



AGENCE DE L'EAU RHIN-MEUSE

Evaluation des risques de pollution des captages

de la nappe alluviale à partir de la Moselle.

I 'partie : Définition des données.

C. CACHET
(08.12.1998)

Lors de l'incident des entrepôts de la SANE (zone industrielle de HEILLECOURT, département 54), les eaux d'extinction de l'incendie ont contaminé la Moselle et les données (ainsi que le temps) ont manqué pour pouvoir estimer le risque encouru par les prises d'eau potable situées dans la nappe alluviale, à l'aval du site industriel.

Suite à cet incident, l'Agence de l'Eau RHIN-MEUSE, les Directions Départementales de l'Action Sanitaire et Sociale des départements de Meurthe-et-Moselle, Moselle et des Vosges ont décidé de lancer une étude **générale** sur l'évaluation des risques de pollution des captages de la nappe alluviale, à partir de la Moselle.

Le SERVICE HYDROGEOLOGIE ET GEOTECHNIQUE de l'Association Scientifique pour la Géologie et ses Applications a été chargé de cette étude, sous la responsabilité **scientifique** de Christine CACHET.

I - PRESENTATION GENERALE DE L'ETUDE ET DES OBJECTIFS

L'Agence de l'Eau Rhin-Meuse souhaite se doter d'un outil permettant d'estimer :

- le temps de transfert d'une pollution entre la Moselle et les puits situés dans sa nappe alluviale,
- les concentrations qui peuvent être attendues dans les eaux pompées.

Cette vaste tâche a été divisée en deux études :

- l'étude de définition des besoins et des travaux à envisager pour répondre à ces besoins, qui doit être réalisée dans le courant de l'année 1999
- l'étude de définition des temps de transfert qui comprendra une phase de travaux et une phase de calcul.

L'étude de définition qui nous intéresse plus particulièrement pour l'instant est divisée en deux phases, à savoir la définition des besoins et la définition d'un programme de travaux.

La première phase est elle-même scindée en trois parties que nous allons détailler ci-dessous.

• **Pour la première partie**, qui concerne la définition des données, nous proposons donc de faire l'inventaire des différentes méthodes utilisables pour le calcul des temps de transfert et des abattements de concentrations ainsi que des paramètres qui seront nécessaires à l'application de ces différentes méthodes.

D'ores et déjà, il est possible de citer deux groupes de méthodes pour l'obtention des temps de transfert :

- les méthodes de calcul "simples" (calcul ou utilisation d'abaques pour des cas simples),
- les méthodes de calcul "plus complexes" (modèle analytique ou numérique)

A noter qu'en dehors des cas simples, il est nécessaire d'utiliser un modèle et nous gardons bien à l'esprit que ce modèle (conformément à ce qui est souhaité par l'Agence de l'Eau) devra être un modèle facilement utilisable, convivial et ne nécessitant qu'un nombre restreint de données par rapport à d'autres outils déjà existants et plus complexes.

§ Il va de soi que le fait de supposer que l'outil final sera un modèle implique tout de même qu'il sera nécessaire d'avoir un nombre de données plus important que pour les calculs simples ou par abaques et qu'en retour, on aura une meilleure précision sur les temps de transfert et que l'on pourra connaître les courbes de restitution et les abattements de concentrations au niveau des puits.

Cette première partie correspondra également au choix des différents paramètres à inclure dans la base de données en tenant essentiellement compte des paramètres techniques nécessaires.

• **La deuxième partie** correspond au recueil des données et au remplissage du tableau en sachant que cette étude portera sur environ 80 sites répartis sur trois départements (Vosges, Meurthe-et-Moselle, Moselle) et-comprenant chacun un ou plusieurs ouvrages de **captage**. Ces données sont sensées être disponibles et centralisées dans les différents organismes comme l'Agence de l'Eau, la D.D.A.F., la D.D.E., la D.D.A.S.S. et les archives. Toutefois, au moins une visite de terrain **sera** réalisée sur chaque site pour se rendre compte de l'état des installations. Les données ainsi **recueillies** seront ensuite validées avant d'être stockées.

