSIVAGE NITRATES ECHANTILLON NO 2

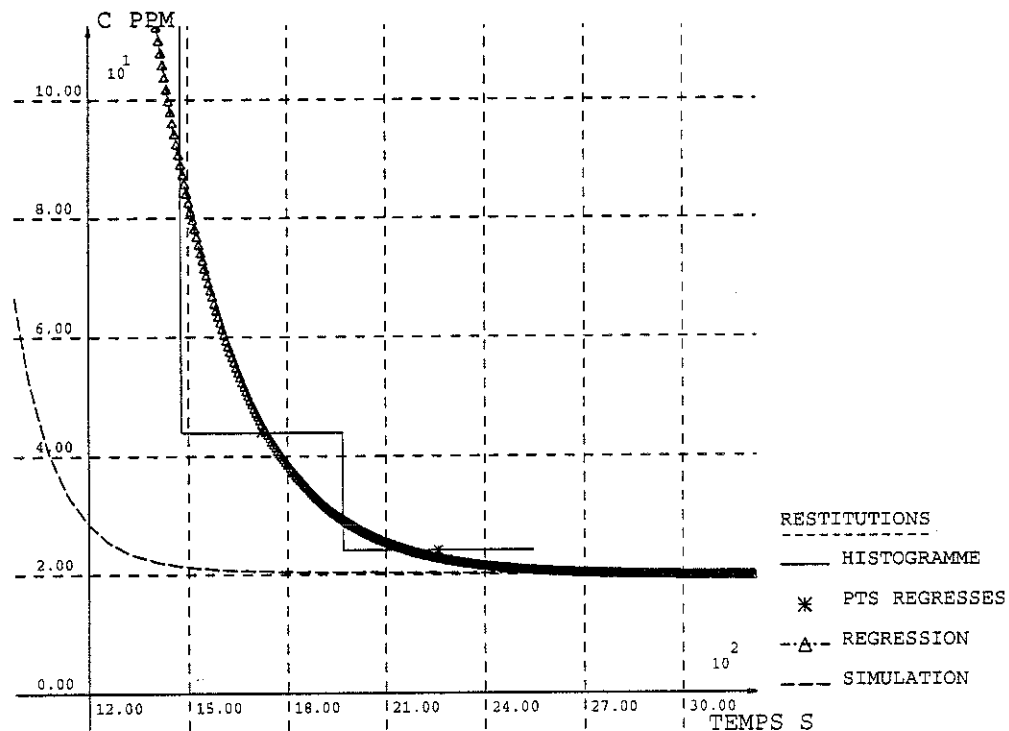


figure III.29: comparaison des teneurs en fin de lixiviation: modèle, régression, et histogramme expérimental

III.3.d) Tentative de globalisation du comportement de la craie "poreuse" en vue de quantifier son effet à l'échelle macroscopique (craie fissurée).

III.3.d.1) Introduction.

Grâce aux essais précédents, nous avons pu préciser le comportement des nitrates dans la craie "poreuse".

Sur base de la simulation de ces tests, nous distinguons deux jeux de coefficients de transport suivant que l'échantillon étudié est affecté ou non d'une microfissuration (tableau III.12).

paramètre	craie saine	craie microfissurée
K (m/s)	$2.0 \cdot 10^{-8}$	$2.7 \cdot 10^{-8}$
D_m (m^2/s)	$7.3 \cdot 10^{-10}$	$6.3 \cdot 10^{-10}$
T	0.92	0.79
a_L (m)	$3.0 \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$
α_d (s^{-1})	$6.0 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$
θ_m (%)	15	2
θ_{im} (%)	15	10
R _{dm}	1.5	1.3
R _{d_{im}}	1.7	1.5

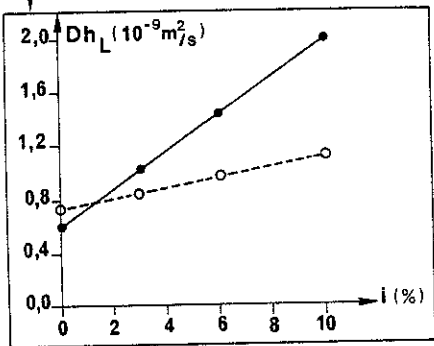
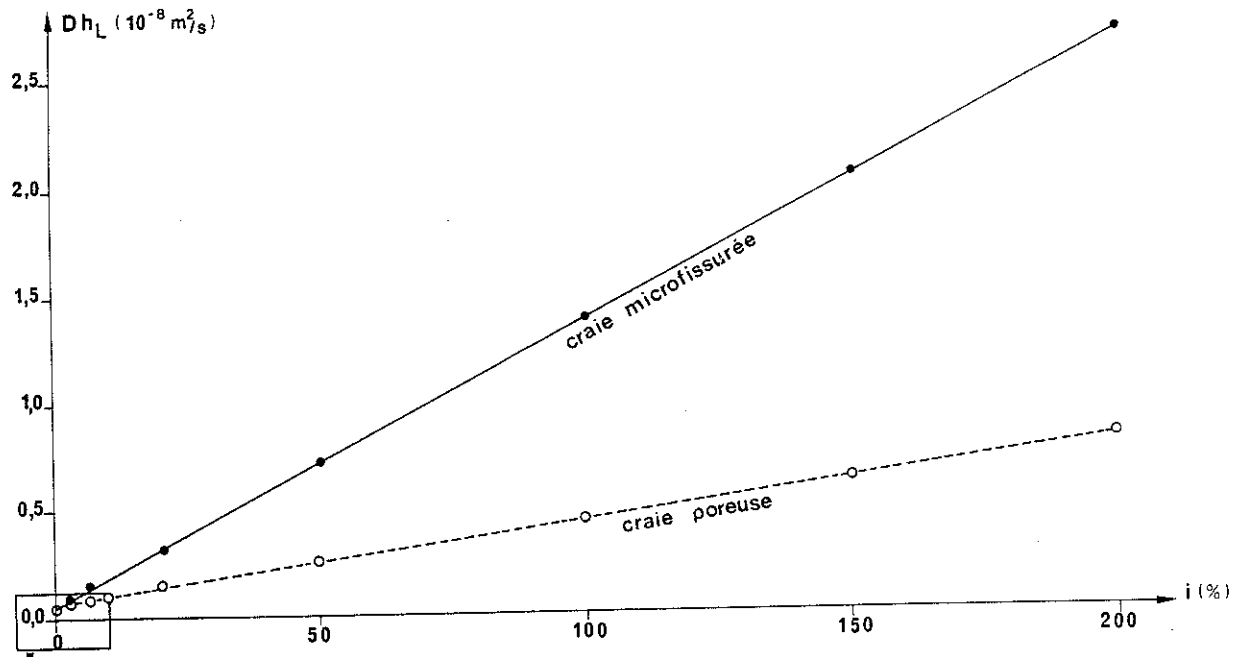
tableau III.12: paramètres régissant le transport des nitrates dans la craie "poreuse".

Lorsque nous envisageons des écoulements avec des gradients (i) croissants de hauteur piézométrique, la dispersion hydrodynamique déterminée à partir de ces coefficients (sur base de la relation $D_{hl} = D_m - a_L \cdot K \cdot i / \theta_m$) est représentée par la figure III.30. On remarque que la composante mécanique est plus importante pour la craie microfissurée. Ceci peut s'expliquer en considérant que la circulation du fluide se fait préférentiellement et plus rapidement par les microfissures. En conséquence, la porosité efficace déterminée (θ_m) est nettement plus faible que pour la craie saine, et elle a un sens radicalement différent. Cet argument explique aussi une dispersivité un peu plus faible. Par ailleurs, pour des gradients naturels (de l'ordre du % en Hesbaye), la vue de détail du graphique montre que la diffusion moléculaire joue un rôle non négligeable sur la dispersion hydrodynamique (pour $i = 3 \%$, D_m/D_{hl} vaut 86 % pour la craie saine et 61 % pour la craie microfissurée).

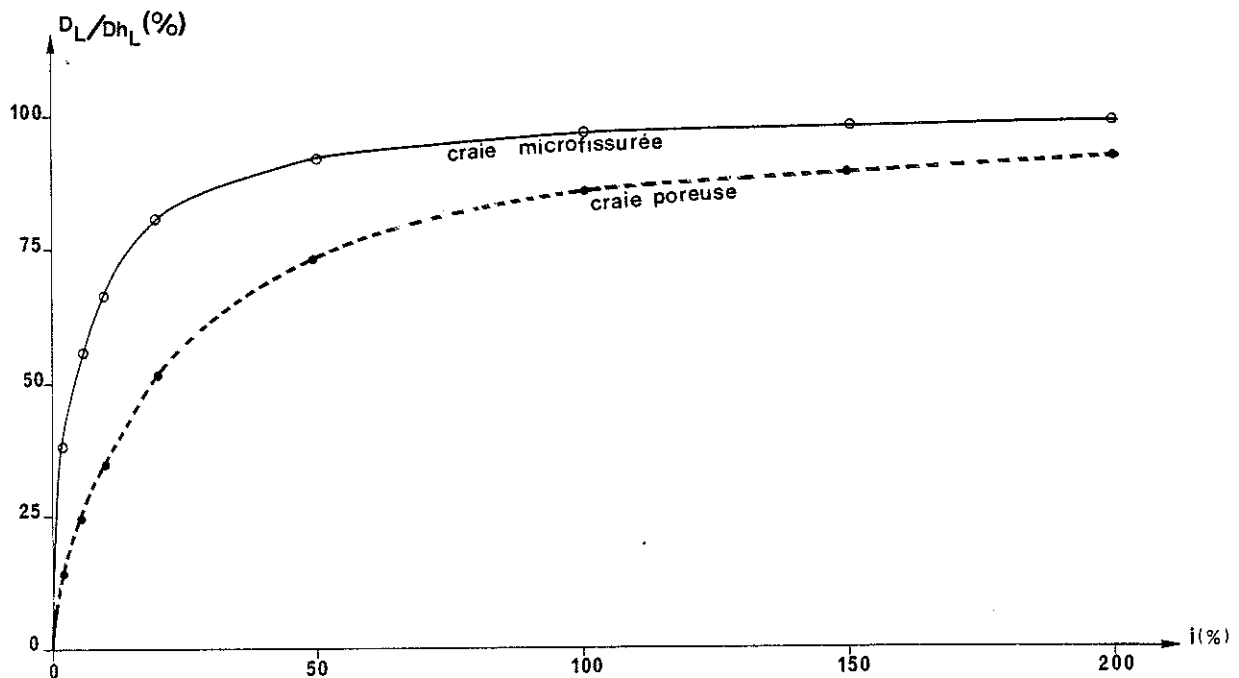
Envisageons maintenant un échantillon comportant des macrofissures. Nous avons vu que la perméabilité est alors au moins 1000 fois plus grande. En conséquence, même si les phénomènes que nous venons de décrire se produisent toujours, ils sont limités à de petits domaines (des blocs de matrice "poreuse") où la mobilité de l'eau est très faible comparativement à celle de l'eau des fissures. Il en résulte que, macroscopiquement, le transport dans les pores se visualise comme un effet d'eau immobile dont il convient de déterminer les caractéristiques. Cette opération sera appelée "globalisation" du comportement de la craie "poreuse".

III.3.d.2) Modèle théorique.

Isolons par la pensée un bloc de matrice poreuse circonscrit par 4 diaclases et 2 joints de stratification. Supposons en outre que l'eau de ces fissures soit à concentration constante c_0 et que le bloc initialement à concentration nulle soit progressivement pollué. Le comportement d'un tel système peut être décrit de deux manières.



a) graphe $Dh_L - i$



b) proportion représentée par la dispersion mécanique

figure III.30: évolution de la dispersion hydrodynamique en fonction du gradient de hauteur piézométrique.

1°) A l'échelle microscopique.

Une simulation numérique du problème peut être réalisée avec les paramètres du tableau III.12. Considérons un transport bidimensionnel "microscopique" représenté par le système suivant (axes de Frenet):

$$Rdm. \frac{\partial cm}{\partial t} + v_x. \frac{\partial cm}{\partial x} + v_y. \frac{\partial cm}{\partial y} - DhL. \frac{\partial^2 cm}{\partial x^2} - DhT. \frac{\partial^2 cm}{\partial y^2} + \alpha m. (cm - cim) = 0 \quad (III.13a)$$

$$Rdm. \frac{\partial cm}{\partial t} + \alpha im. (cim - cm) = 0 \quad (III.13b)$$

Il nous faut alors connaître, en plus des paramètres repris au tableau III.12, la dispersivité transversale de la craie "poreuse" α (estimée à $\alpha_l/20$) et l'orientation de la vitesse de convection par rapport au bloc.

Remarquons que l'utilisation d'un tel système implique que la vitesse de convection soit horizontale (c'est le cas) et que la distribution des concentrations soit homogène sur une verticale (ce qui correspond au cas où les joints de stratification sont fermés, les apports se font alors par 4 des faces du bloc et le transport est bidimensionnel).

2°) A l'échelle macroscopique.

Le comportement global est modélisé de façon très simple par l'équation de bilan macroscopique dans l'eau "immobile"

$$\frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \alpha_{im}. (C_{im} - c_m) = 0 \quad (III.14)$$

Lorsque c_m ne varie pas dans le temps ($c_m = c_0$ dans notre cas), cette équation est facilement intégrable et mène à une solution simple:

$$c_{im} = c_0. \{ 1 - \exp [- \alpha_{im}/(t-t_0)] \} \quad (III.15)$$

t_0 étant l'instant initial correspondant à l'imposition de la concentration c_0 dans les macrofissures.

Rappelons que $\alpha_{im} = \alpha_d^*/\theta_{im}$ et que $\theta_{im} = n_{im} + n_{eff}$. α_d^* peut donc être obtenu en comparant les deux modes de résolution. La procédure peut être décrite comme suit:

- on résoud numériquement le problème avec les équations microscopiques pour lesquelles les coefficients sont connus;
- on intègre le résultat sur le domaine:

$$C_{im} = (M_m + M_{im}) / (\theta_{im}. V_{bloc})$$

$$\begin{aligned} \text{avec } M_m &= \int_{V_{bloc}} cm. n_{eff}. dv \\ &= \sum_e \int_{V_e} cm. n_{eff}. dv \text{ (discrétisation en éléments } V_e) \\ &= n_{eff}. \sum_e \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \sum_i cm_i. N_i. \det J. d\xi. d\eta. \Delta l \\ &\quad \text{(passage aux coordonnées locales des éléments)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow M_m = n_{eff} \cdot \sum_e \Delta s_e \cdot \Delta l / 4 \cdot \sum_i c_{mi} \quad (\text{III.16a})$$

(pour des éléments à 4 noeuds, rectangulaires, parallèles aux axes globaux et dont le volume est $\Delta s_e \cdot \Delta l$)

$$\text{et, de la même manière, } M_{im} = n_{im} \cdot \sum_e \Delta s_e \cdot \Delta l / 4 \cdot \sum_i c_{mi} \quad (\text{III.16b})$$

- on identifie les résultats, pour divers instants t, avec ceux donnés par la relation III.15.

III.3.d.3) Présentation des résultats.

Dans un premier temps, trois simulations ont été effectuées sur des blocs carrés de 10 cm d'arête, avec un gradient de hauteur piézométrique égal à 3 % et orienté parallèlement au bloc.

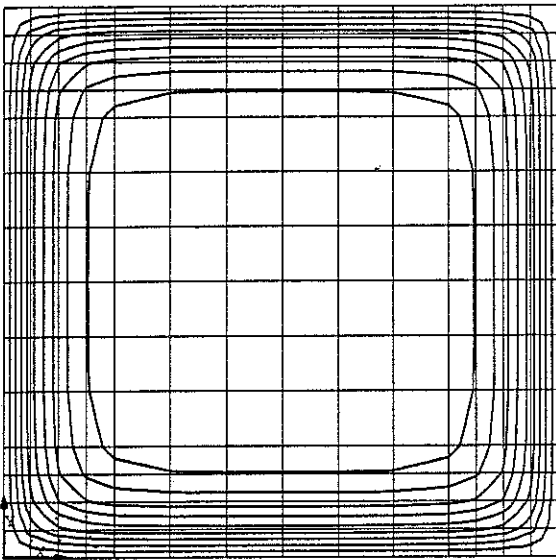
La première correspond au cas de la craie saine non microfissurée. Les paramètres du tableau III.12 n'y sont pas repris tels quels. En effet, en utilisant ces coefficients, des instabilités apparaissent (oscillations spatiales) et raffiner la discrétisation ne les amoindrit pas. Ceci peut se comprendre puisque le transport est à 86 % régi par la diffusion moléculaire, la distinction entre eau mobile et eau immobile devient très difficile et le problème numérique correspondant devient alors mal conditionné (voir les considérations sur le nombre de mobilité au chapitre II, p.150). Pour cette raison, la dispersion mécanique a été incorporée dans le coefficient de diffusion ($D_{ma} = D_{HL}$), la porosité accessible a été portée à 30 %, et l'effet direct de la convection a été supposé nul. Cette assimilation est objective en raison de la faible influence du courant convectif sur les tests de dispersion, lorsque la craie n'est pas microfissurée.

La seconde simulation correspond à une craie microfissurée pour laquelle l'effet d'eau immobile serait inexistant, la troisième représente le comportement complet de ce même matériau (avec les paramètres du tableau III.12 cette fois).

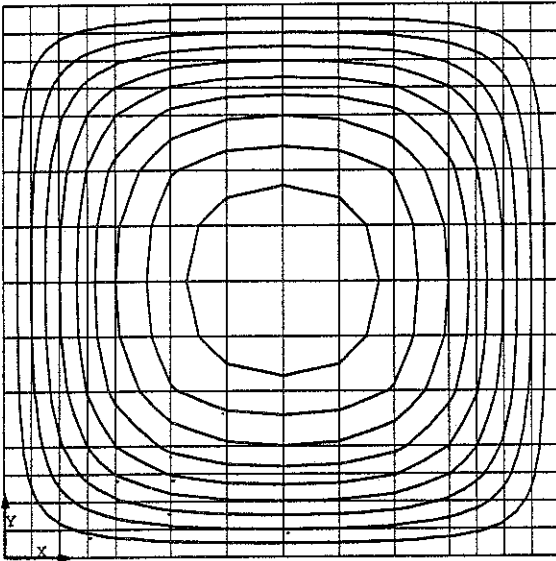
Pour ces 3 cas, une discrétisation spatiale 14 * 14 a été utilisée. Les mailles sur le pourtour du bloc ont été choisies plus fines pour éviter un problème analogue choc thermique (faible profondeur de pénétration du polluant lors des premiers pas). 15 pas de temps d'1 jour ont été calculés. La méthode F.U.P.G. (bien adaptée aux faibles nombres de Courant que nous avons rencontrés) a été choisie.

Les courbes d'égale concentration relative (c_m/c_0) dans le bloc ont été dessinées après 2, 5, et 15 jours pour chaque modèle (figures III.31 à III.33). La masse totale présente dans le bloc est fournie pour ces situations. Les cartes de flux ont également été dressées après le 5^{ème} pas (figure III.34).

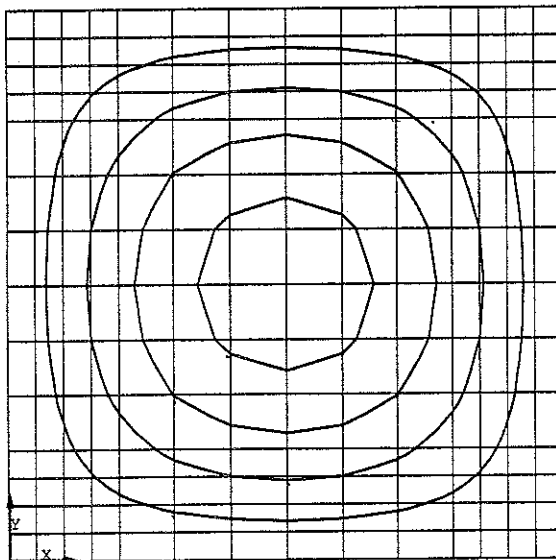
³¹ Δl est la distance entre les 2 joints de stratification, $V_{bloc} = \text{aire horizontale du bloc} * \Delta l = \Delta s_e \cdot \Delta l$.



a) situation après
2 jours

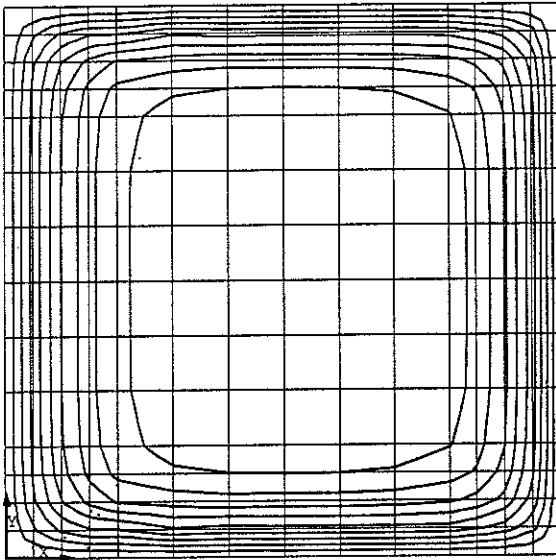


b) situation après
5 jours

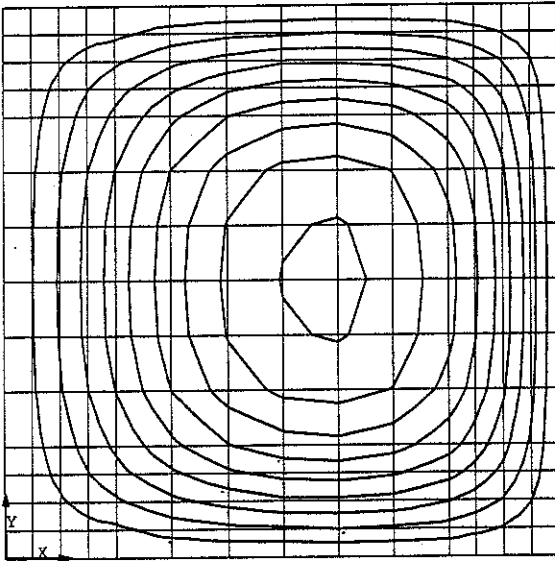


c) situation après
15 jours

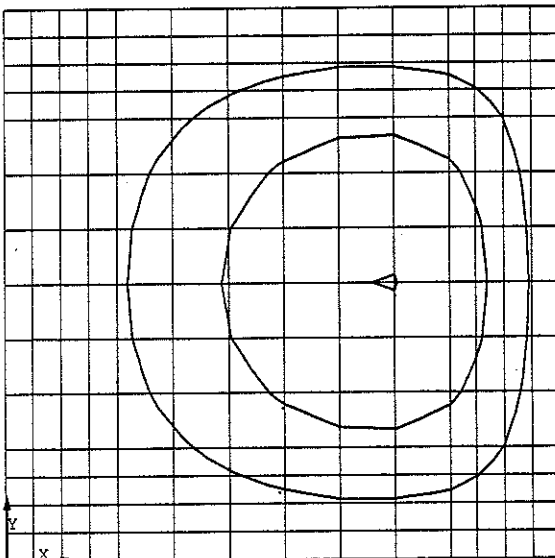
figure III.31: contamination d'un bloc matriciel non microfissuré de 10 cm d'arête (courbes d'égale concentration relative obtenues par simulation, $\Delta c_r = 0.1$)



a) situation après
2 jours

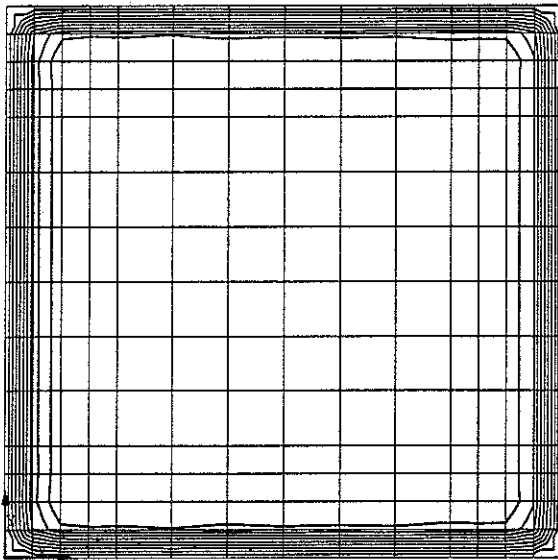


b) situation après
5 jours

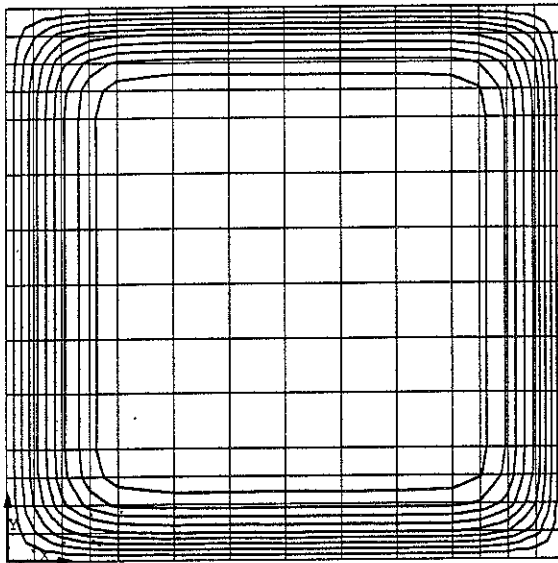


c) situation après
15 jours

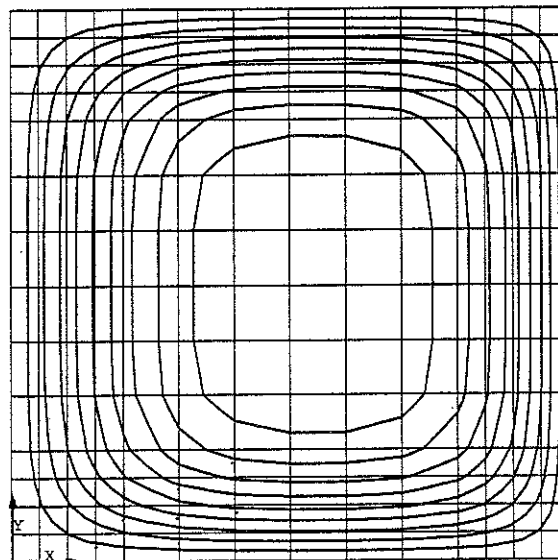
figure III.32: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 10 cm d'arête, sans effet d'eau immobile (courbes d'égale concentration relative obtenues par simulation, $\Delta c_r = 0.1$)



a) situation après
2 jours

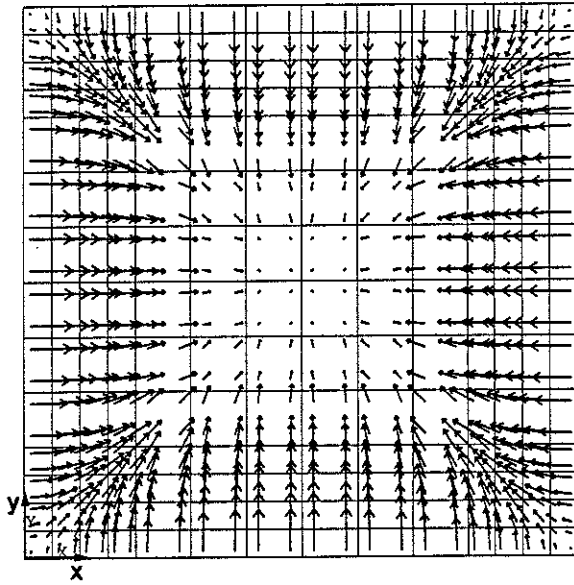


b) situation après
5 jours

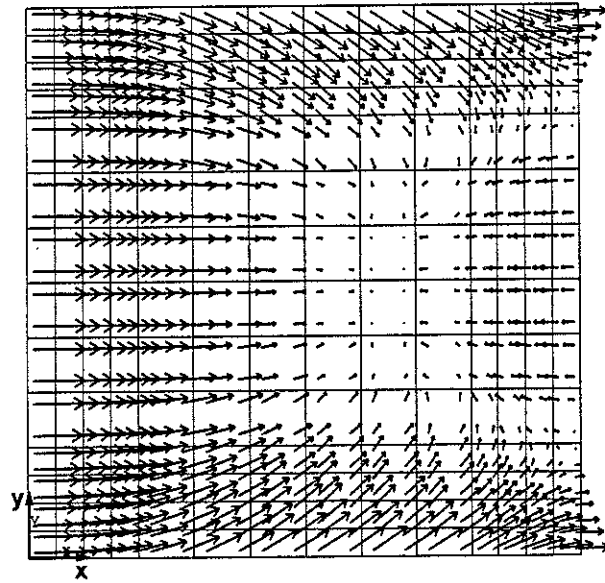


c) situation après
15 jours

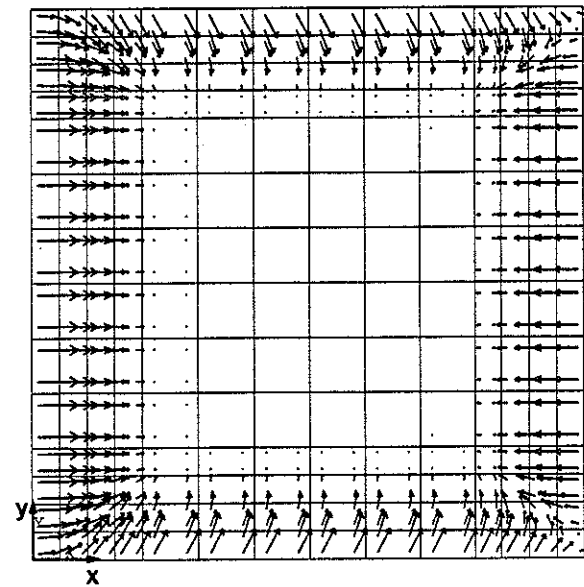
figure III.33: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 10 cm d'arête, avec effet d'eau immobile (courbes d'égale concentration relative obtenues par simulation, $\Delta c_r = 0.1$)



a) bloc non microfissuré



b) bloc microfissuré sans effet d'eau immobile



c) bloc microfissuré avec effet d'eau immobile

figure III.34: contamination d'un bloc matriciel de 10 cm d'arête, simulation, flux totaux après 5 jours, $f_{\max} = 9.6 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$.

En examinant ces graphiques, on peut constater que:

- les résultats sont parfaitement symétriques dans le cas purement "dispersif". Cette composante de transport suffit pour obtenir un taux de contamination assez élevé (80 % après 15 jours);
- la convection engendrée par la microfissuration a pour effet de dissymétriser le résultat. Elle permet à une certaine quantité de polluant de traverser le bloc sans être stockée dans celui-ci (voir carte de flux). La masse totale injectée dans le bloc est diminuée;
- l'effet d'eau immobile est radicalement opposé à celui de la convection. Il en résulte que la couche limite associée à la faible profondeur de pénétration du polluant persiste pendant toute la simulation et que la masse injectée est intermédiaire entre les deux premières situations.

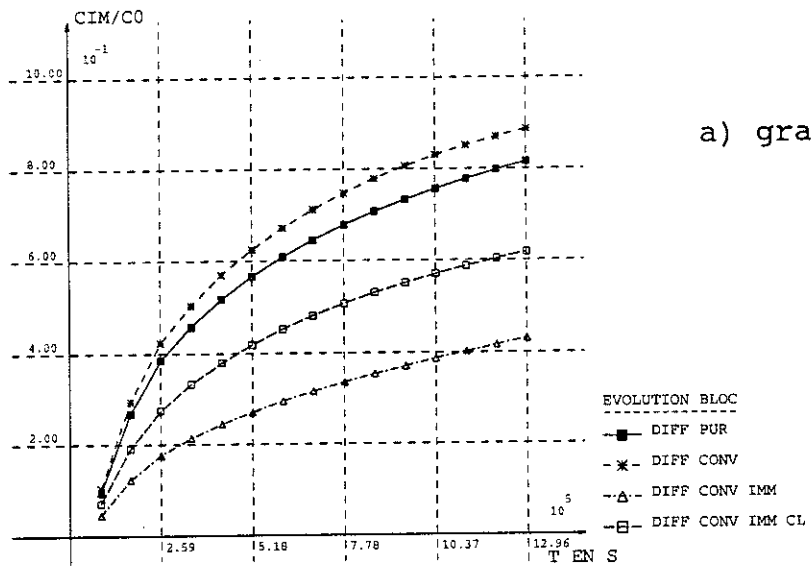
Les résultats sont exprimés de façon globale par la figure III.35. Y sont représentées l'évolution temporelle de la concentration globale relative c_{im}/c_0 et de la constante de transfert α_d qui en est déduite, ainsi que la relation entre ces 2 valeurs. Pour la dernière simulation, 2 globalisations ont été réalisées: la première en prenant en compte toute la zone, la seconde en considérant seulement la couche limite.

On remarque que, même si les concentrations sont élevées dans la craie microfissurée, les constantes de transfert α_d y sont nettement plus faibles (0.5 à $1.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ au lieu de 3.5 à $5.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$). Ceci résulte de l'accessibilité de la porosité au transfert (une quantité moins importante de l'eau des pores se trouve à concentration nominale en raison d'une cinétique à deux vitesses du transport).

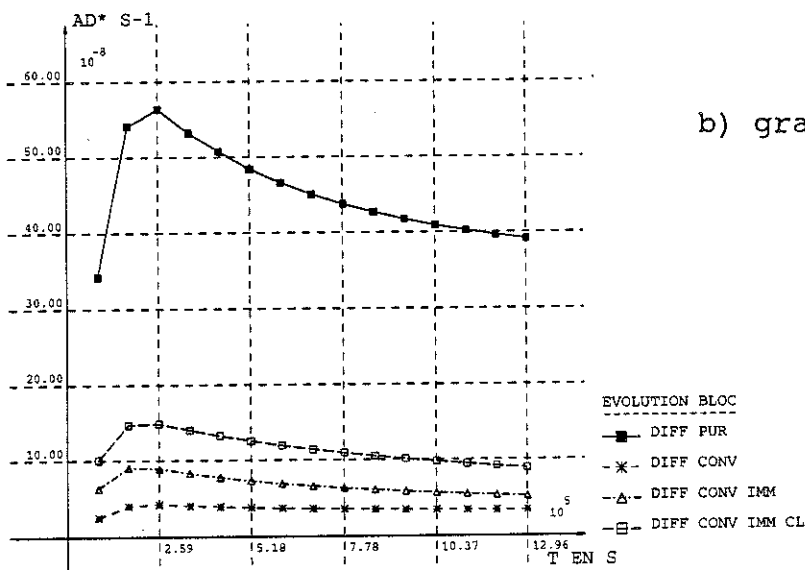
Enfin, remarquons que l'effet d'eau immobile résultant du transport dans le bloc matriciel présente une non linéarité (plus ou moins prononcée suivant les cas) caractérisée par un extremum dans le diagramme $\alpha_d - c_{im}/c_0$. Cette non linéarité qui peut jouer un rôle non négligeable sur le résultat n'est pas prise en compte dans le modèle et il nous faut utiliser une valeur moyenne.

Par la suite, nous avons voulu envisager l'effet de deux facteurs sur la valeur du paramètre global.

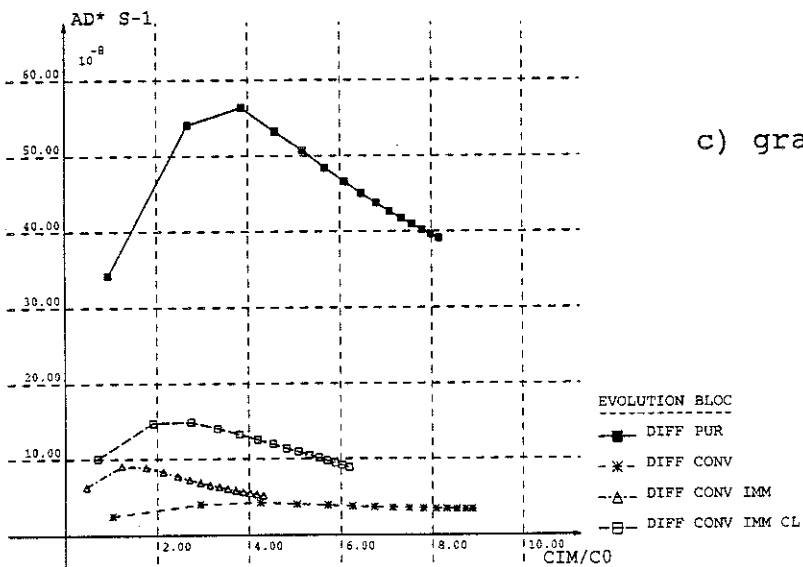
Le premier est l'orientation du courant convectif (pour les craies microfissurées). Deux simulations supplémentaires (une avec et une sans eau immobile) ont été effectuées en choisissant un gradient de valeur identique mais orienté à 45° par rapport aux faces du bloc. Si les "isoconcentrations" (figures III.36 et III.37) et les cartes de flux (figure III.38) sont nettement différentes, la globalisation aboutit à un résultat identique au pour-cent près. Il est réconfortant de voir que l'effet d'eau immobile équivalent au processus réel est indépendant de la direction de la sollicitation convective.



a) graphe c_r - temps

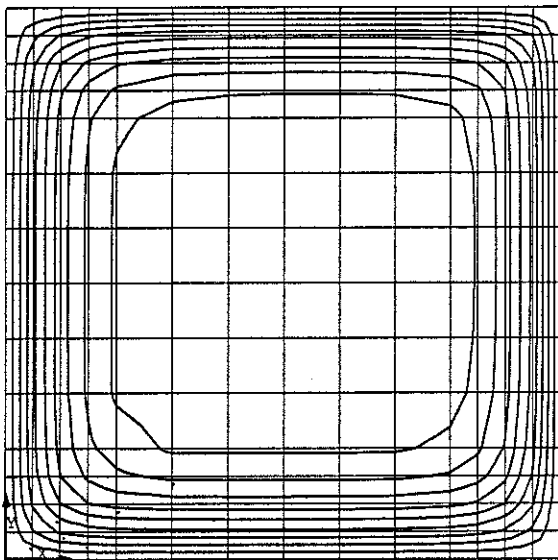


b) graphe α_d^* - temps

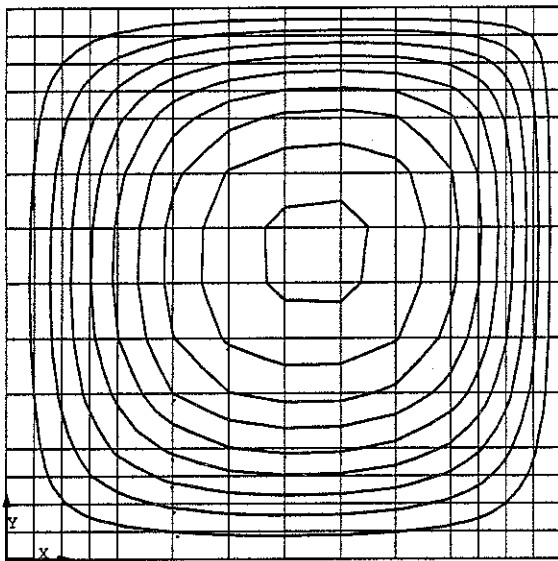


c) graphe α_d^* - c_r

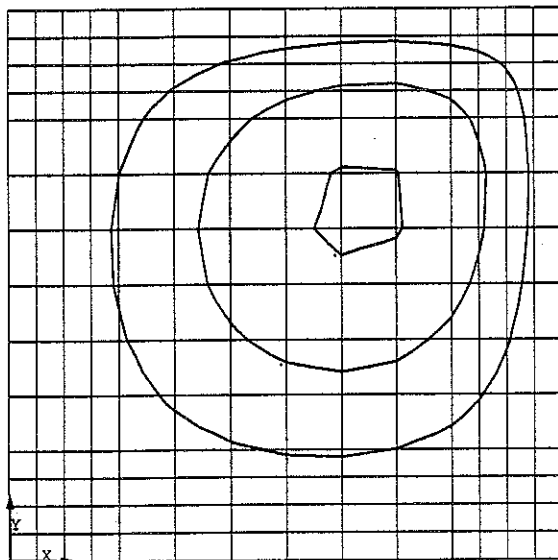
figure III.35: globalisation de la contamination de blocs matriciels (taille: 10 cm d'arête).



a) situation après
2 jours

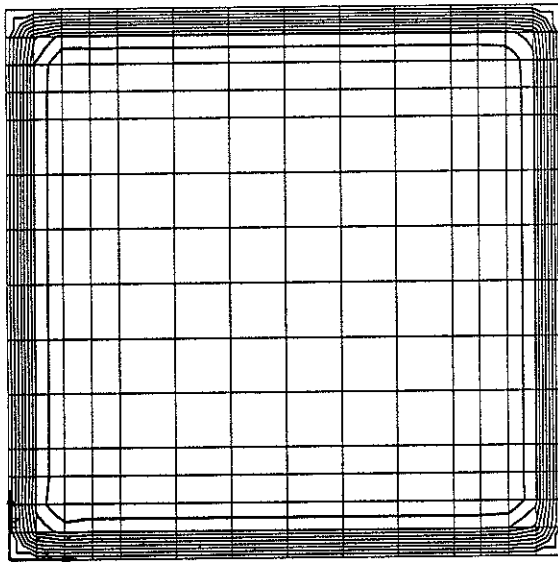


b) situation après
5 jours

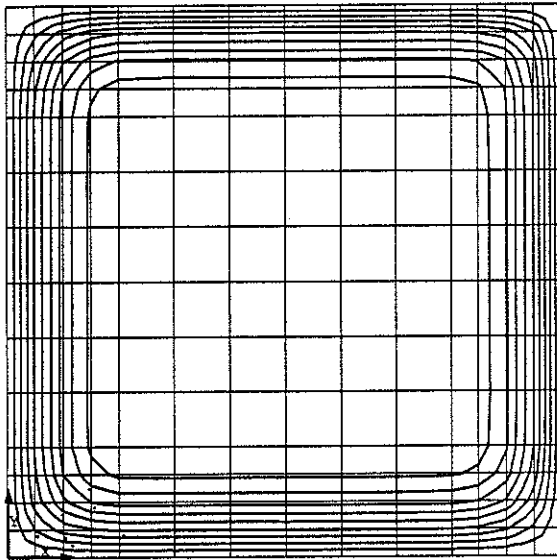


c) situation après
15 jours

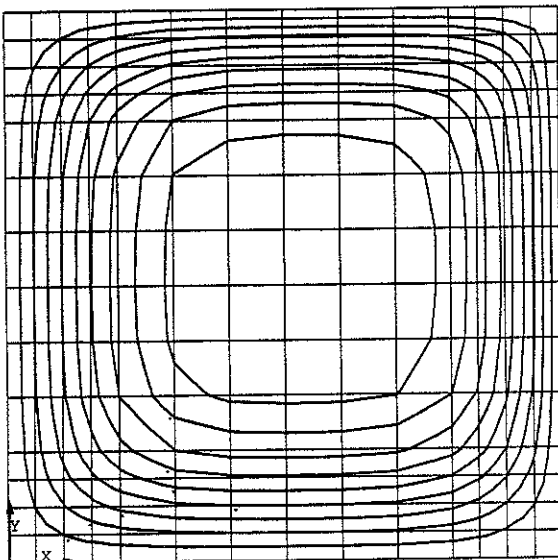
figure III.36: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 10 cm d'arête, sans effet d'eau immobile, vitesse de convection orientée à 45°, courbes d'égale concentration relative obtenues par simulation ($\Delta c_r = 0.1$).



a) situation après
2 jours

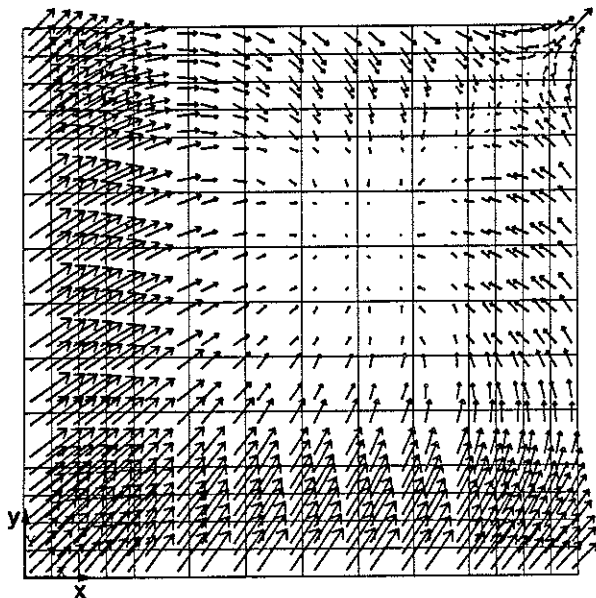


b) situation après
5 jours

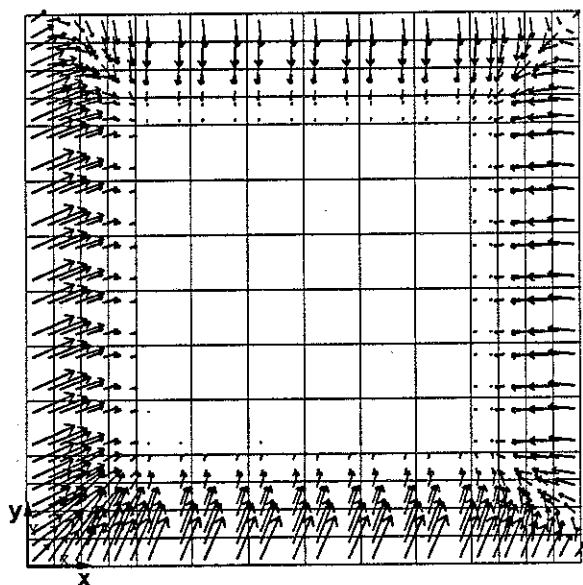


c) situation après
15 jours

figure III.37: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 10 cm d'arête, avec effet d'eau immobile, vitesse de convection orientée à 45°, courbes d'égale concentration relative obtenues par simulation ($\Delta c_r = 0.1$).



a) bloc microfissuré sans effet d'eau immobile

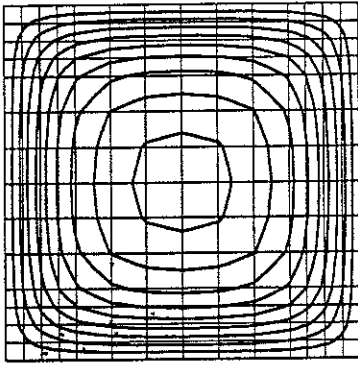


b) bloc microfissuré avec effet d'eau immobile

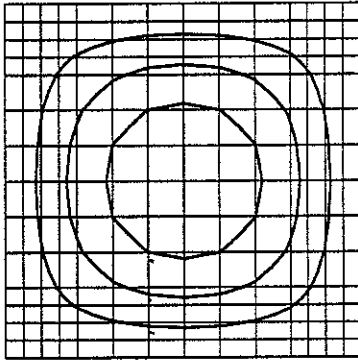
figure III.38: contamination d'un bloc matriciel microfissuré, de 10 cm d'arête, vitesse de convection orientée à 45°, simulation, flux totaux après 5 jours, $f_{\max} = 2.1 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$.

L'autre facteur envisagé est la taille des blocs matriciels. Les 3 simulations de base ont été reprises pour des blocs plus petits correspondant à un espacement de diaclases 2 fois moindre (5 cm au lieu de 10). Les résultats sont repris aux figures III.39 à III.41. On constate les mêmes tendances mais, bien évidemment, avec une cinétique de contamination plus rapide (il faut environ 3 fois moins de temps pour aboutir à une situation identique).

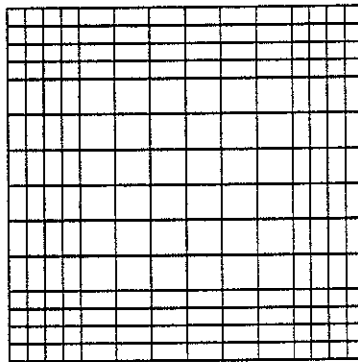
La globalisation est illustrée figure III.42. Les constantes de transfert obtenues sont environ 2 fois plus importantes ($2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ et $1,2 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$). En outre, on assiste à un nouveau phénomène: assez rapidement, lorsque le bloc est presque entièrement contaminé à la concentration c_0 , le transfert s'annule. En pratique, cet état final n'est pas souvent atteint puisque les pollutions sont essentiellement des phénomènes transitoires et que les concentrations c_m dans les fissures varient continuellement.



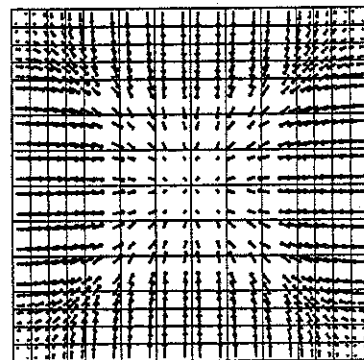
- a) courbes d'égal concentration relative après 2 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



- b) courbes d'égal concentration relative après 5 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



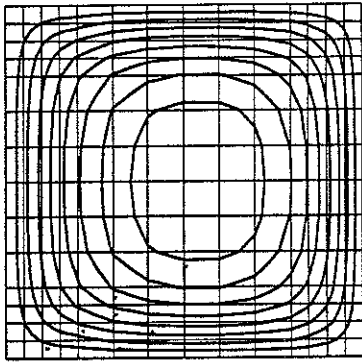
- c) courbes d'égal concentration relative après 15 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



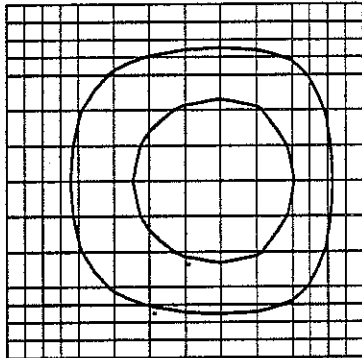
- d) cartes des flux totaux après 5 jours
 $f_{\max} = 1.1 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



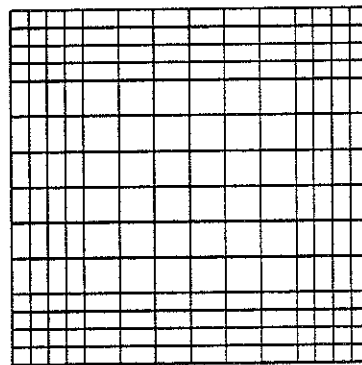
figure III.39: contamination d'un bloc matriciel non microfissuré de 5 cm d'arête.



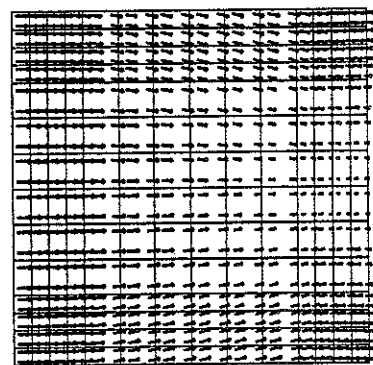
a) courbes d'égalité concentration relative après 2 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



b) courbes d'égalité concentration relative après 5 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



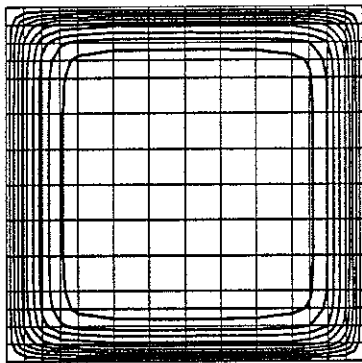
c) courbes d'égalité concentration relative après 15 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



d) cartes des flux totaux après 5 jours
 $f_{\max} = 2.0 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$

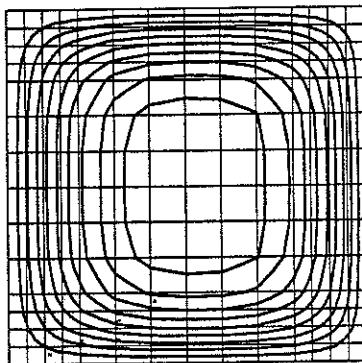


figure III.40: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 5 cm d'arête, sans effet d'eau immobile.



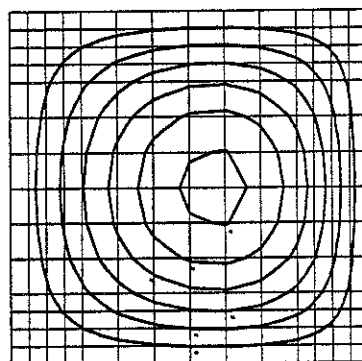
$v \rightarrow$

a) courbes d'égale concentration relative après 2 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



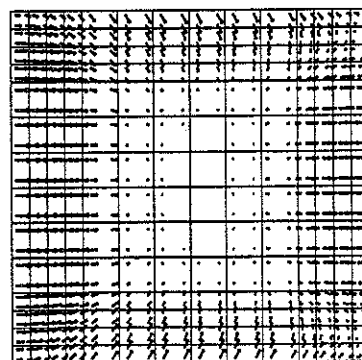
$v \rightarrow$

b) courbes d'égale concentration relative après 5 jours ($\Delta c_r = 0.1$).



$v \rightarrow$

c) courbes d'égale concentration relative après 15 jours ($\Delta c_r = 0.1$).

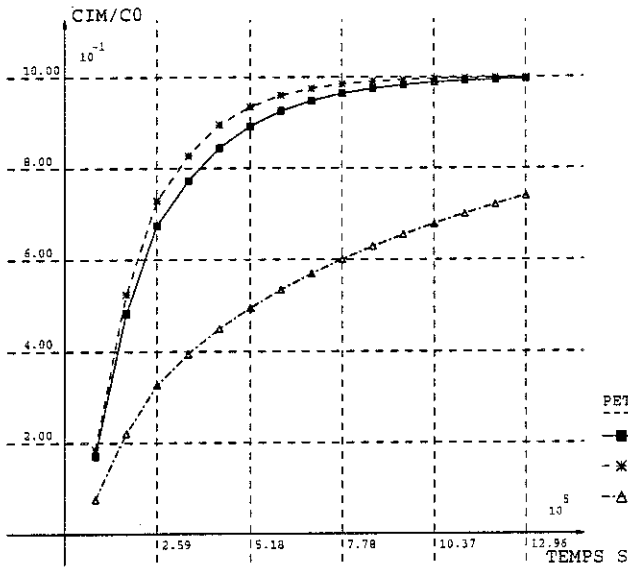


$v \rightarrow$

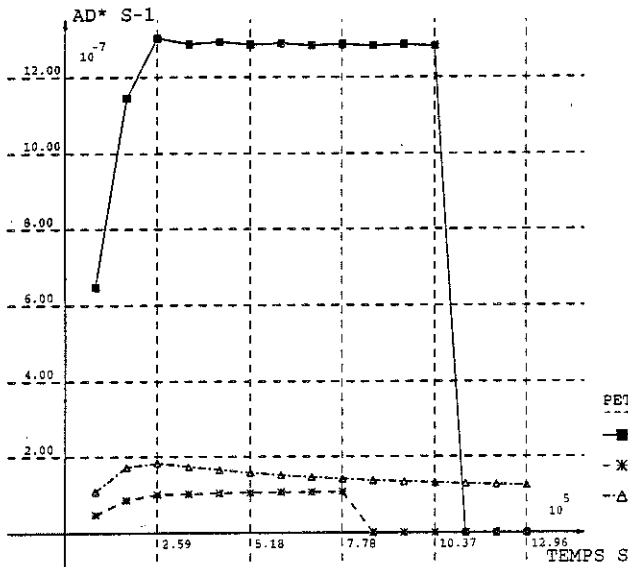
d) cartes des flux totaux après 5 jours
 $f_{\max} = 4.5 \cdot 10^{-7} \text{ kg/m}^2/\text{s}$

y ↑
x →

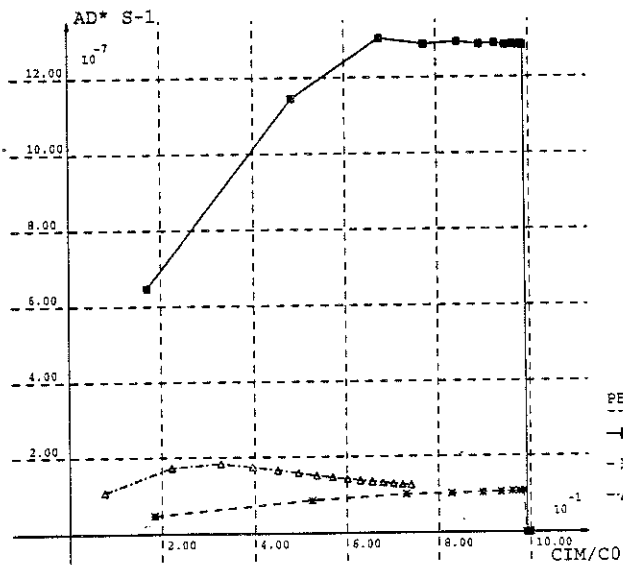
figure III.41: contamination d'un bloc matriciel microfissuré de 5 cm d'arête, avec effet d'eau immobile.



a) graphe c_r - temps



b) graphe α_d^* - temps



c) graphe α_d^* - c_r

figure III.42: globalisation de la contamination de blocs matriciels (taille: 5 cm d'arête).

III.3.d.4) Similitude avec l'expérimentation.

Comme les coefficients de transfert utilisés dans le modèle sont déterminés de manière objective (par expérimentation), il n'est pas nécessaire de mettre en doute les résultats. Toutefois, à titre indicatif, nous présentons ici des cinétiques de diffusion sur des blocs décimétriques de craie.

Ces blocs sont saturés à concentration nulle. Un capteur diélectrique est placé au centre puis, les faces supérieure et inférieure du bloc sont imperméabilisées (conformément à l'hypothèse selon laquelle les joints de stratification sont supposés fermés). L'ensemble est alors plongé dans une solution nitratée à 950 ppm régulièrement renouvelée. L'essai est ainsi poursuivi pendant plusieurs jours et la permittivité diélectrique au centre du bloc est mesurée en continu pour 5 fréquences différentes f_1 à f_5 (10^4 , $10^{4.25}$, $10^{4.5}$, $10^{4.75}$, 10^5 Hz).

Les résultats des mesures sont représentés figure III.43. On visualise les faibles variations de la conductivité équivalente conformément à la présence d'une couche limite pour la pollution. En effet, au bout de 3 jours, les nitrates n'ont pas encore atteint le centre du bloc. Ces expériences démontrent que les échelles de temps auxquelles les modèles aboutissent sont représentatives de la réalité.

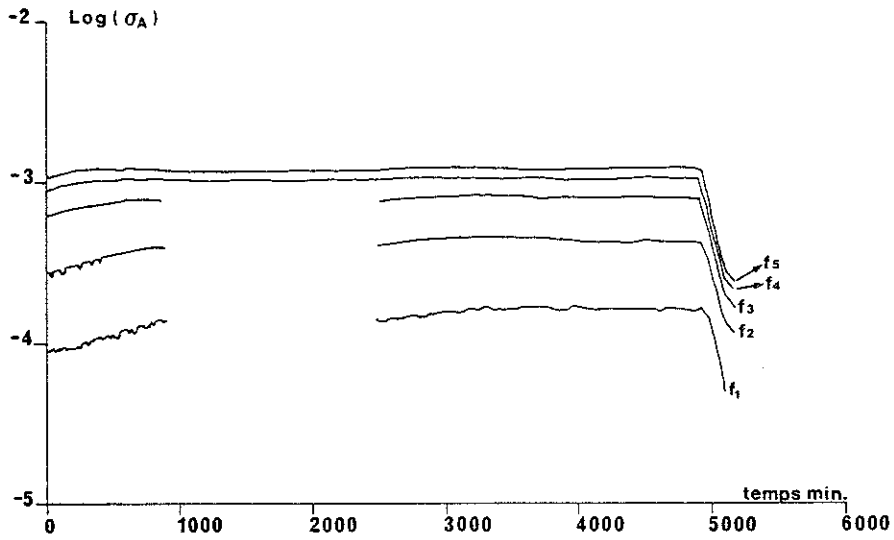
III.4. CARACTERISATION DE LA CRAIE FISSUREE.

A l'échelle macroscopique, la craie est affectée par une fissuration; elle possède des coefficients de transport qui lui sont propres. Les seuls que nous ayons évalué jusqu'à présent sont ceux qui chiffrent l'effet de l'eau immobile (α_d , n_{im}). Il convient également de caractériser la convection (n_{eff}) et la dispersion (α_L , D_m). Nous supposons nulle la dégradation. Quant à l'adsorption, phénomène essentiellement lié à la matrice poreuse, elle est reprise par α_d .

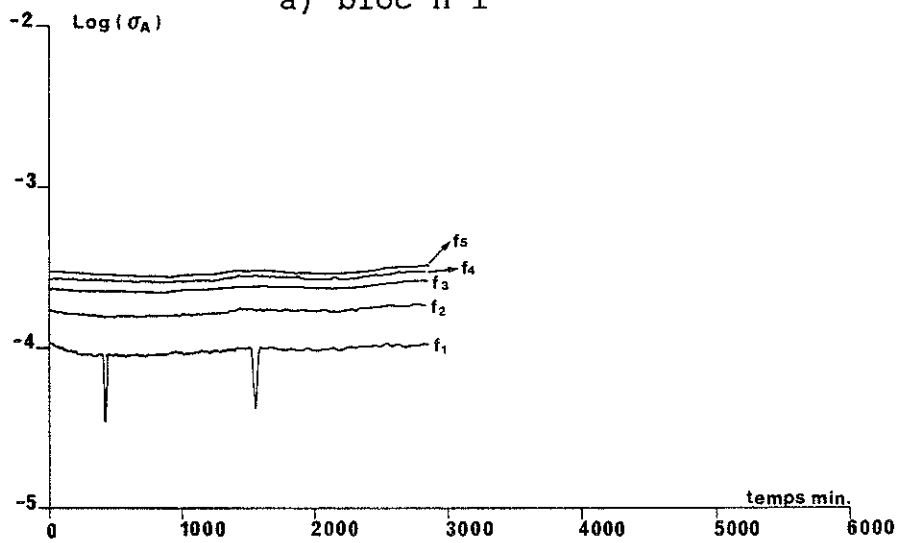
III.4.a) Détermination de la porosité de fissures à l'échelle macroscopique.

La porosité de fissures n_f est responsable des valeurs élevées de perméabilité. Par conséquent, la mobilité de l'eau qu'elle contient est grande et on peut, en première approche, supposer qu'elle représente la porosité efficace qui régit la convection ($n_f = \theta_m$). Dans cette section, nous proposons une méthode pour évaluer n_f en laboratoire sur des échantillons de taille raisonnable (de l'ordre du mètre).

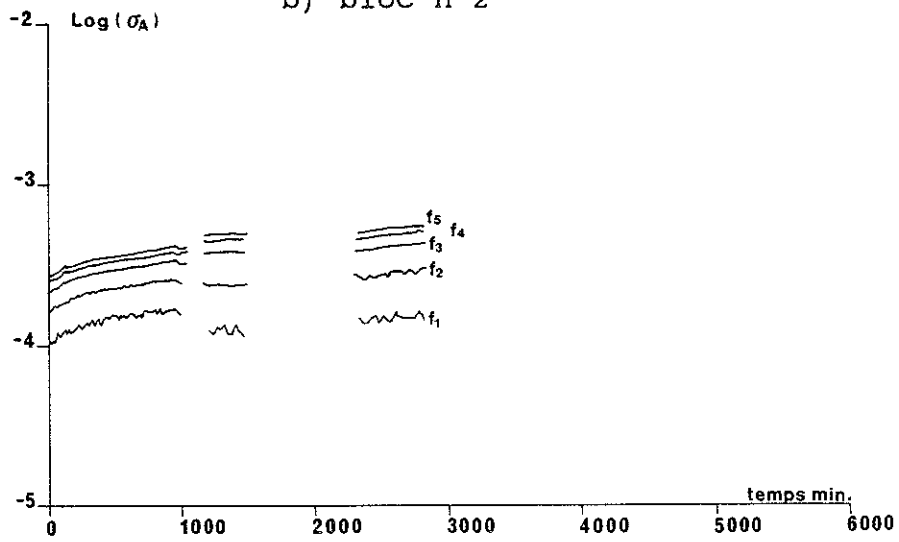
Il est difficile de prélever un échantillon de craie fissurée sans modifier la distribution des fissures. Nous avons préféré prélever de grands blocs de craie saine et les fracturer en laboratoire pour leur donner une fissuration similaire à celle observée sur les fronts de taille des carrières et sur les affleurements. Une vérification a posteriori est toujours possible en évaluant la perméabilité de l'échantillon.



a) bloc n°1



b) bloc n°2



c) bloc n°3

figure III.43: cinétiques de diffusion sur blocs matriciels.

III.4.a.1) Principe de la méthode.

L'échantillon prélevé est dégrossi à la scie pour lui donner la forme d'une dalle parallélépipédique. Cette dalle est séchée à l'étuve (progressivement pour éviter la fracturation thermique). La vitesse sismique de la dalle est alors mesurée, avant et après fissuration par un couple d'accéléromètres haute fréquence (capable de mesurer de faibles longueurs d'ondes):

- une légère impulsion sismique est appliquée à l'extrémité de l'échantillon: il s'agit du signal d'entrée;
- cette impulsion est atténuée lors de son trajet sismique et arrive à l'autre extrémité sous une forme modifiée: il s'agit du signal de sortie;
- ces deux signaux sont recueillis par les accéléromètres et visualisés sur un oscilloscope.

D'après le déphasage, on peut déterminer le retard Δt du second signal par rapport au premier et, connaissant la longueur Δl de l'échantillon (50 cm), en déduire sa vitesse sismique ($V = \Delta l / \Delta t$). L'indice de continuité peut alors être calculé par la relation:

$$I_c = \frac{\text{vitesse sismique de l'échantillon}}{\text{vitesse sismique de la matrice solide}} \quad (\text{III.17})$$

où la vitesse sismique de la matrice solide est celle de la calcite pure et varie donc entre 4000 et 8000 m/s suivant la direction testée (la calcite est fortement anisotrope).

La position des 2 points de mesures (avant et après fissuration) dans un diagramme de corrélation entre l'indice de continuité et la porosité permet de déterminer les proportions de pores et de fissures.

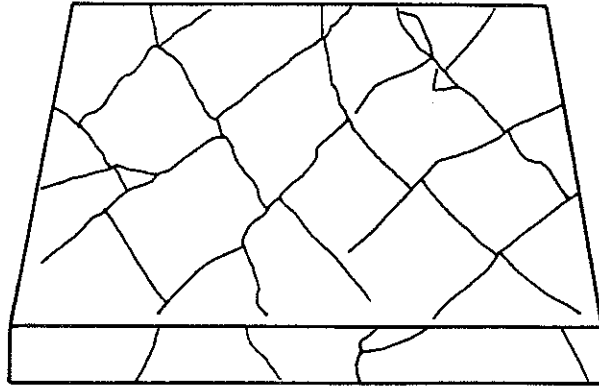
III.4.a.2) Résultats.

La fissuration de la dalle que nous avons testée est représentée figure III.44a. Les signaux mesurés par l'oscilloscope sont représentés figure III.44b pour la dalle intacte et figure III.44c pour la dalle fissurée (même échelle).

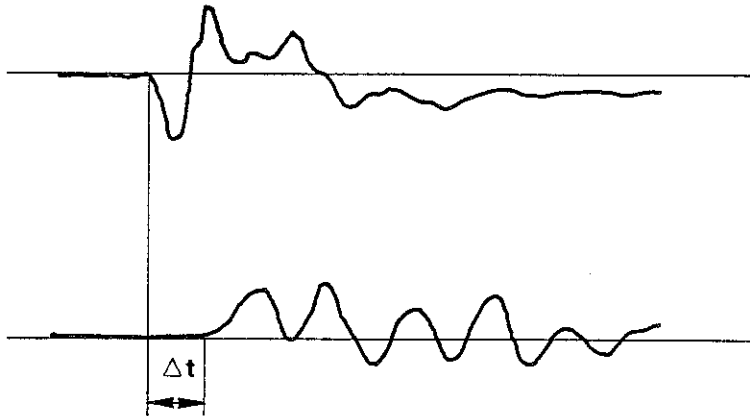
Les points correspondants dans le diagramme (indice de continuité-porosité) sont représentés figure III.45. Ils correspondent aux vitesses suivantes:

$$\begin{aligned} V \text{ dalle non fissurée} &= 1350 \text{ m/s} \\ V \text{ dalle fissurée} &= 340 \text{ m/s} \end{aligned}$$

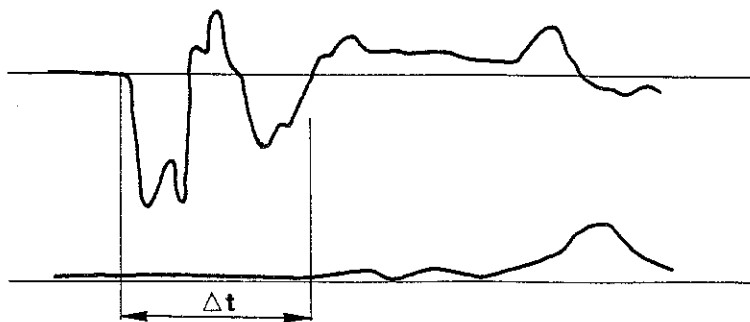
On en déduit une porosité de pores $n_p = 45 \%$ et une porosité de fissures $n_f = 1,15 \%$. En utilisant la formule I.47 page 36, on peut déterminer que, pour un espacement moyen de 10 cm, cette porosité de fissure correspond une ouverture moyenne de 0,58 mm. Cette valeur semble correcte d'après l'examen visuel de l'échantillon.



a) fissuration de l'échantillon



b) ondes sismiques avant fissuration



c) ondes sismiques après fissuration

figure III.44: détermination de la porosité de fissures d'un échantillon de craie.

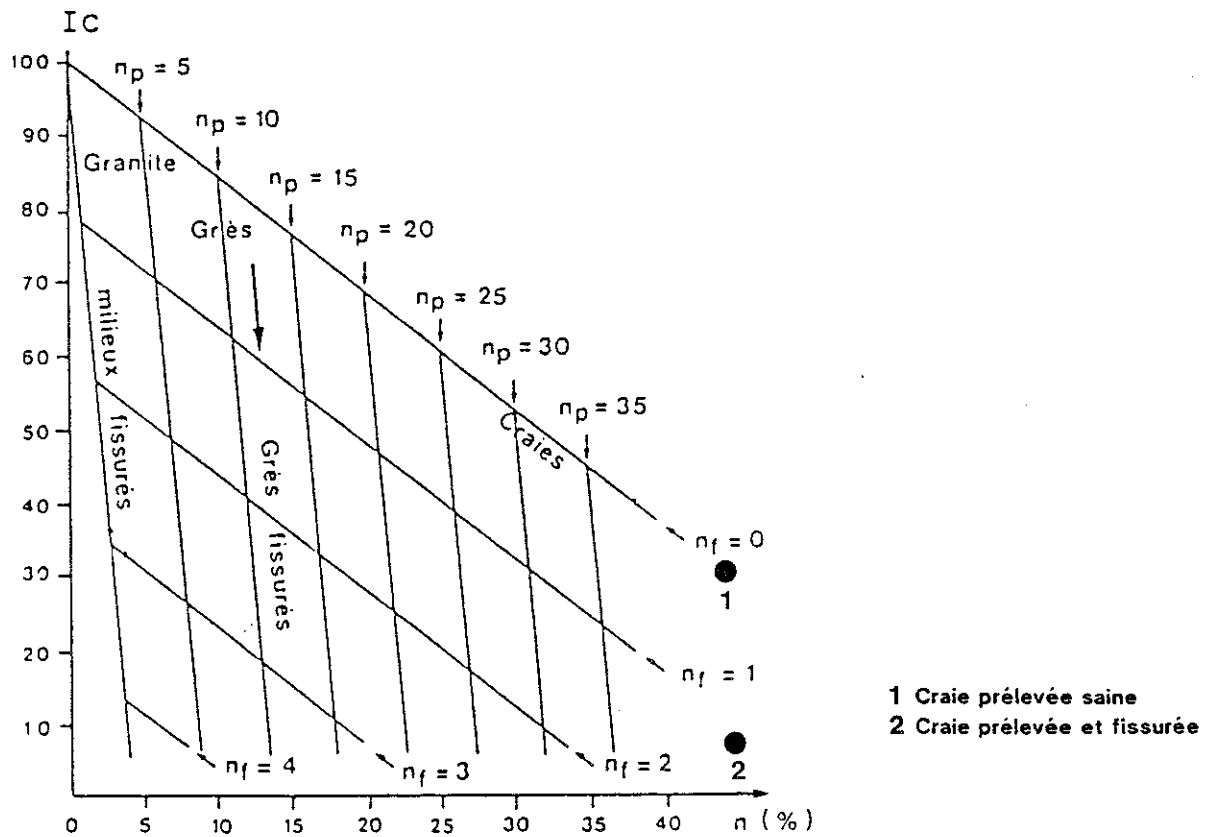


figure III.45: position des points représentatifs de l'échantillon dans le diagramme de corrélation entre l'indice de continuité et les porosités de pores et de fissures.

III.4.b) Essai de dispersion sur une dalle fissurée.

Lorsque le milieu est fissuré, la dispersion est essentiellement mécanique et la diffusion moléculaire devient négligeable. Pour cette raison, un seul type d'essai, avec mise en pression, suffit pour déterminer la composante de dispersion longitudinale du transport.

III.4.b.1) Mode opératoire.

1°) Description du dispositif.

La figure III.46 illustre schématiquement le dispositif de test dont le fonctionnement peut être décrit comme suit.

Un réservoir supérieur (1) alimente la tour d'entrée (2) en solution polluante ou dépolluante. Le niveau dans la tour est maintenu constant par un trop-plein (3). La solution pénètre dans l'échantillon (4) grâce à une surpression (par rapport à la tour de sortie) qui peut être mesurée par la jauge (5). Des capteurs diélectriques (6) sont placés dans l'échantillon et la tour de sortie pour suivre, en direct, les variations de concentrations. La tour de sortie (7) a un volume minimum (5 mm d'épaisseur) et est remplie d'un sable dont la granulométrie est étudiée pour assurer un compromis entre une porosité minimale et une perméabilité maximale (37 % de porosité totale et 25 % de porosité effective pour une perméabilité de $5 \cdot 10^{-4}$ m/s).

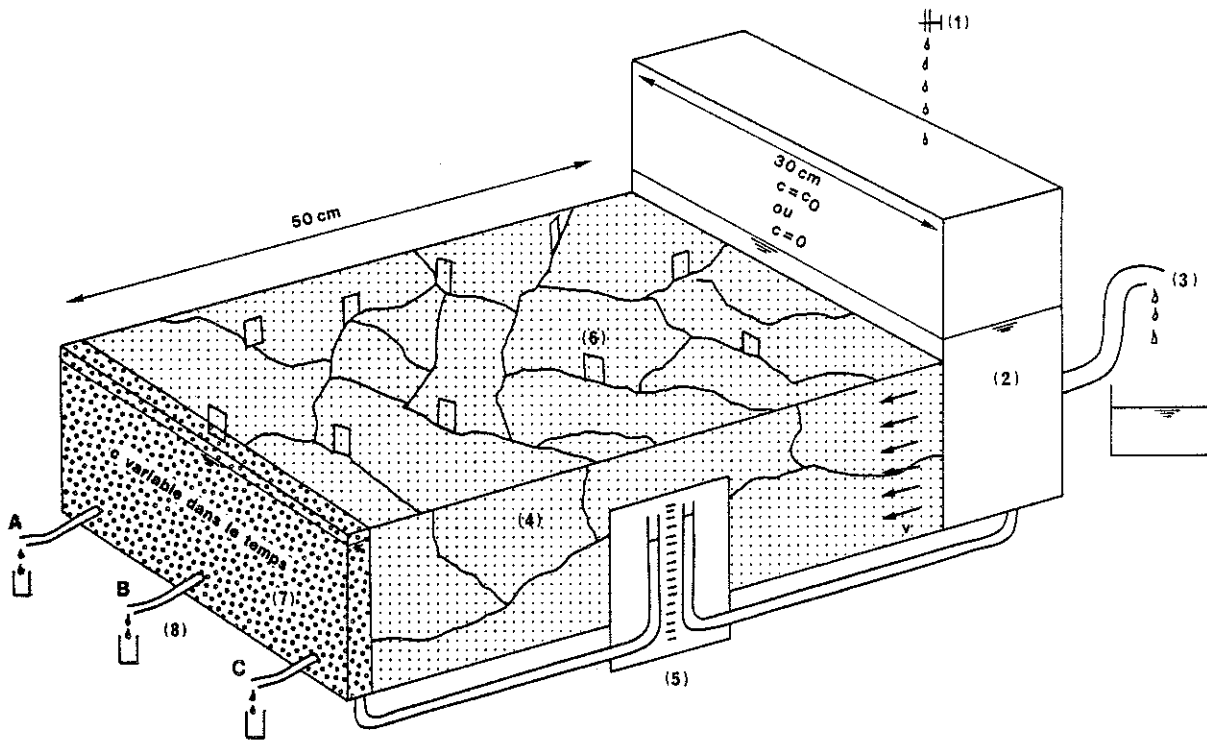


figure III.46: Dispositif utilisé pour le test de dispersion sur un échantillon fissuré.

Le rôle de ce sable est double. D'une part, il fonctionne comme un filtre pour les particules de craie qui pourraient obstruer les purges A, B, et C (8). D'autre part, il minimise le volume occupé par le fluide dans la tour de sortie (75 cm³ seulement) pour éviter une différence trop importante de concentration entre l'eau circulant à l'extrémité de la dalle et celle recueillie à la sortie. Les échantillons prélevés sont soumis à l'analyse chimique pour valider les mesures directes.

Rappelons que les capteurs sont reliés par l'intermédiaire d'un multiplexage à un microdiélectromètre. L'ensemble est piloté par un ordinateur qui permet, grâce à l'actualisation du programme de contrôle, d'automatiser entièrement le dispositif. Cet appareillage mesure en séquence les paramètres diélectriques au niveau de chaque capteur et en déduit la conductivité équivalente. La durée de ce cycle est courte (quelques minutes), ce qui permet de visualiser une cinétique rapide.

2°) Préparation de l'échantillon.

La fissuration de la dalle est similaire à celle présentée dans la section précédente. Toutefois, il semble que l'échantillon ait été taillé dans un sens quasiment parallèle à la stratification. C'est ainsi que des fissures longitudinales, parallèles aux joints de stratification, ont été induites en plus des quelques fissures transversales parallèles aux diaclases.

L'indice de continuité de l'échantillon n'a pas été évalué et c'est en mesurant la taille et la longueur des fissures que la porosité efficace (de fissures) a été chiffrée à 1.0 %. Ceci correspond à un espacement moyen de 7 cm entre des fissures d'ouverture moyenne égale à 0,20 mm. Pour un tel réseau, la perméabilité calculée par la formule théorique I.19a p.19 est de $5 \cdot 10^{-5}$ à 10^{-4} m/s.

Pour lessiver l'échantillon et mobiliser les éventuelles poussières de calcite qui pourraient faire varier la vitesse d'écoulement en cours d'essai, des tests de perméabilité ont été réalisés après avoir enveloppé l'échantillon dans un double manteau de silicone et de ciment hydrofuge. Ces tests ont été effectués après un temps de saturation égal à 2 semaines, avec des gradients de $8 \cdot 10^{-2}$ à $2 \cdot 10^{-1}$. Les résultats de ces tests sont donnés au tableau ci-dessous.

date	heure	K (m/s)	i
13-3	11h 00'	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
13-3	12h 00'	$7.4 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
13-3	15h 00'	$7.4 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
13-3	16h 30'	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
13-3	17h 30'	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
14-3	09h 45'	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
14-3	11h 15'	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
14-3	12h 00'	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
14-3	13h 45'	$7.4 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
14-3	15h 20'	$7.4 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$
15-3	09h 50'	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
15-3	13h 30'	$3.1 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
15-3	14h 00'	$3.2 \cdot 10^{-5}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$
15-3	14h 25'	$3.2 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
15-3	16h 50'	$3.2 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
18-3	13h 35'	$3.6 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
18-3	13h 50'	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$
18-3	14h 05'	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
18-3	14h 30'	$3.5 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
18-3	16h 00'	$3.5 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$
18-3	16h 50'	$3.2 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-1}$

tableau III.13: essais de perméabilité sur la dalle fissurée en laboratoire.

En examinant ce tableau, on conclut que:

- d'après les 11 dernières mesures, la perméabilité de la dalle varie peu avec le gradient envisagé pour autant qu'il soit de l'ordre de grandeur de celui rencontré dans la nature;
- brutalement, lorsque le gradient augmente, la perméabilité est multipliée par 4 pour atteindre une valeur de l'ordre de grandeur de nos prédictions. Ce phénomène peut être expliqué par un débouffrage des fissures avec entraînement des particules de calcite.

D'après la formule théorique, la perméabilité de fissures est proportionnelle à la 3ème puissance de leur ouverture. Pour multiplier par 4 la perméabilité, il a fallu que l'ouverture des fissures passe de 0,125 mm à 0,2 mm. Ceci démontre l'utilité du lessivage de la dalle.

III.4.b.2) Présentation des résultats de l'essai.

La séquence des opérations effectuées est la suivante:

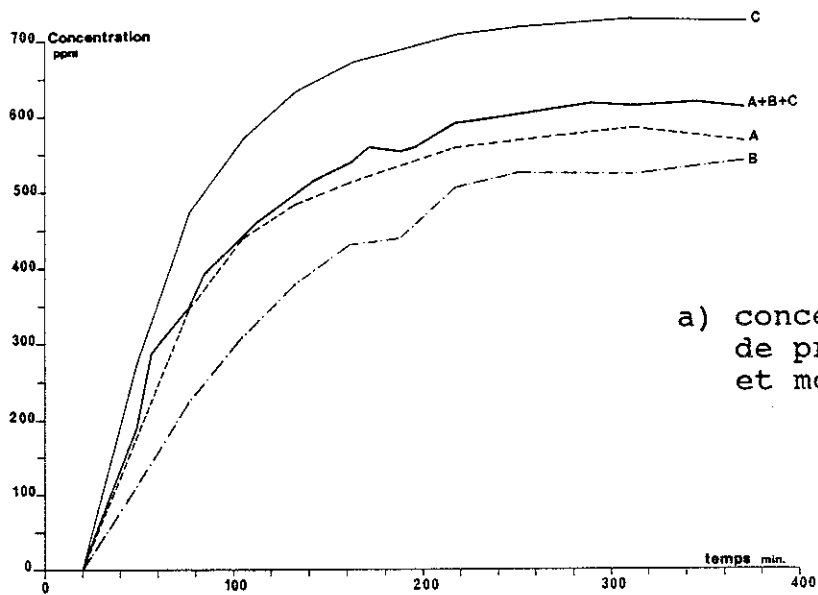
- a) pollution par une solution de concentration égale à 1000 ppm en nitrates, pendant 24 heures, avec mesures à intervalles réguliers pendant les 6 premières heures;
- b) dépollution de l'échantillon avec une eau pure saturée en CaCO_3 pendant 7 heures, avec mesures à intervalles réguliers;
- c) repollution de l'échantillon pendant 1 heure par une autre substance, la rhodamine B, susceptible de colorer la matrice crayeuse et de mettre en évidence, lors de la destruction de l'échantillon, l'accessibilité des fissures.

Les évolutions des concentrations à l'intérieur de la dalle de craie n'ont pas pu être suivies (même qualitativement) par microdiélectrométrie. A posteriori, après avoir cassé la dalle, on a constaté que de fines particules de calcite se sont accumulées au voisinage des parties sensibles des capteurs formant une isolation atténuant toute variation diélectrique. Il conviendrait donc, à l'avenir, de mieux protéger les capteurs pour avoir des informations sur la répartition spatiale du polluant à l'intérieur de l'échantillon.

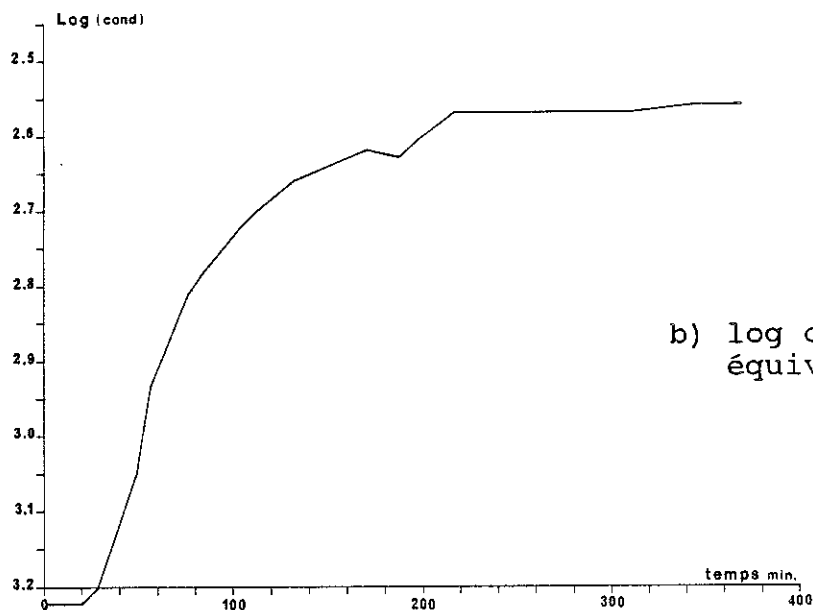
En ce qui concerne les mesures à la tour de sortie, les résultats des deux premières étapes, réalisées avec un gradient de hauteur piézométrique égal à 2 %, sont présentés respectivement aux figures III.47 et III.48 où on donne chaque fois en parallèle la concentration des solutions percolantes (déduite des mesures par électrode spécifique) et leur conductivité équivalente (déterminée par le microdiélectromètre).

On en tire les conclusions suivantes:

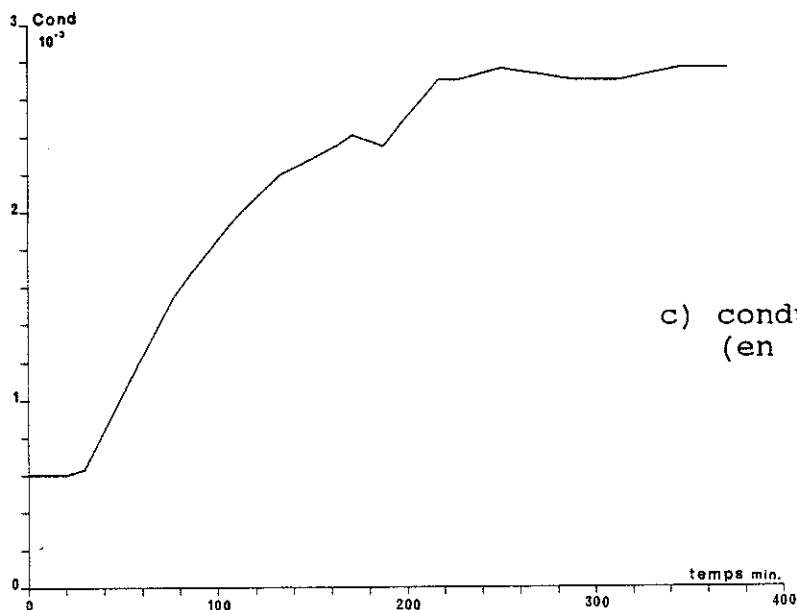
- la pollution ne semble pas être freinée aux frontières latérales de l'échantillon puisque les purges les plus proches des bords "voient" leur concentration s'élever plus rapidement que la purge centrale. Ces contrastes s'expliquent mieux en considérant que les concentrations en chaque point de mesure sont des concentrations locales qui ne sont pas caractéristiques d'un élément de volume représentatif (E.V.R.). Ce fait peut se comprendre puisque la dalle fissurée peut à peine être considérée comme telle. C'est pourquoi, dans la simulation de l'essai, la courbe expérimentale servant au calibrage sera la courbe moyenne des 3 points de mesure (A, B, C).



a) concentrations au 3 points de prélèvement (A, B, C) et moyenne

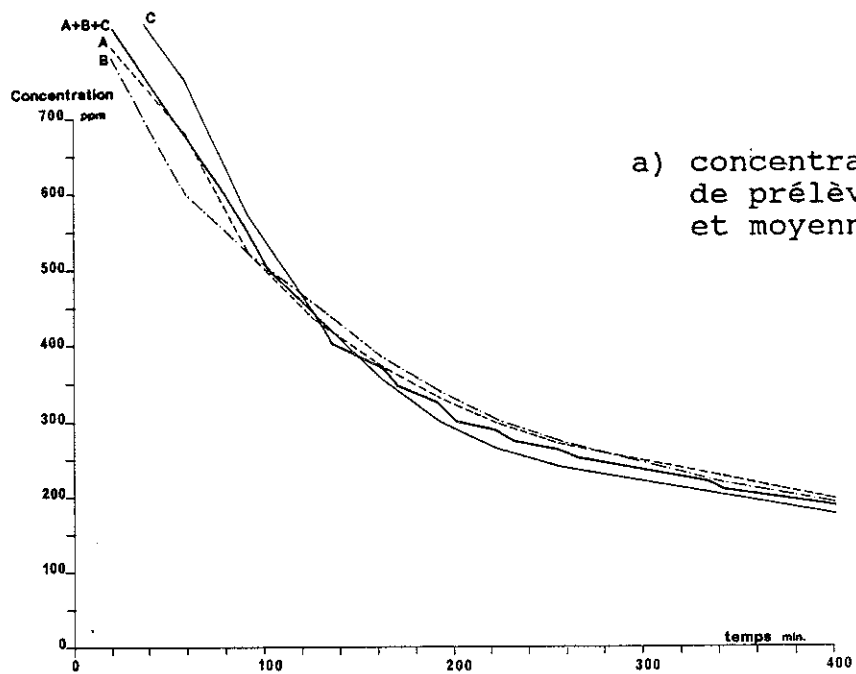


b) log conductivité équivalente (en B)

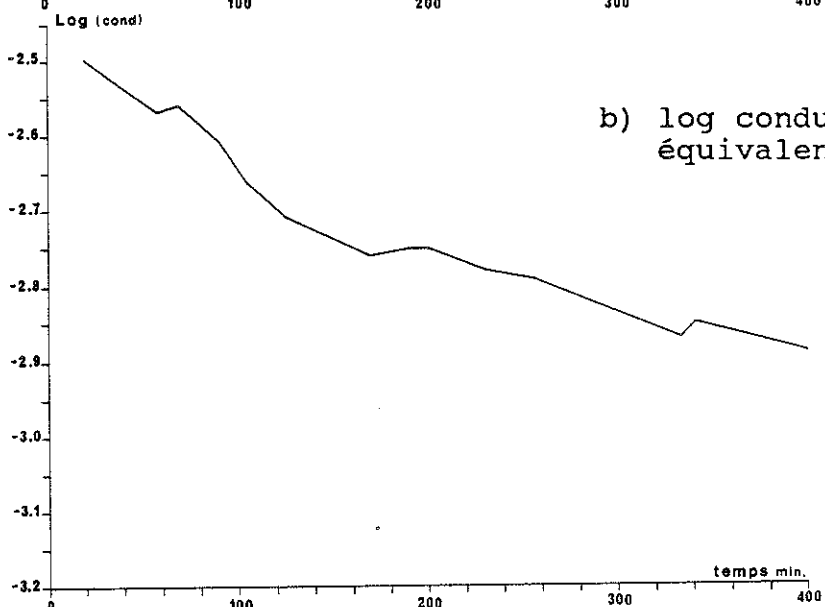


c) conductivité équivalente (en B)

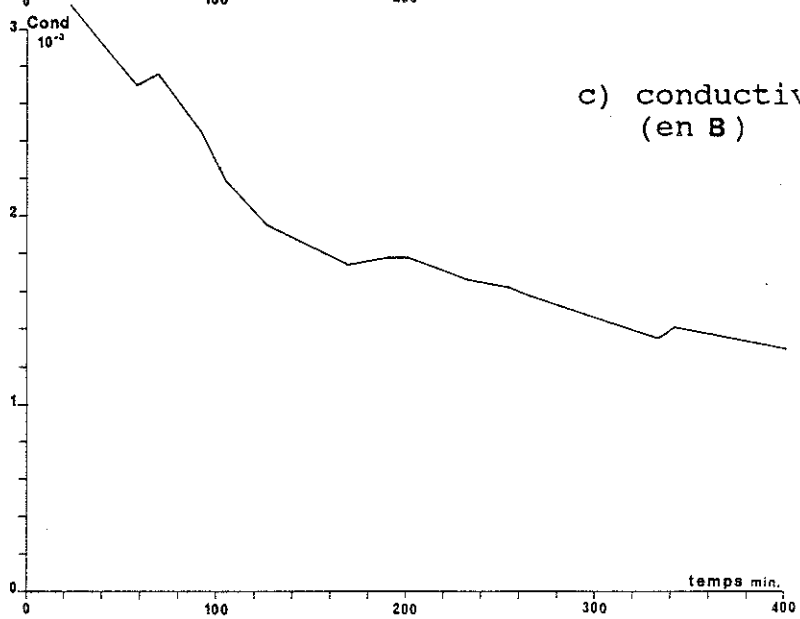
figure III.47: essai de dispersion sur un échantillon de craie fissurée, phase de pollution, évolution temporelle des grandeurs observées à l'extrémité aval.



a) concentrations au 3 points de prélèvement (A, B, C) et moyenne



b) log conductivité équivalente (en B)



c) conductivité équivalente (en B)

figure III.48: essai de dispersion sur un échantillon de craie fissurée, phase de dépollution, évolution temporelle des grandeurs observées à l'extrémité aval.

- La pollution comporte deux composantes: une composante rapide (suivie de près) qui amène la concentration à 700 ppm et une composante lente pouvant durer plusieurs jours avant que l'échantillon ne soit complètement pollué au niveau des fissures. Ce phénomène résulte de l'existence d'une quantité importante d'eau immobile dans les pores ayant pour effet d'empêcher la stabilisation rapide des concentrations dans les fissures. La stationnarité atteinte après 6 heures, n'est donc qu'apparente. Ce fait est également constaté à la dépollution au cours de laquelle il persiste une concentration résiduelle beaucoup plus difficile à éliminer.
- Les mesures diélectriques réalisées au droit du point de prélèvement central suivent parfaitement l'évolution de la concentration et on peut considérer cette méthode comme fiable pour suivre en direct un essai de laboratoire.

Finalement, on peut comparer les courbes de concentrations relatives des nitrates et de la rhodamine (dosée par fluorimétrie)³² puisque les conditions opératoires sont rigoureusement identiques. La figure III.49 met en évidence une arrivée plus rapide de la rhodamine. Ceci ne peut s'expliquer que par un processus dispersif plus important puisque la sollicitation convective ne change pas d'une courbe à l'autre. La dispersion est donc sensible à la substance considérée.

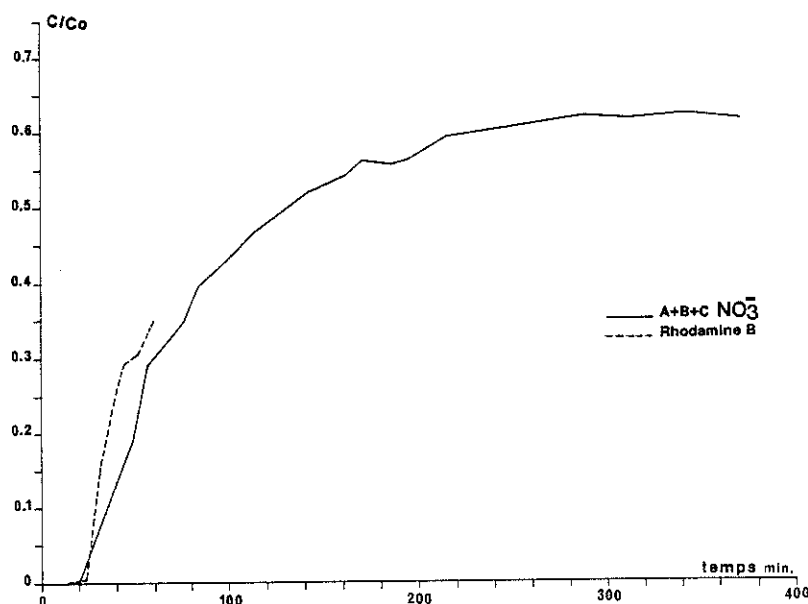


figure III.49: essai de dispersion sur un échantillon fissuré, comparaison nitrate-rhodamine, évolution temporelle des concentrations relatives, à l'extrémité aval du dispositif.