• **La troisième partie** correspond à un récapitulatif des données manquantes et à la répartition des sites en trois lots, en fonction de leur vulnérabilité et de leur importance stratégique.

Ensuite, on passera à la deuxième phase correspondant à la définition d'un programme de travaux. Celle-ci comprendra l'inventaire secteur par secteur des travaux à réaliser et les résultats des consultations des différentes entreprises afin d'estimer le coût total et le délai de réalisation de ces différents travaux. Une description des travaux sera faite dans un rapport avec une synthèse par lot et par type de travaux.

II - RAPPELS GÉNÉRAUX

Rappelons que la propagation des polluants dans un hydrosystème souterrain s'effectue selon trois modes :

* mode "convectif" : il s'agit du transport par les fluides (l'eau dans notre cas) en circulation, et selon la loi de comportement la mieux adaptée à décrire ce mouvement compte tenu du contexte hydrogéologique (Loi de Darcy dans notre cas).

* mode "diffusif" : il s'agit d'un transport de type aléatoire (agitation moléculaire) - qui conduit dans un milieu immobile à l'homogénéisation des concentrations - régi par la Loi de Fick.

* mode "dispersif" : il s'agit d'une redistribution (également de nature aléatoire) des polluants le long de leurs trajectoires moyennes, redistribution aussi bien longitudinale que transversale. Cette redistribution, régie par une loi similaire à la Loi de Fick, est due à deux causes essentielles :

- d'une part les cheminements des particules s'effectuant dans un milieu semé d'embûches (les grains), elles ont à faire un choix (de nature aléatoire) pour les contourner, ce qui les entraîne à se disperser de part et d'autre de leur trajectoire "idéale" : cette dispersion est qualifiée de "géométrique" ;

- d'autre part, le long de leur trajectoire, elles sont amenées à côtoyer de plus ou moins près les obstacles : elles peuvent donc se déplacer moins vite (si elle se frottent de trop près aux "embûches"), ou plus vite (si elles choisissent de cheminer selon l'axe des pores), que ne le prévoirait l'application sommaire de la loi de comportement évoquée ci-avant (Loi de Darcy) : cette dispersion, le long de leur trajectoire est qualifiée de "cinématique".

Chacune des lois évoquées nécessite la connaissance de paramètres spécifiques relatifs à chacun des déplacements :

- tenseur de perméabilité pour la "**convection**",
- coefficient de diffusion moléculaire propre au triplet soluté-solvant-support pour la diffusion,
- coefficients de dispersivité longitudinale et transversale pour la dispersion.

Des coefficients peuvent être appréhendés avec plus ou moins d'acuité par des pompages d'essai (perméabilité), des traçages naturels ou artificiels (dispersion), des mesures de laboratoire (diffusion) qui mettent toujours en jeu un volume de **terrain** naturel limité.

En outre il est possible, si le couple soluté-solvant et si le degré de connaissance du "milieu" le justifient, de prendre en considération les phénomènes de décroissance de type radioactif (ou similaire) d'adsorption-désorption (qui dans certains cas peuvent se caractériser par un coefficient de "retard").

Les déplacements convectif, **diffusif** et dispersif peuvent se calculer, ou se "modéliser", par application de leurs lois de mouvement et des équations de continuité correspondantes ("conservation" de la **masse**) dans l'**hydrosystème**, sous réserve que soient connus deux types de conditions :

- des conditions "internes" : elles caractérisent la géométrie du système (extension, épaisseur, structure) et la répartition spatiale (et quelquefois spatio-temporelle) des caractéristiques hydro-dispersives (perméabilité, emmagasinement, porosité cinématique, coefficients de dispersivité longitudinale et transversale, coefficient de retard ...)_{x,y,z,t}
- des conditions "externes" : elles caractérisent ce que l'on a coutume d'appeler les "conditions aux limites", et qui sont éminemment variables dans le temps en fonction des circonstances tant hydroclimatiques qu'hydrologiques ou anthropiques (niveau ou flux d'entrée des rivières, infiltration ou évapotranspiration, débits d'apport ou **d'export**, flux de pollution, ...)_{x,y,z,t}

Pour caractériser la part respective des déplacements diffusif, dispersif et convectif, on utilise couramment un nombre sans dimension nommé nombre de Peclet :

- un nombre de Peclet **diffusif** (au sens initial de sa définition) caractérise le rapport du flux **diffusif** au flux convectif et s'estime par :

$$Pe_o = \frac{|u^*| \cdot l}{dom} \quad \text{avec:}$$

$|u^*|$ = vitesse microscopique moyenne,

l = longueur caractéristique moyenne,

dom = coefficient de diffusion moléculaire propre au triplet évoqué ci-avant.

- un nombre de Peclet dispersif (au sens dérivé de sa définition) caractérise le rapport du flux dispersif au flux convectif et peut s'estimer, par exemple, par :

$$Pe_d = \frac{|u^*| \cdot l}{D} \quad \text{avec}$$

D = coefficient de dispersion (cinématique et géométrique)

Toutes les expériences rassemblées à l'Institut Français du Pétrole par O. Pfannkuch (cf. fig. 1), ont permis de montrer qu'il existe, dans les milieux poreux, cinq types de déplacement dans l'ordre des nombres de Peclet diffusifs croissants (donc des déplacements diffusifs décroissants) :

- déplacement **diffusif** "pur" (I),
- superposition des déplacements diffusifs et dispersifs (II),
- déplacements dispersifs prédominants (III),
- déplacements dispersifs "purs" (IV),
- déplacement en dehors du domaine de validité de la loi de Darcy (V).

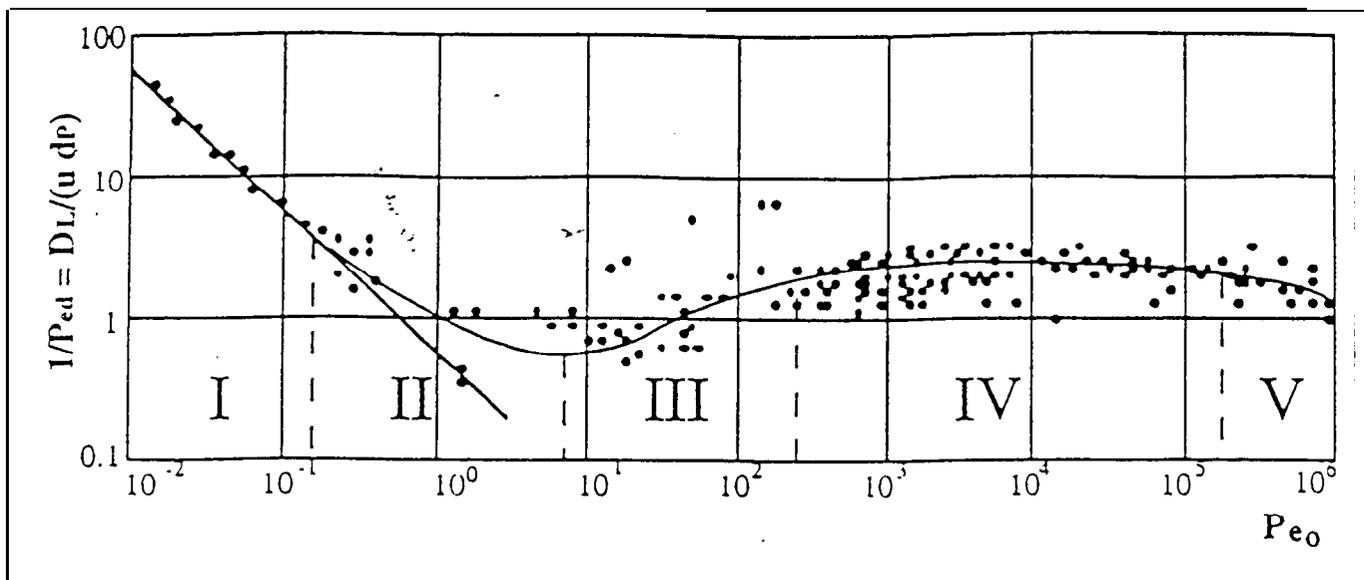


Fig. 1 : Représentation des différents régimes de dispersion (d'après Pfannkuch, 1963).