³² Aucune conclusion n'a pu être tirée quant à la distribution du polluant dans les fissures car la coloration à la rhodamine est insuffisante pour teinter la matrice crayeuse. Le bleu de méthylène serait sans doute plus performant pour une telle opération.

Une dernière analyse peut être faite concernant les mesures diélectriques. Traçons les courbes de corrélation entre la concentration et le logarithme de la conductivité (figure III.50) pour la pollution et la dépollution, et comparons aux courbes d'étalonnage réalisées pour les faibles concentrations (paragraphe III.2.c.3).

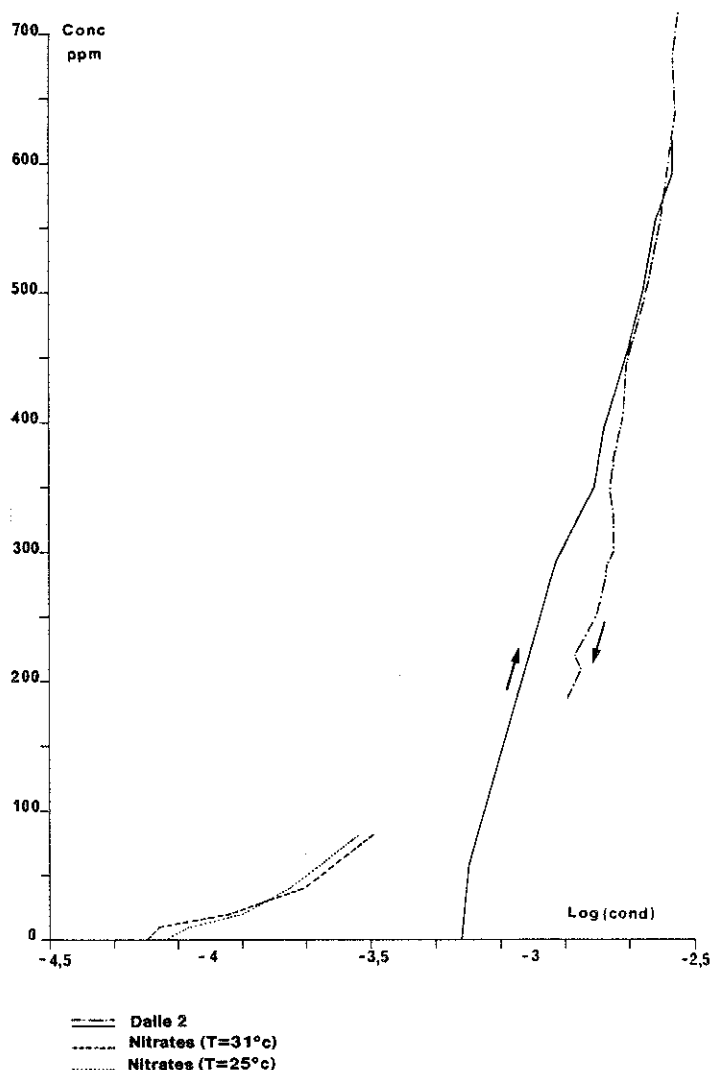


figure III.50: essai de dispersion sur un échantillon fissuré, corrélation c_{nitrate} - $\log \sigma_a$ et comparaison avec les courbes d'étalonnage.

On remarque:

- 1°) un léger hystérésis entre la pollution et la dépollution;
- 2°) une inadéquation entre les courbes d'étalonnage et les expérimentations (pour les concentrations inférieures à 100 ppm). Ce phénomène peut être expliqué par l'imperfection de notre système de multiplexage qui engendre des pertes électriques dans les connecteurs. Ces pertes ne sont pas apparues lors de l'étalonnage puisqu'un seul capteur était utilisé et que le multiplexeur était court-circuité.

3°) au-delà de 1000 ppm, la variation de la conductivité devient négligeable lorsque la concentration augmente.

Ces considérations démontrent que le dispositif doit encore être perfectionné et que le dosage par microdiélectrométrie à l'intérieur d'un milieu poreux n'est, en tout cas à ce stade de la recherche, qu'un procédé semi-quantitatif.

III.4.b.3) Interprétation de l'essai.

Seules les deux premières étapes de l'expérience, à savoir la pollution et la dépollution des ions nitrates, ont été modélisées. Le système d'équations III.10 est utilisé (pas de dégradation, modèle unidimensionnel). En outre, on accepte l'hypothèse supplémentaire selon laquelle la diffusion moléculaire est négligeable par rapport à la dispersion mécanique.

L'échantillon est discrétisé dans le sens de la longueur en 50 éléments finis d'1 cm; le filtre de sable est également modélisé avec 2 éléments finis de 2,5 mm. Les deux méthodes de résolution donnent des résultats identiques si le pas de temps est choisi de manière appropriée ($\Delta t = 60$ s, soit $C_r = 0.33$ pour la méthode F.U.P.G., $\Delta t = 200$ s soit $C_r = 1.65$ pour la méthode H.E.L.M.). Les paramètres imposés sont donnés au tableau III.14 avec les valeurs des coefficients calibrés (dispersivité longitudinale = 0,22 m, porosité d'eau immobile accessible au polluant $n_{im} = 9.5$ %, et constante de transfert $\alpha_d = 1.5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$).

paramètre	craie	sable
i (%)	2.0	1.4
K (m/s)	$3.3 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
$a_{\frac{1}{2}}$ (m)	$2.2 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
α_d (s^{-1})	$1.5 \cdot 10^{-6}$	0.0
θ_m (%)	1.2	25.0
θ_{im} (%)	9.5	0.0
R_{dm}	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	0.0

tableau III.14: paramètres utilisés pour calibrer l'essai de dispersion sur la dalle fissurée.

Les paramètres chiffrant l'effet d'eau immobile sont du même ordre de grandeur que ceux obtenus par la globalisation sur de petits blocs matriciels d'une craie poreuse non microfissurée. Quant à la dispersivité, elle est d'un ordre de grandeur supérieure à celle de la craie poreuse.

Si on calcule la dispersion équivalente, on obtient $D_h = 1.22 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Pour que la diffusion moléculaire représente 1 % de cette dispersion, il faudrait donc imaginer une tortuosité de 122, ce qui est rigoureusement impossible et prouve, à posteriori, la véracité de l'hypothèse de diffusion moléculaire négligeable.

Signalons également que l'effet du filtre de sable est négligeable, ce qui signifie que les échantillons analysés sont bien à l'image du comportement de la dalle crayeuse. Pour juger de la qualité de la calibration, nous présentons l'évolution temporelle de la concentration normée par rapport à la concentration injectée (figure III.51a). Nous fournissons également les répartitions spatiales qui y correspondent, dans l'eau mobile et dans l'eau immobile (figures III.51b et III.51c), après 10, 20 et 30 heures. On remarquera le caractère très étalé des profils et la proportion tout à fait significative de polluant stocké dans la matrice poreuse.

A titre de comparaison, citons les travaux de Porel (1988) sur la craie senonienne fracturée. Les dispersivités que cet auteur mesure par des essais de traçage en laboratoire varient entre $2 \cdot 10^{-2}$ et $1.7 \cdot 10^{-1}$ m. Quant au coefficient de diffusion moléculaire, il le chiffre à $3.4 \cdot 10^{-10}$ m²/s ($T = 0.34$). Ces valeurs sont assez bien en accord avec nos résultats. Toutefois, cette comparaison n'est pas tout à fait objective car Porel ne tient pas compte de l'effet d'eau immobile pour ses interprétations.

Quoiqu'il en soit, ces valeurs sont nettement supérieures à celles obtenues pour des sables. Pour ces milieux à porosité unique, Hussain (1981) obtient, à une échelle similaire (échantillons d'1.2m de longueur), les valeurs suivantes:

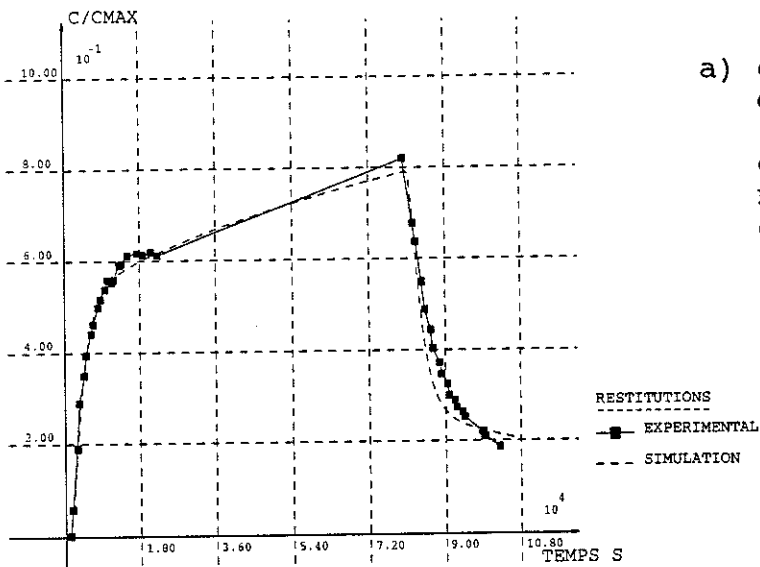
- cas d'un sable grossier: $\alpha_L = 2.7 \cdot 10^{-3}$ m
- cas d'un sable fin: $\alpha_L = 1.1 \cdot 10^{-3}$ m

III.5. CONCLUSIONS

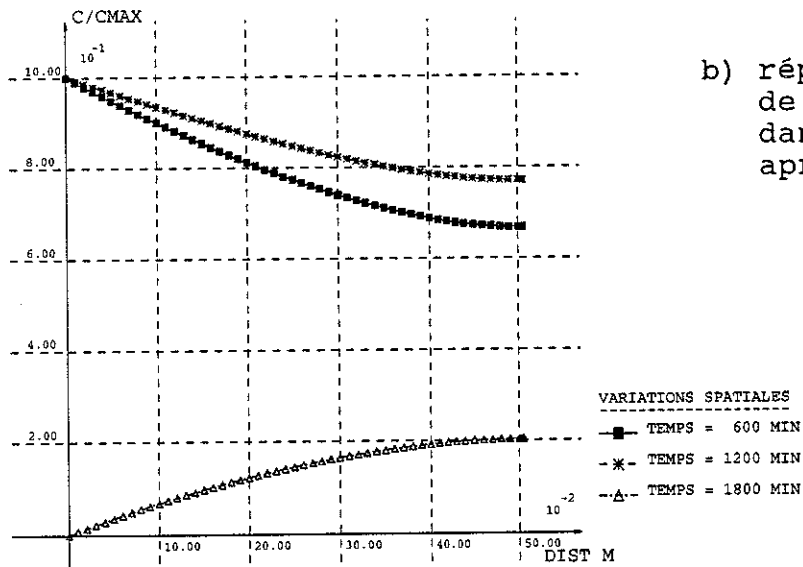
Par le biais de réalisations expérimentales variées, nous avons pu déterminer le comportement de la craie à l'échelle microscopique. A cette échelle, le transport est dominé par la diffusion. Toutefois, une composante convective avec effet d'eau immobile peut jouer un rôle non négligeable lorsqu'une microfissuration apparaît (voir tableau III.12).

Nous avons également abordé le comportement à une échelle macroscopique par une expérience sur un échantillon plus grand, affecté d'une fissuration plus importante. Nous avons pu en déduire qu'à cette échelle, la dispersion devient essentiellement mécanique et que l'effet d'eau immobile est important. La convection joue également un rôle significatif; la vitesse de migration par convection est de 1 mètre en 3 heures en ce qui concerne notre expérience.

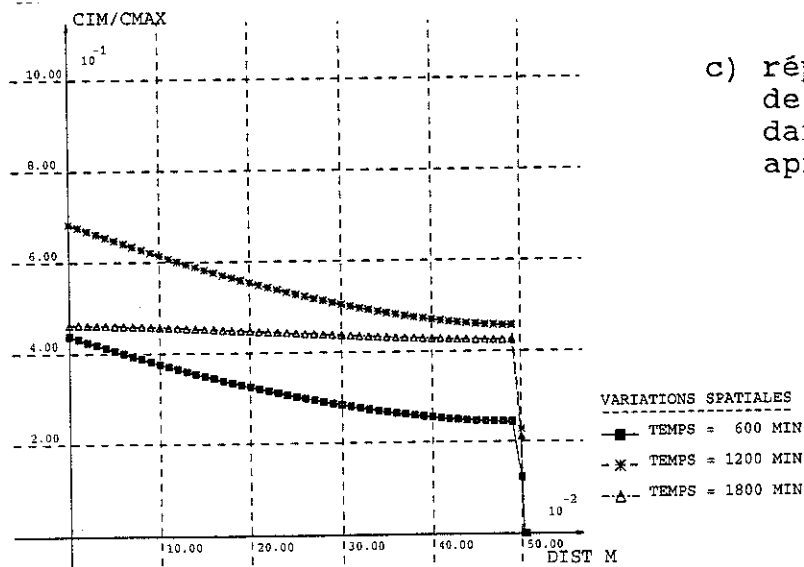
Il est certain que ces derniers résultats devraient être confirmés par d'autres essais du même type et nous aurions pu tester d'autres dalles de craie. Toutefois, cette échelle intermédiaire ne présente qu'un intérêt mitigé et nous avons préféré continuer notre processus de "globalisation expérimentale" en explorant des domaines plus grands pour tenter de définir des caractéristiques mégascopiques. C'est l'objet des essais in situ que nous présentons au chapitre suivant.



a) évolution temporelle de la concentration à l'extrémité avale, comparaison entre le modèle et les résultats expérimentaux.



b) répartition spatiale de la concentration dans l'eau mobile après 10, 20, et 30 h.



c) répartition spatiale de la concentration dans l'eau immobile après 10, 20, et 30 h.

figure III.51: modélisation de l'essai de dispersion sur échantillon fissuré (résultats après calibration).

CHAPITRE IV

ETUDE EXPERIMENTALE IN SITU DU TRANSPORT MISCIBLE EN MILIEU MULTIPOREUX

IV.1. INTRODUCTION.

Le but final de notre recherche est de comprendre et de prévoir, par l'intermédiaire d'un modèle régional, la répartition des nitrates au sein d'un aquifère crayeux multiporeux. Il est donc important de déterminer les coefficients de transport à l'échelle du terrain pour être sûr de globaliser correctement les phénomènes identifiés par l'expérimentation en laboratoire. Pour atteindre cet objectif, nous avons fait appel aux essais de traçage qui sont, pour le transport miscible, ce que les essais de pompage sont pour les écoulements monophasiques.

Dans cette introduction, nous définissons les principaux concepts auxquels nous nous référerons par la suite. Nous décrivons également les aquifères que nous allons tester.

IV.1.a) Définition des traceurs.

Un traceur est une substance généralement miscible, non polluante pour les teneurs auxquelles on travaille, facilement détectable, peu présente dans le milieu testé, qui est injectée dans ce milieu en vue d'en caractériser l'écoulement et le transport. D'après cette définition, il est clair qu'une substance réputée toxique mais détectable en très faible teneur peut servir de traceur. En général, la dilution des traceurs est suffisante pour que l'écoulement de l'eau ne soit pas influencé par leur transport.

On définit souvent un traceur parfait comme une substance miscible, diluée idéalement, dont le comportement est essentiellement convectif (par exemple, l'eau tritiée). En karstologie, la plupart des traceurs sont considérés comme parfaits. Ils sont utilisés pour identifier les conduits karstiques et les relations privilégiées entre différents points d'un aquifère. Toutefois, même pour ces applications, on s'intéresse de plus en plus aux autres composantes du transport.

Dans notre cas, le but poursuivi est radicalement différent. Il s'ensuit que cette notion de perfection est, pour nous, tout à fait relative. En ce qui nous concerne, le traceur qui convient le mieux doit avoir un comportement se rapprochant le plus possible de celui du polluant étudié (la substance nitrate elle-même si c'est envisageable).

Pour nos expériences, nous avons choisi des traceurs fluorescents et des traceurs salins ioniques. Nous les répertorions dans le tableau suivant avec, en regard, la méthode utilisée pour leur détection dans les eaux prélevées.

Traceurs fluorescents	Méthode d'analyse
uranine ($\text{Na}_2\text{C}_{20}\text{H}_{10}\text{O}_5$)	fluorimètre à filtre (Turner 111)
rhodamine b ($\text{C}_{28}\text{H}_{31}\text{Cl N}_2\text{O}_3$)	fluorimètre à filtre (Turner 111)
naphtionate ($\text{Na C}_{10}\text{H}_8\text{NO}_3\text{S}-1/2 \text{H}_2\text{O}$)	spectrofluorimètre (Perkin-Elmer LS 50)
Traceurs salins cationiques	
lithium (Li^+)	spectrométrie d'émission de flamme (Perkin-Elmer 603)
potassium (K^+)	spectrométrie d'absorption atomique (Perkin-Elmer 603)
sodium (Na^+)	spectrométrie d'absorption atomique (Perkin-Elmer 603)
Traceurs salins anioniques	
iodure (I^-)	électrode spécifique (radiometer F1032I)
nitrate (NO_3^-)	électrode spécifique (radiometer F2002)
chlorure (Cl^-)	titrage avec une électro- de d'argent (radiometer P4011)

Tableau IV.1: traceurs choisis et mode de détection utilisés pour les doser.

Signalons qu'il existe aussi des traceurs radioactifs (^{131}I , ^{51}Cr par exemple), détectés par radiométrie, ainsi que des traceurs particuliers (spores, bactéries), quantifiés par dénombrement. Ils ne sont pas utilisés dans le cadre de cette étude.

IV.1.b) Définition des différents types d'essais.

Il est possible de distinguer plusieurs catégories d'essais de traçage sur base des sollicitations qui sont imposées à l'aquifère testé.

Dans notre cas, comme l'aquifère n'affleure pratiquement pas, les points d'injection (I) et de prélèvement (P) sont des piézomètres crépinés au niveau des couches à caractériser. On distingue alors les différents tests suivant 2 caractéristiques.

1°) D'après le mode d'injection (sollicitation du transport), on distingue:

- des essais à injection brève: le traceur est envoyé dans le piézomètre I en un délai très court. On symbolise souvent l'opération par une fonction d'entrée de Dirac en argumentant que le délai d'injection est infiniment petit par rapport à la durée de restitution.
- des essais à injection prolongée: le traceur est solubilisé et la solution obtenue est introduite dans le piézomètre I par un dispositif régulateur du débit qui permet de répartir l'injection sur une durée non négligeable vis-à-vis de la durée de l'essai.

2°) Suivant le régime d'écoulement des eaux (sollicitation de l'écoulement), on différencie:

- des essais en écoulement convergent: un des points de prélèvement est le puits central du dispositif, dans lequel on réalise un essai de pompage. Le traceur est injecté en I lorsque l'écoulement est stabilisé. Les flux d'eaux sont alors convergents vers le point de pompage et le traceur a tendance à s'y diriger préférentiellement. Ces essais sont tout à fait indiqués pour comprendre les mécanismes de transport dans des conditions de captage, et notamment pour déterminer des périmètres de protection.
- des essais en écoulement naturel: dans ce second cas, l'écoulement de la nappe n'est pas modifié et est, par conséquent, plus uniforme. Ces tests conviennent mieux pour étudier un transport qui s'effectue sans action anthropique.

Signalons qu'il existe également des essais en puits unique où injection et pompage se font au même point. Le traceur est injecté dans un écoulement naturel et est récupéré, après un certain délai, par pompage. Ce genre de test est utile lorsque le site à étudier n'est pas suffisamment équipé, mais leur interprétation est plus complexe en raison de la non-stationnarité de l'écoulement (contrairement aux deux autres catégories).

IV.1.c) Visualisation du processus de transport lors des essais.

Pour tous ces tests, il convient de choisir un nombre suffisant de points de prélèvement judicieusement positionnés et d'y échantillonner les eaux avec un pas adapté à la cinétique du problème. On peut ainsi reconstituer la courbe d'évolution temporelle de la concentration du traceur, appelée courbe de restitution au point étudié.

A partir de cette courbe fondamentale, image de l'histoire subie par le traceur depuis son injection, il est possible de dériver des courbes associées (distribution des temps de séjour, courbe de masse cumulée, courbes réduites) et des paramètres caractéristiques (temps et vitesse de transit, durée de restitution, temps modal, vitesse modale, ...). Ces notions sont très utiles pour une interprétation visuelle qualitative mais ne font qu'exprimer de manières différentes une même réalité.

Pour plus de détails à ce sujet, nous renvoyons le lecteur à la thèse de Ph. Meus (1993) et aux auteurs à qui il fait référence (Lepiller et Mondain 1986, Molinari 1976, Maloszewski et Zuber 1985, ...). Retenons que, pour un essai en écoulement convergent, le taux de restitution du traçage peut être calculé par la formule suivante:

$$r = M_r/M_o = \int_{t_o}^{+\infty} Q(t) \cdot c_m(t) \cdot dt / M_o \quad (IV.1)$$

avec $Q(t)$ = débit de pompage au point P à l'instant t
 $c_m(t)$ = concentration en traceur au même point et au même instant
 t_o = instant du début de l'injection au point I
 M_o = masse totale injectée au même point.
 M_r = masse totale restituée au point P

Cette notion perd évidemment toute signification lorsque le traçage est réalisé en écoulement naturel (à moins qu'on ne puisse déterminer le débit $Q(t)$ qui transite à travers une section S dont la concentration moyenne peut être assimilée à celle du point de prélèvement).

Enfin, il importe d'attirer l'attention sur le fait que la normation d'une courbe de restitution présente un risque de distorsion des résultats et qu'il est périlleux de comparer des courbes normées de traçages effectués dans des conditions différentes. Il est préférable d'interpréter les différentes courbes par un modèle approprié et de comparer les coefficients de transport qui en sont déduits.

Toutefois, si la qualité de la simulation n'est pas suffisante (phénomènes importants non pris en compte dans le modèle conceptuel, imperfections numériques, ...), cette comparaison sera tout aussi subjective.

IV.1.d) Choix d'un site de référence.

Trouver, dans les craies du Crétacé, un site suffisamment équipé pour réaliser des essais de traçage précis n'est pas chose facile. Nous avons opté pour le site de Bertrée (au voisinage de Hannut) qui se situe à proximité du bassin versant de la Hesbaye, au Nord-Ouest de la crête de partage entre cette zone d'écoulement généralement libre et celle du Nord du pays plus souvent captive (voir figure IV.1.).

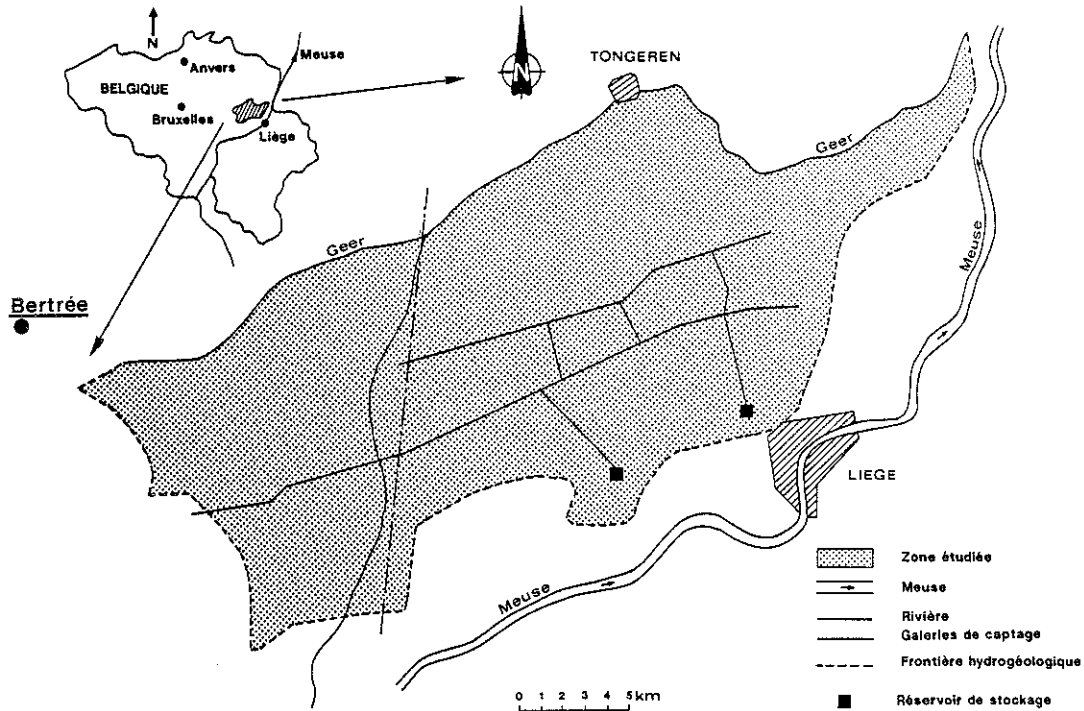


figure IV.1: plan de situation (Bertrée)

IV.1.d.1) Contexte géologique et hydrogéologique.

A cet endroit, la séquence lithologique se présente comme suit (figure IV.2):

- à environ 25 m de profondeur, on rencontre les couches crayeuses du Crétacé. Leur épaisseur est vraisemblablement de 35 mètres et les niveaux supérieurs sont relativement plus fracturés;
- les craies sont recouvertes d'une couche marneuse semi-perméable, d'environ 10 m de puissance, dont l'argilosité est variable. Cette couche est vraisemblablement d'âge heersien (L1a);
- on constate ensuite une transition progressive vers des grès peu indurés, fissurés, et altérés, formant une couche de 12 mètres d'épaisseur. Ces dépôts d'âge landénien ont un caractère plus sableux dans la partie supérieure (particulièrement le dernier mètre);
- le tout est surmonté d'une couche de 3 mètres de limons superficiels dont la base présente plutôt les caractéristiques d'un dépôt alluvionnaire.

Parmi ces formations, deux sont aquifères. Les dépôts landéniens sont le siège d'une nappe phréatique libre dont la surface se situe à 3 mètres (voire 3,5 mètres) sous le niveau du sol. Les craies du Crétacé constituent également une importante réserve d'eau. La nappe correspondante est semi-captive et la cote piézométrique est de l'ordre de -2 mètres par rapport au sol, soit un niveau supérieur à celui de la nappe libre.

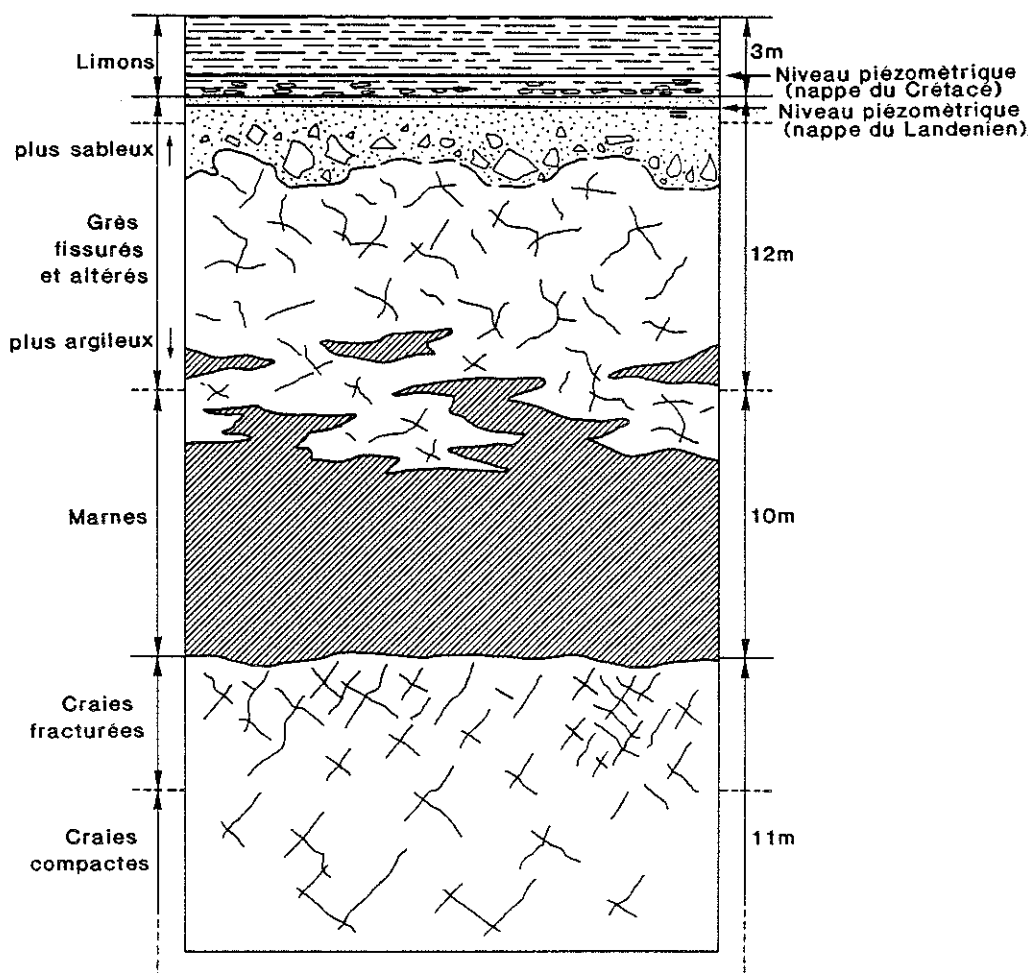


figure IV.2: séquence lithologique sur le site de Bertrée et niveaux statiques des 2 nappes (Crétacé et Landénien)

IV.1.d.2) Equipement du site.

Le site est équipé de 12 piézomètres (de diamètre interne égal à 50 mm), jumelés par groupe de 2. A chaque groupe correspondent un piézomètre d'une profondeur de 20 m, crépiné en regard des dépôts landéniens (numéros impairs) et un piézomètre d'une profondeur de 35 mètres, crépiné au niveau de l'aquifère crétacé (numéros pairs).

Au centre du dispositif (voir figure IV.3.), on trouve 2 puits. Le premier (P1) a un diamètre interne de 300 mm et une profondeur de 20 m; il est crépiné dans le Landénien. Le second (P2) a un diamètre interne de 125 mm et une profondeur de 47 m; il est crépiné dans le Crétacé.

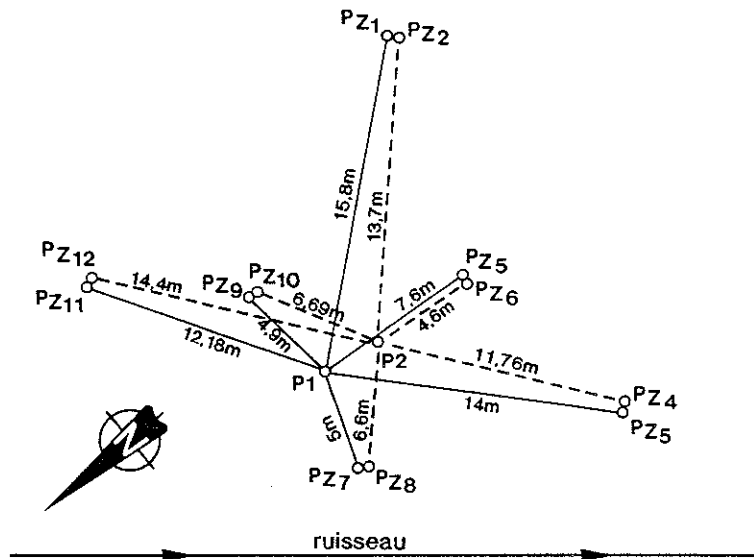


figure IV.3: équipement du site de Bertrée.

Avec un tel dispositif, il est possible de faire des essais tant en écoulement convergent (pompages aux puits) qu'en écoulement uniforme (nombre suffisant de piézomètres). De plus, ce site permet de tester et de comparer, à des échelles similaires, deux aquifères fort différents. En outre, il est intéressant de déterminer les propriétés de transport à cet endroit puisqu'à proximité immédiate, se trouve une station d'épuration dont les effluents sont susceptibles de migrer vers et dans les aquifères.

Pour toutes ces raisons, le site de Bertrée a été choisi comme référence. Cependant, même si ce site est bien équipé (piézomètres nombreux dont le temps de réaction est faible en raison de leur petit diamètre), il présente quelques inconvénients qu'il faut avoir à l'esprit :

- les distances entre piézomètres sont peut être insuffisantes par rapport à la taille supposée de l'élément de volume représentatif. Toutefois, ceci permet de travailler à des débits de pompage plus faibles et avec des durées d'expérience relativement courtes;
- les couches de craies ne sont pas traversées sur la totalité de leur épaisseur, ce qui peut compliquer l'interprétation des essais;
- géographiquement, le site se trouve en bordure du bassin dont on désire caractériser le comportement, dans des conditions légèrement différentes (nappe semi-captive à captive).

IV.1.d.3) Piézométrie naturelle des nappes.

Lors des différents tests que nous avons effectués sur le site, la première opération consistait à mesurer les niveaux d'eau dans les puits et les piézomètres avant tout pompage dans la nappe.

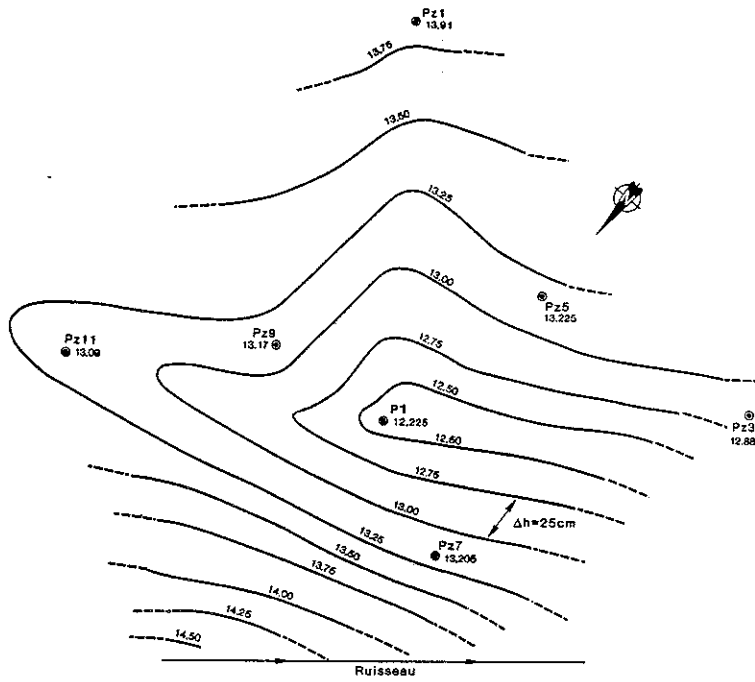
Après correction par nivellement topographique, il est possible, en choisissant une altitude de référence, de déterminer les hauteurs piézométriques correspondantes (tableaux IV.2 et IV.3) et de dresser des cartes piézométriques interprétées à partir de ces valeurs (figures IV.4a et IV.4b pour les nappes du Landénien et du Crétacé respectivement). En ce qui concerne la nappe phréatique du Landénien, nous avons également pris en compte le petit cours d'eau qui longe le site. La cote de son plan d'eau a été déterminée en 2 points (R1 et R2) par nivellement topographique. Elle est vraisemblablement en relation avec celle de la nappe phréatique.

piézomètre ou puits	h (m) déc.90	h (m) fév.91	h (m) avr.91	h (m) fév.92	h (m) août 92
Pz1	14.425	14.655	13.910	13.935	14.055
Pz3	13.020	12.985	12.880	12.690	12.640
Pz5	13.550	13.475	13.225	13.170	13.070
Pz7	13.310	13.270	13.205	13.000	12.915
Pz9	13.465	13.350	13.170	13.010	12.905
Pz11	13.330	13.260	13.090	12.985	12.850
P1	12.535	12.570	12.335	12.310	12.185
R1	=====	14.465	=====	=====	=====
R2	=====	12.865	=====	=====	=====

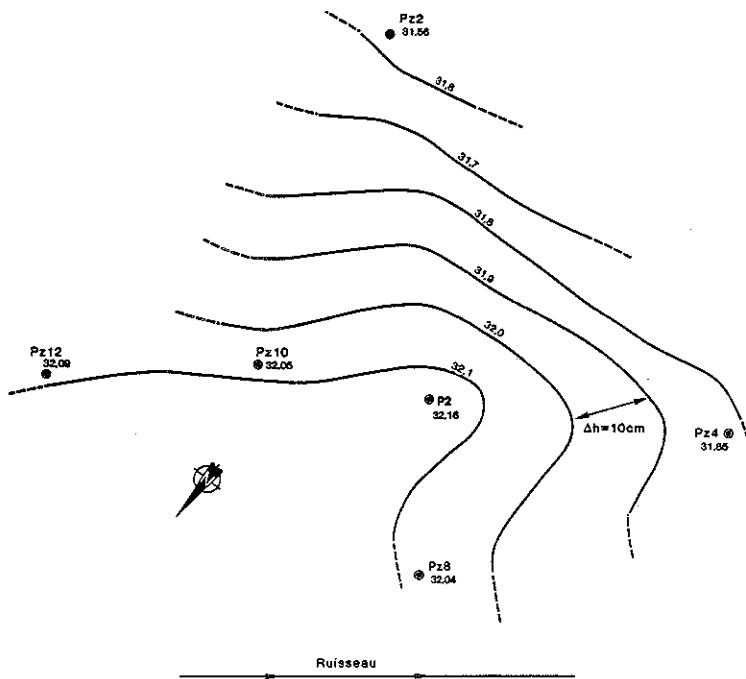
tableau IV.2: niveaux piézométriques naturels dans la nappe du Landénien à Bertrée (niveau de référence = -16 m sous la surface du sol au puits P1).

piézomètre ou puits	h _i (m) déc.90	h _i (m) fév.91	h _i (m) avr.91	h _i (m) fév.92	h _i (m) août 92
Pz2	31.780	32.820	31.575	31.560	31.285
Pz4	31.955	32.165	31.940	31.850	31.680
Pz6	----- bouché à 6 m de profondeur -----				
Pz8	32.625	32.400	32.210	32.040	31.745
Pz10	32.625	32.435	32.220	32.050	31.825
Pz12	32.750	32.500	=====	32.090	31.915
P2	=====	=====	=====	32.160	31.985

tableau IV.3: niveaux piézométriques naturels dans la nappe du Crétacé à Bertrée (niveau de référence = -35 m sous la surface du sol au puits P2).



a) nappe du Landénien (avril 1991)



b) nappe du Crétacé (février 1992)

figure IV.4: site de Bertrée, cartes piézométriques interprétées, écoulement naturel.

De ces résultats, on peut tirer quelques conclusions :

- Entre décembre 1990 et août 1992, on constate une baisse de pression équivalente à environ 45 cm d'eau pour la nappe du Landénien et 65 cm d'eau pour la nappe du Crétacé. Ces dépressions peuvent être associées à des recharges faibles durant la période d'observation.
- l'écoulement dans la nappe du Landénien est dirigé globalement vers l'Ouest. Il est fortement influencé par le ruisseau dans lequel il semble avoir un exutoire. La distorsion importante des isopièzes démontre le caractère hétérogène de l'aquifère³³. On peut notamment deviner la présence de 2 axes drainants (figure IV.4a);
- dans la nappe du Crétacé, la situation est fort différente. L'écoulement est orienté plutôt vers le Sud. Les isopièzes sont moins resserrées et leur allure est plus régulière. Par conséquent, on peut penser que le milieu est globalement plus "transmissif" et plus homogène.

IV.2. TRACAGES EN ECOULEMENT CONVERGENT SUR LE SITE DE BERTREE.

Trois traçages de ce type ont été effectués. Nous avons testé d'abord l'aquifère landénien (2 tests), puis celui du crétacé (1 test). Nous présentons, dans cette section, les résultats de ces essais ainsi que les informations qui en ont été déduites. Nous parlerons de multitraçage puisque nous avons injecté plusieurs traceurs qui, normalement, n'interagissent pas entre eux.

IV.2.a) Premier multitraçage dans nappe phréatique du Landénien (février 1991).

IV.2.a.1) Description de l'essai de pompage.

Avant d'injecter les traceurs, un pompage a été réalisé en P1 jusqu'à obtention d'un régime stabilisé. Ce pompage a été prolongé jusqu'à ce que la concentration en traceur de l'eau pompée soit pratiquement revenue à sa valeur initiale. Le débit de pompage est de 10 m³/h. Celui-ci a duré 70,5 heures.

Les rabattements, dans les puits et les piézomètres, ont été régulièrement mesurés et on peut estimer qu'après 5 heures, la nappe atteint un régime quasiment stabilisé. Les valeurs finales des hauteurs piézométriques (hr) sont données au tableau ci-après en regard des rabattements correspondants (sr).

³³ Rappelons-nous les limites lithologiques imprécises dessinées à la figure IV.2.

piézomètre ou puits	h _f (m)	s _f (m)
Pz1	14.360	0.295
Pz3	12.760	0.225
Pz5	12.770	0.705
Pz7	13.125	0.145
Pz9	12.760	0.590
Pz11	12.750	0.510
P1	11.310	1.260

tableau IV.4: piézométrie en fin de pompage dans la nappe du Landénien (premier test).

A partir de ces chiffres, il est possible d'évaluer la piézométrie de la nappe lorsqu'elle est sollicitée par le pompage (figure IV.5.). On peut ainsi voir le resserrement des isopièzes près du puits et imaginer une crête de partage résultant de l'influence du ruisseau.

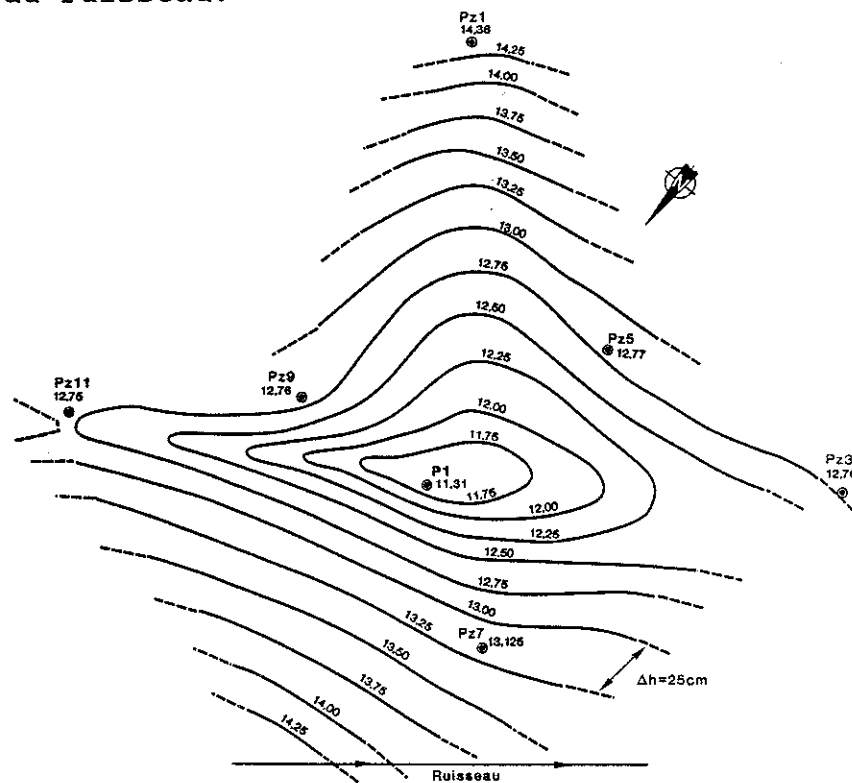


figure IV.5: site de Bertrée, carte piézométrique interprétée, nappe du Landénien, écoulement convergent, premier pompage ($10 \text{ m}^3/\text{h}$).

Signalons également qu'en fin de pompage, une variation anormale du niveau est constatée en Pz1. Nous expliquons celle-ci par une alimentation verticale de la nappe du Crétacé plus importante au niveau de ce piézomètre. En effet, les tubages Pz1 et Pz2 ont été placés dans le même trou lors de la foration et il est possible qu'ils ne soient pas parfaitement isolés l'un de l'autre. Toutefois, comme l'alimentation se fait per ascensum, ce phénomène n'engendre pas de pertes excessives à l'injection.

Nous avons interprété les données de pompage en supposant négligeables les infiltrations à travers les couches marneuses moins perméables³⁴. Trois méthodes ont été utilisées:

- la solution de Dupuit pour une nappe libre en régime permanent (en évaluant le rayon d'influence à 29 mètres);
- la solution de Jacob, par approximation logarithmique, en régime transitoire (en supposant que le rabattement reste faible par rapport à la hauteur saturée, ce qui est le cas ici);
- la solution des puits-images en régime stabilisé (pour tenir compte de la limite à potentiel imposé que constitue le ruisseau).

Les valeurs de transmissivité et de perméabilité calculées sont reprises aux tableaux suivants:

(↓)

piézomètre ou puits	T Dupuit (m ² /s)	T Jacob (m ² /s)	T images (m ² /s)
Pz1	1.2 10 ⁻³	3.3 10 ⁻³	1.2 10 ⁻³
Pz3	1.4 10 ⁻³	1.1 10 ⁻²	9.3 10 ⁻⁴
Pz5	9.1 10 ⁻⁴	6.3 10 ⁻³	7.1 10 ⁻⁴
Pz7	4.7 10 ⁻³	1.1 10 ⁻²	4.0 10 ⁻³
Pz9	1.6 10 ⁻³	1.4 10 ⁻²	1.1 10 ⁻³
Pz11	7.5 10 ⁻⁴	8.3 10 ⁻³	5.6 10 ⁻⁴
P1	2.2 10 ⁻³	3.9 10 ⁻³	1.7 10 ⁻³

tableau IV.5: transmissivités de l'aquifère landénien calculées lors du premier test.

piézomètre ou puits	K Dupuit (m/s)	K Jacob (m/s)	K images (m/s)
Pz1	9.2 10 ⁻⁵	2.5 10 ⁻⁴	9.2 10 ⁻⁵
Pz3	1.1 10 ⁻⁴	8.5 10 ⁻⁴	7.2 10 ⁻⁵
Pz5	7.0 10 ⁻⁵	4.8 10 ⁻⁴	5.4 10 ⁻⁵
Pz7	3.6 10 ⁻⁴	8.5 10 ⁻⁴	3.1 10 ⁻⁴
Pz9	1.2 10 ⁻⁴	1.1 10 ⁻³	8.5 10 ⁻⁵
Pz11	5.7 10 ⁻⁵	6.4 10 ⁻⁴	4.3 10 ⁻⁵
P1	1.7 10 ⁻⁴	3.0 10 ⁻⁴	1.3 10 ⁻⁴

tableau IV.6: coefficients de perméabilité de l'aquifère landénien calculés lors du premier test (épaisseur saturée estimée à 13 m)

³⁴ Si le coefficient de perméabilité des marnes est de 10⁻⁷ m/s, il y correspond un débit d'infiltration de l'ordre de 0.5 m³/s pour une surface de 10⁴ m². Cette valeur peut être négligée par rapport au débit pompé.

On constate que les valeurs calculées par la méthode de Jacob sont systématiquement plus élevées. Ceci est normal étant donné que cette méthode interprète les résultats en régime transitoire et pas uniquement les valeurs stabilisées en fin de pompage.

On peut toutefois visualiser des axes plus perméables dans les directions Sud-Est/Nord-Ouest et Est-Ouest en traçant (figure IV.6) le diagramme directionnel des perméabilités (méthode des images).