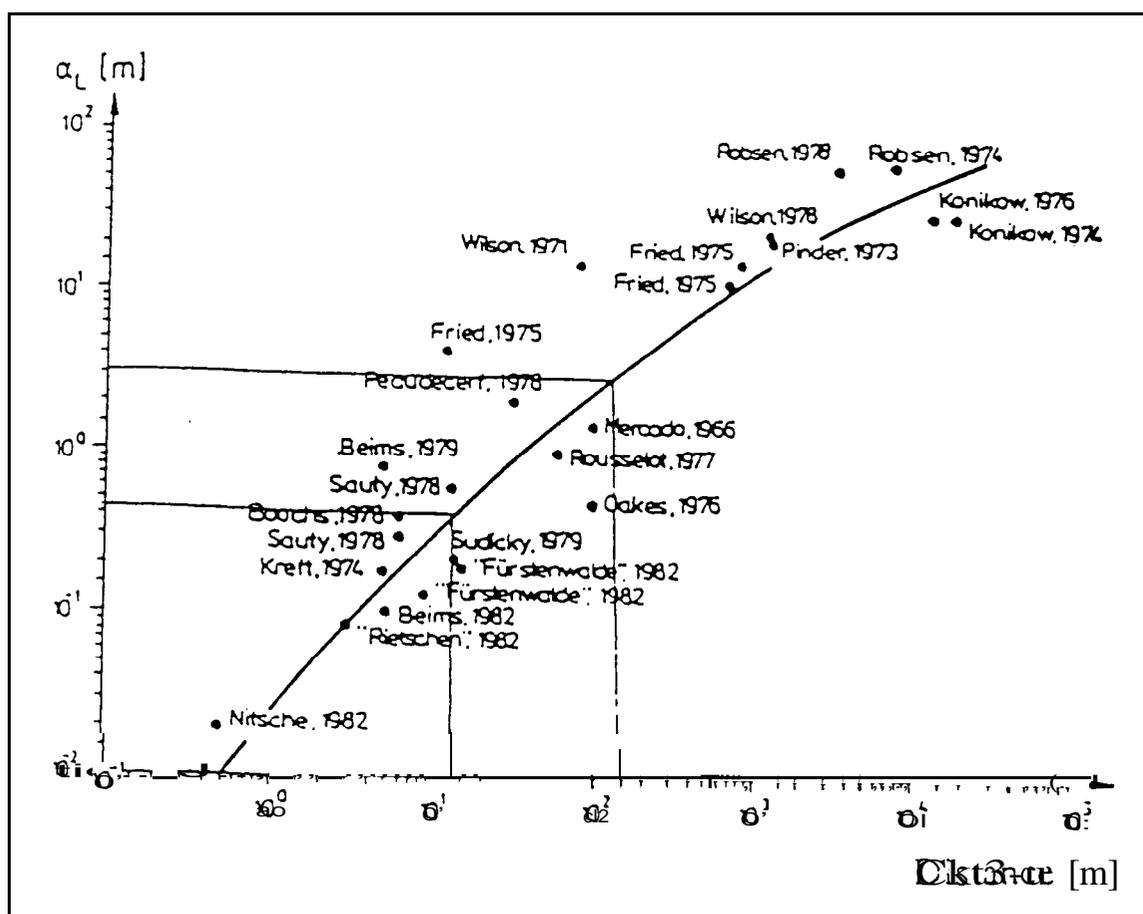


Fig. 2 : Détermination de la dispersivité à partir de l'échelle des expériences réalisées sur le terrain (d'après Beims, 1983).

Dans les domaines de vitesses usuelles ($Pe > 10$), ce qui est le cas en général dans des hydrosystèmes d'extension limitée et exploités de façon soutenue, on se trouve dans les cas III ou IV. On établit alors de façon théorique, mais cela a été vérifié par l'expérience, qu'il y a linéarité entre le coefficient de dispersion et la vitesse microscopique moyenne (ou son équivalent la vitesse macroscopique). On a alors . . .

$$D = \alpha \cdot |u^*|$$

... avec α (m) le coefficient de dispersivité intrinsèque.

C'est d'ailleurs dans ce domaine que sont habituellement conduits les traçages entre un piézomètre et un puits de soutirage, qui permettent l'estimation de la seule dispersivité longitudinale.

Il faut signaler (cf. fig. 2) que les expériences de traçage réalisées montrent que le coefficient de dispersivité intrinsèque augmente de façon significative avec la distance d'observation du passage de la pollution par rapport à la source d'injection.

III - INVENTAIRE DES METHODES DE CALCUL 'SIMPLES'

(cf. annexe 1)

ZZZ.1 - Calcul des temps moyens de transfert

111.1. 1 - Rappels sur le temps moyen de transfert

Soit une injection localisée et instantanée d'une substance dans le champ captant d'un ouvrage de prélèvement au débit moyen Q et $C(t)$ la courbe de restitution exprimée en $M.T^{-1}$.

Le temps moyen de transfert se définit par :

$$T_{m,s} = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C(t) \cdot dt}{\int_0^{\infty} C(t) \cdot dt}$$

On peut aussi le définir comme étant la durée de renouvellement du volume d'eau (V_c) du champ capté. Soit :

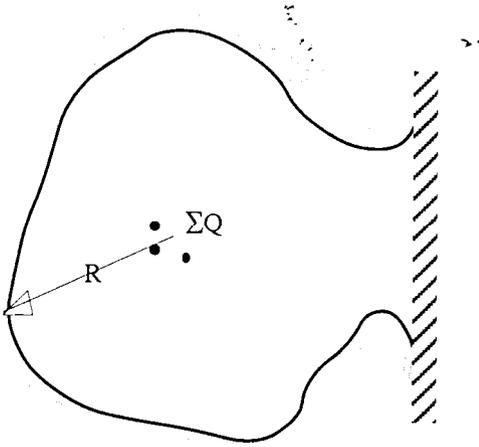
$$T_m = \frac{V_c}{Q}$$

Le calcul, ou l'estimation, des temps de transfert peut se faire à l'aide de trois procédés :

- par l'estimation du volume d'eau mis en cause par l'exploitation et de sa durée de renouvellement
- par l'utilisation d'abaques établies pour quelques configurations simples (cf. annexe 1)
- par modélisation hydrodispersive (voir chapitre suivant IV)

III.1.2 - Calcul du temps de transfert moyen par la durée de renouvellement

Soit A, l'aire d'un **champ** capté, E son épaisseur, n_c sa porosité cinématique et Q le débit de pompage moyen.



MODELE A (Disque) : Le puits au débit Q, ou un groupe "serré" de puits au débit ΣQ , est isolé au "centre" d'un champ compact (boucle alluviale) quasi "circulaire" de rayon R ou de surface planimétrée A_c : le temps de transfert moyen est donné par

$$T_m = \frac{A_c \cdot E \cdot n_c}{Q (\theta \mu \Sigma Q)}$$

ou

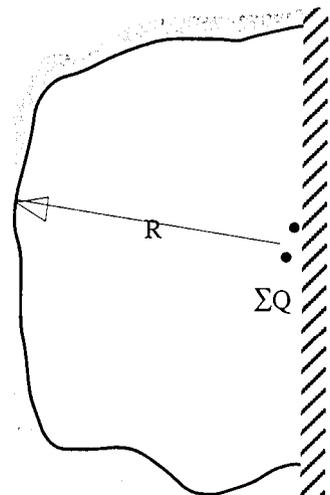
$$T_m = \frac{\pi \cdot R^2 \cdot E \cdot n_c}{Q (\theta \mu \Sigma Q)}$$