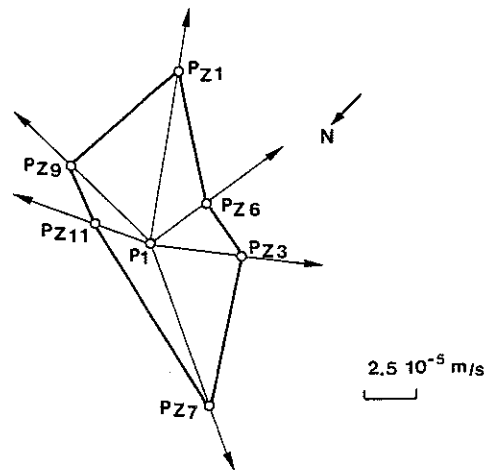


figure IV.6: site de Bertrée, nappe du Landénien, diagramme directionnel des perméabilités, premier pompage.

Signalons encore que, par la méthode de Jacob, il est possible d'évaluer le coefficient d'emmagasinement S de la nappe à 10^{-3} . Cette valeur semble un peu faible par rapport à la porosité efficace des dépôts landéniens (quelques %), déduite des essais de traçage effectués.

IV.2.a.2) Modélisation de l'essai de pompage.

Le but du modèle que nous envisageons ici est de déterminer, de façon objective, la sollicitation convective de l'aquifère lorsque les traçages sont effectués. Pour cette raison, nous calculerons uniquement la piézométrie en régime permanent d'écoulement.

Nous prendrons également en compte les hypothèses suivantes:

- le modèle sera bidimensionnel et les écoulements seront horizontaux. Ceci correspond à l'hypothèse de Dupuit selon laquelle la hauteur saturée varie peu et les transmissivités peuvent être considérées comme constantes; c'est le cas pour notre application puisque le rabattement représente seulement 10 % de la hauteur saturée;

- l'hétérogénéité est prise en compte en introduisant des matériaux de perméabilité différente. Chacun de ces matériaux est considéré comme isotrope;
- les limites du domaine ont une piézométrie imposée qui ne varie pas avant et après imposition du pompage. Sur un de ces bords, il s'agit de la piézométrie du ruisseau. Sur les autres, c'est une extrapolation de la piézométrie régionale au-delà de la zone d'influence du pompage.

La discrétisation comporte 374 éléments quadrilatères à 8 noeuds régis par une équation de diffusivité classique. Elle est représentée à la figure IV.7. On peut y voir la répartition des différents matériaux (on remarquera leur nombre important nécessaire pour représenter la forte hétérogénéité de l'aquifère). La calibration est obtenue en adaptant les coefficients de perméabilité et, dans une moindre mesure, en réajustant la piézométrie du pourtour. On obtient finalement des valeurs beaucoup plus contrastées pour les coefficients de perméabilité (tableau ci-après). Ceci est normal étant donné que les solutions analytiques ont tendance à atténuer les effets des hétérogénéités dont elles ne tiennent pas compte et qui sont pourtant prouvées par la lithologie.

matériau	K (m/s)
1	$7.5 \cdot 10^{-6}$
2	$5.0 \cdot 10^{-4}$
3	$1.4 \cdot 10^{-4}$
4	$7.5 \cdot 10^{-6}$
5	$3.0 \cdot 10^{-3}$
6	$1.0 \cdot 10^{-10}$
7	$1.0 \cdot 10^{-5}$
8	$1.0 \cdot 10^{-5}$
9	$4.0 \cdot 10^{-3}$

tableau IV.7: coefficients de perméabilité utilisés dans le modèle d'écoulement pour l'aquifère landenien (premier test)

Les cartes piézométriques calibrées sont représentées aux figures IV.8a et IV.8b respectivement pour les écoulements naturels et en pompage. En comparant avec les cartes interprétées (figures IV.4a et IV.5), on constate que les allures globales sont respectées mais on comprend également le caractère subjectif d'une piézométrie tracée à la main.

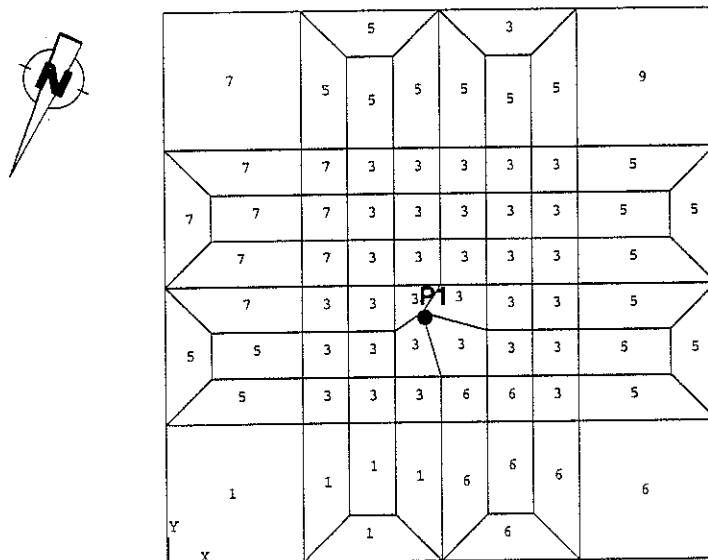
Pour juger de la précision de la calibration, il faut comparer les valeurs mesurées et calculées aux piézomètres et aux puits. Le tableau IV.8 ci-après fournit les écarts.

La précision est satisfaisante dans l'ensemble mais moins bonne au puits. N'oublions pas qu'à cet endroit, une hauteur de suintement (non prise en compte dans le modèle) peut s'établir en cours de pompage.³⁵

³⁵ Par la formule de Babbit et Caldwell (Recordon 1979), la hauteur de suintement est estimée à 35 cm.

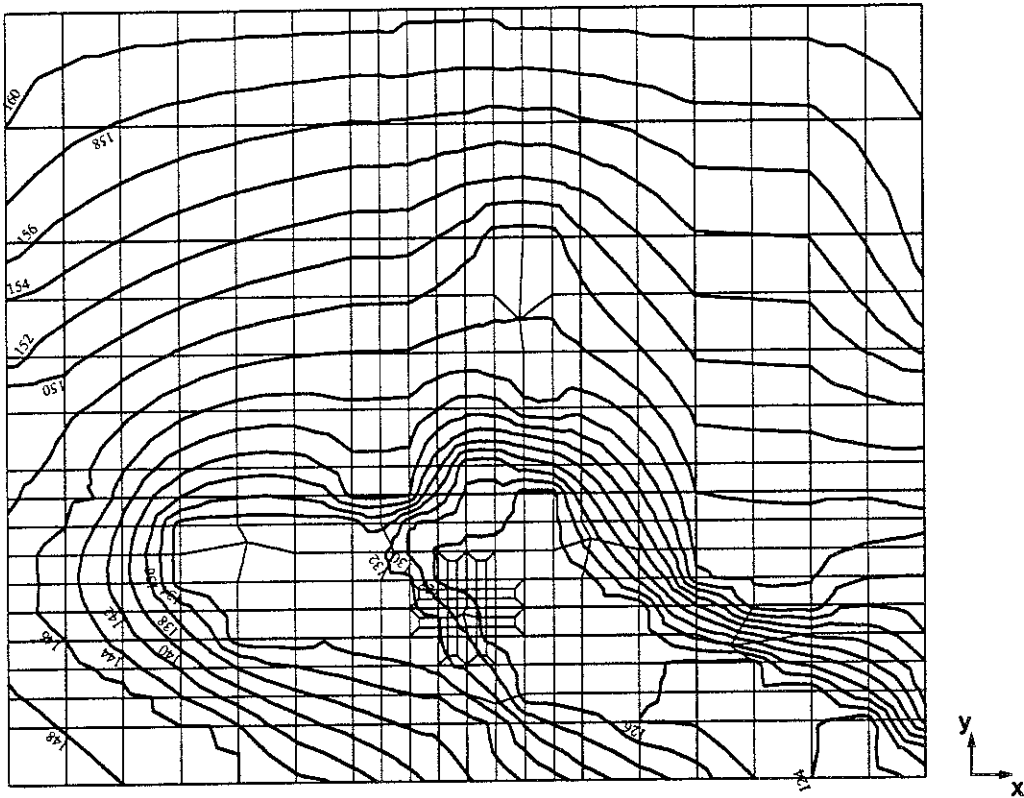
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	8	8	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	8	8	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	3	3	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	3	3	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	8	3	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	8	8	1	1	1	3	3	1	1		
1	1	1	1	1	1	3	3	1	1	1	3	8	8	1	1	1	3	3	1	1	
1	1	1	1	1	1	7	7	1	1	1	3	8	9	1	1	1	3	3	1	1	
1	1	1	1	9	P21	5	7	5	3	1	3	8	9	1	P25	1	3	3	1	1	
1	1	1	1	9	5	5	7	5	3	1	3	8	9	1	1	1	3	3	1	1	
1	1	1	1	1	5	5	5	5	5	5	5	5	1	1	1	1	3	1	1	1	
1	1	1	1	1	5	1	5	5	5	5	5	9	1	1	1	1	1	1	1	1	
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	5	5	5	1	1	1	1	1	1	1	
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	6	6	6	5	5	5	5	9	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	6	6	1	1	1	5	5	5	1	1	1
4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	5	5	1	1	1

a) vue d'ensemble

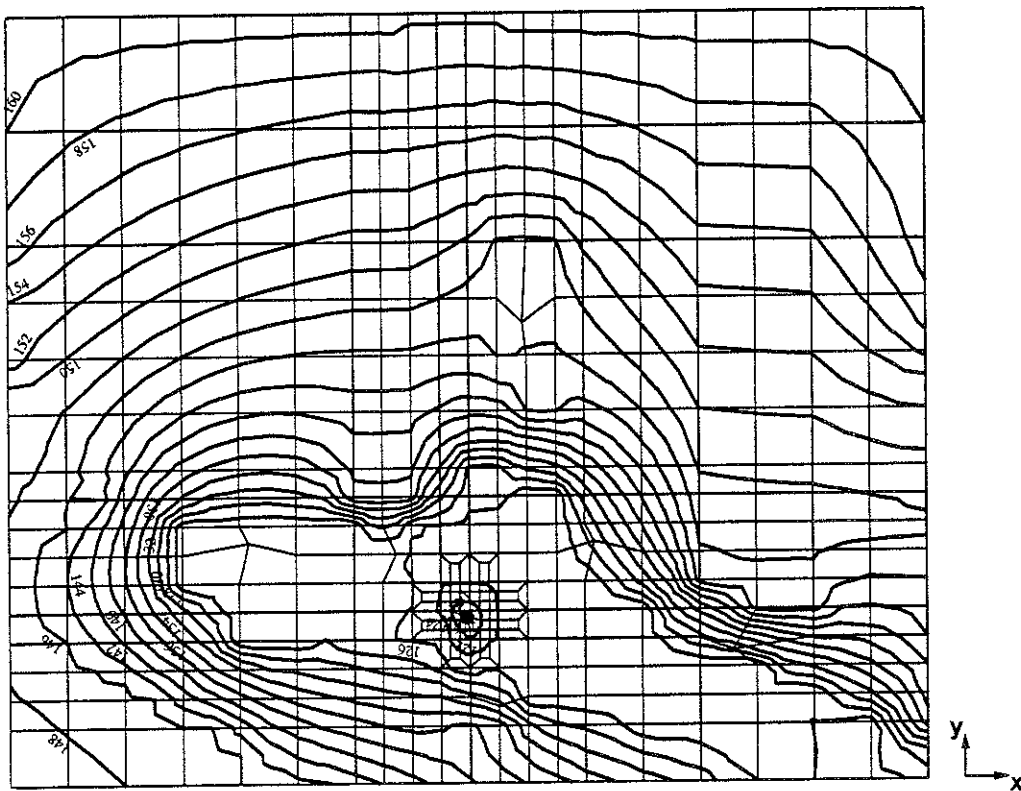


b) à proximité du puits P1

figure IV.7: site de Bertrée, nappe du Landénien, discrétisation pour le modèle écoulement



a) piézométrie naturelle ($\Delta h = 20$ cm)



b) piézométrie en régime stabilisé de pompage ($\Delta h = 20$ cm)

figure IV.8: site de Bertrée, nappe du Landénien, piézométrie calculée par le modèle écoulement (premier test).

piézomètre ou puits	hi cal - hi mes (cm)	hf cal - hf mes (cm)
Pz1	- 5	+ 9
Pz3	- 3	+ 9
Pz5	- 36	+ 11
Pz7	- 1	- 6
Pz9	- 19	- 8
Pz11	+ 3	- 9
P1	+ 34	+ 23

tableau IV.8: écarts entre les hauteurs piézométriques calibrées calibrées et mesurées (Landénien, premier test)

Finalement, nous avons également représenté les cartes de flux d'eau (figure IV.9) où apparaissent clairement les axes drainants.

IV.2.a.3) Description des tracages.

Après 7 heures de pompage, les traceurs ont été injectés dans les piézomètres Pz1 et Pz9 pour lesquels il est clair que l'écoulement se fait préférentiellement vers le puits.

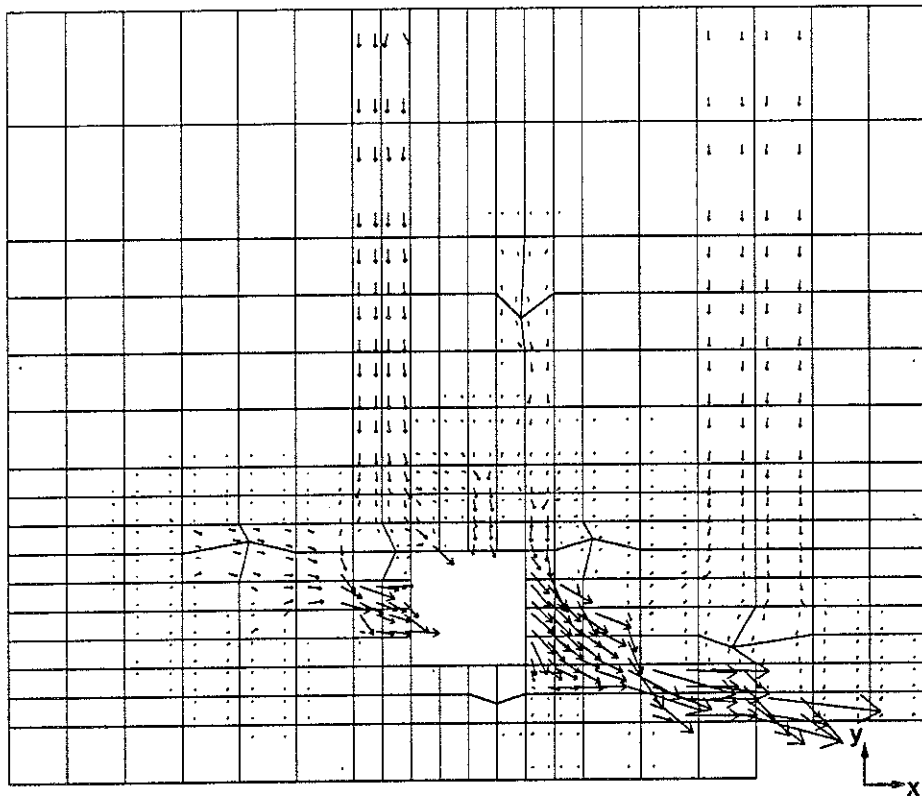
Le dispositif d'injection utilisé est décrit à la figure IV.10a. Le traceur est déversé par un tube plongeur entre 2 injections d'eau. Les débits d'eau proviennent d'un circuit indépendant et le polluant est débité par un vase de Mariotte dont la dépression est supposée constante.

Avec ce dispositif, on espère régler la durée d'injection et confiner le traceur. La quantité qui retombe dans la zone morte du piézomètre (zone non crépinée) serait faible car la zone de turbulence est réduite. De plus, le débit d'eau qui injecté crée une surpression au voisinage du piézomètre (figures IV.10b et IV.10c); on assurerait ainsi une pénétration plus rapide du traceur.

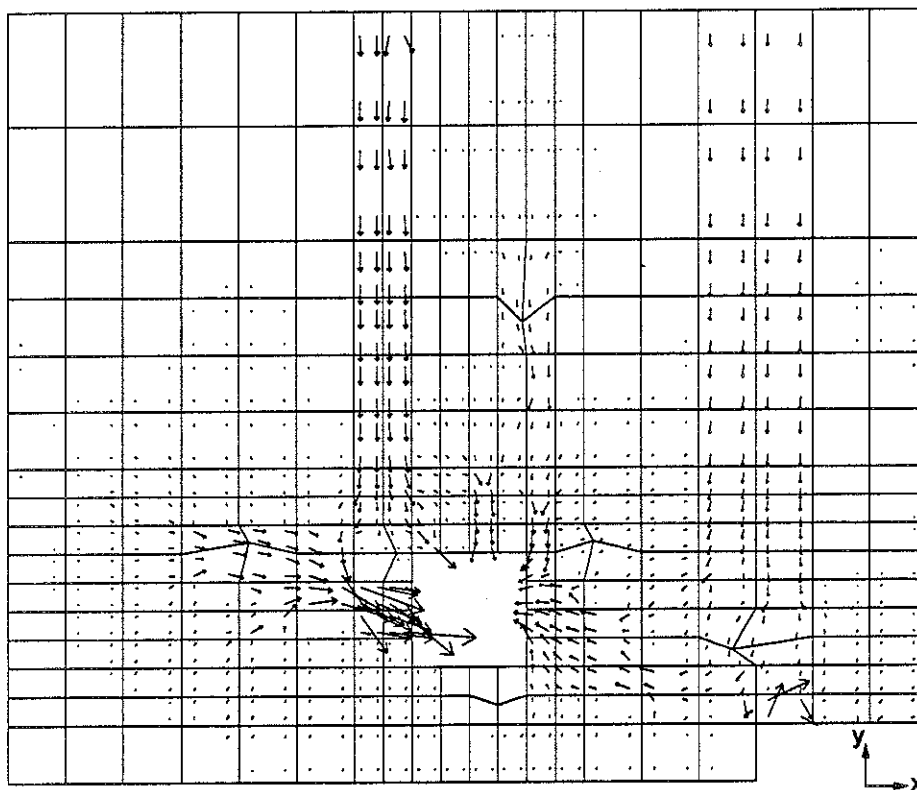
Les traceurs choisis sont:

- au piézomètre Pz1: 4 g d'uranine (dilués dans 50 l)
1,145 kg de LiCl
10,636 kg de NaCl
- au piézomètre Pz9: 1 g de rhodamine B (dilués dans 30 l)
207 g de KI
5,130 kg de KNO₃

Ce choix n'est pas quelconque. Chaque injection comprend un traceur coloré et deux traceurs salins possédant un ion commun. Parmi ces deux derniers, il en est chaque fois un qui est absent dans la nature (Li⁺ et I⁻), ce qui permet de s'affranchir du bruit de fond de la nappe. L'autre est une substance réellement présente dans la nature et dont on désire connaître les caractéristiques (NO₃⁻, Na⁺).

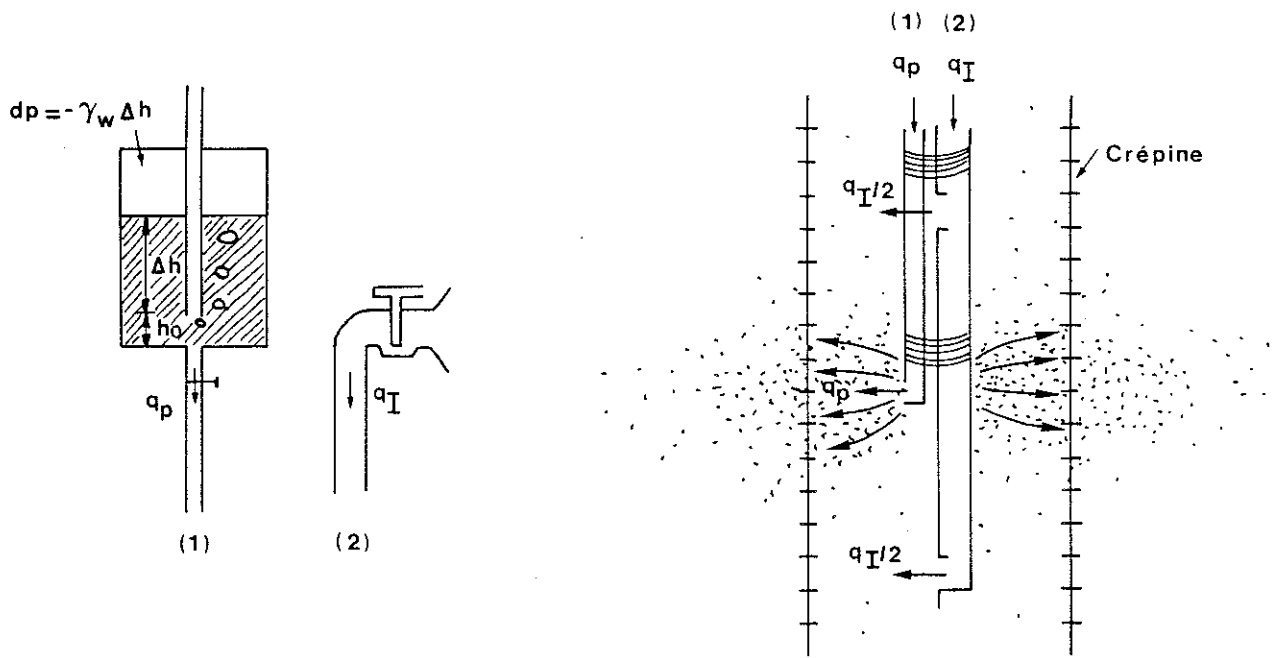


a) écoulement naturel $v_{Dmax} = 2.7 \cdot 10^{-5}$ m/s

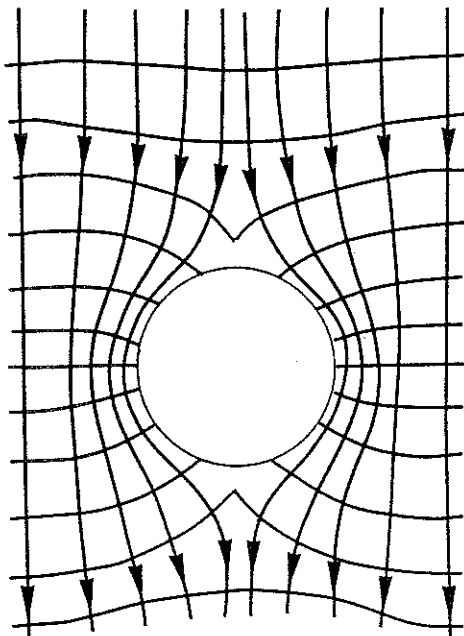


b) écoulement en régime stabilisé de pompage
 $v_{Dmax} = 7.9 \cdot 10^{-5}$ m/s

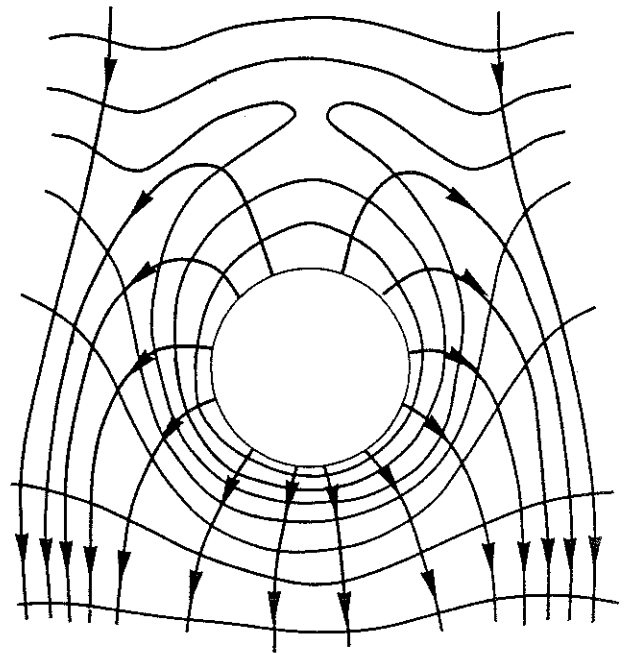
figure IV.9: site de Bertrée, nappe du Landénien,
 flux calculés par le modèle écoulement,
 (premier test).



a) dispositif d'injection



b) écoulement naturel au voisinage du piézomètre (Porel 1988)



c) écoulement forcé par l'injection au même point (Porel 1988)

figure IV.10: mode d'injection des traceurs.

Les débits d'injections sont:

- au piézomètre Pz1:

$q_I = 0,505 \text{ m}^3/\text{h}$
 $q_P = 8 \text{ l/h}$ pendant 6 heures (48 litres injectés);

- au piézomètre Pz9:

$q_I = 0,436 \text{ m}^3/\text{h}$
 $q_P = 70 \text{ l/h}$ pendant 25 minutes (29 litres injectés).

Les débits de solution q_P ne sont pas connus avec précision car le vase de Mariotte que nous avons utilisé s'est révélé peu précis.

Les courbes de restitution au puits ont pu être obtenues pour l'uranine, le lithium Li^+ , le sodium Na^+ , et le nitrate NO_3^- (figure IV.11)³⁶. On remarquera la densité d'échantillonnage (pas de 20 minutes en moyenne).

Les taux de restitution r correspondants sont donnés par le tableau ci-après :

traceur	M_0 (kg)	r (%)	tableau IV.9: masses injectées et taux de restitution des traceurs (Landenien, premier test)
uranine	$3.43 \cdot 10^{-3}$	4	
Li^+	$1.63 \cdot 10^{-1}$	17	
Na^+	3.61	12	
NO_3^-	3.04	42	

En ce qui concerne l'iodure et la rhodamine, les quantités injectées étaient insuffisantes et les contrastes de concentration sont tombés sous la limite de détection. Pour les mêmes raisons, les courbes de l'uranine et du sodium sont très irrégulières. En revanche, pour le lithium et le nitrate, les courbes se prêtent à une analyse quantitative. Remarquons également le bruit de fond important qui existe pour le sodium (15.5 ppm) et le nitrate (21.7 ppm).

IV.2.a.4) Modélisation des traçages.

Nous avons modélisé les traçages au lithium et au nitrate. La première simulation a été réalisée avec un maillage F.U.P.G. 10×14 (figure IV.12a).³⁷ Elle a fait l'objet du travail de fin d'études de X. Renard (1991). Pour cette application, l'aquifère est très hétérogène alors qu'on n'a considéré qu'un seul matériau.

³⁶ Des prélèvements statiques ont été effectués dans les piézomètres Pz7 et Pz3 mais rien n'y a été détecté.

³⁷ L'utilisation de la méthode F.U.P.G. nécessite le choix d'un petit pas de temps. Dans toutes nos simulations, le nombre de pas est grand. Il se situe entre 100 et 300.

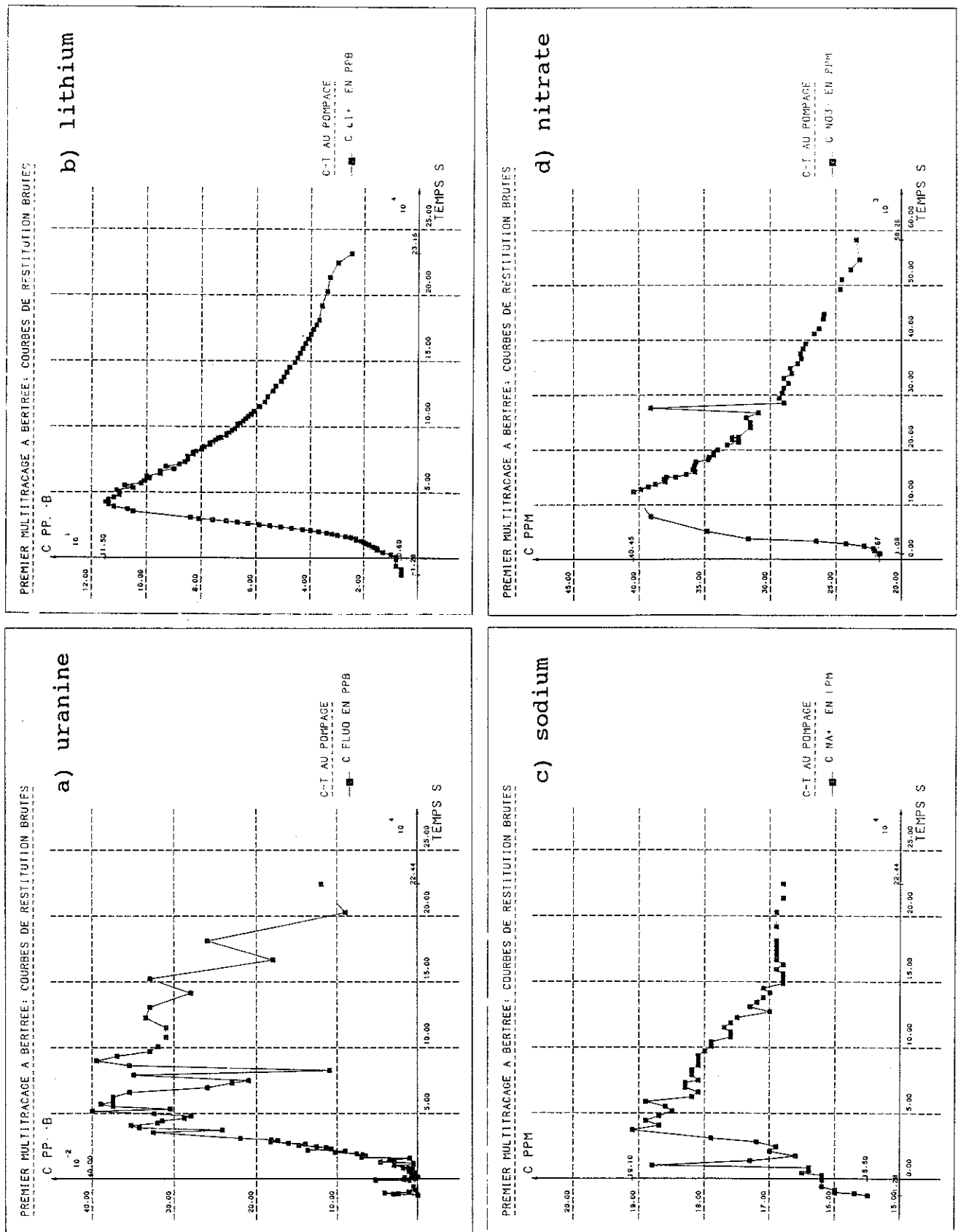


figure IV.11: site de Bertrée, nappe du Landénien, courbes de restitution au puits P1, (premier multitraçage).

Le comportement déduit sera donc global. Cette approche nous semble plus raisonnable que d'essayer de distinguer l'influence de chaque matériau différent. Toutefois, l'hétérogénéité de la sollicitation convective a été conservée grâce au programme d'interpolation.

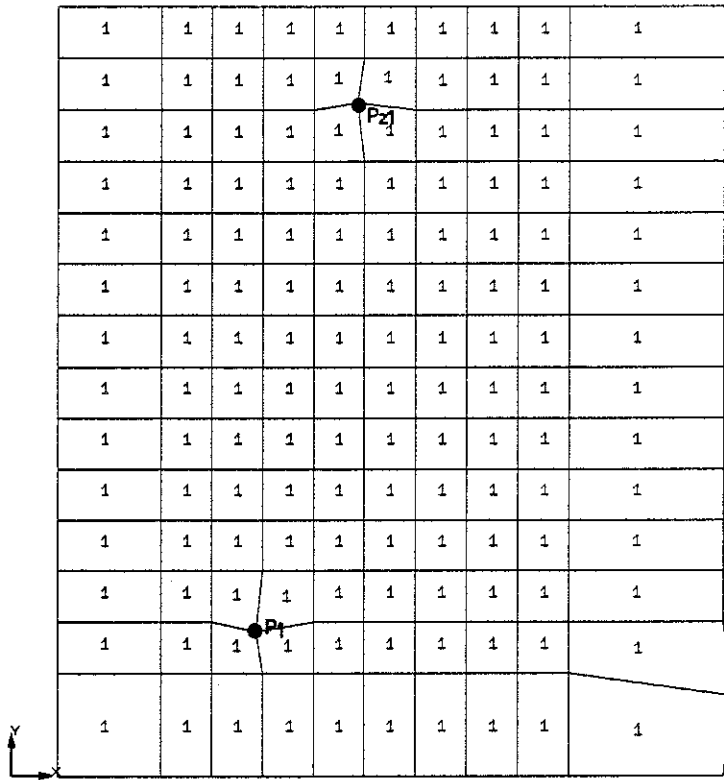
Comme le montre la figure IV.12b, les vitesses d'écoulement sont dirigées vers l'intérieur du modèle. Pour cette raison, nous y précisons la concentration qui sera celle du bruit de fond (il en ira de même pour toutes les simulations en écoulement radial convergent). En ce qui concerne l'injection, nous avons utilisé un élément de frontière spécial pour lequel on précise la vitesse de convection du traceur dans le piézomètre (V_{out}) et dans la nappe (V_{in}) ainsi que la concentration au piézomètre (C_{out}) pendant la durée du déversement (6 heures). Cette injection s'est faite dans une zone perméable dont l'épaisseur (e_{inj}) est choisie en fonction des données lithologiques. Elle est dominée par la convection (figure IV.13a).

La courbe de restitution au puits, obtenue après calibration, est très proche des points expérimentaux (figure IV.13b). Elle correspond aux coefficients suivants (à introduire dans le système I.46 p.34 sans considérer la composante de dégradation et en supposant que la dispersion hydrodynamique se résume à la dispersion mécanique).

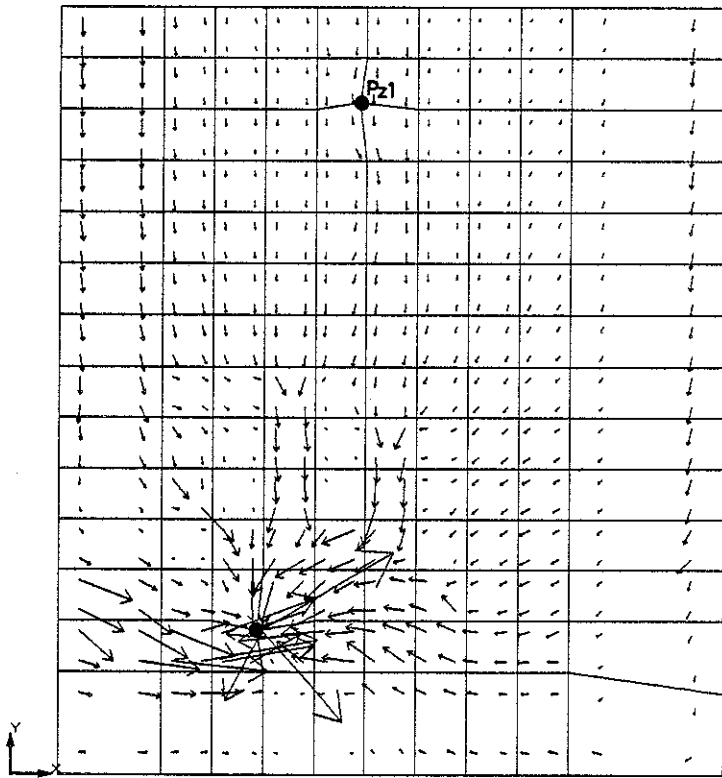
paramètres de transport		paramètres d'injection	
a_T (m)	0.25	V_{in} (m/s)	$5.0 \cdot 10^{-5}$
a_L (m)	6.00	V_{out} (m/s)	$5.0 \cdot 10^{-5}$
α_d (s^{-1})	$3.6 \cdot 10^{-8}$	C_{out} (ppb)	$1.0 \cdot 10^6$
θ_m (%)	6.0	e_{inj} (m)	13.0
θ_{im} (%)	12.0		
R_{dm}	1.0		
R_{dim}	1.0		

tableau IV.10: paramètres de calibration, premier test (Landénien), traçage au lithium.

La répartition spatiale des concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective et courbes d'isovaleurs) et dans l'eau immobile (courbes d'isovaleurs) ainsi que la carte des flux totaux (rapportés à la surface de milieux poreux) ont été dessinées (figures IV.14a, b, c, et d), à un instant qui correspond à 17h30' de surveillance. Ces graphiques permettent de constater que la discrétisation spatiale est un peu trop grossière (oscillations visibles sur la vue en perspective). On voit également que le maximum spatial de concentration dans l'eau mobile se situe à mi-chemin entre l'injection et le pompage. En fait, il ne se déplacera que très tardivement vers le puits. Ceci peut se comprendre en examinant les flux correspondants. En raison d'une importante convection au voisinage du puits, il n'est pas nécessaire d'avoir une concentration élevée pour obtenir un flux élevé de traceur extrait du système.

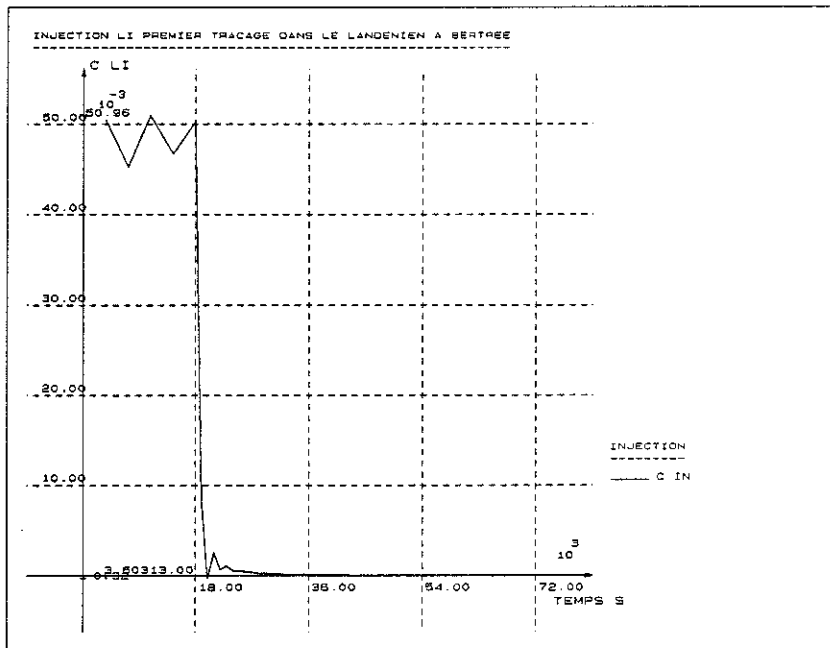


a) discrétisation

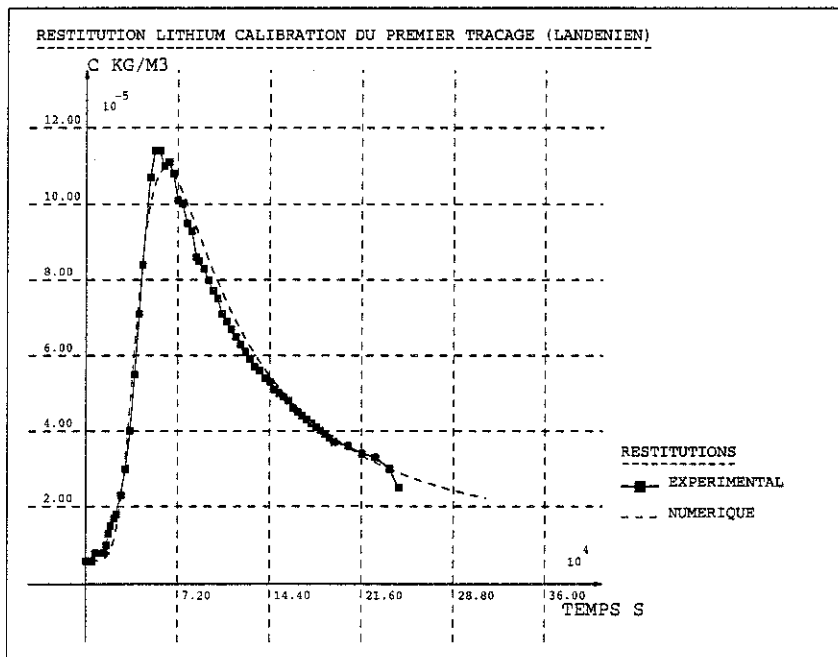


b) vitesses de Darcy interpolées,
 $VD_{max} = 2.6 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$

figure IV.12: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au lithium, sollicitation convective.

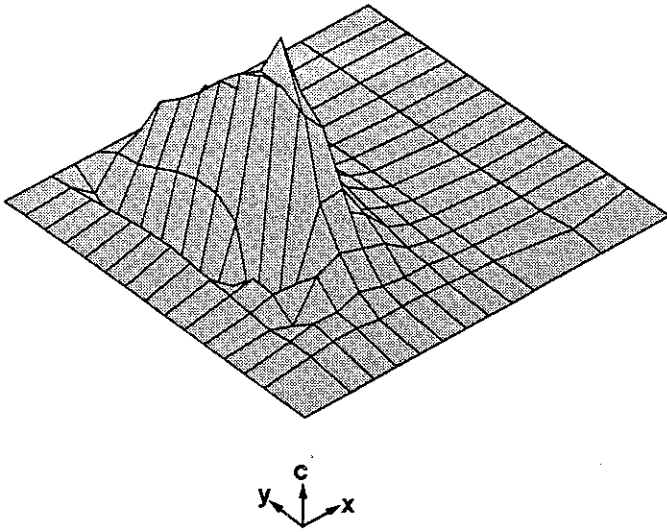


a) injection en Pz1 (concentration dans l'aquifère C_{im})

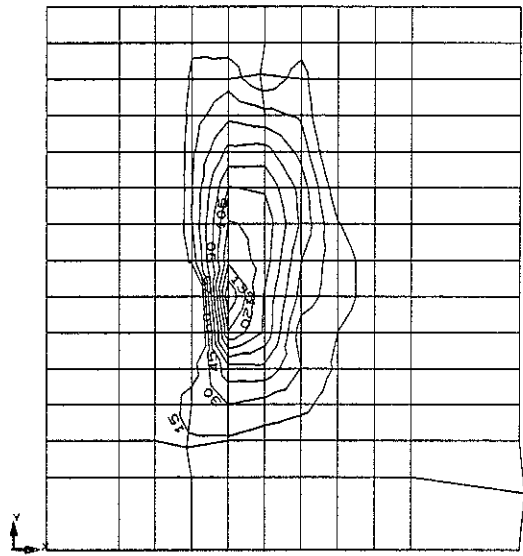


b) restitutions au puits P1 (expérimentale et modélisée)

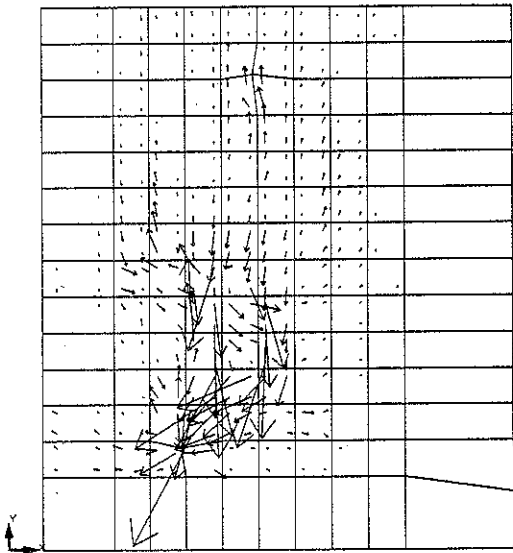
figure II.13: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au lithium, évolution temporelle des concentrations.



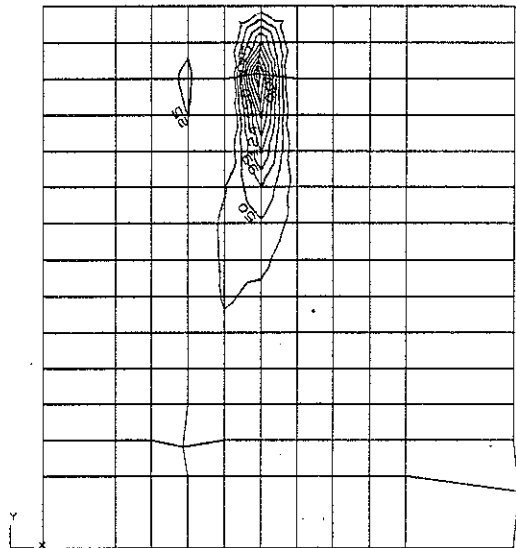
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 150$ ppb



b) flux totaux
 $f_{\max} = 2.48 \cdot 10^{-8} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 250$ ppb

figure IV.14: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au lithium, résultats de la simulation (après 17h 30').

Par contre, lorsque la convection est moins grande, la dispersion joue un rôle plus important et le sens du flux peut être modifié par rapport à l'écoulement.

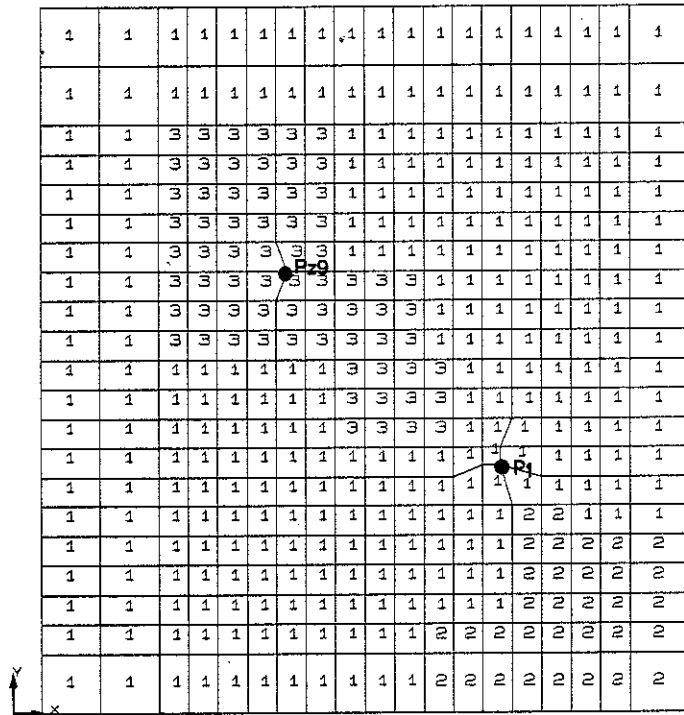
En ce qui concerne l'eau immobile, la propagation est beaucoup plus lente et une quantité importante de traceur est temporairement stockée au voisinage du point d'injection.

Pour le traçage au nitrate, nous avons procédé de manière similaire. La discrétisation comporte, cette fois, 399 éléments F.U.P.G. (figure IV.15a). Cependant, puisque la zone influencée par le traçage est moins hétérogène, on a distingué 3 matériaux répartis de la même manière que pour le modèle écoulement. Les flux d'eau interpolés sont représentés à la figure IV.15b. Pour ce traçage, l'injection a été réalisée dans une zone à faible circulation. En conséquence, l'évacuation du traceur ne s'est faite que très progressivement; si bien que, pour calibrer le modèle, la concentration c_{out} dans le piézomètre a dû être décrétementée progressivement plutôt que d'un seul coup (figures IV.16a et b). Il s'ensuit que le maximum spatial de concentration dans l'eau mobile reste à proximité immédiate du puits et que le déphasage de la propagation par rapport à l'eau immobile est moins important (figure IV.17). La calibration obtenue est satisfaisante (figure IV.16c). Il y correspond les coefficients suivants:

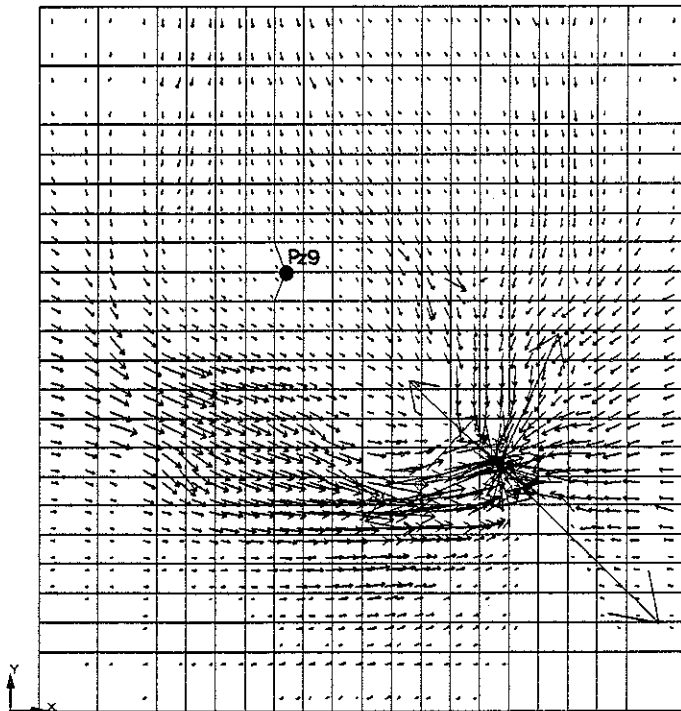
paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3
a_r (m)	0.10	0.10	0.10
a_L (m)	2.50	2.50	2.50
α_d (s ⁻¹)	$4.5 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-9}$	$4.5 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.0	0.2	0.8
θ_{im} (%)	1.5	1.0	1.0
R_{dm}	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0

paramètres d'injection		tableau IV.11: paramètres de calibration, premier test (Landenien), traçage au nitrate.
v_{in} (m/s)	$5.0 \cdot 10^{-5}$	
v_{out} (m/s)	$5.0 \cdot 10^{-5}$	
c_{out} (ppm)	$1.0 \cdot 10^6$	
e_{inj} (m)	13.0	

On remarquera que les paramètres que nous avons fait varier d'un matériau à l'autre sont les porosités et la constante de transfert pour l'eau immobile. Ceci permet de restaurer des vitesses de convection moins contrastées et plus vraisemblables, tout en gardant une évaluation globale du processus dispersif. Le partitionnement du traceur entre eau mobile et eau immobile sera également plus objectif. Par rapport aux paramètres obtenus pour le lithium, on obtient des porosités plus faibles, des dispersivités longitudinales moins grandes et un transfert plus rapide vers l'eau immobile. Nous attribuons ces différences à l'hétérogénéité de l'aquifère.

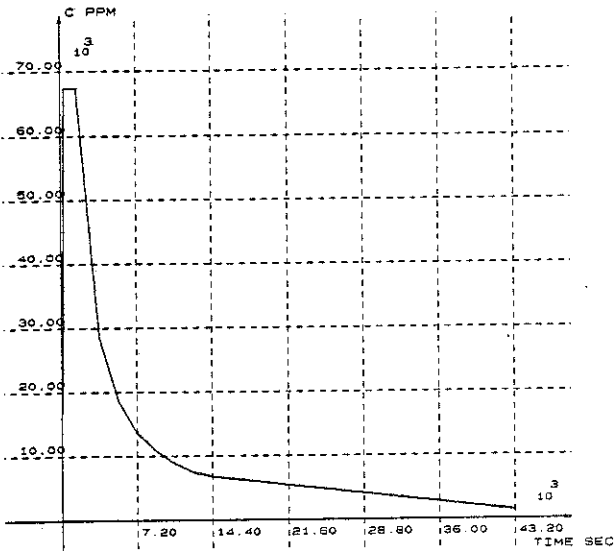


a) discrétisation

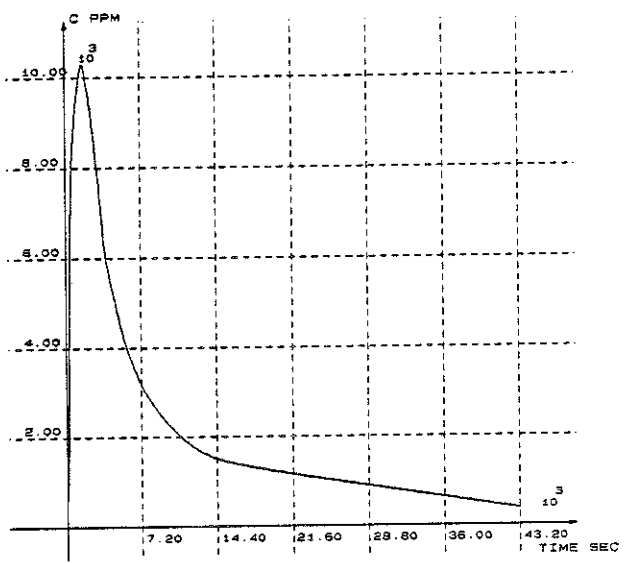


b) vitesses de Darcy interpolées,
 $VD_{max} = 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$

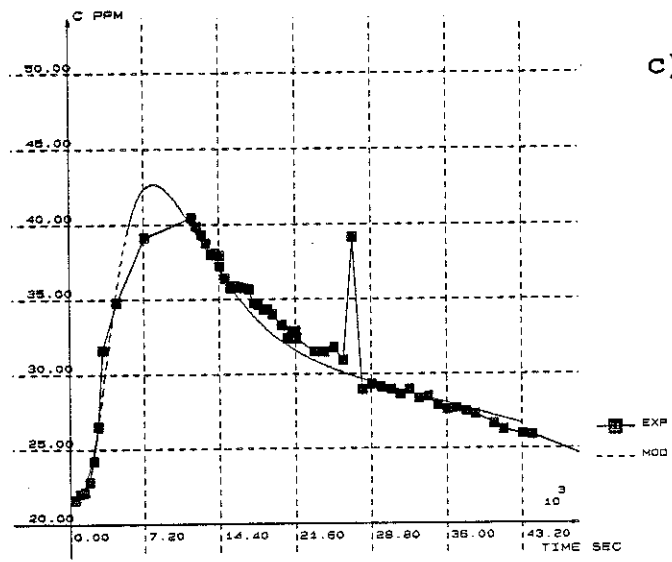
figure IV.15: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au nitrate, sollicitation convective.



a) injection en Pz9 (concentration dans le piézomètre Cout)

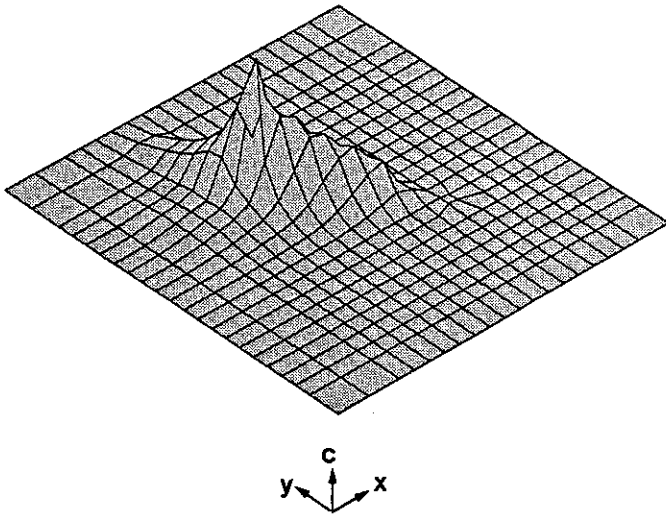


b) injection en Pz9 (concentration dans l'aquifère cin)

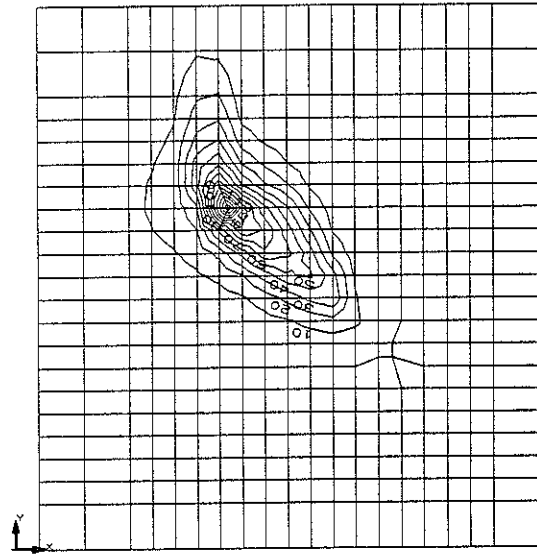


c) restitutions au puits P1 (expérimentale et modélisée)

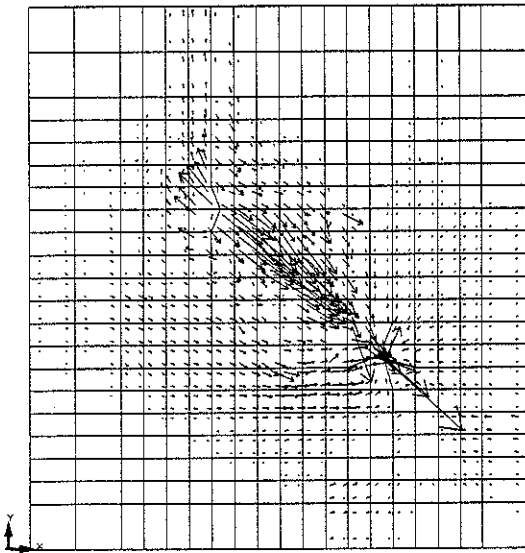
figure II.16: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au nitrate, évolution temporelle des concentrations.



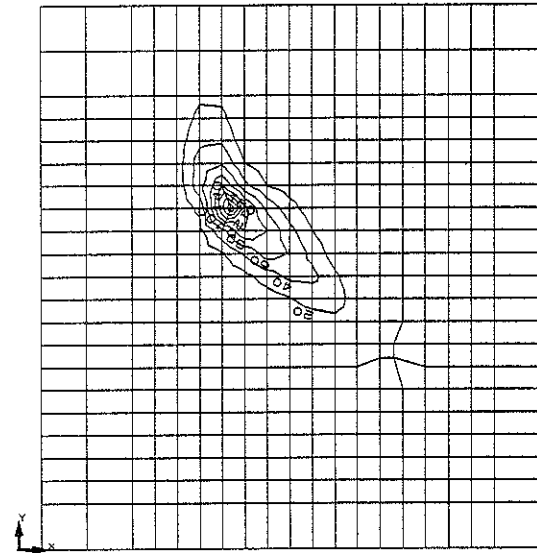
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 100$ ppm



b) flux totaux
 $f_{max} = 1.81 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 200$ ppm

figure IV.17: site de Bertrée, premier test dans le Landenien, traçage au nitrate, résultats de la simulation (après 8h 15').

En effet, le traçage au nitrate concerne une direction moins perméable, donc moins poreuse (vraisemblablement moins fissurée) pour laquelle la dispersivité peut être plus faible et le transfert vers l'eau immobile plus important.

Signalons encore que les résultats sont très peu influencés par la valeur de la dispersivité transversale. C'est le type de sollicitation convective qui en est responsable. En effet, la convergence de l'écoulement et la dispersion latérale ont des actions antagonistes sur la répartition latérale du traceur et on peut dire que les tests en écoulement convergent sont peu appropriés pour déterminer cette composante du transport.

IV.2.b) Second multitraçage dans la nappe phréatique du Landénien (avril 1991).

Le premier multitraçage n'ayant pas fourni tous les résultats escomptés, un second test a été réalisé. Les buts poursuivis étaient les suivants:

- mieux contrôler les injections;
- caractériser d'autres traceurs et les comparer aux précédents;
- juger de la reproductibilité du test;
- tester une nouvelle direction quant au transport (Pz7 → P1).

IV.2.b.1) Description de l'essai de pompage.

Le pompage réalisé est tout à fait similaire au précédent. Le débit est de 10 m³/h mais la durée de pompage a été portée à 146 heures (± 6 jours). Les valeurs stabilisées des hauteurs piézométriques et des rabattements sont fournis par le tableau ci-après.

piézomètre ou puits	h _r (m)	s _r (m)
Pz1	13.750	0.160
Pz3	12.690	0.190
Pz5	12.645	0.580
Pz7	13.055	0.150
Pz9	12.720	0.450
Pz11	12.660	0.430
P1	11.225	1.110

tableau IV.12: piézométrie en fin de pompage dans la nappe du Landénien (second test).

Si ces valeurs diffèrent de celles obtenues lors du premier essai, c'est essentiellement en raison d'une modification de la piézométrie naturelle. Lorsqu'on interprète ce nouveau pompage (avec les mêmes méthodes que l'ancien), on obtient des valeurs de transmissivité et de perméabilité très semblables aux précédentes, excepté pour la méthode de Jacob (tableaux IV.13 et IV.14 à comparer aux tableaux IV.15 et IV.16). Il s'agit sans doute encore d'un effet transitoire lié à ce type d'interprétation.

↓

piézomètre ou puits	T Dupuit (m ² /s)	T Jacob (m ² /s)	T images (m ² /s)
Pz1	6.3 10 ⁻⁴	1.0 10 ⁻²	1.9 10 ⁻³
Pz3	1.2 10 ⁻³	8.5 10 ⁻³	1.1 10 ⁻³
Pz5	7.5 10 ⁻⁴	6.0 10 ⁻³	8.2 10 ⁻⁴
Pz7	4.7 10 ⁻³	7.8 10 ⁻³	3.8 10 ⁻³
Pz9	1.2 10 ⁻³	5.6 10 ⁻³	1.4 10 ⁻³
Pz11	6.2 10 ⁻⁴	8.5 10 ⁻³	6.7 10 ⁻⁴
P1	1.9 10 ⁻³	3.9 10 ⁻³	1.9 10 ⁻³

tableau IV.13: transmissivités de l'aquifère landénien calculées lors du second test.

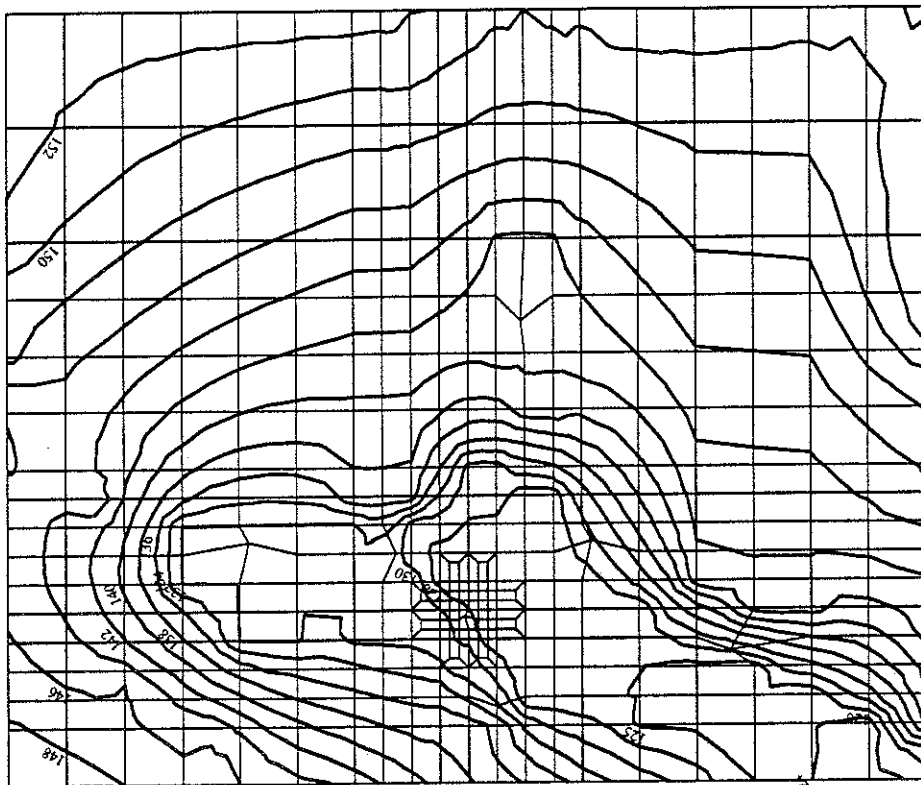
piézomètre ou puits	K Dupuit (m/s)	K Jacob (m/s)	K images (m/s)
Pz1	5.0 10 ⁻⁵	8.0 10 ⁻⁴	1.5 10 ⁻⁴
Pz3	9.6 10 ⁻⁵	6.8 10 ⁻⁴	8.8 10 ⁻⁵
Pz5	6.0 10 ⁻⁵	4.8 10 ⁻⁴	6.6 10 ⁻⁵
Pz7	3.8 10 ⁻⁵	6.2 10 ⁻⁴	3.0 10 ⁻⁴
Pz9	9.6 10 ⁻⁵	4.5 10 ⁻⁴	1.1 10 ⁻⁵
Pz11	5.0 10 ⁻⁵	6.8 10 ⁻⁴	5.4 10 ⁻⁵
P1	1.5 10 ⁻⁴	3.1 10 ⁻⁴	1.5 10 ⁻⁴

tableau IV.14: coefficients de perméabilité de l'aquifère landénien calculés lors du second test (épaisseur saturée estimée à 12.5 m) →

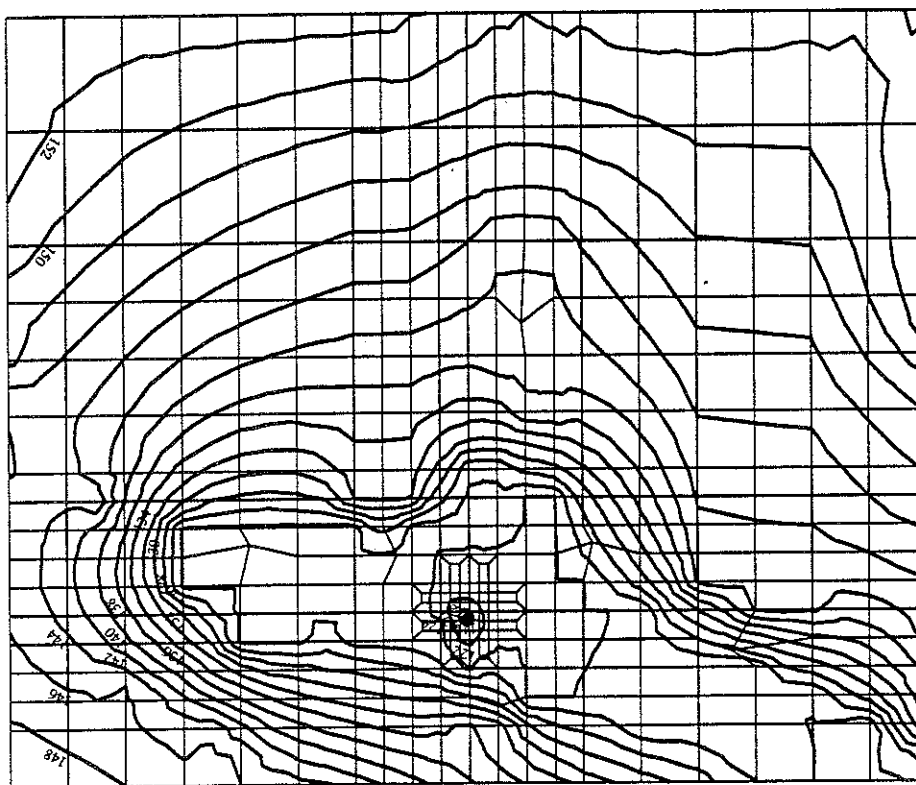
351
15 ↓

IV.2.b.2) Modélisation de l'essai de pompage.

Pour déterminer la nouvelle piézométrie sur le domaine étudié, nous avons repris la même discrétisation et les mêmes caractéristiques de perméabilité que pour le premier test. Nous avons essayé alors de calibrer au mieux en modifiant uniquement les potentiels imposés sur le contour pour qu'ils correspondent mieux à l'état de la nappe au moment du test (avril 1991). Les piézométries obtenues avant et pendant le pompage sont dessinées à la figure IV.18 (à comparer avec la figure IV.8 p. 259). Les écarts par rapport aux mesures (piézomètres et puits) sont fournis au tableau ci-après.



a) piézométrie naturelle ($\Delta h = 20$ cm)



b) piézométrie en régime stabilisé de pompage ($\Delta h = 20$ cm)

figure IV.18: site de Bertrée, nappe du Landénien, piézométrie calculée par le modèle écoulement, (second pompage).

piézomètre ou puits	hi cal - hi mes (cm)	hf cal - hf mes (cm)
Pz1	+ 18	+ 19
Pz3	- 4	+ 5
Pz5	- 25	+ 9
Pz7	+ 3	- 1
Pz9	- 11	- 14
Pz11	+ 10	- 9
P1	+ 52	+ 23

tableau IV.15: écarts entre les hauteurs piézométriques calibrées et mesurées (Landenien, second test)

On en déduit que la calibration est moins bonne. Toutefois, elle reste acceptable en régime de pompage, surtout compte tenu de la faible marge de manoeuvre dont nous avons disposé pour l'obtenir.

IV.2.b.3) Description des traçages.

Le deuxième multitraçage a été réalisé avec le même dispositif d'injection que le premier. Toutefois, le vase de Mariotte a été remplacé par deux autres procédés:

- pour les injections courtes, on verse aussi rapidement que possible le traceur dans le piézomètre (par le tube plongeur) en augmentant le débit d'injection d'eau q_i qui doit forcer le traceur à pénétrer dans l'aquifère. Finalement, une chasse légère est envoyée par le tube plongeur;
- pour l'injection longue, une pompe doseuse, utilisée habituellement pour les chlorations dans les stations de pompage, régule beaucoup plus précisément le débit.

Les caractéristiques d'injection sont données ci-dessous:

- au piézomètre Pz1:

- $q_i = 0,514 \text{ m}^3/\text{h}$,
- $q_p = 3,08 \text{ l/h}$ de solution pendant 17 heures,
- pas de chasse, mais prolongement de l'injection d'eau q_i pendant plusieurs heures après l'injection du traceur.

- au piézomètre Pz7:

- $q_i = 2,2 \text{ m}^3/\text{h}$,
- $q_p = 50 \text{ l}$ de solution en 7 minutes,
- chasse = 185 litres d'eau en 13 minutes.

- au piézomètre Pz9:

- $q_i = 2,2 \text{ m}^3/\text{h}$,
- $q_p = 30 \text{ l}$ de solution en 7 minutes,
- chasse = 100 l d'eau en 8 minutes.

Les traceurs choisis sont les suivants :

- au piézomètre Pz1: 100 g d'uranine dilués dans 50 litres
2 kg de LiCl
- au piézomètre Pz7: 10,736 kg de NaCl dilués dans 50 litres
- au piézomètre Pz9: 5 kg de KNO₃ dilués dans 30 litres
2 kg de KI

Ils ont été injectés après 7 heures de pompage.

Les courbes de restitution au puits ont pu être obtenues pour l'uranine, le lithium Li⁺, l'iodure I⁻, le nitrate NO₃⁻ et le sodium Na⁺ (figures IV.19 et IV.20). On constate la similitude de comportement des traceurs injectés au même endroit. La courbe du sodium reste trop faible par rapport à un important bruit de fond. Les taux de restitution ont été calculés à partir de ces résultats. On obtient:

traceur	M ₀ (kg)	r (%)
uranine	9.80 10 ⁻²	13
Li ⁺	3.27 10 ⁻¹	30
Na ⁺	4.26	9
NO ₃ ⁻	3.07	30
I ⁻	1.53	60

tableau IV.16: masses injectées et taux de restitution des traceurs (Landenien, second test)

Signalons encore que le bruit de fond naturel en nitrates est toujours élevé (entre 20 et 25 ppm) et qu'il semble diminuer au cours de la période d'observation (15 ppm en fin d'expérience). Ceci complique l'interprétation et rend imprécis le taux de restitution calculé.

On pourrait très bien chiffrer le bruit de fond à 15 ppm et le taux de restitution serait alors de 118 % . En d'autres termes, il est possible qu'on ait extrait de la nappe une partie des nitrates qui s'y trouvait déjà. Quoiqu'il en soit, l'allure générale de la restitution reste similaire à celle observée lors du premier test.

IV.2.b.4) modélisation des traçages.

Nous avons simulé le comportement des traceurs injectés aux piézomètres Pz9 et Pz1. Pour les premiers (NO₃⁻, I⁻), nous avons utilisé le même maillage et les mêmes conditions-frontières que lors du premier test (NO₃⁻). Pour les seconds (l'uranine et Li⁺), l'injection a été prolongée pendant 17 heures. En conséquence, l'extension de la zone effectivement atteinte par le traceur est plus large. Il convient d'utiliser une discrétisation plus appropriée (288 éléments F.U.P.G. de plus grande taille) qui est représentée à la figure IV.21a³⁸.

³⁸ Nous utilisons de nouveau un seul matériau pour déterminer le comportement global de cette zone fortement hétérogène.

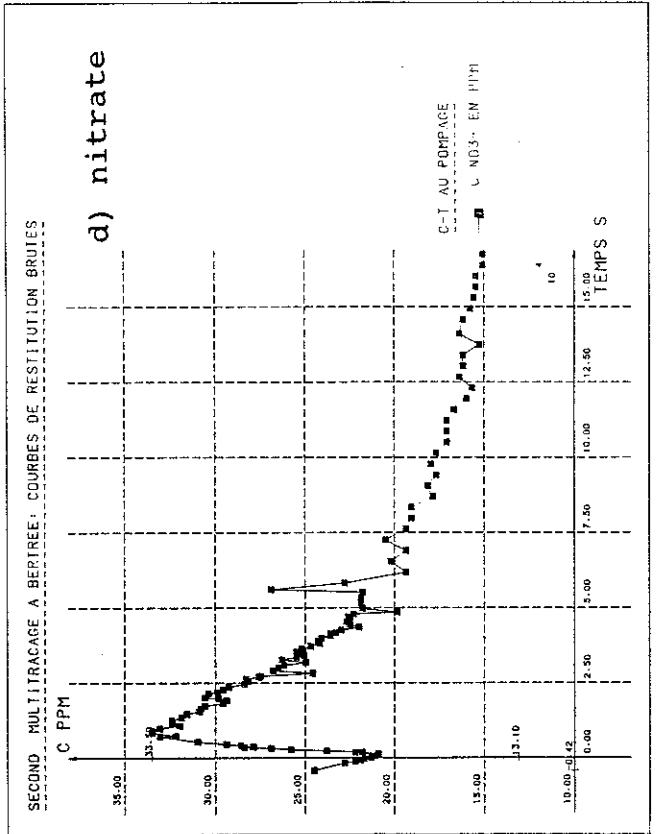
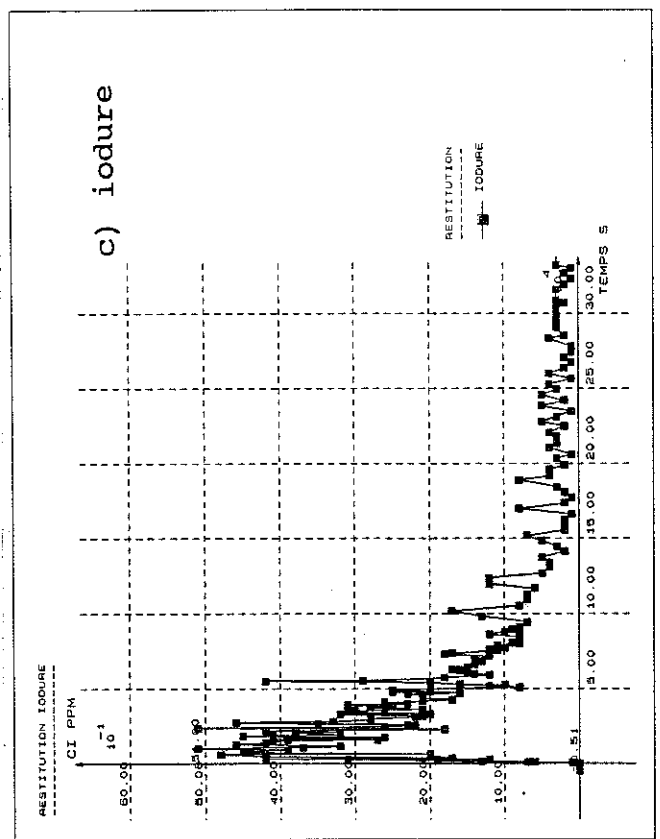
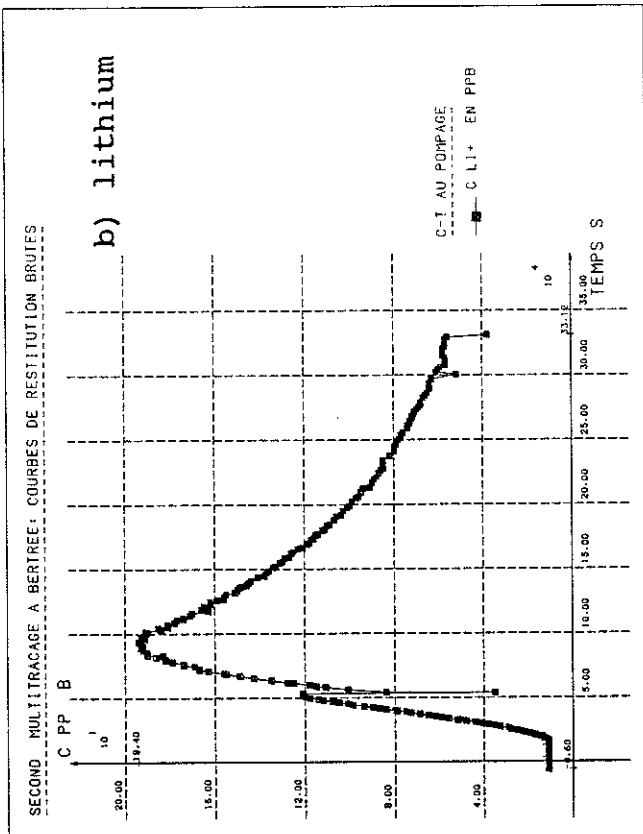
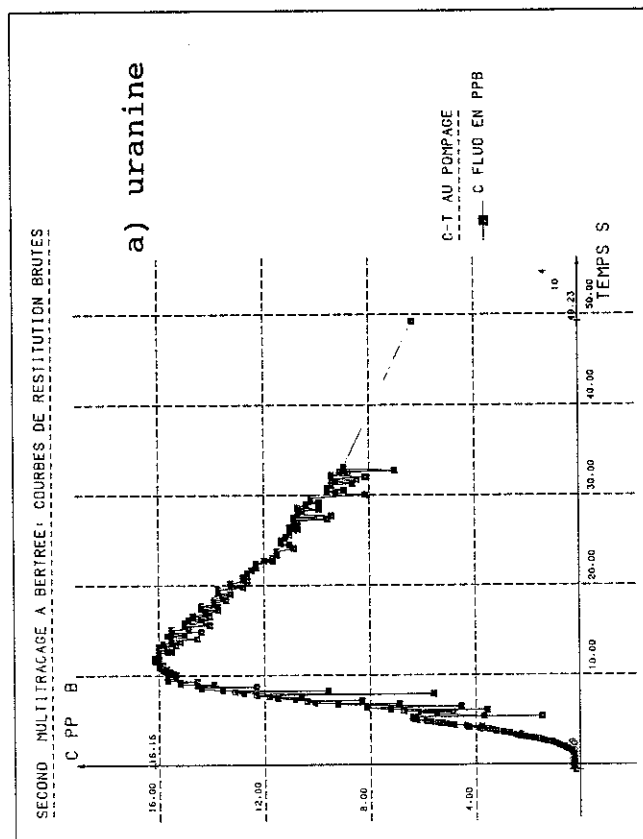


figure IV.19: site de Bertrée, nappe du Landénien, courbes de restitution au puits P1, (second multitraçage).

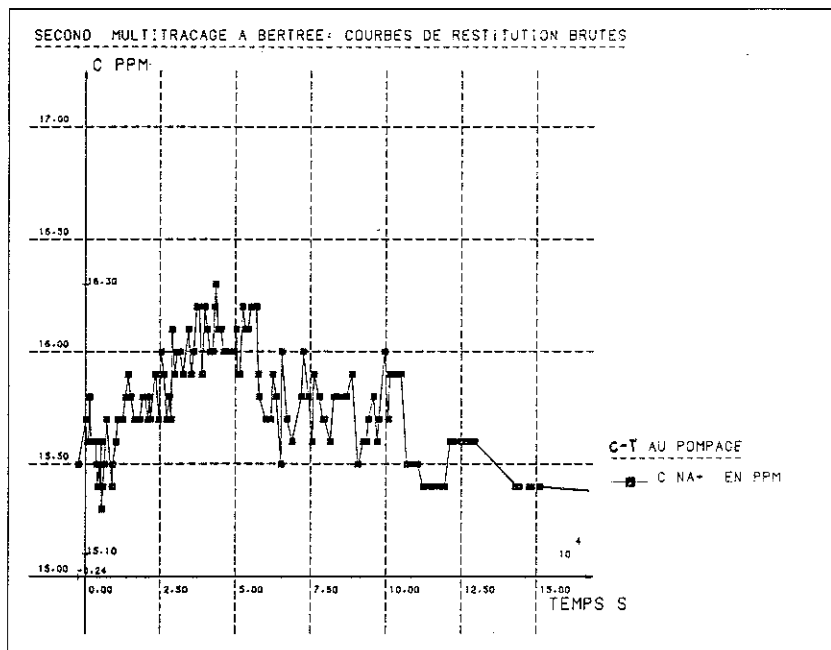


figure IV.20: site de Bertrée, nappe du Landénien, courbe de restitution du sodium au puits P1, (second multitraçage).

Les flux d'eau interpolés qui y sont associés sont représentés à la figure IV.21b; on y visualise clairement les axes drainants.

Envisageons maintenant les résultats de tous ces modèles.

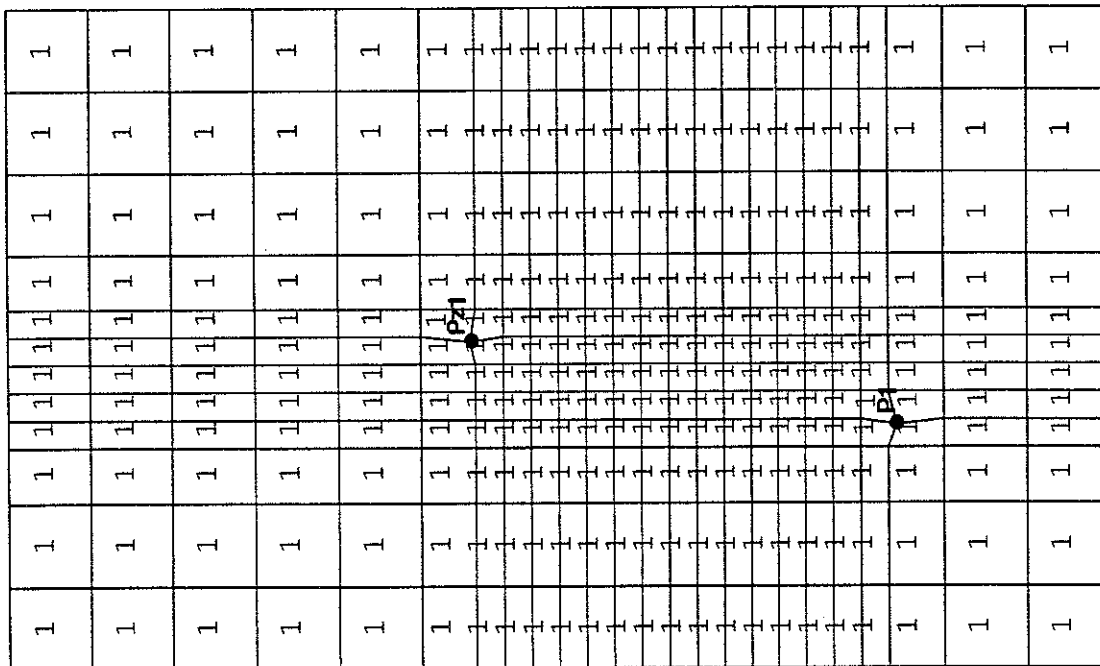
1°) Traçage au lithium (figures IV.22 et IV.23).

Les paramètres obtenus après calibration sont les suivants:

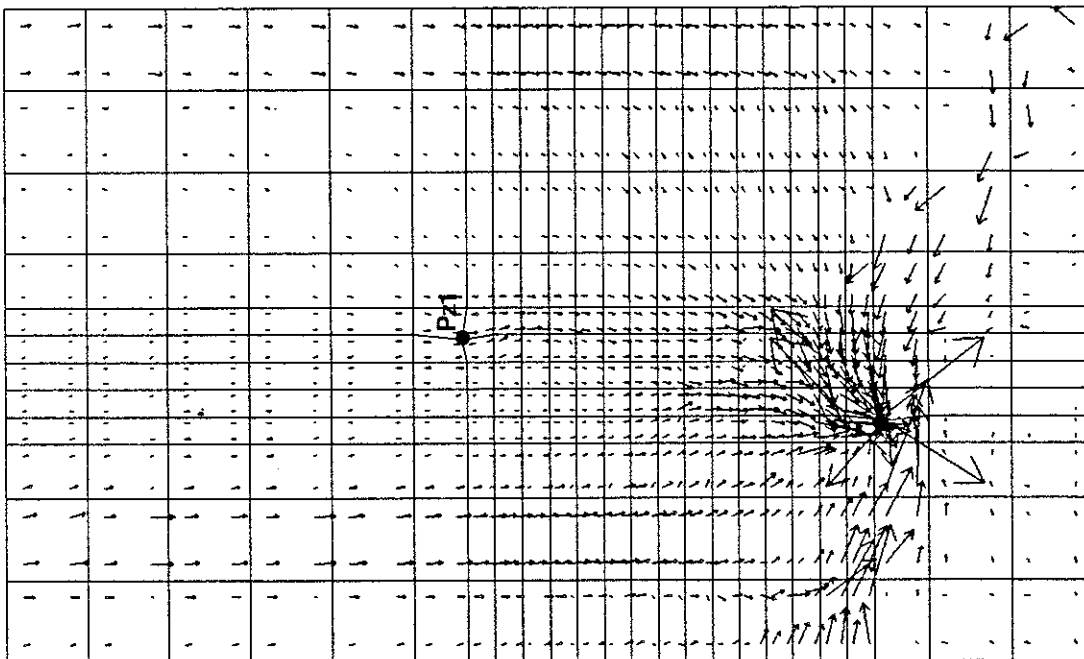
paramètres de transport		paramètres d'injection	
a_T (m)	0.30	v_{in} (m/s)	$6.7 \cdot 10^{-5}$
a_L (m)	6.00	v_{out} (m/s)	$1.9 \cdot 10^{-4}$
α_d (s^{-1})	$3.6 \cdot 10^{-8}$	C_{out} (ppb)	41400→1050
θ_m (%)	3.0	e_{inj} (m)	12.5
θ_{im} (%)	24.0		
R_{dm}	1.0		
R_{dim}	1.0		

tableau IV.17: paramètres de calibration, second test (Landénien), traçage au lithium.

Les paramètres de transport sont tout à fait similaires à ceux obtenus pour le premier test (tableau IV.10) excepté en ce qui concerne les porosités (θ_m plus faible et θ_{im} plus important). Ceci peut éventuellement être justifié par la différence de taille du domaine étudié. En ce qui concerne l'injection, les caractéristiques sont assez différentes, ce qui est normal vu que celle-ci s'est faite sur une durée 3 fois plus longue que dans le premier cas.

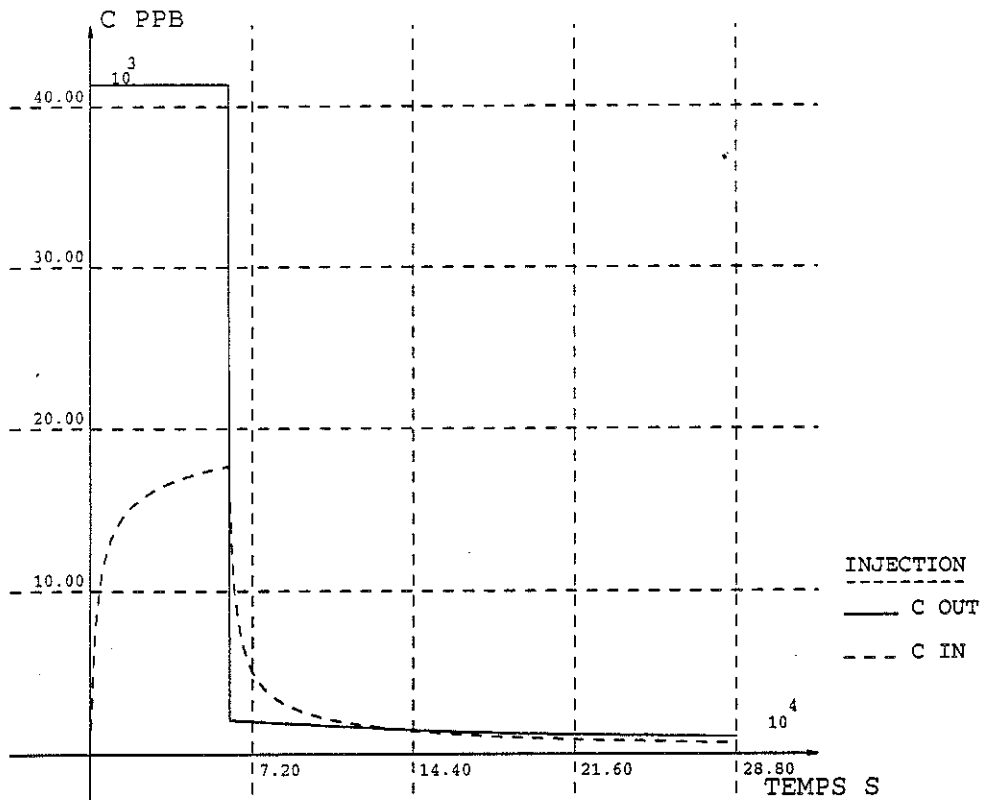


a) discrétisation

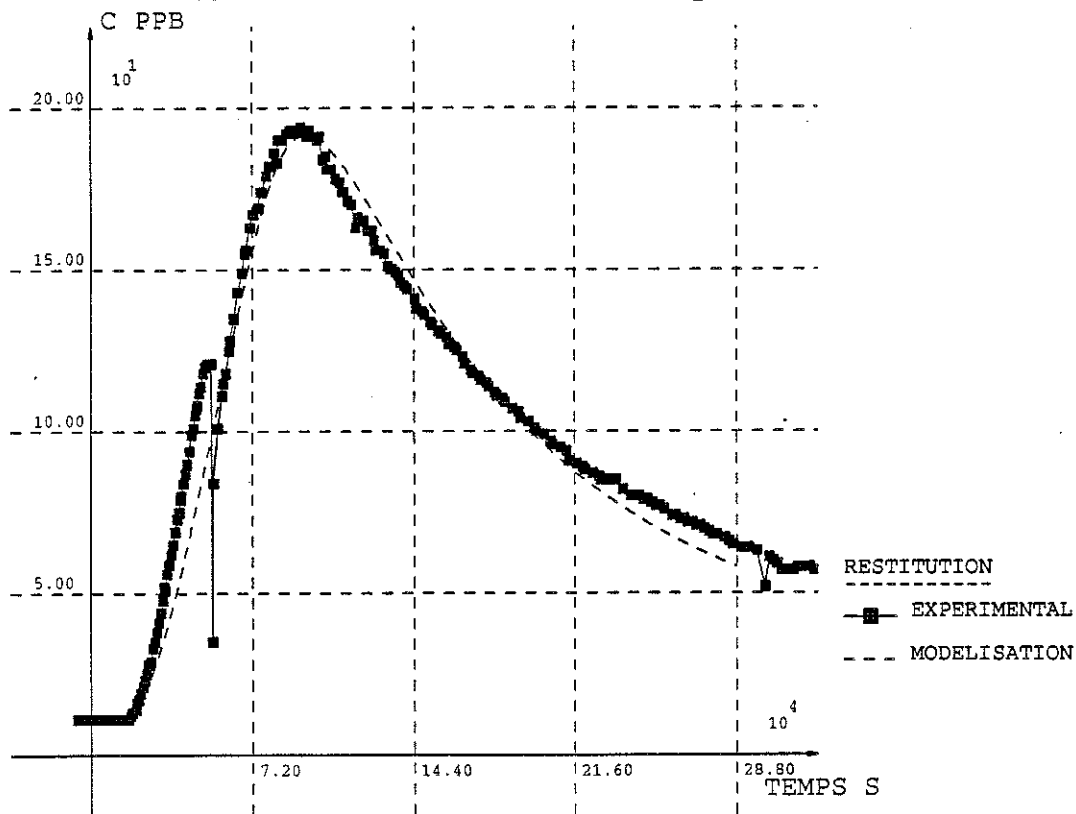


b) vitesses de Darcy interpolées,
 $VD_{max} = 7.1 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$

figure IV.21: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage au lithium et à l'uranine, sollicitation convective.

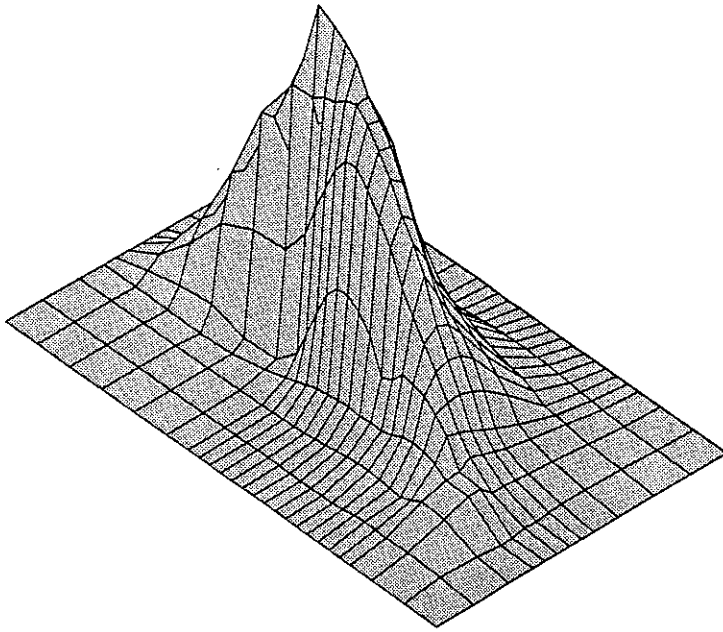


a) injection en Pz1 (concentrations dans le piézomètre C_{out} et dans l'aquifère C_{in})

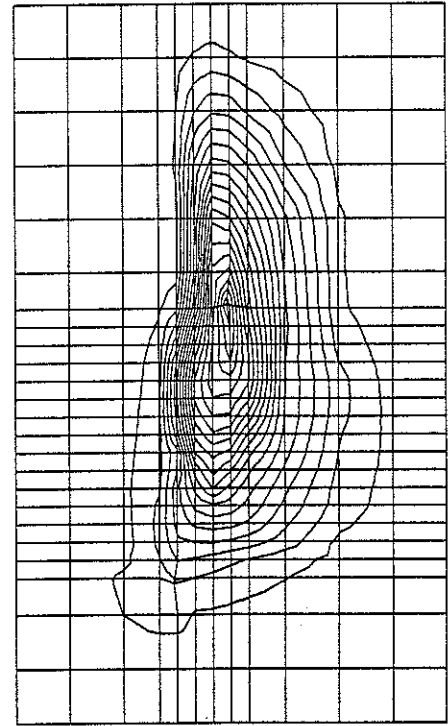


b) restitutions au puits P1 (expérimentale et modélisée)

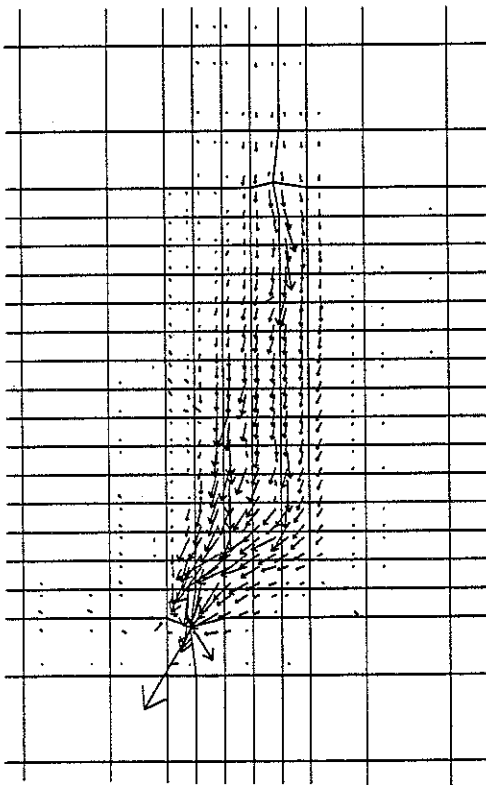
figure II.22: site de Bertrée, second test dans le Landénien, traçage au lithium, évolution temporelle des concentrations.



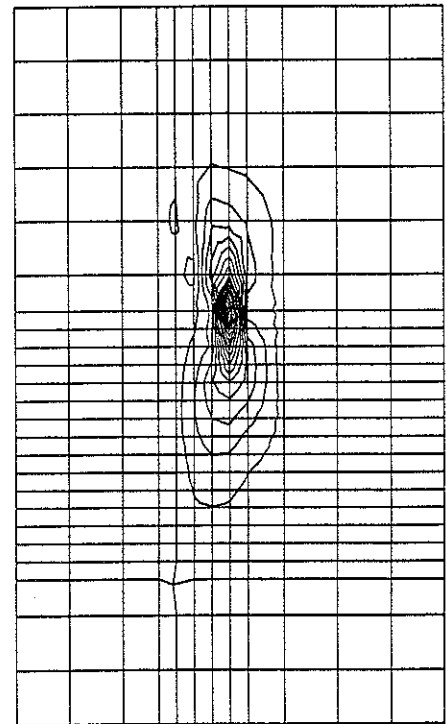
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 100$ ppb



b) flux totaux
 $f_{\max} = 3.7 \cdot 10^{-8} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 100$ ppb

figure IV.23: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage au lithium, résultats de la simulation (après 32 h.).

Si on examine les résultats obtenus avec ces paramètres, on peut remarquer plusieurs phénomènes importants:

- l'action de la dispersion se manifeste déjà au niveau de l'injection (figure IV.22a). Aux variations brutales de la concentration dans le piézomètre (C_{out}), correspondent des variations beaucoup plus progressives dans la nappe (C_{in}). Lorsque l'injection est terminée, il persiste une certaine quantité de lithium dans le piézomètre (± 1000 ppb) car le nuage de traceur s'étend sur une large zone incluant ce point (figure IV.23c);
- la calibration sur la courbe expérimentale est excellente (figure IV.22b);
- les flux (figure IV.23b) sont davantage dans le sens de la convection et ceci en raison de la distribution plus étalée du traceur (gradients de concentration en général plus faibles);
- dans l'eau immobile, le traceur reste essentiellement localisé à proximité de l'injection.

2°) Traçage à l'uranine (figures IV.24 et IV.25).

Les paramètres obtenus après calibration sont les suivants:

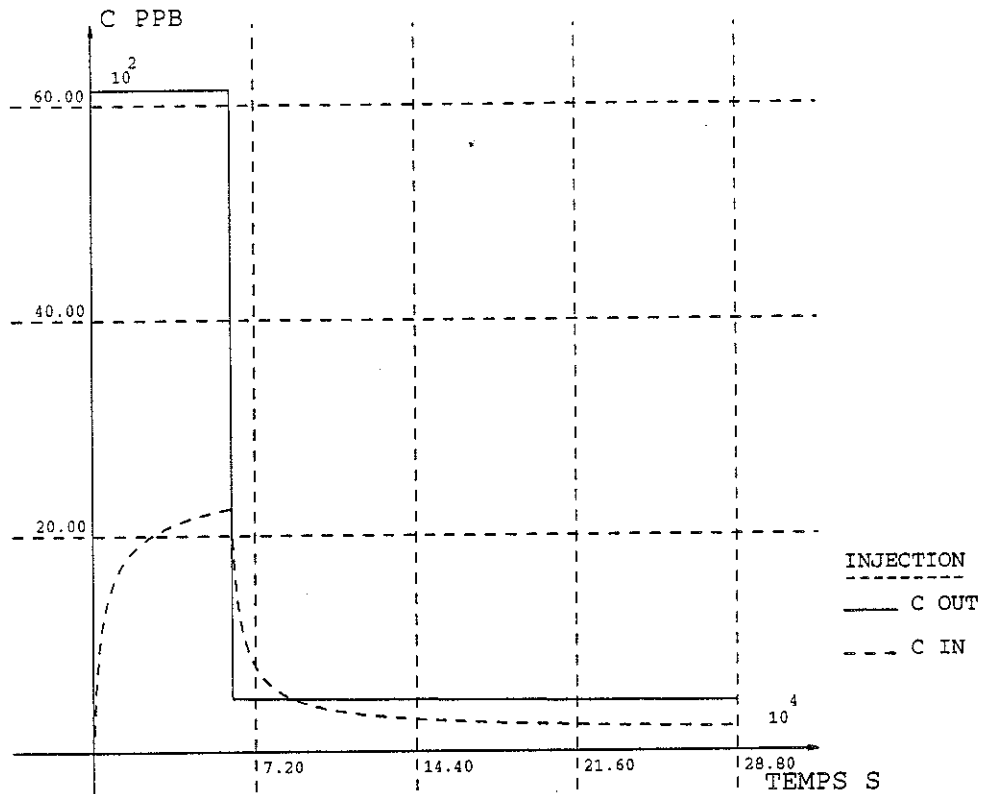
paramètres de transport		paramètres d'injection	
\bar{a}_r (m)	0.35	v_{in} (m/s)	$6.7 \cdot 10^{-5}$
a_L (m)	7.00	v_{out} (m/s)	$1.9 \cdot 10^{-4}$
α_d (s^{-1})	$7.5 \cdot 10^{-8}$	C_{out} (ppb)	6150 \rightarrow 460
θ_m (%)	3.0	e_{inj} (m)	12.5
θ_{im} (%)	24.0		
R_{dm}	1.62		
R_{dim}	1.62		

tableau IV.18: paramètres de calibration, second test (Landenien), traçage à l'uranine.

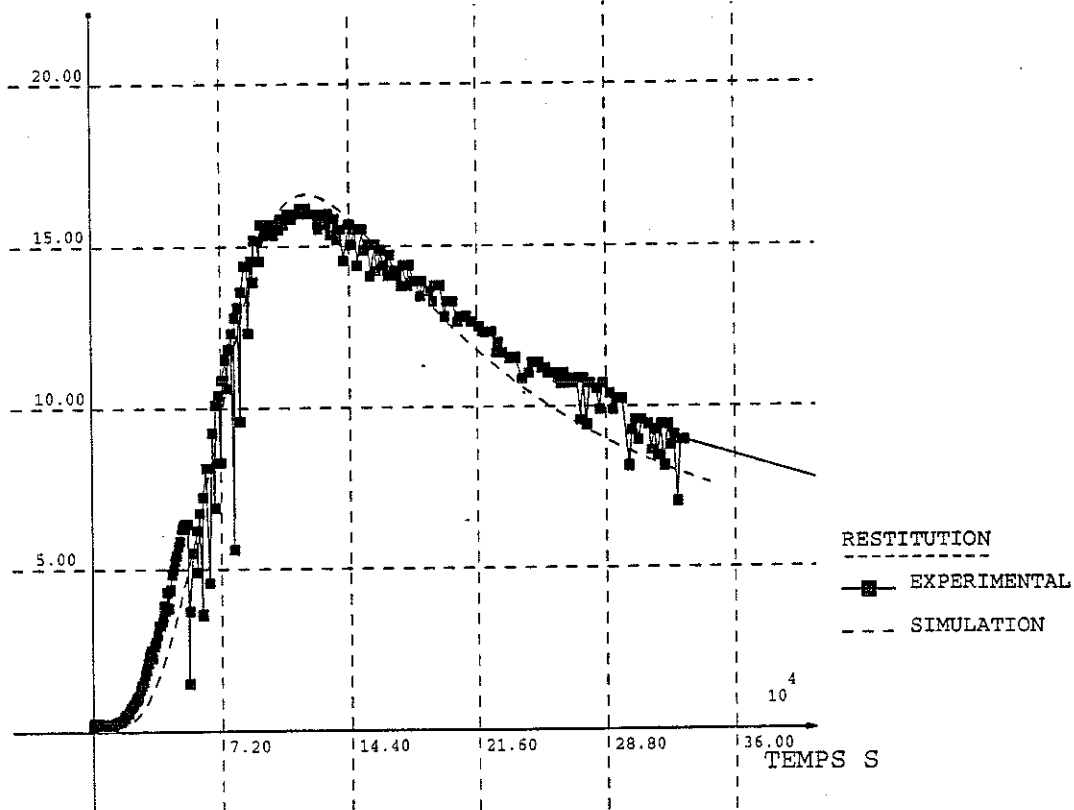
En comparant ces résultats aux précédents, on peut constater les mêmes tendances liées à une injection prolongée.

La calibration est toujours très bonne (figure IV.24b).

On constate toutefois une différence essentielle: l'action d'une adsorption sur le solide, attestée par des coefficients de retard supérieurs à l'unité). Ce phénomène permet d'expliquer l'arrivée plus tardive de l'uranine au puits de pompage (figure IV.24b à comparer avec la figure IV.22b), malgré que les vitesses de convection et les conditions d'injection soient rigoureusement identiques à celles du lithium.

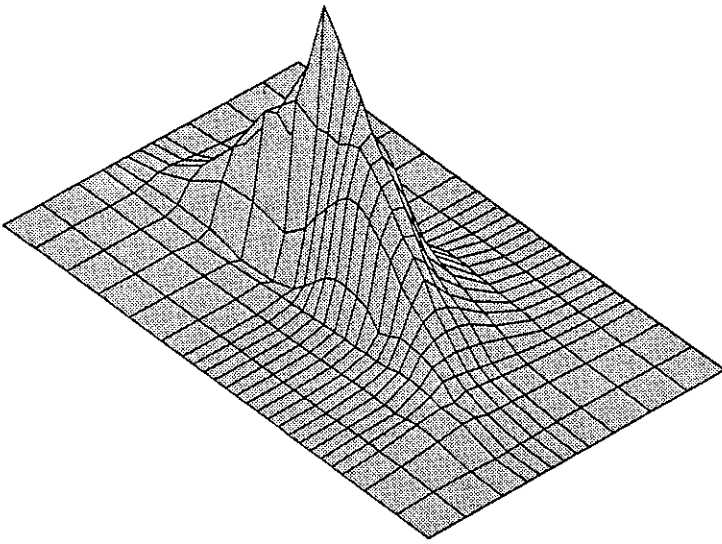


a) injection en Pz1 (concentrations dans le piézomètre C_{out} et dans l'aquifère C_{in})

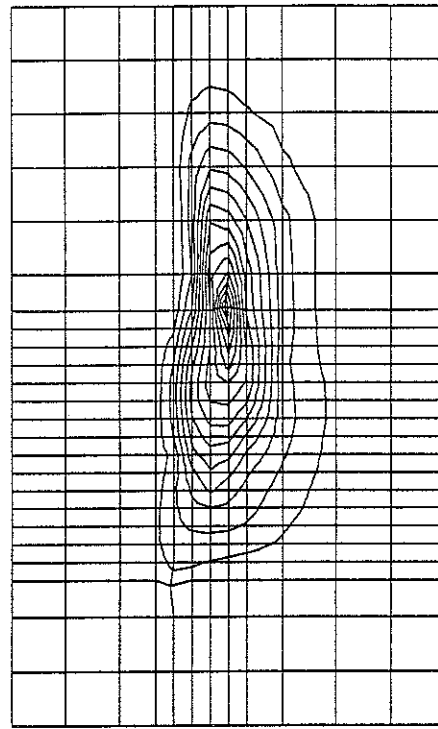


b) restitutions au puits P1 (expérimentale et modélisée)

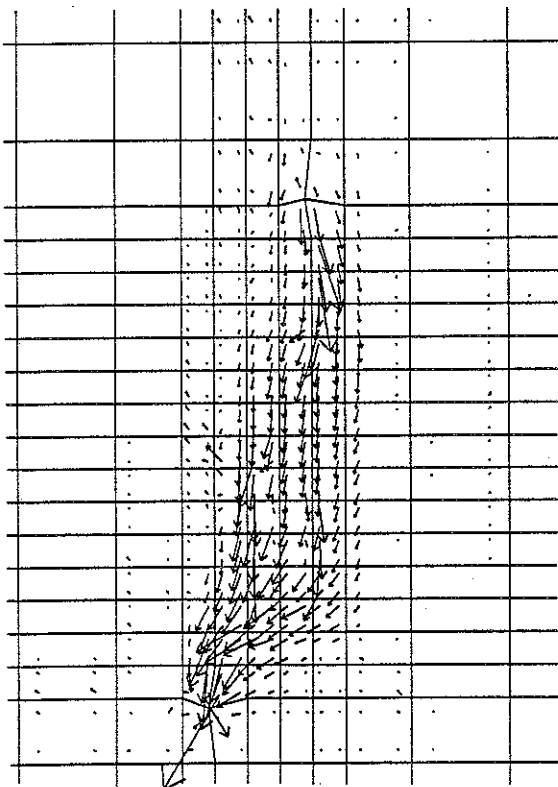
figure II.24: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage à l'uranine, évolution temporelle des concentrations.



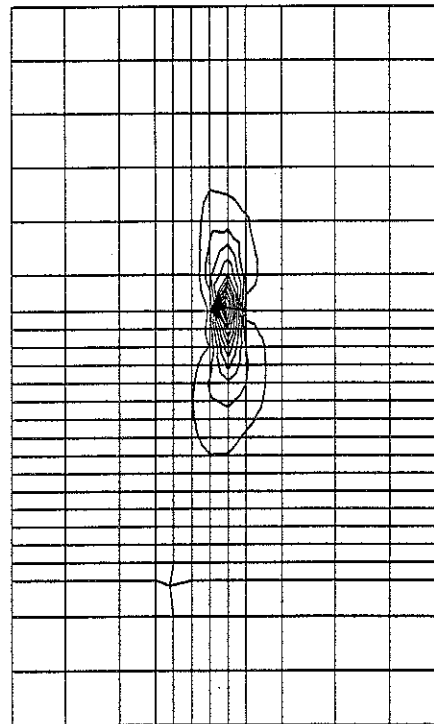
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 20$ ppb



b) flux totaux
 $f_{\max} = 4.1 \cdot 10^{-9} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 20$ ppb

figure IV.25: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage à l'uranine, résultats de la simulation (après 32 h.).

Physiquement, on peut comprendre qu'une adsorption puisse se produire puisque l'aquifère est hétérogène et qu'il peut, en certains endroits, présenter une argilosité importante. Toutefois, on peut se demander pourquoi cette adsorption agirait uniquement sur l'uranine. Peut-être faudrait-il réinterpréter les autres traçages dans le Landénien avec un coefficient de retard supérieur à l'unité. Il est aussi possible que cette adsorption agisse peu dans les fissures et qu'elle soit active essentiellement dans la matrice poreuse. Dès lors, l'écart entre les 2 courbes (Li⁺ et uranine) pourrait être simulé par une différence dans la cinétique de l'effet d'eau immobile (α_d plus grand pour l'uranine). Cette approche permet également de justifier les valeurs différentes de α_d entre les zones proches de Pz1 et celles proches de Pz9.

Pour pouvoir trancher cette question, il faudrait mieux connaître le milieu poreux en l'étudiant en laboratoire comme cela a été fait pour la craie du Crétacé.

Pour déterminer l'importance de l'adsorption dans le cas du lithium, on pourrait également proposer de refaire un test avec une injection triple: eau tritiée (traceur "parfait" peu sorptif), lithium (traceur éventuellement sorptif) et uranine (traceur davantage adsorbé).

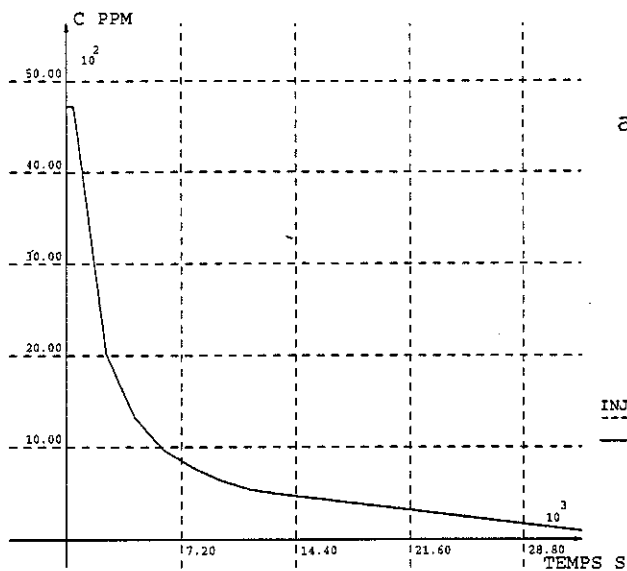
Signalons encore que l'uranine semble plus dispersive que le lithium (7 mètres au lieu de 6). Toutefois, cette différence est moins importante que celle engendrée par l'hétérogénéité de l'aquifère (2,5 mètres en Pz9 et 6 mètres en Pz1).

3°) Traçage au nitrate (figures IV.26, IV.27 et IV.28).

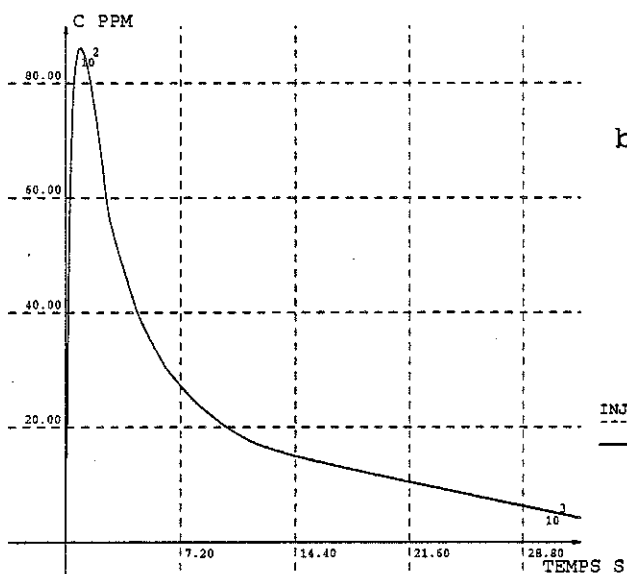
Les paramètres de la calibration sont donnés ci-dessous.

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3
a_T (m)	0.10	0.10	0.10
a_L (m)	2.50	2.50	2.50
α_d (s^{-1})	$6.4 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-9}$	$5.6 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.4	0.3	1.0
θ_{im} (%)	2.1	1.5	1.3
R_{dm}	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection			
v_{in} (m/s)	$2.25 \cdot 10^{-4}$		
v_{out} (m/s)	$2.7 \cdot 10^{-3}$		
C_{out} (ppm)	4821 \rightarrow 0		
e_{inj} (m)	12.5		

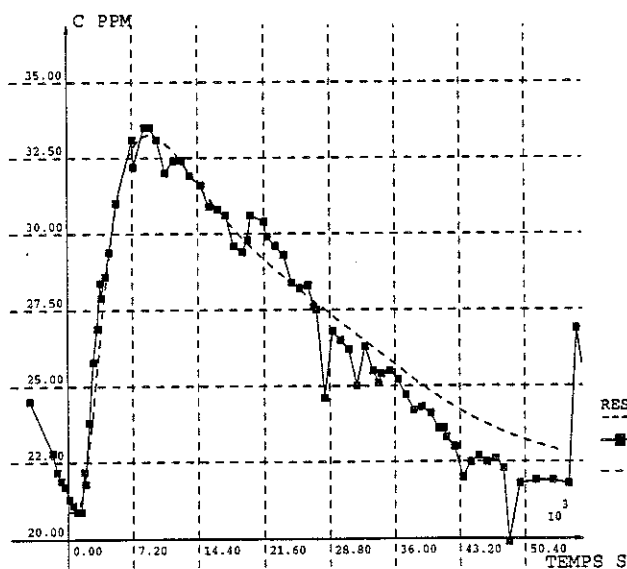
tableau IV.19: paramètres de calibration, second test (Landénien), traçage au nitrate.



a) injection en Pz9 (concentration dans le piézomètre C_{out})

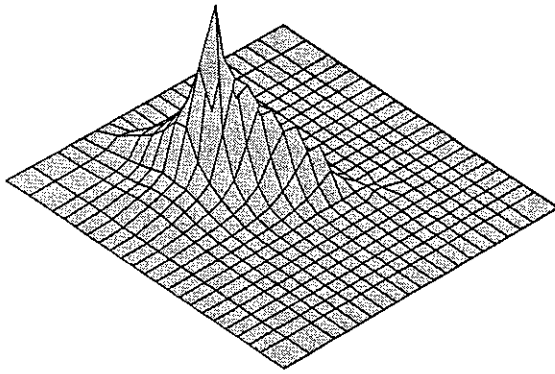


b) injection en Pz9 (concentration dans l'aquifère C_{in})

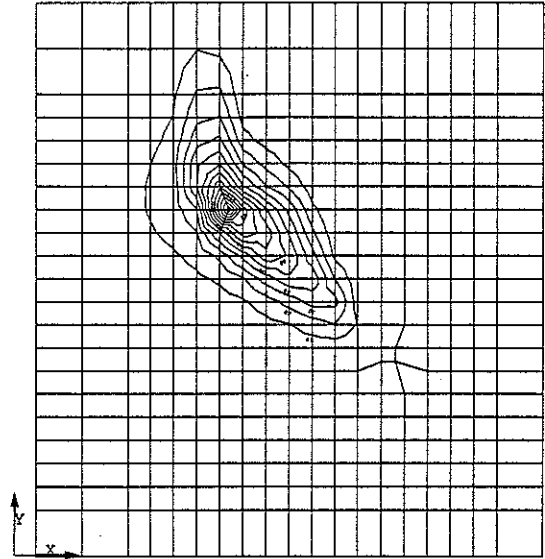


c) restitutions au puits P1 (expérimentale et modélisée)

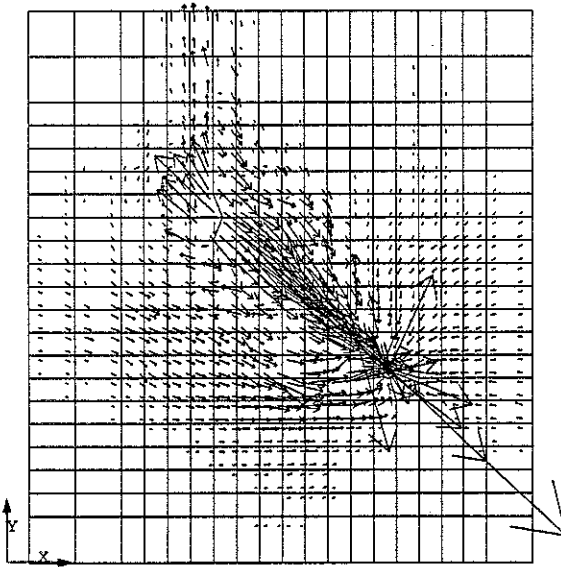
figure II.26: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage au nitrate, évolution temporelle des concentrations.



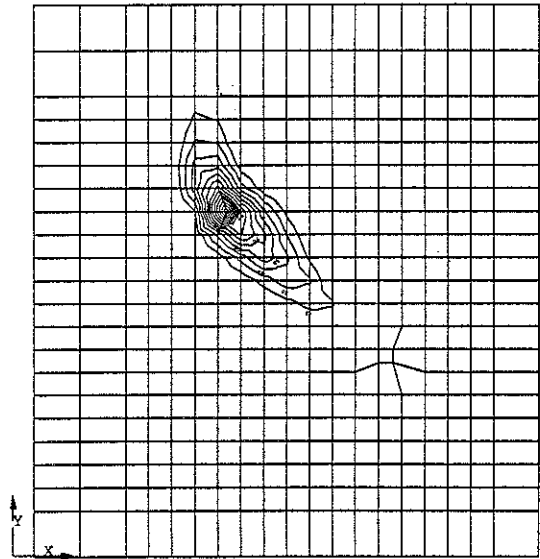
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 100$ ppm

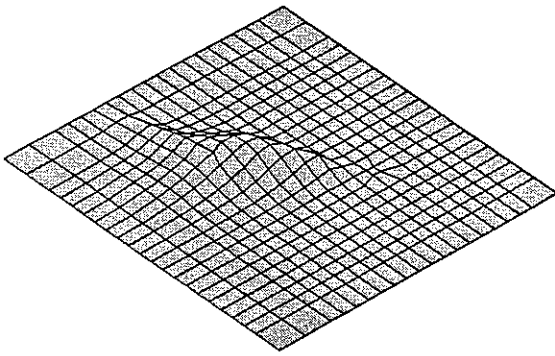


b) flux totaux
 $f_{\max} = 1.4 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^2/\text{s}$

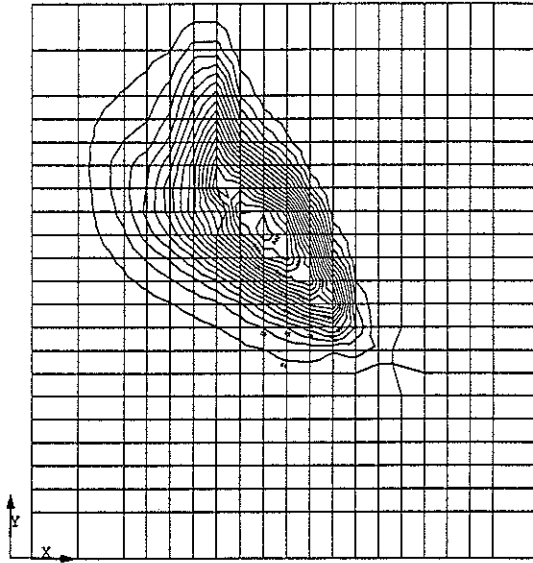


d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 100$ ppm

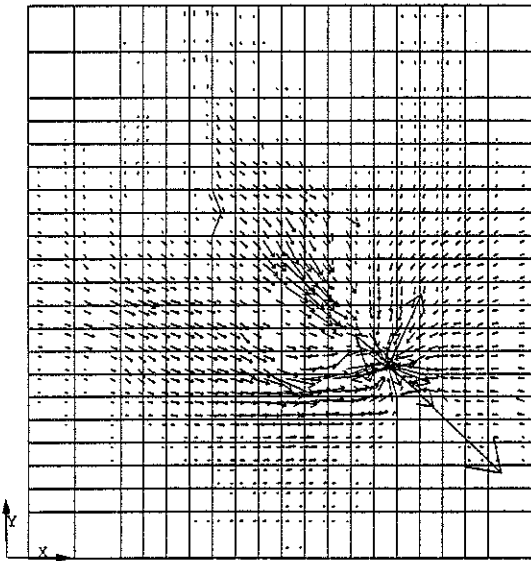
figure IV.27: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage au nitrate, résultats de la simulation (après 4h.30').



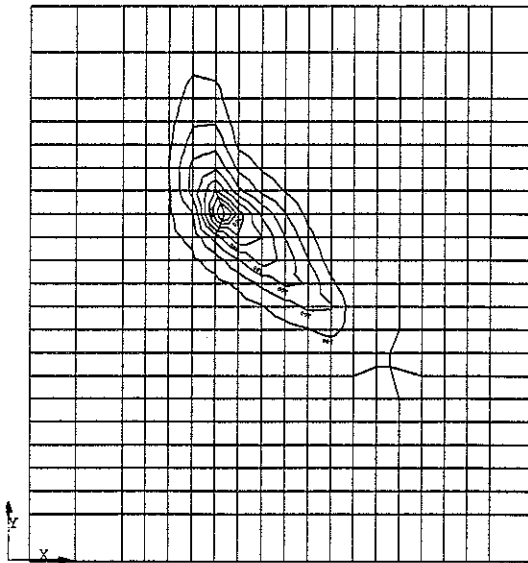
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 10$ ppm



b) flux totaux
 $f_{\max} = 8.8 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 100$ ppm

figure IV.28: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage au nitrate, résultats de la simulation (après 10h.30').

Les constantes de transport sont très similaires à celles déterminées lors du premier test (tableau IV.11). Ceci permet de conclure à la reproductibilité de la méthode. La calibration est bonne, sauf pour la fin de la courbe (figure IV.26c). Nous attribuons cet écart à la variation du bruit de fond qui n'est pas prise en compte dans le modèle.

Les paramètres d'injection diffèrent à cause d'un débit d'injection d'eau plus important. Il en résulte une vitesse d'injection v_{out} supérieure ($2.7 \cdot 10^{-3}$ m/s au lieu de $2.15 \cdot 10^{-4}$ m/s) et une dilution initiale plus importante pour le traceur ($c_{out} = 4821$ ppm plutôt que 67400 ppm).

Cependant, le même comportement d'évacuation différée de la substance est observé au piézomètre (figures IV.26a et b) puisque la perméabilité de l'aquifère à proximité de l'injection reste évidemment inchangée. De plus, comme la baisse de la concentration c_{out} est compensée par un contraste de vitesse ($v_{out} - v_{in}$) plus important, les concentrations c_{in} dans l'aquifère sont du même ordre de grandeur (10000 ppm pour le premier test, 8000 ppm pour le second).

La répartition spatiale est donc très similaire (figure IV.27 à comparer avec la figure VI.17). Ce n'est qu'en fin de traçage que la différence se marque: le traceur est plus vite évacué du piézomètre vers l'aquifère et le maximum spatial de concentration dans l'eau mobile s'éloigne légèrement du point d'injection (figure IV.28).

4°) Traçage à l'iodure (figures IV.29, IV.30 et IV.31).

Les paramètres de la calibration sont donnés ci-dessous.

paramètres de transport	matériau 1	matériau 2	matériau 3
a_r (m)	0.16	0.16	0.16
a_l (m)	3.20	3.20	3.20
α_d (s^{-1})	$6.4 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-9}$	$5.6 \cdot 10^{-7}$
θ_m (%)	1.4	0.3	1.0
θ_{im} (%)	2.1	1.3	1.5
R_{dm}	1.0	1.0	1.0
R_{dim}	1.0	1.0	1.0
paramètres d'injection			
v_{in} (m/s)	$2.25 \cdot 10^{-4}$		
v_{out} (m/s)	$2.2 \cdot 10^{-3}$		
c_{out} (ppm)	1800 → 0		
e_{inj} (m)	12.5		

tableau IV.20: paramètres de calibration, second test (Landenien), traçage à l'iodure.

On constate que ces valeurs sont identiques à celles des nitrates, excepté la dispersivité qui est plus grande (3.2 mètres au lieu de 2.5 mètres).

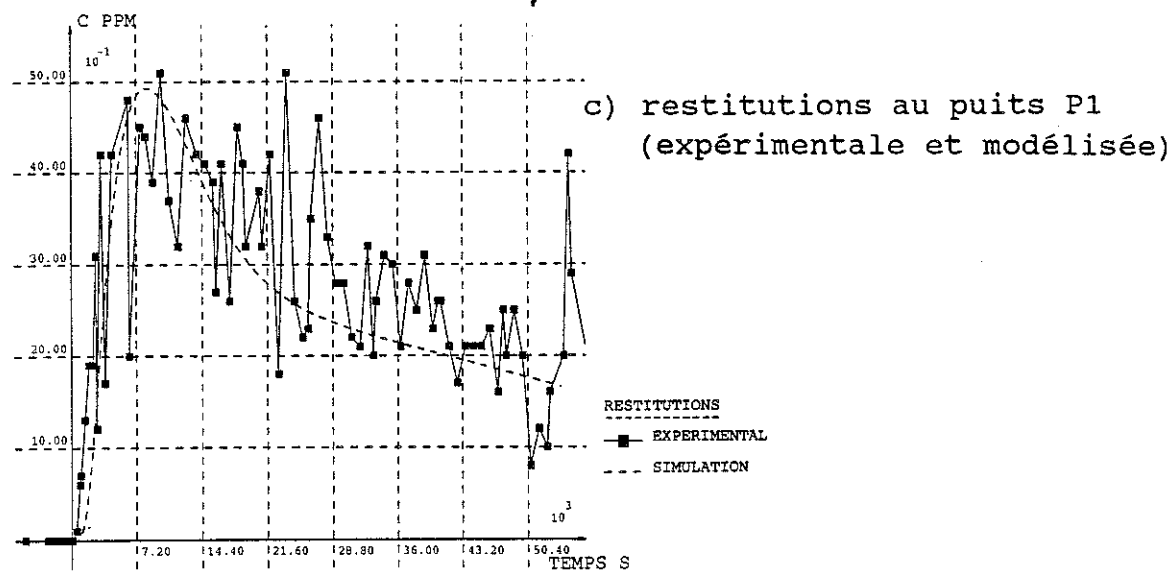
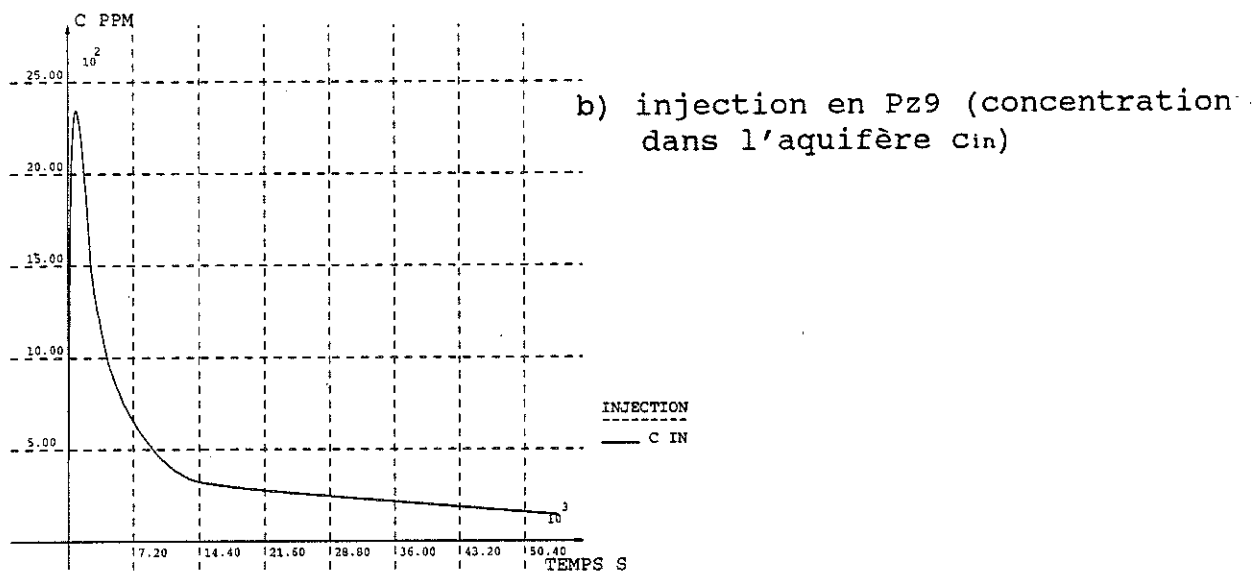
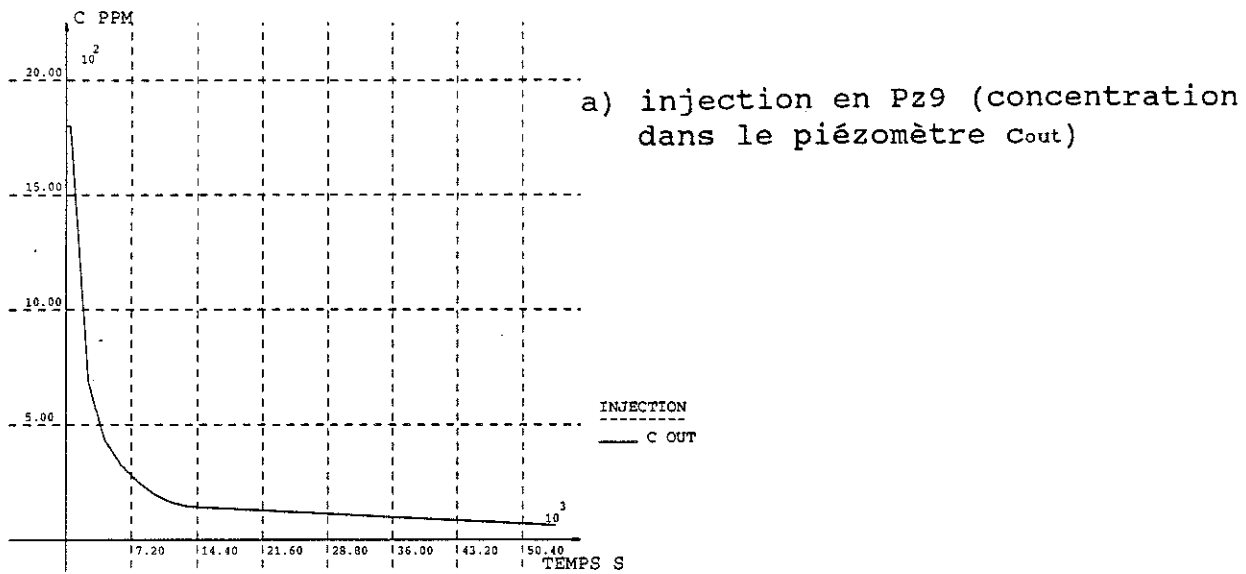
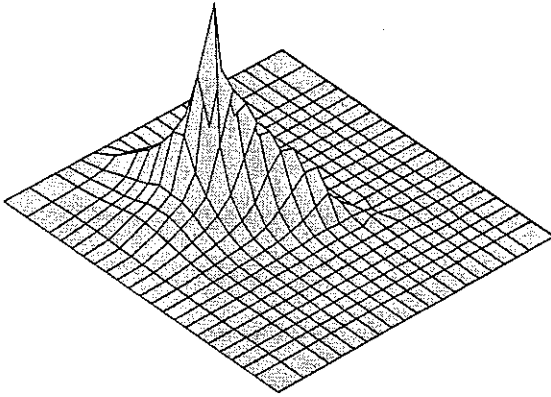
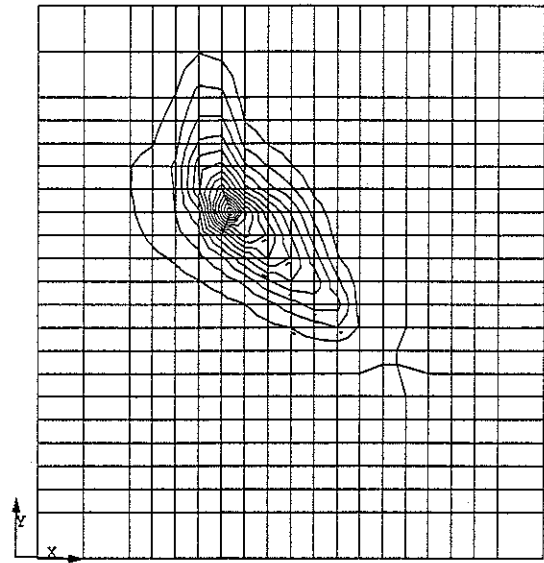


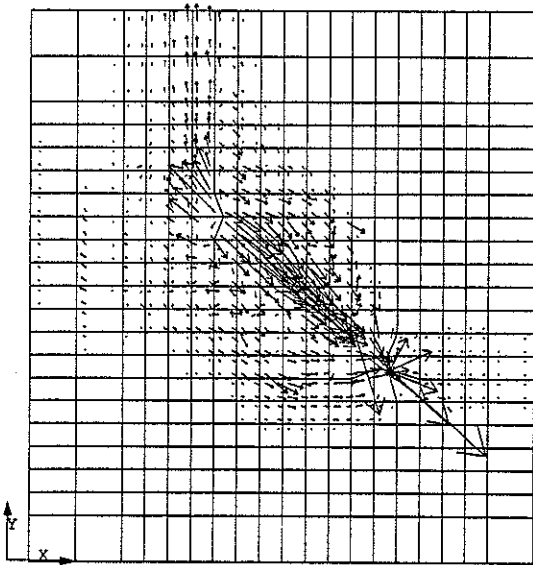
figure II.29: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage à l'iodure, évolution temporelle des concentrations.



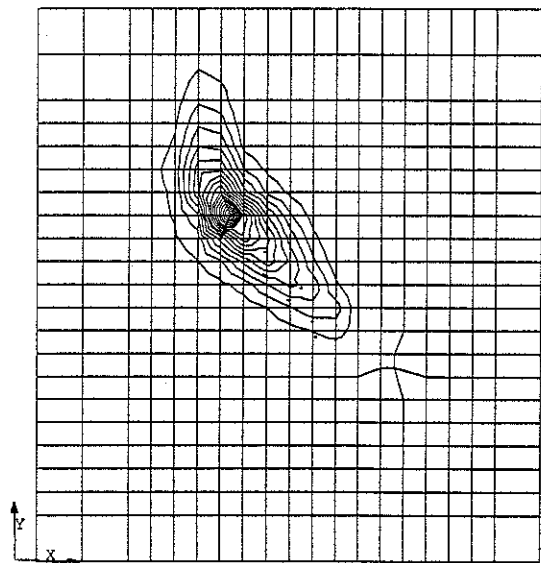
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 20$ ppm

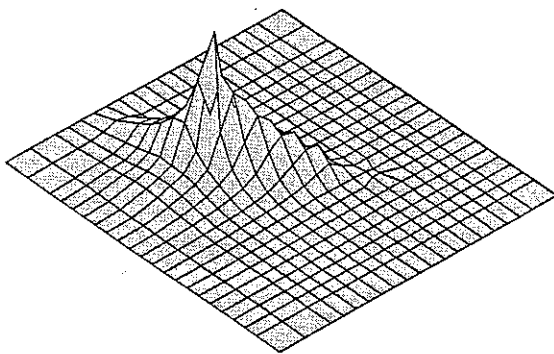


b) flux totaux
 $f_{\max} = 2.9 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$

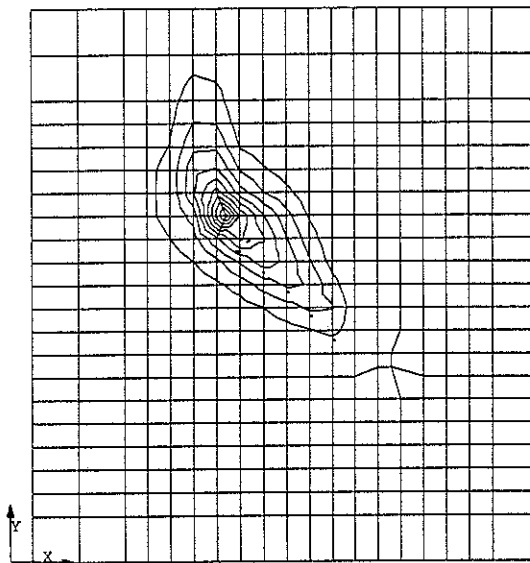


d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 20$ ppm

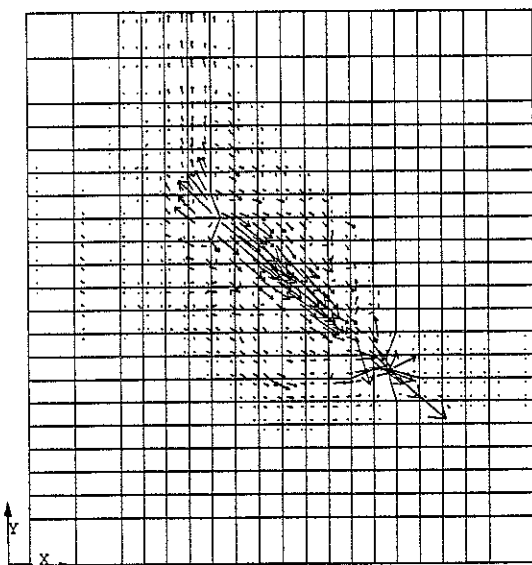
figure IV.30: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage à l'iode, résultats de la simulation (après 4h.30').



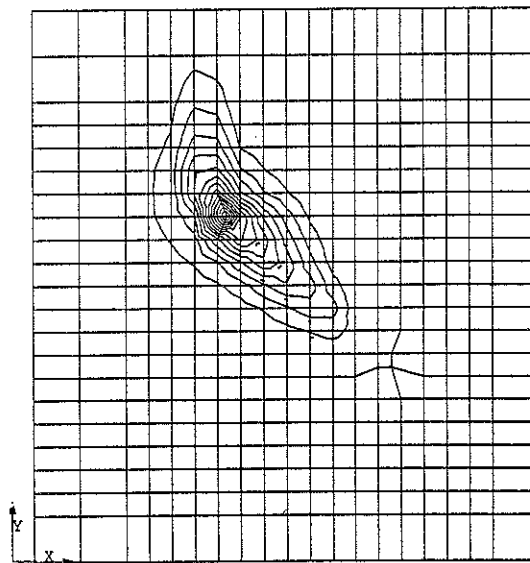
a) concentrations dans l'eau mobile (vue en perspective)



c) concentrations dans l'eau mobile $\Delta c_m = 20$ ppm



b) flux totaux
 $f_{\max} = 1.9 \cdot 10^{-6} \text{ kg/m}^2/\text{s}$



d) concentrations dans l'eau immobile $\Delta c_{im} = 20$ ppm

figure IV.31: site de Bertrée, second test dans le Landenien, traçage à l'iodure, résultats de la simulation (après 10h.30').

C'est sans doute cette différence qui explique qu'en fin d'expérience, le traceur s'évacue moins vite du piézomètre (figures IV.29a et b). En effet, une dispersion élevée provoque une extension importante du nuage de traceur; Il s'ensuit que, malgré un mouvement convectif globalement dirigé vers le puits, une certaine quantité de la substance est rétrogradée au piézomètre. Nous parlerons dans ce cas de "rétrodispersion".

II.2.c) Premier multitraçage dans l'aquifère semi-captif du Crétacé (février 1992).

II.2.c.1) Description de l'essai de pompage.

Dans l'aquifère crayeux plus transmissif, le débit de pompage a été porté à 20 m³/h. La zone influencée est nettement plus importante (puisque la taille du cône de rabattement augmente avec la transmissivité et le débit). En conséquence, les niveaux piézométriques se sont stabilisés moins vite; on a constaté qu'il convenait d'attendre environ 15 heures avant d'obtenir un régime plus ou moins permanent. Le pompage a duré 92 heures et une courbe de remontée sur 5 heures a été enregistrée au puits. Les valeurs stabilisées des hauteurs piézométriques et des rabattements sont reprises ci-dessous.

piézomètre ou puits	h _r (m)	s _r (m)
Pz2	30.200	1.360
Pz4	29.685	2.165
Pz8	29.295	2.745
Pz10	29.135	2.915
Pz12	29.155	2.935
P2	28.065	4.095

tableau IV.21: piézométrie en fin de pompage dans la nappe du Crétacé (Bertrée).

La carte piézométrique interprétée à partir de ces valeurs est représentée à la figure IV.32. On y constate l'étirement des isopièzes dans la direction ENE-WSW, ce qui peut être justifié par l'action non négligeable de l'écoulement régional. On peut voir également que, dans la direction Pz2 → Pz1, le resserrement des isopièzes est moins important. Cet axe est vraisemblablement plus perméable.

Les données de pompage ont été interprétées par trois méthodes différentes :

- la méthode de Dupuit pour une nappe captive en régime permanent (en évaluant le rayon d'influence à 200 m);
- la méthode de Jacob en régime transitoire;
- la méthode de correction de Jacob en régime permanent, qui tient compte d'une pénétration partielle dans l'aquifère, du puits de pompage et des piézomètres de mesure.

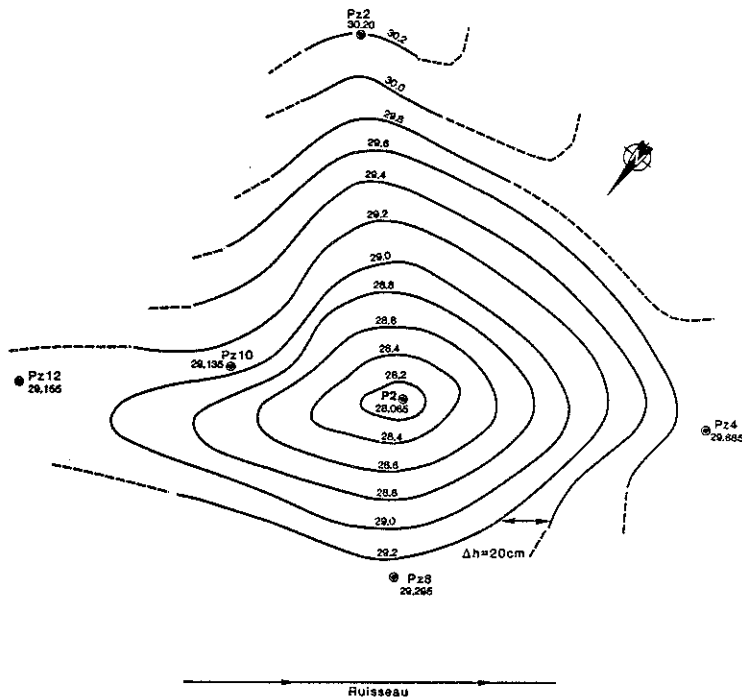


figure IV.32: carte piézométrique interprétée, site de Bertrée, nappe du Crétacé, écoulement convergent, pompage à $20 \text{ m}^3/\text{h}$.

Les valeurs obtenues pour la transmissivité et le coefficient de perméabilité sont répertoriées aux tableaux IV.22 et IV.23. Pour les deux premières méthodes, le calcul des coefficients de perméabilité a été réalisé avec une épaisseur saturée estimée à 10 mètres. On suppose ainsi que le débit pompé provient essentiellement de la couche supérieure des craies qui est plus fracturée. Pour la troisième méthode, on suppose que la totalité des 35 mètres contribue, de façon significative, à l'écoulement, ce qui explique la nécessité d'effectuer la correction de pénétration partielle.

piézomètre ou puits	T Dupuit (m^2/s)	T Jacob (m^2/s)	T corrigée (m^2/s)
Pz2	$1.7 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
Pz4	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$9.6 \cdot 10^{-4}$
Pz8	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$
Pz10	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$8.0 \cdot 10^{-4}$
Pz12	$7.9 \cdot 10^{-4}$	$9.0 \cdot 10^{-4}$	$6.6 \cdot 10^{-4}$
P2	$1.6 \cdot 10^{-3}$	$3.1 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$

tableau IV.22: transmissivités de l'aquifère crétacé (test de Bertrée).

piézomètre ou puits	K Dupuit (m/s)	K Jacob (m/s)	K corrigé (m/s)
Pz2	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$	$4.1 \cdot 10^{-5}$
Pz4	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$
Pz8	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.4 \cdot 10^{-5}$
Pz10	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$2.3 \cdot 10^{-5}$
Pz12	$7.9 \cdot 10^{-5}$	$9.0 \cdot 10^{-5}$	$1.9 \cdot 10^{-5}$
P2	$1.6 \cdot 10^{-4}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$	$3.9 \cdot 10^{-5}$

tableau IV.23: coefficients de perméabilité de l'aquifère crétacé (test de Bertrée).

On remarque évidemment que la troisième méthode conduit à des coefficients de perméabilité plus faibles. Par ailleurs, il est intéressant de constater que les valeurs de perméabilités sont, d'un piézomètre à l'autre, moins variables que dans les formations landéniennes. Ceci semble confirmer que l'aquifère crétacé est plus homogène, sauf dans la direction Pz2-P2 où les valeurs de perméabilité sont plus élevées.

Le diagramme directionnel des perméabilités (figure IV.33) illustre clairement ces constatations. La remontée au puits a également été interprétée par la méthode de Jacob. Il y correspond une transmissivité de $1.3 \cdot 10^{-3}$ m²/s et une perméabilité de $1.3 \cdot 10^{-4}$ m/s. Toujours par cette même méthode, on a évalué l'emmagasinement entre $5 \cdot 10^{-4}$ et $3 \cdot 10^{-3}$. On peut en conclure que la nappe est semi-captive, voire captive.

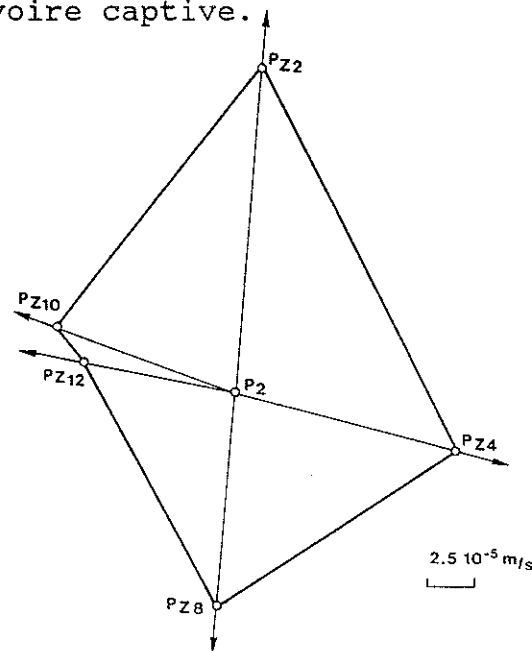


figure IV.33: diagramme directionnel des perméabilités, site de Bertrée, nappe du Crétacé.

Enfin, nous avons tenté une interprétation en tenant compte de l'infiltration verticale à travers les marnes (méthode de Hantush), mais les valeurs déduites sont incohérentes. Le coefficient de perméabilité obtenu pour la couche de marne est supérieur à celui de la craie et l'emmagasinement calculé est supérieur à l'unité.

IV.2.c.2) Modélisation de l'essai de pompage.

Pour simuler le pompage dans la craie, on a procédé de manière analogue aux cas précédents (régime permanent bidimensionnel avec différents matériaux isotropes et une discrétisation similaire). L'hypothèse de Dupuit est bien évidemment vérifiée puisque nous avons affaire à une nappe semi-captive dont la hauteur piézométrique remonte d'environ 23 mètres, au dessus du toit de la couche.

En ce qui concerne les conditions aux frontières, nous avons dû, en raison du grand rayon d'influence, faire varier le potentiel imposé sur les bords en extrapolant la valeur du rabattement en cet endroit. Pour une étude en régime permanent, cette approche nous semble tout aussi satisfaisante que celle des flux imposés (lorsqu'on ne connaît pas ces derniers).

La répartition des matériaux dans le domaine discrétisé est illustrée par la figure IV.34. On distingue les axes drainants (matériau 2) dont les directions peuvent être assimilées aux orientations générales des linéaments observés aux alentours du site (par photo-interprétation) et associés à des zones de fissuration importante. On remarque également une zone moins perméable (matériau 3) dont la présence est justifiée par la valeur légèrement plus faible de la perméabilité à proximité du piézomètre Pz12. La présence de cette zone peut aussi expliquer la diminution des transmissivités calculées par la méthode de Jacob lorsque la durée du pompage augmente. Les valeurs données au tableau IV.22 diminuent en effet de 25 à 50 % si on choisit la portion plus raide de la courbe $\Delta - \log t$.

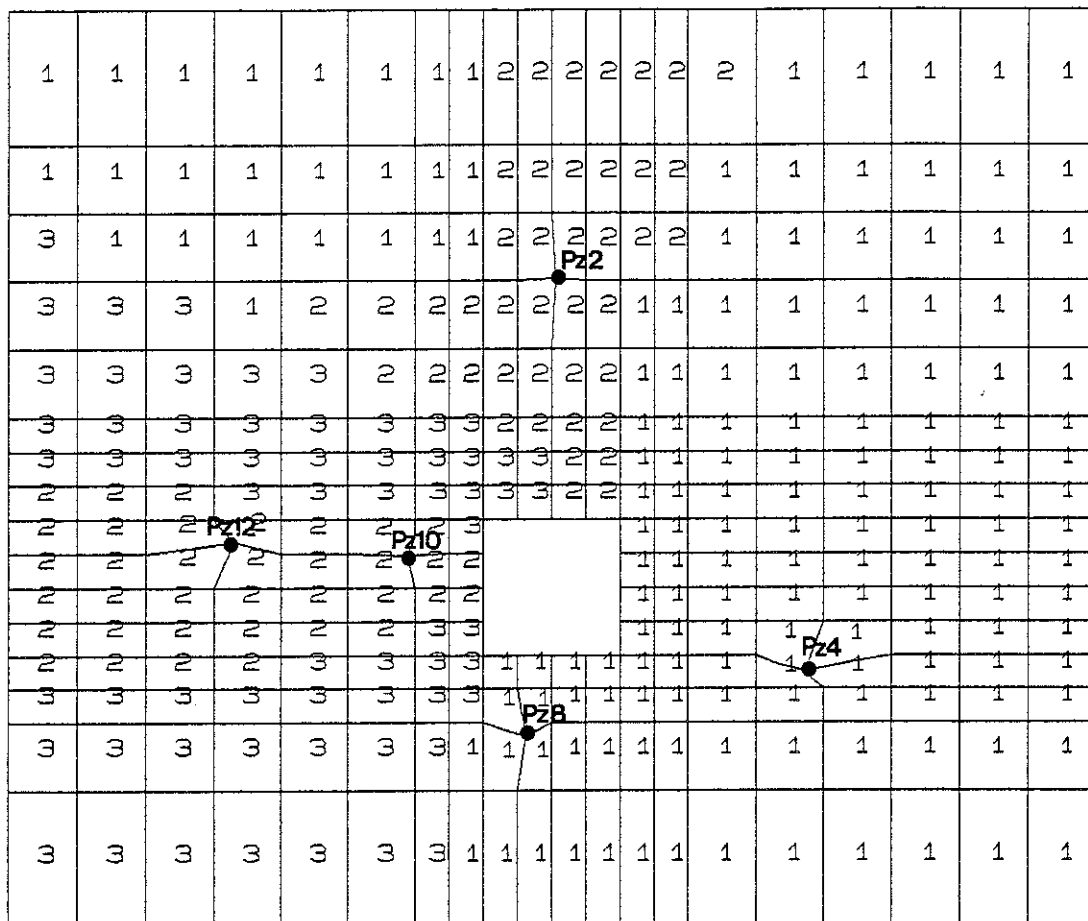
A priori, l'épaisseur de la zone influencée par le pompage n'est pas connue. C'est pourquoi, nous travaillons avec les transmissivités pour caractériser chaque matériau. En conséquence, les flux calculés seront des flux intégrés verticalement.

Après calibration, on obtient les valeurs suivantes :

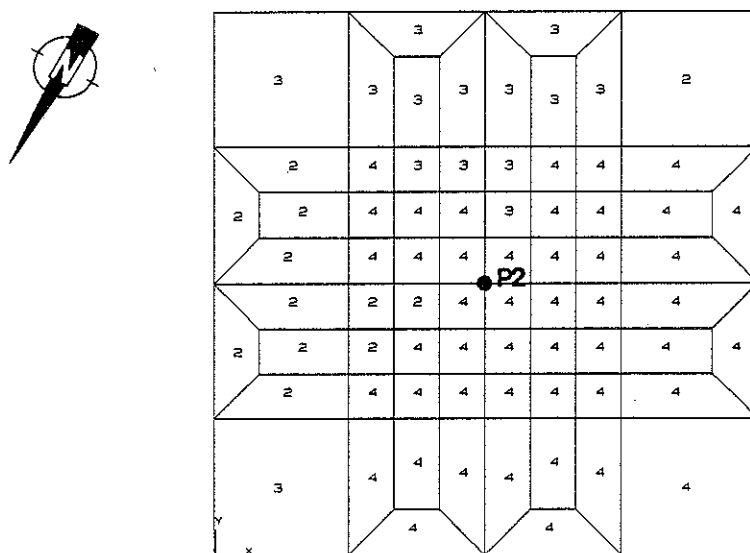
matériau	T (m ² /s)
1	9.0 10 ⁻⁴
2	6.5 10 ⁻³
3	2.5 10 ⁻⁴
4	5.8 10 ⁻³

tableau IV.24: transmissivités utilisées dans le modèle écoulement pour l'aquifère crétacé (Bertrée).

Ces valeurs sont de l'ordre de grandeur de celles obtenues par l'interprétation analytique; mais elles sont plus contrastées, ce qui est normal puisque le modèle lisse moins les résultats. Quoiqu'il en soit, la piézométrie obtenue est correctement calibrée (tableau IV.25).



a) vue d'ensemble



b) à proximité du puits P2 y
x

figure IV.34: site de Bertrée, nappe du Crétacé, discrétisation pour le modèle écoulement

piézomètre ou puits	$h_i \text{ cal} - h_i \text{ mes}$ (cm)	$h_f \text{ cal} - h_f \text{ mes}$ (cm)
Pz2	0	- 6
Pz4	- 6	+ 13
Pz5	- 7	- 1
Pz10	- 3	- 9
Pz12	+ 4	+ 9
P2	- 28	+ 3

tableau IV.25: écarts entre les hauteurs piézométriques calibrées et mesurées (Crétacé, Bertrée)

Les cartes piézométriques calculées sont représentées à la figure IV.35. Elles possèdent les mêmes caractéristiques globales que les cartes interprétées (figures IV.4b, et IV.32). Enfin, la répartition des flux peut être visualisée à la figure IV.36. On y voit clairement les axes drainants.

IV.2.b.3) Description des traçages.

Après 20 heures de pompage, les traceurs ont été injectés dans les piézomètres Pz2, Pz10 et Pz12.

- au piézomètre Pz2, on a introduit 50 gr d'uranine dilués dans 35 litres. L'injection a duré 10 heures avec les débits suivants: $q_i = 0,395 \text{ m}^3/\text{h}$, $q_p = 3.39 \text{ l/h}$ de solution. Le débit d'eau a été maintenu au-delà de ce délai (environ 1 heure). Signalons, dès à présent, que la solution d'uranine n'a pas été régulièrement homogénéisée et qu'une décantation s'est sans doute produite dans le réservoir d'injection. Il s'en est suivi que la concentration dans le piézomètre (C_{out}) n'a pas été constante mais a décru régulièrement au cours des 10 heures.
- au piézomètre Pz10, il s'agit d'une injection de courte durée (10 minutes) de 2,163 kg de KI et 9,932 kg de KN_3 déversés en deux étapes: d'abord environ 70 % (dilués dans 56 l) en 6 minutes, ensuite les 30 % restants (dilués dans environ 150 litres) en 4 minutes; enfin 50 litres de chasse ont encore été écoulés par l'injecteur.
- au piézomètre Pz12, les traceurs (2 kg de LiCl et 25 kg de NaCl) ont été dilués dans 200 litres. L'injection s'est faite en 20 minutes par le tube plongeur sans débit d'eau q_i . Pour forcer le traceur à pénétrer dans la nappe, on l'a chassé³⁹ énergiquement ($20 \text{ m}^3/\text{h}$) pendant un temps très court (1 minute).

³⁹ Puisque les piézomètres profonds n'ont pas de zone d'eau morte inférieure, on ne risque pas d'y confiner le traceur.

ANNEXES

A.1. ORGANIGRAMME DU PROGRAMME LAGAMINE.

Le programme LAGAMINE est décrit de façon détaillée dans la brochure rédigée au M.S.M. (Bille et al. 1993). Il comporte un préprocesseur qui lit les données de style ingénieur et les transforme en données de style éléments finis après avoir vérifié leur cohérence. L'organigramme correspondant est représenté figure A.1. Le programme de résolution proprement dit est symbolisé par un autre organigramme (figure A.2).

Outre ces descriptions générales, nous pensons qu'il est utile de préciser les modifications apportées pour implanter, dans le code, les 2 méthodes de résolution propres aux problèmes de pollution (ces modifications sont symbolisées par des astérisques dans les organigrammes).

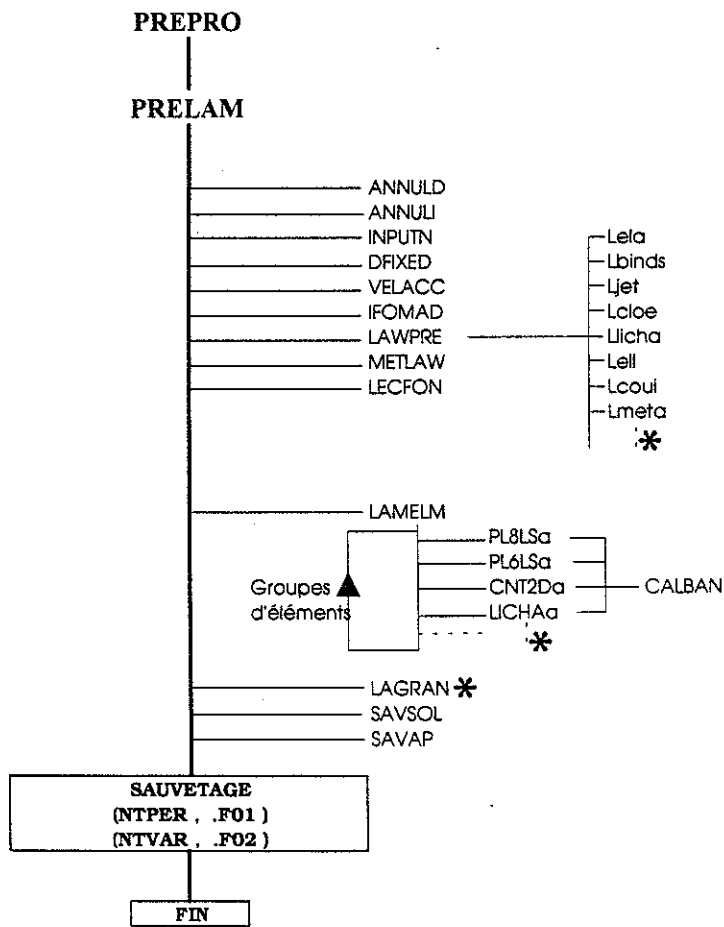


figure A.1: organigramme du préprocesseur.

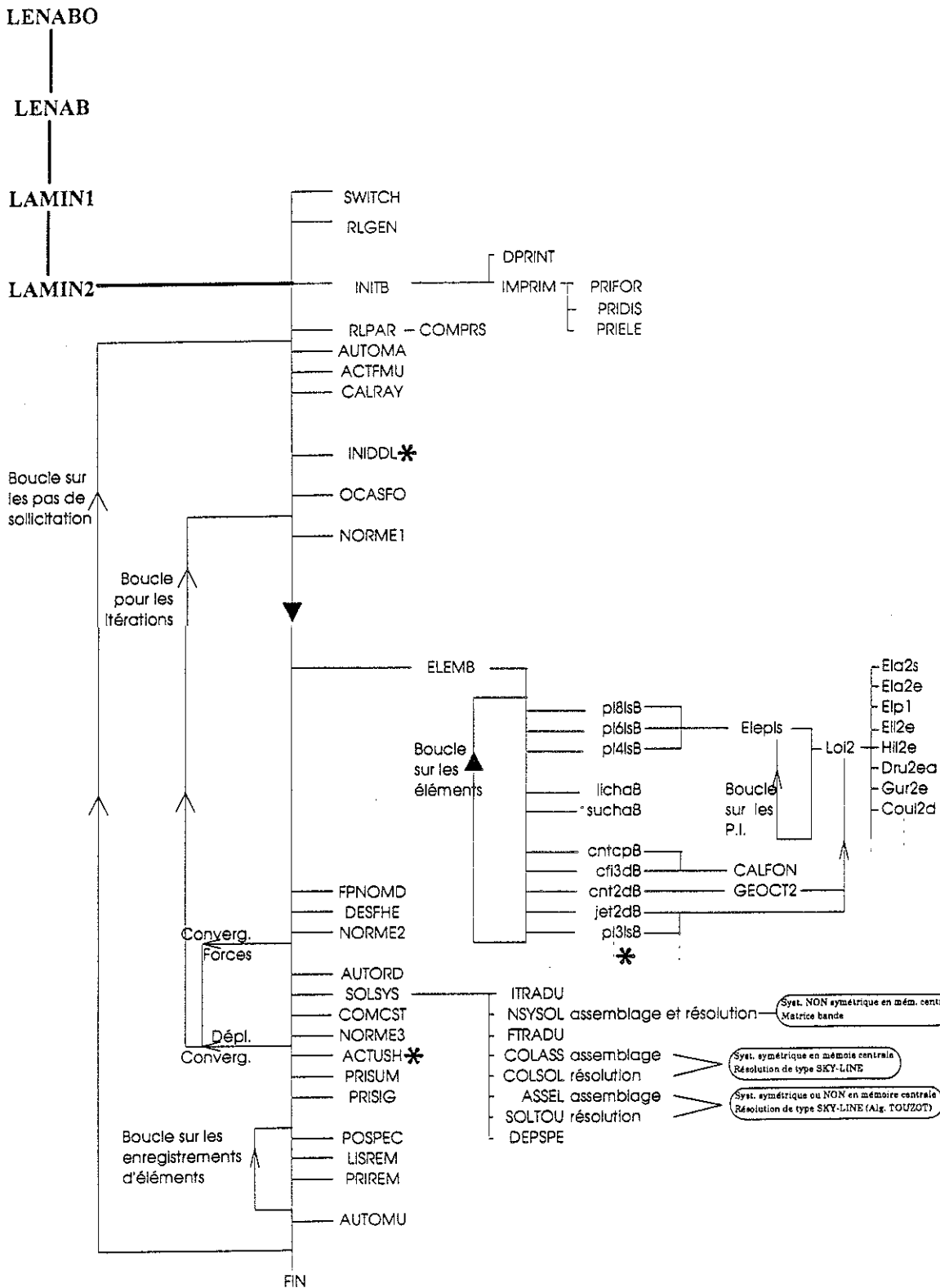


figure A.2: organigramme du programme LAGAMINE.

Le programme LAGAMINE est un code général qui traite, par la méthode des éléments finis, des problèmes de natures physiques très diverses (mécanique des sols, mise à forme des matériaux, transferts de chaleur, écoulement en milieu poreux, transport de matière en milieu poreux, etc...). Pour cette raison, il importe que la spécificité du phénomène étudié soit rejetée au maximum dans les lois de comportement et les éléments finis programmés.

En ce qui concerne le transport de polluants miscibles, nous avons créé 2 éléments (ADVE2a et ELAN2a dans le préprocesseur, ADVE2b et ELAN2b dans le programme de résolution), ainsi que 2 lois associées (LADVEC et LADVEL). Pour la méthode F.U.P.G. (élément ADVE2), cette seule opération est suffisante.

Par contre, la méthode H.E.L.M. (élément ELAN2) exige un travail de topologie sur le maillage pour déterminer les concentrations lagrangiennes. Il en résulte de nouveaux développements dans le corps général du programme.

Pour optimiser les calculs, la routine LAGRAN a été introduite dans le préprocesseur. Elle se décompose comme suit:

- 1) définition de la notion de voisinage pour chaque noeud de la structure. Il s'agit de déterminer tous les éléments faisant intervenir le noeud considéré ainsi que l'ensemble des autres noeuds qui les définissent;
- 2) définition de la notion de voisinage pour chaque élément de la structure. On détermine la somme des voisinages des noeuds appartenant à l'élément considéré;
- 3) initialisation des vitesses nodales de Darcy (par extrapolation nodale lorsque les maillages écoulement et pollution sont identiques, par interpolation en $1/R^2$ lorsqu'ils sont différents);
- 4) initialisation des données de zoom (lecture de la liste des éléments zoomés et des concentrations totales aux noeuds cachés).

Les données 1) et 2) sont stockées dans le fichier de données permanentes (NTPER) avec la liste des noeuds définissant le contour de la structure (calculée par un programme extérieur: REMOTO). Les données 3) et 4) sont mémorisées dans le fichier des variables (NTVAR). Ces 2 fichiers comportent donc, pour nos applications, un enregistrement supplémentaire.

Dans le programme LAGAMINE proprement dit, la majorité des modifications nécessaires pour une analyse eulérienne-lagrangienne sont reportées à l'intérieur de la routine INIDDL. On peut les symboliser par l'organigramme ci-après (figure A.3). Ce bloc programme permet de définir les concentrations lagrangiennes qui servent à calculer l'équilibre pondéré dans les éléments et à initialiser les concentrations totales inconnues.

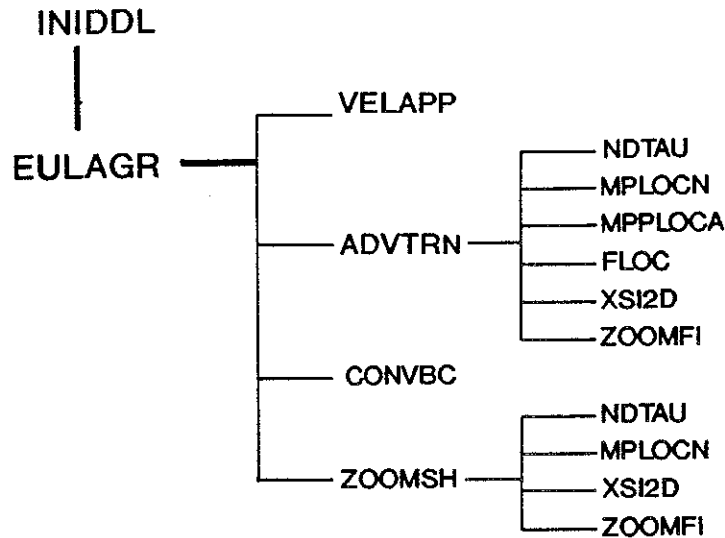


figure A.3: organigramme du particle tracking
(analyse eulérienne lagrangienne)

Les routines qui apparaissent dans l'organigramme se définissent comme suit:

VELAPP: routine d'actualisation des vitesses nodales de Darcy (par les mêmes procédés que pour l'initialisation dans le préprocesseur).

ADVTRN: routine de reverse particle tracking avec adaptation au noeud tracé et aux éléments traversés (taille variable du sous-intervalle, actualisée au cours du trajet convectif).

CONVBC: prise en compte des conditions frontières pour la convection. $c^* = c_{displ}$ pour les noeuds à déplacement imposé, $c^* = c_{out} \cdot v_{out} / v_{in}$ pour les noeuds à condition mixte imposée par un élément de frontière.

ZOOMSH: reverse particle tracking des noeuds cachés et détermination des nouveaux éléments à zoomer.

NDTAU: définition de la longueur initiale du sous-intervalle pour le noeud à tracer (sous-multiple du temps nécessaire pour traverser l'élément voisin de ce noeud).

MPLOCN: localisation du point tracé par rapport au voisinage du noeud dont il provient.

MPLOCA: localisation du point tracé par rapport au voisinage de sa position lors du sous-intervalle précédent.

FLOC: détermine si un point est intérieur à un élément (par la méthode des triangles, figure A.4.)

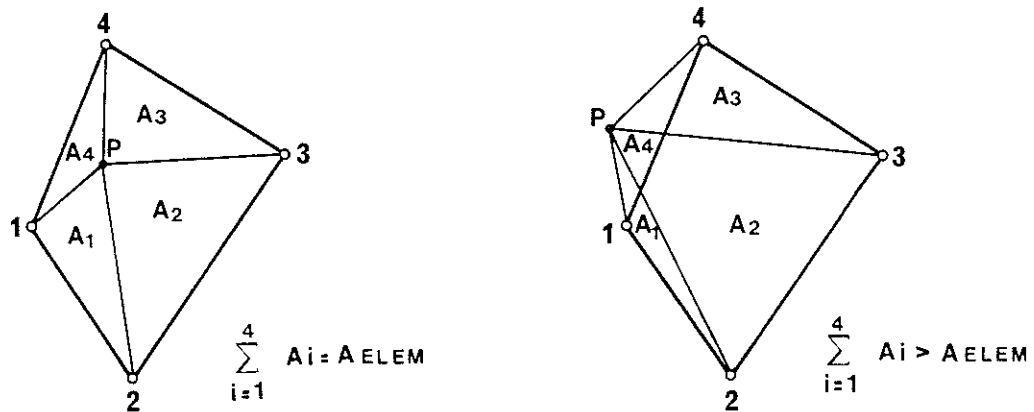


figure A.4: méthode des triangles pour positionner un point par rapport à un élément.

XSI2D: recherche les coordonnées locales d'un point intérieur à un élément donné (methode itérative de Newton-Raphson).

ZOOMFI: calcule les fonctions d'interpolation de l'élément zoomé. Il s'agit de fonctions bilinéaires dans le sous-élément concerné. Elles servent uniquement à déterminer la concentration lagrangienne d'un noeud dont le trajet convectif inverse aboutit dans un élément zoomé.

Mentionnons encore la routine ACTUSH qui mémorise les nouveaux éléments zoomés et actualise les concentrations totales des noeuds cachés.

Enfin, il faut également signaler que l'élément de frontière CONRA, utilisé dans les problèmes de conduction thermique, a été généralisé (dans le cas à 2 noeuds) pour tenir compte d'une convection à l'intérieur du milieu. Une loi propre à ce type de condition frontière a été programmée (LCOPO)

A.2. DONNEES DE RESTITUTIONS.

La plupart des essais de traçage ont été réalisés en collaboration avec Ph. Meus qui les a interprétés avec diverses solutions analytiques. On trouvera dans sa thèse une description complète des données de restitution pour tous les tests en écoulement convergent. Pour le traçage en écoulement naturel, les données sont reprises ci-après.

DONNEES EXPERIMENTALES
 TRACAGE EN ECOULEMENT UNIFORME
 AQUIFERE CRETACE BERTREE
 =====

t S,CFLUO PPB PZ2

t S,CFLUO PPB PUITs,PZ4,PZ8

=====

=====

00000000. 000000.00
 00000900. 000000.02
 00001800. 000000.02
 00002700. 000000.04
 00003600. 000000.00
 00004500. 000000.00
 00005400. 000000.00
 00006300. 000000.00
 00007200. 000000.00
 00008100. 000000.00
 00009000. 000000.09
 00009900. 000004.27
 00010800. 000000.02
 00011700. 000000.07
 00012600. 000026.38
 00013500. 000053.57
 00014400. 000061.34
 00015300. 000094.64
 00015750. 000080.77
 00016200. 000087.98
 00016650. 000062.45
 00017100. 000041.92
 00017550. 000098.65
 00018000. 000087.43
 00018450. 000096.86
 00018900. 000097.97
 00019350. 000037.48
 00019800. 000089.09
 00020700. 000051.35
 00021600. 000009.17
 00022500. 000013.53
 00023400. 000066.34
 00024300. 000030.82
 00025200. 000022.49
 00026100. 000054.13
 00027000. 000027.49
 00027900. 000023.61
 00028800. 000029.85
 00029700. 000027.45
 00030600. 000012.73
 00031500. 000026.17
 00032400. 000026.01
 00033300. 000028.60
 00034200. 000019.72
 00035100. 000025.27
 00036000. 000020.83
 00036900. 000018.05
 00037800. 000025.27
 00038700. 000060.23
 00039600. 000023.05
 00040500. 000020.27
 00041400. 000010.17
 00042300. 000089.09
 00043200. 000027.49
 00044100. 000067.45
 00045000. 000054.68
 00045900. 000033.59
 00046800. 000023.05
 00047700. 000100.87

00000000. 000000.00 000000.00 000000.00
 00000900. 000000.00 000000.00 000000.00
 00001800. 000000.00 000000.00 000000.00
 00002700. 000000.00 000000.52 000000.00
 00004500. 000000.00 000000.05 000000.00
 00006300. 000000.00 000000.40 000000.00
 00008100. 000000.00 000001.77 000000.00
 00009900. 000000.00 000002.17 000000.00
 00011700. 000000.08 000001.82 000000.00
 00013500. 000000.00 000000.49 000000.14
 00014400. 000000.03 000000.00 000000.00
 00015750. 000000.00 000000.00 000000.00
 00016650. 000000.00 000000.00 000000.00
 00018000. 000000.00 000000.58 000000.00
 00018900. 000000.00 000000.00 000000.00
 00019800. 000000.00 000000.00 000000.00
 00021600. 000000.00 000000.00 000000.00
 00023400. 000000.14 000001.04 000000.19
 00026100. 000000.04 000000.53 000003.23
 00027900. 000000.56 000000.89 000000.78
 00029700. 000000.06 000000.82 000022.97
 00031500. 000000.00 000000.91 000010.97
 00033300. 000000.00 000000.89 000037.48
 00035100. 000000.00 000001.04 000043.58
 00036900. 000000.00 000001.02 000051.35
 00038700. 000000.00 000001.20 000036.37
 00040500. 000000.00 000001.42 000069.11
 00042300. 000000.00 000001.90 000048.58
 00044100. 000000.00 000001.99 000147.49
 00045900. 000000.00 000002.22 000111.97
 00047700. 000000.00 000003.83 000125.29
 00049500. 000000.00 000016.73 000019.16
 00051300. 000000.00 000016.57 000035.81
 00053100. 000000.00 000004.05 000019.72
 00054900. 000000.00 000011.93 000029.15
 00056700. 000000.00 000010.49 000018.61
 00058500. 000000.00 000004.54 000021.38
 00060300. 000000.00 000005.79 000014.17
 00062100. 000000.00 000003.99 000014.81
 00063900. 000000.00 000004.21 000018.33
 00065700. 000000.00 000003.45 000008.25
 00067500. 000000.00 000009.53 000007.61
 00069300. 000000.00 000007.10 000007.13
 00071100. 000000.00 000004.48 000010.65
 00072900. 000000.00 000006.12 000011.13
 00074700. 000000.00 000007.32 000011.13
 00076500. 000000.00 000002.96 000009.05
 00078300. 000000.00 000004.59 000004.54
 00080100. 000000.00 000003.50 000004.32
 00081900. 000000.00 000003.56 000001.87
 00083700. 000000.00 000003.61 000003.94
 00085500. 000000.00 000002.96 000005.08
 00087300. 000000.00 000003.89 000004.16
 00089100. 000000.00 000001.59 000004.27
 00090900. 000000.00 000001.11 000004.98
 00092700. 000000.00 000003.63 000006.50
 00094500. 000000.00 000002.88 000006.34
 00096300. 000000.00 000004.27 000006.12
 00098100. 000000.00 000004.21 000006.23

00048600.	000033.59	00099900.	000000.00	000004.27	000007.65
00049500.	000070.78	00101700.	000000.00	000003.72	000010.15
00049950.	000036.37	00103500.	000000.00	000004.16	000008.03
00050400.	000064.12	00105300.	000000.00	000004.48	000003.61
00050850.	000054.13	00107100.	000000.00	000004.81	000006.77
00051300.	000029.15	00108900.	000000.00	000004.05	000003.94
00051750.	000017.21	00110700.	000000.00	000004.92	000004.70
00052200.	000026.33	00114300.	000000.00	000001.87	000004.87
00052650.	000036.37	00117900.	000000.00	000004.21	000004.05
00053100.	000032.48	00127800.	000000.00	000001.31	000003.83
00053550.	000105.31	00142200.	000000.00	000003.81	000002.74
00054000.	000023.05	00156600.	000000.00	000002.28	000003.99
00054450.	000032.48	00171000.	000000.00	000003.78	000003.29
00054900.	000035.81	00185400.	000000.00	000000.45	000002.96
00055350.	000045.80	00199800.	000000.00	000000.86	000004.92
00055800.	000035.81	00214200.	000000.00	000002.35	000001.22
00056250.	000029.71	00233100.	000000.00	000000.35	000001.04
00056700.	000030.82	00243000.	000000.00	000003.41	000001.35
00057150.	000034.70	00253800.	000000.01	000003.41	000006.12
00057600.	000035.81	00264600.	000000.00	000002.35	000004.92
00058050.	000033.04	00275400.	000000.00	000002.77	000004.48
00058500.	000031.93	00286200.	000000.00	000001.93	000002.63
00058950.	000031.93	00300600.	000000.00	000002.55	000000.47
00059400.	000033.59	00315000.	000000.00	000002.46	000000.62
00059850.	000030.82	00329400.	000000.00	000000.40	000001.51
00060300.	000029.15	00351000.	000000.00	000001.37	000001.22
00061200.	000035.26	00415800.	000000.00	000000.84	000000.44
00062100.	000033.04				
00063000.	000033.59				
00063900.	000033.59				
00064800.	000031.37				
00065700.	000033.59				
00066600.	000032.48				
00067500.	000034.15				
00068400.	000032.48				
00069300.	000033.59				
00070200.	000018.05				
00071100.	000035.26				
00072000.	000059.68				
00072900.	000020.27				
00073800.	000049.13				
00074700.	000024.71				
00075600.	000090.20				
00076500.	000120.85				
00077400.	000100.87				
00078300.	000061.34				
00079200.	000066.89				
00080100.	000053.02				
00081000.	000050.80				
00081900.	000028.04				
00082800.	000024.71				
00083700.	000022.49				
00084600.	000024.71				
00085500.	000020.83				
00086400.	000037.48				
00087300.	000022.49				
00088200.	000030.82				
00089100.	000020.57				
00090000.	000024.16				
00090900.	000016.39				
00091800.	000023.60				
00092700.	000038.59				
00093600.	000020.83				
00094500.	000022.49				
00095400.	000024.71				
00096300.	000020.27				

t S,CFLUO PPB PZ10

=====

00250200.	000004.15
00253800.	000002.08
00257400.	000001.95
00261000.	000001.73
00264600.	000002.13
00268200.	000002.15
00271800.	000002.13
00275400.	000001.99
00279000.	000001.91
00282600.	000001.82
00286200.	000001.68
00289800.	000002.04
00293400.	000001.46
00300600.	000001.73
00307800.	000001.86
00315000.	000001.28
00322200.	000001.15
00329400.	000001.64
00351000.	000001.73
00415800.	000004.91

00097200. 000022.49
00098100. 000026.01
00099000. 000019.45
00099900. 000022.97
00100800. 000028.89
00101700. 000026.97
00102600. 000027.45
00103500. 000037.48
00104400. 000041.36
00105300. 000016.09
00106200. 000023.61
00107100. 000025.69
00108900. 000024.73
00110700. 000023.13
00112500. 000025.05
00114300. 000021.21
00117000. 000035.26
00120600. 000031.93
00124200. 000025.27
00127800. 000028.04
00131400. 000024.71
00135000. 000024.16
00138600. 000022.17
00142200. 000028.57
00145800. 000025.69
00149400. 000025.21
00153000. 000023.77
00156600. 000023.61
00160200. 000023.13
00163800. 000020.73
00167400. 000020.89
00171000. 000018.49
00174600. 000015.13
00178200. 000015.77
00181800. 000015.93
00185400. 000013.05
00189000. 000012.41
00192600. 000013.05
00196200. 000012.89
00199800. 000012.89
00203400. 000010.33
00207000. 000010.33
00210600. 000010.97
00214200. 000010.81
00217800. 000010.65
00221400. 000009.37
00229500. 000008.89
00243000. 000008.09
00253800. 000010.01
00264600. 000007.45
00275400. 000006.97
00286200. 000007.65
00300600. 000006.50
00315000. 000006.34
00329400. 000005.36
00351000. 000005.19
00415800. 000000.84

DONNEES EXPERIMENTALES
 TRACAGE EN ECOULEMENT UNIFORME
 AQUIFERE CRETACE BERTREE
 =====

t S, Cli PPM PZ2

t S, Cli PPM PUITs,PZ4,PZ8

000000.00 00000.004
 001800.00 00000.000
 002700.00 00000.000
 003600.00 00000.000
 004500.00 00000.000
 005400.00 00000.000
 006300.00 00000.000
 007200.00 00000.004
 008100.00 00000.004
 009000.00 00000.005
 009900.00 00000.011
 010800.00 00000.031
 011700.00 00000.397
 012600.00 00000.190
 013500.00 00000.356
 014400.00 00001.150
 015300.00 00001.980
 016200.00 00002.270
 017100.00 00002.790
 017550.00 00002.810
 018000.00 00003.080
 018450.00 00002.790
 018900.00 00002.820
 019350.00 00003.700
 019800.00 00003.720
 020250.00 00004.190
 020700.00 00004.440
 021150.00 00004.170
 021600.00 00004.770
 022500.00 00005.190
 023400.00 00006.100
 024300.00 00006.400
 025200.00 00006.700
 026100.00 00007.100
 027000.00 00007.700
 027900.00 00008.300
 028800.00 00008.800
 029700.00 00008.300
 030600.00 00008.600
 031500.00 00009.500
 032400.00 00011.400
 033300.00 00010.400
 034200.00 00010.600
 035100.00 00010.500
 036000.00 00010.900
 036900.00 00011.200
 037800.00 00011.000
 038700.00 00011.000
 039600.00 00010.900
 040500.00 00010.800
 041400.00 00011.700
 042300.00 00011.500
 043200.00 00014.700
 044100.00 00010.600
 045000.00 00011.700
 045900.00 00010.900
 046800.00 00010.700
 047700.00 00011.000
 048600.00 00011.300

000000.00 00000.008 00000.000 00000.000
 001800.00 00000.000 00000.000 00000.000
 002700.00 00000.000 00000.000 00000.000
 003600.00 00000.000 00000.000 00000.000
 004500.00 00000.000 00000.054 00000.000
 006300.00 00000.000 00000.043 00003.880
 008100.00 00000.000 00000.032 00015.800
 009900.00 00000.000 00000.037 00016.700
 011700.00 00000.000 00000.039 00024.000
 013500.00 00000.000 00000.038 00026.400
 015300.00 00000.000 00000.225 00016.600
 016200.00 00000.000 00000.000 00000.000
 017100.00 00000.000 00000.000 00000.000
 017550.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018000.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018450.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018900.00 00000.006 00000.000 00000.000
 019350.00 00000.000 00000.000 00000.000
 021150.00 00000.000 00000.194 00000.000
 021600.00 00000.005 00000.770 00006.400
 024300.00 00000.000 00000.398 00009.600
 025200.00 00000.000 00000.497 00013.200
 026100.00 00000.000 00000.000 00000.000
 027900.00 00000.000 00000.177 00011.600
 029700.00 00000.004 00000.182 00000.530
 031500.00 00000.000 00000.258 00011.500
 033300.00 00000.000 00000.221 00004.200
 035100.00 00000.000 00000.306 00011.500
 036900.00 00000.000 00001.720 00012.000
 038700.00 00000.000 00000.720 00011.700
 040500.00 00000.000 00000.497 00000.920
 042300.00 00000.000 00001.190 00010.000
 044100.00 00000.000 00000.890 00008.700
 045900.00 00000.000 00001.100 00008.900
 047700.00 00000.000 00001.140 00005.700
 049500.00 00000.000 00001.820 00007.000
 051300.00 00000.000 00002.440 00002.770
 053100.00 00000.000 00002.770 00004.300
 054900.00 00000.000 00000.780 00002.970
 056700.00 00000.000 00002.190 00004.290
 058500.00 00000.000 00001.130 00003.250
 060300.00 00000.000 00001.380 00004.180
 062100.00 00000.000 00001.660 00002.300
 063900.00 00000.000 00001.310 00002.430
 065700.00 00000.000 00001.390 00003.690
 067500.00 00000.000 00001.220 00001.870
 069300.00 00000.000 00001.770 00001.610
 071100.00 00000.000 00001.630 00001.690
 072900.00 00000.000 00001.300 00002.610
 074700.00 00000.000 00001.550 00002.730
 076500.00 00000.000 00001.260 00002.720
 078300.00 00000.000 00000.740 00002.130
 080100.00 00000.000 00001.280 00002.230
 081900.00 00000.000 00001.300 00002.180
 083700.00 00000.000 00001.270 00002.420
 085500.00 00000.000 00001.260 00001.790
 087300.00 00000.000 00000.930 00002.140
 089100.00 00000.000 00001.270 00001.870
 090900.00 00000.000 00001.220 00001.680

049500.00	00010.000	092700.00	00000.000	00000.355	00001.910
050400.00	00010.500	094500.00	00000.000	00000.900	00002.000
051300.00	00010.300	096300.00	00000.000	00000.670	00001.480
051750.00	00011.800	098100.00	00000.000	00001.080	00001.480
052200.00	00009.600	099900.00	00000.000	00001.090	00001.770
052650.00	00010.200	101700.00	00000.000	00001.150	00001.830
053100.00	00010.600	103500.00	00000.000	00000.980	00002.060
053550.00	00013.400	105300.00	00000.000	00001.080	00001.810
054000.00	00011.600	107100.00	00000.000	00001.110	00001.060
054450.00	00009.600	108900.00	00000.000	00001.250	00001.460
054900.00	00010.600	110700.00	00000.000	00000.990	00001.250
055350.00	00009.200	112500.00	00000.000	00001.170	00001.060
055800.00	00010.900	116100.00	00000.000	00000.460	00001.690
056250.00	00009.900	119700.00	00000.000	00000.990	00001.350
056700.00	00009.700	129600.00	00000.000	00000.292	00001.390
057150.00	00009.500	144000.00	00000.000	00000.830	00000.830
057600.00	00009.700	158400.00	00000.000	00000.790	00000.970
058050.00	00009.900	172800.00	00000.000	00000.950	00000.960
058500.00	00009.600	187200.00	00000.000	00000.930	00000.750
058950.00	00009.500	201600.00	00000.000	00000.127	00000.960
059400.00	00010.000	216000.00	00000.000	00000.523	00000.420
059850.00	00009.300	231300.00	00000.000	00000.084	00000.000
060300.00	00009.800	244800.00	00000.000	00000.710	00000.478
060750.00	00009.300	255600.00	00000.000	00000.710	00001.090
061200.00	00009.600	266400.00	00000.000	00000.610	00001.010
061650.00	00009.300	277200.00	00000.000	00000.580	00000.970
062100.00	00009.500	288000.00	00000.000	00000.414	00000.590
063000.00	00009.000	302400.00	00000.000	00000.530	00000.203
063900.00	00008.900	316800.00	00000.000	00000.510	00000.220
064800.00	00008.900	331200.00	00000.000	00000.199	00000.332
065700.00	00008.600	352800.00	00000.000	00000.301	00000.350
066600.00	00008.300	417600.00	00000.000	00000.024	00000.173
067500.00	00007.900				
068400.00	00008.500				
069300.00	00008.000				
070200.00	00008.000				
071100.00	00007.600				
072000.00	00009.900				
072900.00	00007.000				
073800.00	00006.500				
074700.00	00008.000				
075600.00	00006.400				
076500.00	00006.900				
077400.00	00006.800				
078300.00	00006.900				
079200.00	00006.600				
080100.00	00006.100				
081000.00	00006.200				
081900.00	00005.800				
082800.00	00005.800				
083700.00	00006.300				
084600.00	00006.100				
085500.00	00006.600				
086400.00	00006.800				
087300.00	00006.800				
088200.00	00005.500				
089100.00	00006.300				
090000.00	00005.500				
090900.00	00007.200				
091800.00	00005.500				
092700.00	00006.800				
093600.00	00005.200				
094500.00	00004.890				
095400.00	00005.700				
096300.00	00005.500				
097200.00	00005.560				

t S, Cli PPM PZ10

=====

248400.00	00002.490
252000.00	00002.510
255600.00	00002.390
259200.00	00002.310
262800.00	00002.230
266400.00	00002.220
270000.00	00002.230
273600.00	00002.230
277200.00	00002.170
280800.00	00002.140
284400.00	00002.070
288000.00	00002.050
291600.00	00001.980
295200.00	00002.000
302400.00	00001.910
309600.00	00001.840
316800.00	00001.820
324000.00	00001.740
331200.00	00001.640
352800.00	00001.490
417600.00	00000.770

098100.00	00005.800
099000.00	00005.600
099900.00	00005.500
100800.00	00006.000
101700.00	00005.600
102600.00	00004.540
103500.00	00004.660
104400.00	00004.550
105300.00	00004.300
106200.00	00004.210
107100.00	00005.600
108000.00	00004.620
108900.00	00004.390
110700.00	00004.310
112500.00	00004.470
114300.00	00003.920
116100.00	00004.200
118800.00	00003.450
122400.00	00003.540
126000.00	00003.180
129600.00	00003.270
133200.00	00003.120
136800.00	00003.020
140400.00	00002.830
144000.00	00002.650
147600.00	00002.480
151200.00	00002.620
154800.00	00002.560
158400.00	00002.420
162000.00	00002.400
165600.00	00002.400
169200.00	00002.260
172800.00	00002.290
176400.00	00002.200
180000.00	00001.990
183600.00	00001.940
187200.00	00001.950
190800.00	00001.970
194400.00	00001.790
198000.00	00001.920
201600.00	00001.760
205200.00	00001.770
208800.00	00001.860
212400.00	00001.700
216000.00	00001.660
219600.00	00001.640
223200.00	00001.560
231300.00	00001.560
244800.00	00001.470
255600.00	00001.320
266400.00	00001.240
277200.00	00001.210
288000.00	00001.140
302400.00	00001.130
316800.00	00001.050
331200.00	00000.990
352800.00	00000.910
417600.00	00001.180

DONNEES EXPERIMENTALES
 TRACAGE EN ECOULEMENT UNIFORME
 AQUIFERE CRETACE BERTREE

=====

t S, CNO3 PPM PZ2

t S, CNO3 PPM PUIITS, PZ4, PZ8

=====

=====

000000.00 00000.700
 013500.00 00000.700
 014400.00 00009.200
 015300.00 00015.200
 016200.00 00017.300
 017100.00 00022.000
 017550.00 00021.300
 018000.00 00026.000
 018450.00 00020.700
 018900.00 00021.300
 019350.00 00028.200
 019800.00 00028.800
 020250.00 00031.100
 020700.00 00032.400
 021150.00 00030.800
 021600.00 00036.400
 022500.00 00037.500
 023400.00 00043.900
 024300.00 00046.300
 025200.00 00050.500
 026100.00 00052.000
 027000.00 00058.000
 027900.00 00067.300
 028800.00 00063.500
 029700.00 00068.400
 030600.00 00073.200
 031500.00 00074.600
 032400.00 00096.600
 033300.00 00080.400
 034200.00 00085.100
 035100.00 00080.800
 036000.00 00090.600
 036900.00 00084.900
 037800.00 00085.100
 038700.00 00085.500
 039600.00 00084.300
 040500.00 00083.100
 041400.00 00091.700
 042300.00 00088.100
 043200.00 00117.800
 044100.00 00082.900
 045000.00 00089.200
 045900.00 00086.300
 046800.00 00083.900
 047700.00 00088.300
 048600.00 00088.900
 049500.00 00079.300
 050400.00 00084.100
 051300.00 00082.500
 052200.00 00077.800
 053100.00 00085.700
 054000.00 00093.000
 054900.00 00085.900
 055800.00 00090.400
 056700.00 00080.100
 057600.00 00081.200
 058500.00 00078.900
 059400.00 00078.600
 060300.00 00078.400

000000.00 00001.000 00000.000 00000.000
 001800.00 00000.000 00000.000 00000.000
 002700.00 00000.000 00000.000 00000.000
 003600.00 00000.000 00000.000 00000.000
 004500.00 00000.000 00004.500 00000.000
 006300.00 00000.000 00001.700 00001.000
 008100.00 00000.000 00004.100 00147.000
 009900.00 00000.000 00009.700 00161.000
 011700.00 00000.000 00009.900 00236.000
 013500.00 00000.000 00008.900 00258.000
 015300.00 00000.000 00004.100 00160.000
 016200.00 00000.000 00000.000 00000.000
 017100.00 00000.000 00000.000 00000.000
 017550.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018000.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018450.00 00000.000 00000.000 00000.000
 018900.00 00000.006 00000.000 00000.000
 019350.00 00000.000 00000.000 00000.000
 021150.00 00000.000 00005.000 00043.400
 021600.00 00000.005 00007.400 00060.100
 024300.00 00000.000 00006.800 00092.600
 025200.00 00000.000 00007.300 00138.000
 026100.00 00000.000 00000.000 00000.000
 027900.00 00000.000 00007.100 00111.000
 029700.00 00000.004 00006.500 00008.000
 031500.00 00000.000 00006.200 00108.000
 033300.00 00000.000 00006.000 00040.200
 035100.00 00000.000 00005.800 00111.000
 036900.00 00000.000 00015.800 00127.000
 038700.00 00000.000 00008.500 00116.000
 040500.00 00000.000 00008.200 00013.000
 042300.00 00000.000 00014.600 00111.000
 044100.00 00000.000 00010.700 00095.400
 045900.00 00000.000 00012.500 00090.700
 047700.00 00000.000 00014.200 00057.900
 049500.00 00000.000 00018.800 00072.300
 051300.00 00000.000 00023.600 00027.900
 053100.00 00000.000 00029.700 00042.800
 054900.00 00000.000 00007.900 00030.200
 056700.00 00000.000 00025.600 00043.100
 058500.00 00000.000 00011.800 00032.500
 060300.00 00000.000 00017.400 00041.900
 062100.00 00000.000 00019.200 00023.600
 063900.00 00000.000 00016.200 00025.500
 065700.00 00000.000 00014.500 00037.400
 067500.00 00000.000 00013.500 00019.200
 069300.00 00000.000 00020.200 00016.800
 071100.00 00000.000 00017.000 00017.600
 072900.00 00000.000 00015.200 00028.700
 074700.00 00000.000 00016.500 00028.800
 076500.00 00000.000 00013.900 00028.000
 078300.00 00000.000 00009.400 00024.400
 080100.00 00000.000 00015.000 00024.800
 081900.00 00000.000 00016.400 00022.500
 083700.00 00000.000 00013.600 00024.800
 085500.00 00000.000 00014.800 00018.800
 087300.00 00000.000 00010.800 00023.600
 089100.00 00000.000 00015.100 00019.700
 090900.00 00000.000 00014.500 00017.900

061200.00	00076.200	092700.00	00000.000	00003.800	00019.600
062100.00	00076.900	094500.00	00000.000	00011.800	00020.600
063000.00	00078.400	096300.00	00000.000	00009.000	00019.500
063900.00	00074.800	098100.00	00000.000	00013.400	00015.400
064800.00	00070.700	099900.00	00000.000	00013.700	00018.300
065700.00	00068.400	101700.00	00000.000	00014.000	00021.800
066600.00	00067.300	103500.00	00000.000	00012.600	00024.100
067500.00	00063.500	105300.00	00000.000	00015.400	00019.300
068400.00	00067.800	107100.00	00000.000	00016.500	00012.700
069300.00	00065.200	108900.00	00000.000	00018.500	00016.900
070200.00	00064.700	110700.00	00000.000	00013.900	00013.500
071100.00	00060.900	112500.00	00000.000	00016.200	00012.200
072000.00	00080.100	116100.00	00000.000	00005.400	00016.800
072900.00	00057.700	119700.00	00000.000	00012.700	00013.100
073800.00	00052.800	129600.00	00000.000	00002.900	00014.800
074700.00	00066.100	144000.00	00000.000	00009.800	00008.000
075600.00	00055.400	158400.00	00000.000	00009.000	00011.000
076500.00	00059.600	172800.00	00000.000	00011.500	00010.300
077400.00	00060.200	187200.00	00000.000	00012.700	00009.000
078300.00	00061.000	201600.00	00000.000	00002.100	00012.000
079200.00	00053.600	216000.00	00000.000	00005.900	00003.700
080100.00	00049.400	231300.00	00000.000	00002.000	00003.200
081000.00	00049.100	244800.00	00000.000	00007.700	00004.100
081900.00	00046.500	255600.00	00000.000	00008.400	00012.300
082800.00	00047.800	266400.00	00000.000	00006.300	00011.100
083700.00	00049.800	277200.00	00000.000	00005.900	00011.700
084600.00	00047.900	288000.00	00000.000	00003.200	00006.300
085500.00	00052.300	302400.00	00000.000	00004.000	00002.100
086400.00	00046.300	316800.00	00000.000	00004.000	00002.000
087300.00	00054.300	331200.00	00000.000	00001.300	00002.500
088200.00	00042.700	352800.00	00000.000	00002.200	00003.100
089100.00	00049.300	417600.00	00000.000	00001.200	00001.700
090000.00	00043.100				
090900.00	00057.300				
091800.00	00044.900				

t S, CNO3 PPM PZ10

=====

248400.00	00023.200
252000.00	00027.100
255600.00	00022.700
259200.00	00022.200
262800.00	00021.700
266400.00	00021.000
270000.00	00020.700
273600.00	00020.900
277200.00	00022.000
280800.00	00020.800
284400.00	00022.100
288000.00	00019.200
291600.00	00018.700
295200.00	00018.700
302400.00	00017.700
309600.00	00016.900
316800.00	00018.200
324000.00	00015.800
331200.00	00014.800
352800.00	00014.200
417600.00	00006.100

147600.00 00021.000

151200.00	00021.600
154800.00	00023.700
158400.00	00020.000
162000.00	00020.100
165600.00	00020.500
169200.00	00021.100
172800.00	00021.600
176400.00	00018.600
180000.00	00016.300
183600.00	00018.200
187200.00	00016.400
190800.00	00016.600
194400.00	00015.100
198000.00	00015.700
201600.00	00016.500
205200.00	00014.200
208800.00	00014.900
212400.00	00013.700
216000.00	00014.200
219600.00	00014.000
223200.00	00012.500
231300.00	00012.700
244800.00	00013.300
255600.00	00010.700
266400.00	00010.100
277200.00	00009.900
288000.00	00009.200
302400.00	00009.100
316800.00	00008.500
331200.00	00007.800
352800.00	00007.100
417600.00	00011.000

A.3. EVALUATION DES TENEURS EN NITRATES DANS L'AQUIFERE DE HESBAYE.

Les sites étudiés par traçage dans le cadre de ce travail mais aussi les points échantillonnés lors du recensement des concentrations en 1984-1985 sont repris sur le document intitulé annexe 2 (voir en fin de cet ouvrage).

Ces points ont permis d'évaluer l'état de la nappe à cette période. Parmi ceux-ci, il convient de distinguer les échantillons prélevés dans la craie fracturée (piézomètres) des échantillons prélevés en profondeur, dans la craie plus compacte (galeries captantes).

Pour dessiner une image objective des concentrations qui existaient dans ces deux couches, il faut encore effectuer une interpolation correcte entre les mesures. La méthode du krigeage ne convient pas pour cette application à cause du caractère ponctuel des concentrations observées (pollutions très localisées). Même en introduisant un effet de pépite, le krigeage a tendance à lisser le champ de données. Il s'ensuit que la cross-validation produit rapidement une erreur importante.

Deux alternatives se présentent alors:

- effectuer une interpolation arbitraire pondérée par une puissance n de la distance entre les mesures; de cette façon, l'étendue des zones polluées apparaîtrait plus réduite que dans le cas d'une interpolation linéaire.
- réaliser un modèle bidimensionnel de transport, en régime permanent, assurant une corrélation physiquement objective entre les points de concentration élevée et le reste du domaine.

Pour la couche de craie fracturée, ces 2 méthodes ont été testées. Nous avons utilisé la discrétisation ayant servi à la simulation des écoulements de cette nappe (Radu et al 1987). Les concentrations sont déterminées en chaque noeud de ce maillage. Les résultats sont présentés figure A.5.

La figure A.5a a été obtenue par une interpolation en $1/R^4$, à partir des 4 points de mesure les plus proches du noeud où la concentration doit être évaluée.

La figure A.5b est calculée en fixant les points de concentration maximale (considérés alors comme des lieux de pollution ponctuelle continue) ainsi que les points de la frontière où la vitesse de convection entre dans le modèle. On simule alors pendant un temps très long avec le champ convectif sollicitant (connu avec précision par les simulations de l'écoulement) et les paramètres de transport donnés au tableau A.1.

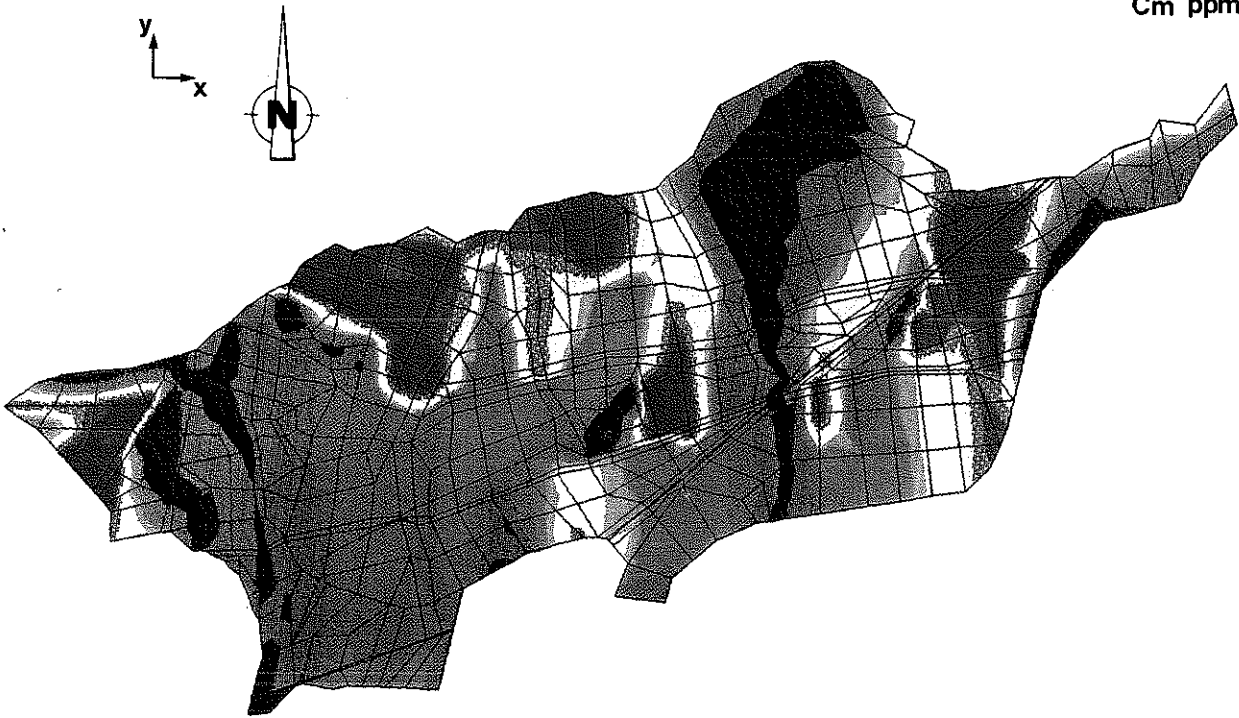
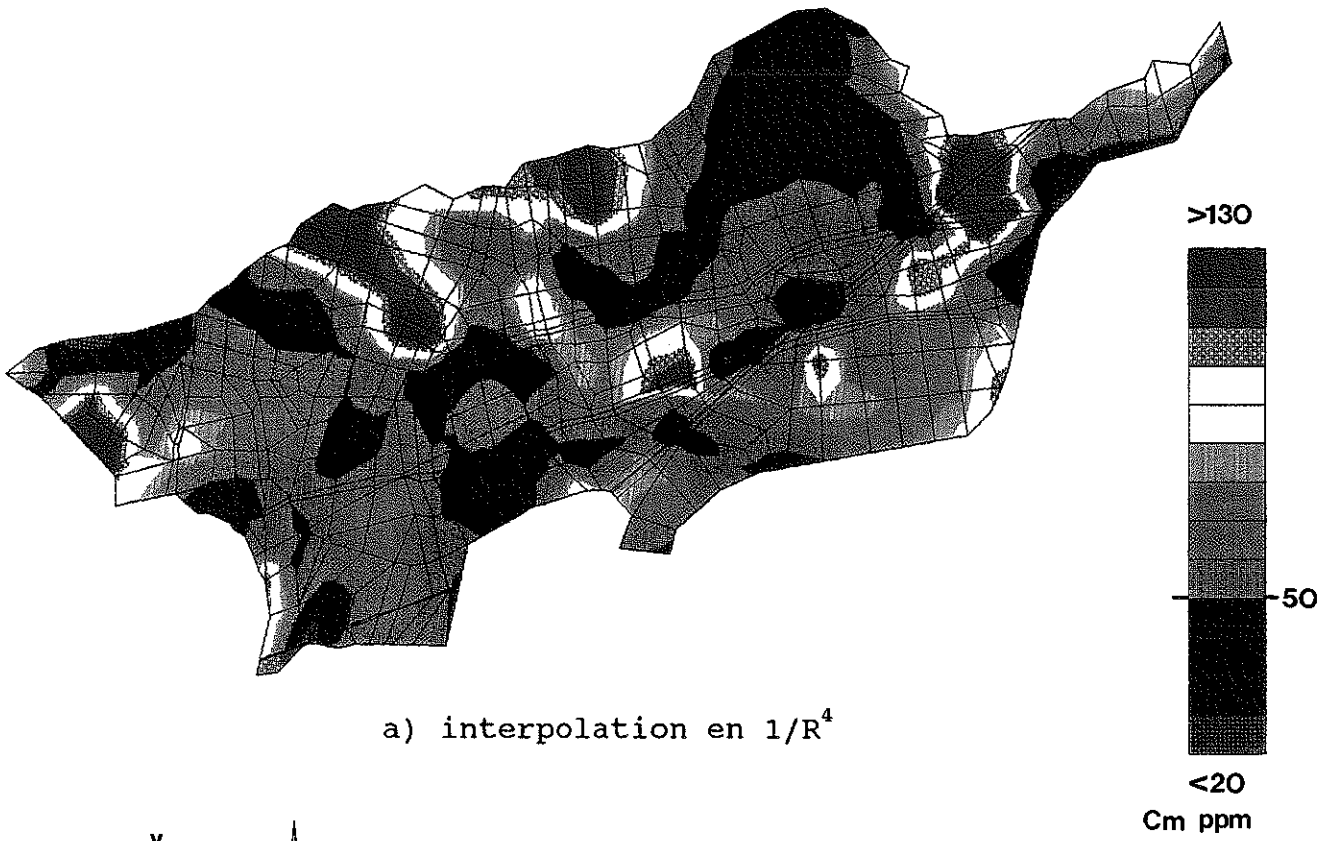


figure A.5: évaluation des concentrations en nitrates dans la craie fracturée (données de 1984).

matériau	a _L (m)	a _T (m)	α_d^* (s ⁻¹)	θ_{im} (%)	θ_m (%)
craie compacte	4.0	1.0	$1.0 \cdot 10^{-6}$	31	6
vallées sèches	10.7	2.7	$1.9 \cdot 10^{-6}$	40	15
nouvelle vallée sèche	10.0	2.5	$1.75 \cdot 10^{-6}$	38	13
craie fracturée	9.5	2.4	$1.7 \cdot 10^{-6}$	37	12
craie fracturée amont	8.0	2.0	$1.3 \cdot 10^{-6}$	33	8

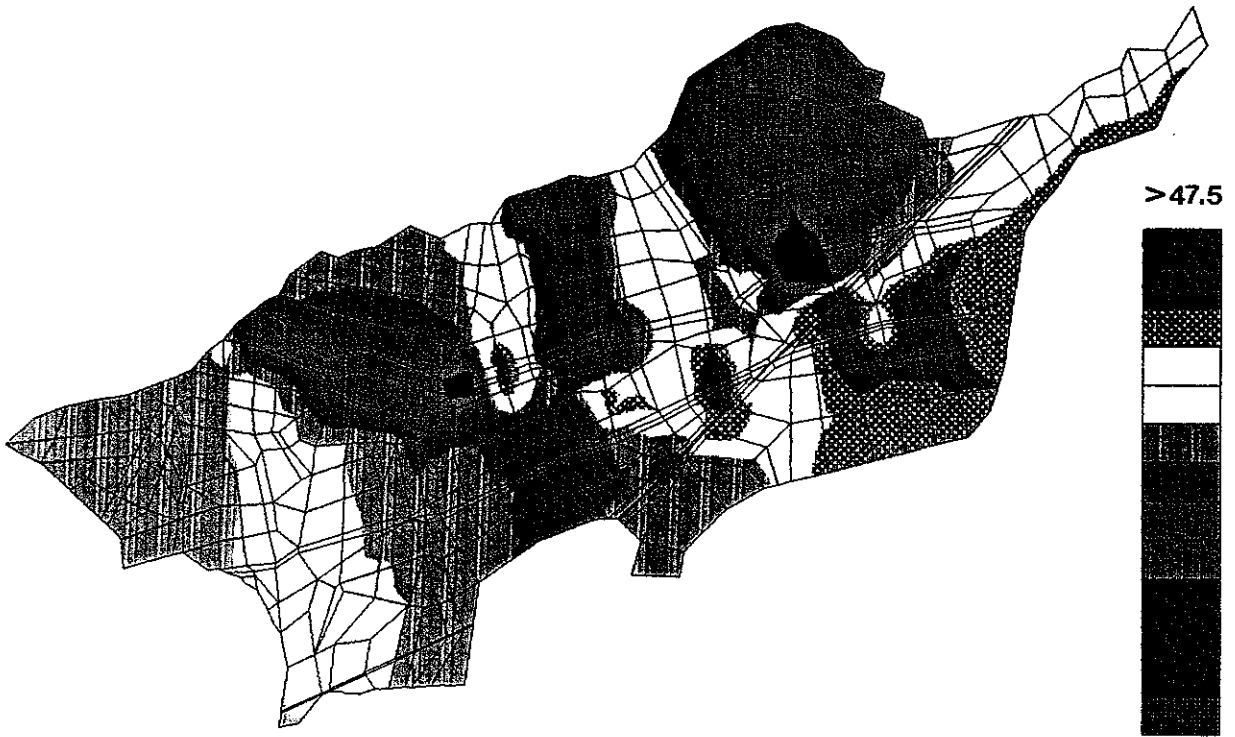
tableau A.1: paramètres de transport utilisés pour le modèle régional en régime permanent.

On constate que le modèle favorise une extension des zones polluées par rapport à l'interpolation. Ceci résulte de l'action de la dispersion et surtout de la convection vers le Nord. Sur les 2 diagrammes d'isovaleurs, on distingue plusieurs zones à risques où les concentrations sont supérieures à 120 ppm (soit plus de 2 fois la norme). C'est le cas notamment à proximité de Slins-Herstal, à l'Est du bassin versant et au Nord, du côté de Waremme-Oreye. Ces zones constituent une menace potentielle pour les couches profondes de craie compacte.

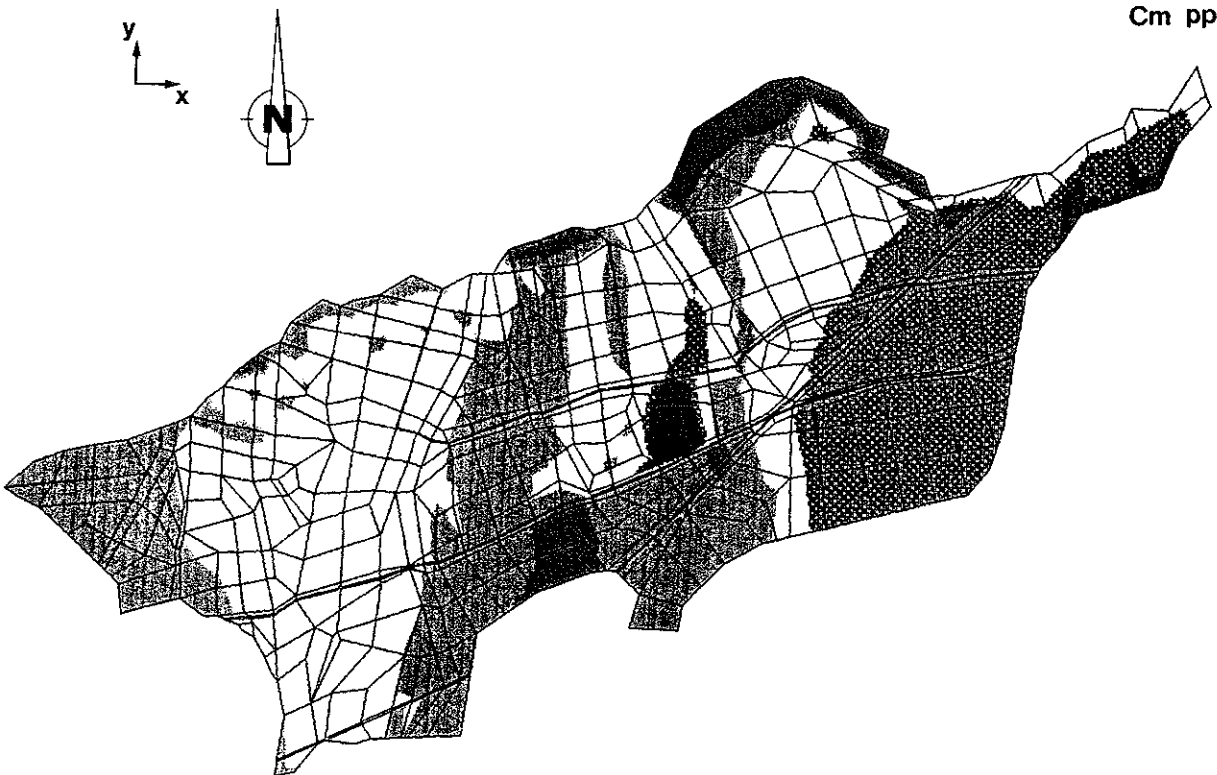
Pour ces dernières, le même traitement de données a été réalisé (figures A.6a et b); mais, comme il porte sur moins de valeurs, il est plus sujet à caution.

On remarquera cependant que les concentrations sont, en 1984, nettement plus faibles dans ces niveaux. Toutefois, la norme est dépassée à proximité de Liège-Herstal (à l'Est du bassin versant).

Il serait évidemment très intéressant d'effectuer un nouveau recensement des teneurs en nitrates pour se rendre compte de l'évolution de la nappe et savoir comment les hautes concentrations observées dans les craies fracturées influencent la qualité de l'eau captée dans les couches profondes plus compactes. L'utilisation d'un modèle tridimensionnel peut se révéler fort utile pour interpoler et prédire ce genre d'évolution.



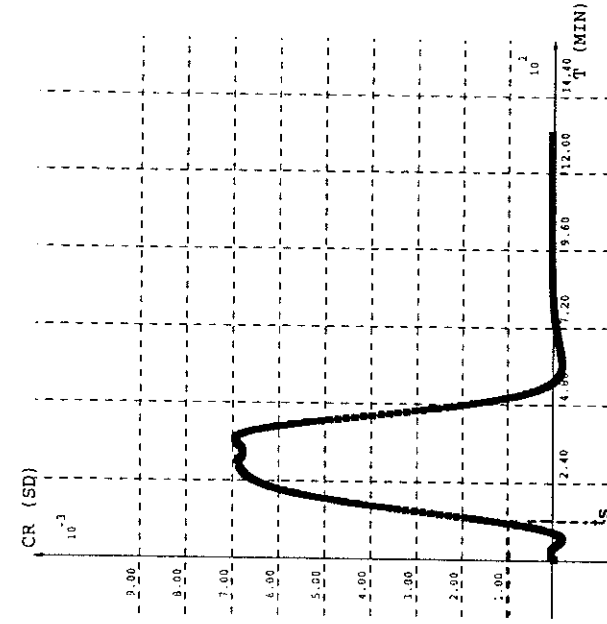
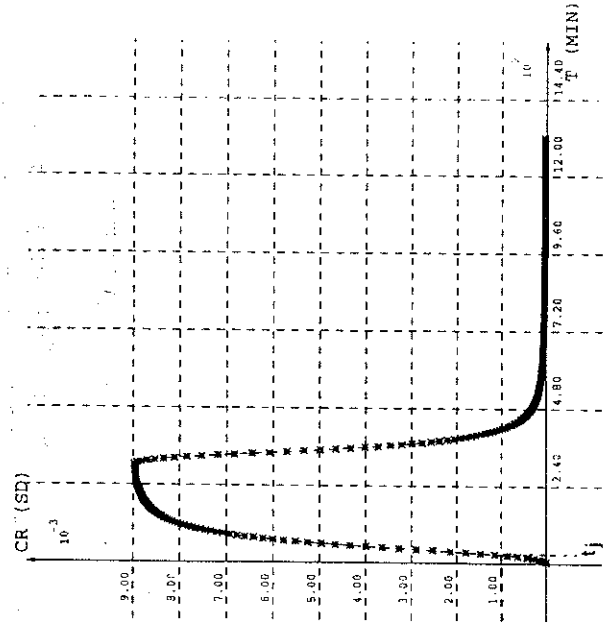
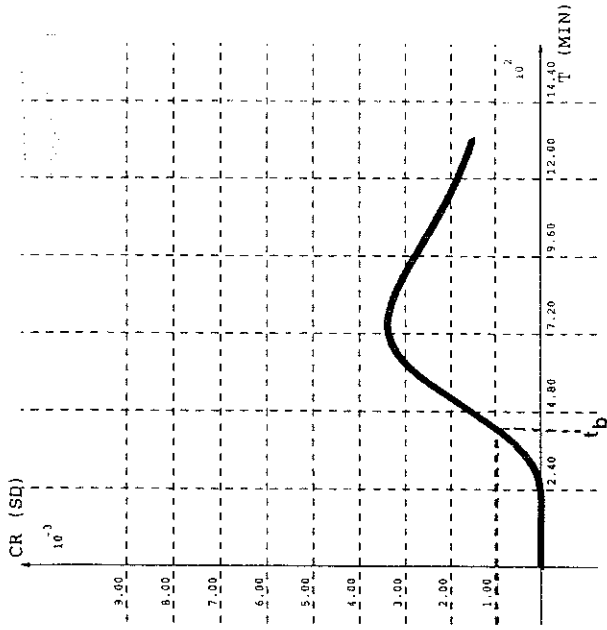
a) interpolation en $1/R^4$



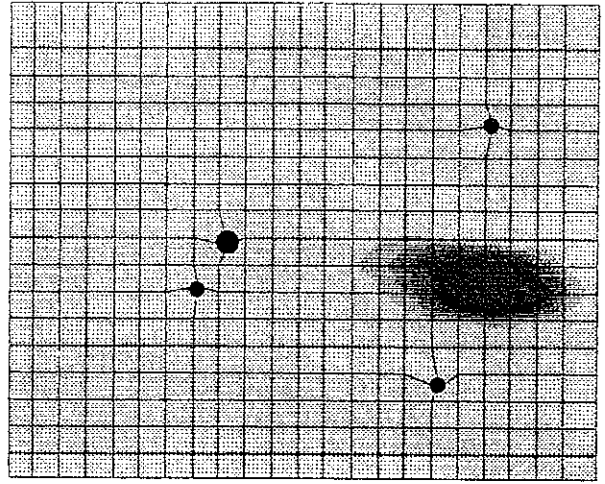
b) modèle en régime permanent

figure A.6: évaluation des concentrations en nitrates dans la craie compacte (données de 1984).

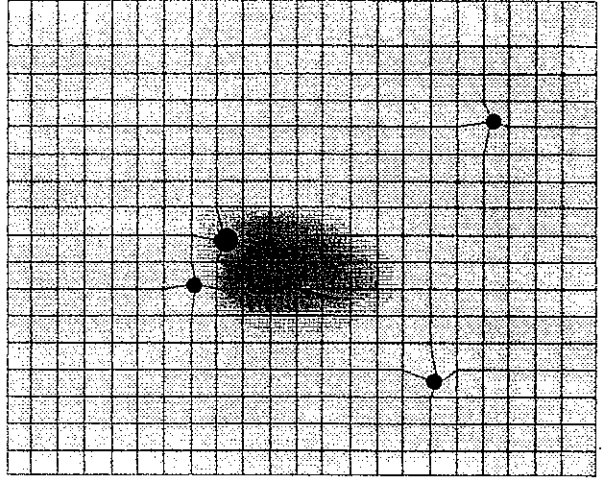
RESTITUTION ET REPARTITION SPATIALE DU TRACEUR
 POUR TROIS INJECTIONS SIMULEES (A CRISNEE)



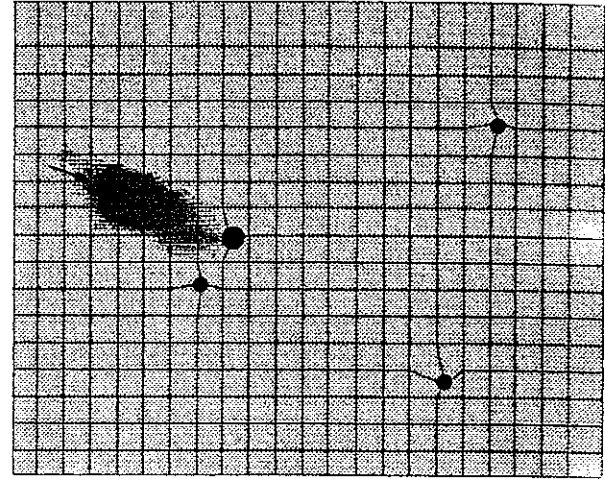
SITUATION APRES 6 HEURES



$dC=2E-2$



$dC=1E-3$



$dC=1E-2$

Cette façon d'aborder les problèmes est maintenant rendue possible d'un point de vue strictement informatique par les performances accrues des ordinateurs et des logiciels. Le problème de la récolte des données mesurées reste, par contre, souvent lié à des impératifs financiers. Il est donc souhaitable de disposer d'études géologiques sérieuses, d'optimiser au mieux l'emploi des données et de diriger les essais et mesures à réaliser en vue de déterminer, de façon adéquate, les paramètres intervenant dans les lois du modèle.

L'étude des non linéarités et couplages affectant les écoulements est un domaine en pleine évolution qui permettra, de plus en plus, de s'approcher de la réalité physique et physico-chimique.

Au terme de la rédaction de ce travail, de vastes possibilités de recherches ultérieures paraissent fondamentales et devraient être abordées dans l'avenir immédiat :

- l'étude des diverses interactions et non linéarités (citées en introduction du chapitre III) et leur numérisation comprenant la mise en équation, la paramétrisation et la résolution de cas pratiques;
- l'étude et la simulation des phénomènes de transport de polluants miscibles avec une approche déterministe détaillée et rigoureuse des processus. Les recherches et la thèse de mon ami et collègue Pierre BIVER vont pleinement dans cette direction;
- la prise en compte encore plus rigoureuse d'hétérogénéités et d'anisotropies mesurées;
- la poursuite de traitements géostatistiques, la réalisation de simulations conditionnelles afin d'optimiser les données et estimer le degré d'incertitude;
- l'introduction d'écoulements multiphasiques dans des codes éléments finis et la réalisation d'études comparatives sur la prise en compte d'hétérogénéités importantes dans les réservoirs pétroliers par rapport aux simulateurs habituels utilisés en "reservoir engineering".

Toutes ces recherches devraient pouvoir être poursuivies dans des cadres très largement interdisciplinaires afin d'écarter définitivement les approches simplistes qui consistent à fermer les yeux pudiquement sur le manque de données, celui-ci entraînant l'absence de vérifications tout en permettant une simplicité accrue du modèle à réaliser sur le cas étudié.

ANNEXE 1

EXPRESSION DE LA VARIATION DE POROSITE EN FONCTION DU TEMPS

La porosité s'exprime par $n = \frac{V_p}{V_t} = \frac{V_p}{V_s + V_p}$

où V_p = volume des pores

V_s = volume du solide

$V_s + V_p = V_t =$ volume total

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{V_s \frac{\partial V_p}{\partial t} - V_p \frac{\partial V_s}{\partial t}}{(V_s + V_p)^2} \quad (\text{a.1.})$$

La variation du volume du solide peut être considérée comme très faible par rapport à la variation du volume des pores:

$$\frac{\partial V_s}{\partial t} \ll \frac{\partial V_p}{\partial t}$$

Par conséquent, on peut écrire :

$$\frac{\partial V_p}{\partial t} \approx \frac{\partial (V_p + V_s)}{\partial t}$$

L'équation (a.1.) devient alors :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{V_s}{(V_p + V_s)^2} \frac{\partial (V_p + V_s)}{\partial t} \quad (\text{a.2.})$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{v_s}{v_t^2} \frac{\partial v}{\partial t} \quad (\text{a.3.})$$

Par définition de la porosité, on a :

$$(1-n) = \frac{v_s}{v_t}$$

L'équation (a.3.) devient :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{(1-n)}{v_t} \frac{\partial v_t}{\partial t} \quad (\text{a.4.})$$

En reprenant l'équation (II.38.) du paragraphe II.3.2., il vient :

$$-\dot{\epsilon}_v = - \frac{1}{v_t} \frac{\partial v_t}{\partial t} = \alpha \cdot \dot{\sigma}' \quad (\text{a.5.})$$

Dès lors, l'équation (a.4.) s'écrit :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - (1-n) \cdot \alpha \cdot \dot{\sigma}'$$

et

$$\frac{\partial n}{\partial t} = (1-n) \cdot \alpha \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{a.6.})$$

avec les mêmes hypothèses qu'utilisées au paragraphe II.3.2.

ANNEXE 2

VITESSES DE DARCY ET VITESSES MICROSCOPIQUES MOYENNES

Comme signalé au paragraphe II.1.4., la vitesse de filtration mesurée par l'expérience de Darcy est une vitesse équivalente, valable pour l'ensemble de l'E.V.R. considéré. La relation liant la vitesse de filtration du fluide à la vitesse microscopique moyenne du fluide est la suivante :

$$v_f = \frac{v}{n} \quad (\text{a.7.})$$

où v_f = vitesse microscopique moyenne du fluide

Lorsque le mouvement du solide est considéré, une vitesse équivalente du solide, globale à l'E.V.R., peut être définie de façon analogue à la vitesse de filtration de Darcy. La relation liant cette vitesse équivalente du solide à la vitesse microscopique moyenne du solide est la suivante :

$$v_s = \frac{v_s}{(1-n)} \quad (\text{a.8.})$$

où v_s = vitesse microscopique moyenne du solide

v_s = vitesse équivalente du solide dans l'E.V.R.

VITESSES RELATIVES ET VITESSES ABSOLUES

Si l'on désire exprimer la vitesse relative du fluide par rapport au solide, en utilisant leurs vitesses microscopiques, on obtient :

$$v_{f.r} = v_{f.a} - v_{s.a} \quad (\text{a.9.})$$

où les seconds indices r et a sont utilisés pour indiquer respectivement les vitesses relatives et absolues.

En utilisant l'équation (a.7.) dans l'équation (a.9.), celle-ci devient (Cooper, 1966) :

$$v_{f.r} = \frac{v}{n} - v_{s.a} \quad (a.10.)$$

où v est la vitesse de filtration de Darcy utilisée précédemment. On obtient :

$$v = n \left(v_{f.r} + v_{s.a} \right) \quad (a.11.)$$

EQUATION DE CONSERVATION DE LA MASSE DE SOLIDE

L'équation de conservation de la masse de solide d'un milieu poreux saturé peut s'écrire comme suit (De Marsily, 1986):

$$\operatorname{div} \left(\rho_s \cdot (1-n) \cdot v_{s.a} \right) = - \frac{\partial \left((1-n) \cdot \rho_s \right)}{\partial t} \quad (a.12.)$$

où ρ_s = masse volumique du solide

En prenant comme hypothèse que la masse volumique du solide est constante dans l'E.V.R. considéré et qu'elle est constante en fonction du temps, l'équation (a.12.) se réduit à :

$$\rho_s \cdot \operatorname{div} \left((1-n) \cdot v_{s.a} \right) = \rho_s \cdot \frac{\partial n}{\partial t}$$

$$\text{et } \operatorname{div} \left((1-n) \cdot v_{s.a} \right) = \frac{\partial n}{\partial t}$$

La porosité est considérée comme constante dans l'E.V.R. (porosité moyenne représentative pour l'E.V.R., cfr. II.1.2.). On obtient donc :

$$\operatorname{div} v_{s.a} = \frac{1}{(1-n)} \cdot \frac{\partial n}{\partial t} \quad (a.13.)$$

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Ahmed, S., and de Marsily, G., 1987, Comparison of geostatistical methods for estimating transmissivity using data on transmissivity and specific capacity, Water Resources Research, vol.23, n°5, pp.1717-1737.

Ahmed, S., de Marsily, G., and Talbot, A., 1988, Combined use of hydraulic and electrical properties of an aquifer in a geostatistical estimation of transmissivity, Ground Water, vol.26, n°1, pp.78-86.

Archer, J.S. and Wall, C.G., 1987, Petroleum engineering, Principles and practices, Chapter 5, Characteristics of Reservoirs, Imperial College of Science and Technology, London, Graham and Trotman.

Aronovici, V.S., 1946, The mechanical analysis as an index of subsoil permeability, Soil Sci. Soc. Am. Proc., n° 11, pp. 137-141.

Aubry, D. and Ozanam, O., 1988, Free surface tracking through non-saturated models, 6th Int. Conf. Numerical Methods in Geomechanics, ICONMIG 88, Innsbruck, pp. 757-763.

Aziz, K. and Palagi, C., 1991, Use of flexible grids in reservoir simulation, note prepared for International Workshop on Computer Applications in Reservoir Modeling, I.B.M. European Petroleum Application Center (E.P.A.C.), Stavanger.

Bachmat, Y., and Bear, J., 1986, Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media, 1 : The continuum approach, Transport in Porous media 1, pp. 213-240.

Baeteman, C., 1989, The Upper Quaternary deposits of the Changjiang coastal plain, Shanghai area, Etude de la géologie du Quaternaire de l'hydrogéologie et de la géologie de l'ingénieur dans le delta du Yangtsé. Modèle mathématique de la zone de Shanghai, pp. 19-177.

Baeteman, C. and Schroeder, C., 1990, Land subsidence in Shanghai, An application of the interaction between coastal-lowland geology and engineering geology, Proc. 6th Int. IAEG Congress, Balkema, pp. 191-199.

Banerjee, P.K. and Butterfield, R., 1981, Boundary element methods in engineering science, Mc Graw-Hill, 452 p.

Barends, F.B.J., 1990, The role of pore water in geological and geotechnical engineering, Proc. of the 6th IAEG Congress Rotterdam, Balkema.

Bathe, K.J. and Khoshgoftaar, M.R., 1979, Finite element free surface seepage analysis without iteration, Int. J. Num. and Anal. Meth. in Geomechanics, vol.3, pp. 13-22.

Bear, J., and Bachmat, Y., 1967, A generalized theory on hydrodynamic dispersion in porous media, I.A.S.H. Symp. Artificial Recharge and Management of Aquifers, Haifa, Israel, IASH 72, pp. 7-16.

Bear, J., and Corapcioglu, M.Y., 1981, Regional land subsidence 1. Integrated aquifer subsidence equations based on vertical displacement only. 2. Integrated aquifer subsidence equations for vertical and horizontal displacements, Water Resources Research, vol. 17, n° 4, pp. 937-946 and pp. 947-958.

Bear, J., and Corapcioglu, M.Y., 1983, A mathematical model for regional land subsidence due to pumping : 3. Integrated equations for a phreatic aquifer, Water Resources Research, vol. 19, n° 4, pp. 895-908.

Bear, J., and Verruijt, A., 1987, Modeling groundwater flow and pollution, Reidel, 414 p.

Biot, M.A., 1941, General Theory of three-dimensional consolidation, J. Appl. Phys. 12, pp. 155-164.

Biot, M.A., 1956, General solutions of the equations of elasticity and consolidation for a porous material, J. Applied Mechanics, Trans. ASME, 23, pp. 91-96.

Bishop, A., 1959, The principle of effective stress, Teknisk Ukeblad, 39, pp. 859-863.

Bishop, A., and Blight, G.E., 1963, Some aspects of effective stress in saturated and partly saturated soils, Geotechnique, pp. 177-197.

Biver, P., 1990, Recherche phénoménologique sur la propagation des polluants dans un milieu poreux et application à un cas concret, Rapport de synthèse IRSIA, 98 p.

BLUEPACK, 1975, Programme de Géostatistiques développé par le Centre de Géostatistique de l'École des Mines de Paris, par Delfiner, P., Delhomme, J.P., et Chiles, J.P.

BLUEPACK, 1978, Version améliorée du programme BLUEPACK de 1975, Irigoien, F., Delfiner, P., Renard, D., et Chiles, J.P.

Bonnechère, F., 1985, Cours de mécanique des sols, Université de Liège, Faculté des Sciences Appliquées.

Boulton, N.S., and Streltsova, T.D., 1975, New equations for determining the formation constants of an aquifer from pumping test data, Water Resources Research, 11(1), pp. 148-153.

Bratvold, R.B., 1991, High-performance reservoir simulation on workstation clusters, note prepared for International Workshop on Computer Applications in Reservoir Modeling, I.B.M. European Petroleum Application Center (E.P.A.C.), Stavanger.

Brebbia, C.A., 1978, The boundary element method for engineers, Pentech press, London.

Bredehoeft, J.D., and Cooley, R.L., 1983, Comment on "A note on the meaning of storage coefficient", Water Resources Research, Vol. 19, n° 6, pp. 1632-1634.

Brixko, A., 1980, L'alimentation en eau de l'agglomération liégeoise, La Technique de l'eau et de l'assainissement, n°402-403, pp. 87-95.

Burger, A., Recordon, E., Bovet D., Cotton, L., et Saugy, B., 1985, Thermique des nappes souterraines, Presses polytechniques romandes, Lausanne, 255 p.

Byrd, C.W. and Cassel, D.K., 1980, The effect of sand content upon cone index and selected physical properties, Soil Sci., n° 129, pp. 197-204.

Calembert, L., 1956, Le Crétacé supérieur de la Hesbaye et du Brabant, Ann. Soc. Géol. de Belgique, tome LXXX, pp. 129-165.

Calembert, L., Monjoie, A., Polo-Chiapolini, Cl. et Schroeder, Ch., 1981, Géologie de l'Ingénieur et mécanique des roches (1ère suite), Annales des Travaux Publics de Belgique n° 6.

Castany, G., 1963, Traité pratique des eaux souterraines, Dunod, Paris, 657 p.

Castany, G., 1967, Principes et méthodes de l'hydrogéologie, Dunod, Paris, 238 p.

Castany, G., 1982, Principes et méthodes de l'hydrogéologie, Dunod Université, 237 p.

Cescotto, S., et Piette, Ch., 1983, Application des éléments finis à la détermination de la surface piézométrique d'une nappe souterraine, Actes de la journée d'étude sur la méthode des éléments finis appliqués à la géotechnique (ABEM), Bruxelles

Charlier, R., 1987, Approche unifiée de quelques problèmes non linéaires de mécanique des milieux continus par la méthode des éléments finis, Thèse de Doctorat en Sciences Appliquées, Université de Liège.

Charlier, R. et Radu, J.P., 1989, Méthode des éléments finis et couplage hydromécanique, Chapitre 4 du rapport LGIH-MSM : SPPS 891, Etude de la géologie du Quaternaire de l'hydrogéologie et de la géologie de l'ingénieur dans le delta du Yangtse. Modèle mathématique de la zone de Shanghai, pp. 505-519.

Charlier, R., Radu, J.P. and Dassargues, A., 1988, Numerical simulation of transient unconfined seepage problems, 1st Int. Conf. Comp. Meth. and Water Resources, vol. 1, Groundwater and Aquifer Modelling, Computational Mechanics Publications, pp. 143-155.

Coates, G.R. and Dumanoir, J.L., 1973, A new approach to improved log derived permeability, Proc. SPWLA, 14th Ann. Symp.

Velz, O., 1990, Modélisation des tassements de Shanghai, Influence de la non linéarité des paramètres de couplage, Travail de fin d'études d'Ingénieur Civil Géologue, Faculté des Sciences Appliquées.

Verdeyen, J., Roisin, V., et Nuyens J., 1968, La mécanique des sols, Presses Universitaires de Bruxelles, DUNOD, Paris.

Verruijt, A., 1980, A simple formula for the estimation of pore pressures and their dissipation, Applied Ocean Research, Vol. 2., n° 2, pp. 57-62.

Verruijt, A., 1984, The theory of consolidation, in Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media, edited by Bear J. and Corapcioglu Y., NATO, ASI Series.

Voorhees, M.L., and Ruskauff, G.J., 1988, GEOKRIG User's manual, An interactive geostatistical package, Hydrosoft/Hunter Inc., 63, Sarasota Center Blvd, Suite 107, Sarasota, Florida 34240.

Wagner, J.F., and Egloffstein, Th., 1990, Advective and/or diffusive transport of heavy metals in clay liners, Proc. of the 6th Int. IAEG Congress, pp. 1483-1490, Amsterdam.

Wang, H.F., and Anderson, M.P., 1982, Introduction to groundwater modeling, Finite difference and finite element methods, Freeman, San Francisco.

Woessner, W.W., 1990, Setting calibration targets and assessing model calibration - room for improvement: an example from North-America, ModelCARE 90 : Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, The Hague, pp.279-288.

Wyllie, M.R.J. and Rose, W.D., 1950, Some theoretical considerations related to the quantitative evaluation of the physical characteristics of reservoir rock from electrical log data, Jour. Pet. Tech., vol. 189.