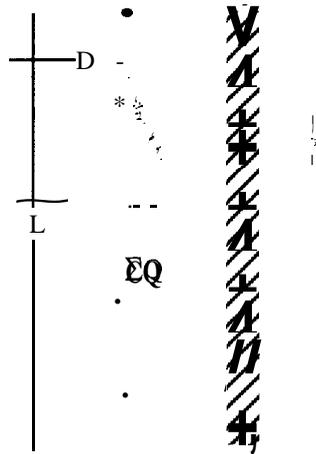
MODELE B (demi-disque) : Le puits, ou un groupe "serré" de puits, est isolé au "milieu" (ou dans son voisinage immédiat) du diamètre d'un demi-disque de rayon R ou de surface planimétrée A_c qui en constitue la limite étanche : le temps de transfert moyen est donné par

$$T_m = \frac{A_c \cdot E \cdot n_c}{Q (\theta \mu \Sigma Q)}$$

ou

$$T_m = \frac{\pi \cdot R^2 \cdot E \cdot n_c}{2 \cdot Q (\theta \mu \Sigma Q)}$$





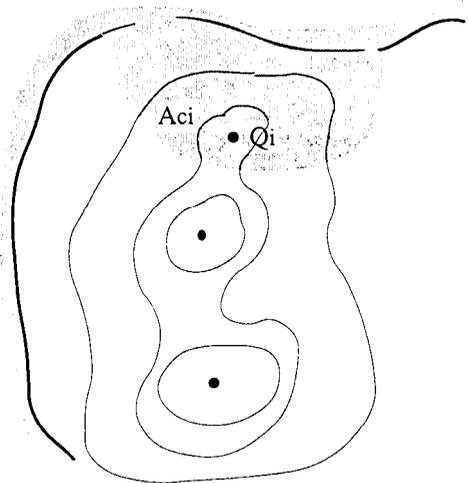
MODELE C (Ligne) : le groupe de puits au débit global ΣQ constitue une ligne de puits "équidistants" de longueur L parallèle à la Moselle située à la distance D et au "milieu" de la plaine alluviale. On considérera que le débit pompé provient de façon égale de part et d'autre de la ligne de puits : le temps moyen de transfert est donc de :

$$T_m = \frac{2 \cdot D \cdot L \cdot E \cdot n_c}{\Sigma Q}$$

Il doit être noté que si la ligne de puits est relativement proche du front étanche, tout se passe comme si le débit n'était pris que dans une "demi-nappe", d'où

$$T_m = \frac{D \cdot L \cdot E \cdot n_c}{\Sigma Q} \text{ (MODELE C'')}$$

MODELE D (aire d'appel) : si l'on dispose d'une carte piézométrique (levé de terrain ou simulation), il est possible de déterminer les aires d'appel de chaque ouvrage de captage. Si ces aires d'appel sont fractionnées comme l'indique le schéma ci-contre, il est en outre possible de répartir les débits concernés par chaque aire au *pro rata* des largeurs des fronts d'emprunt et des gradients hydrauliques entre deux équipotentielles de même valeur. Dans le cas de l'ouvrage i du schéma joint, le temps moyen de transfert est, tout calcul fait :



$$T_{mi} = \frac{A_{ci} \cdot E \cdot n_c}{Q_i} \text{ avec } Q_i = \frac{h_r \cdot Q}{l_i \cdot \Sigma L \cdot M_i}$$

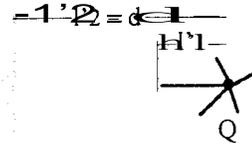
111.1.3 - Calcul du temps de transfert moyen à l'aide d'abaques

Dans le cas de configurations géométriques simples, il est possible de calculer les temps de transfert moyens le long des trajectoires les plus "rapides" (cf. annexe 1). Des abaques ont été établies et on en trouvera un duplicata en annexe. L'utilisation en est relativement simple sous réserve d'avoir choisi la configuration qui restitue au mieux la réalité de terrain : à titre d'exemple, nous développerons ci-après le cas de la propagation d'un polluant d'une rivière vers un puits à drains rayonnants.

MODELE H (drains et front) : cf. abaque n° 1

Soit un puits à drains rayonnants en présence d'un front de réalimentation, les distances l_1, l_2, d et les distances réduites :

$$l_1 = \frac{l_1}{d} \quad \text{et} \quad l_2 = \frac{l_2}{d} = 1$$



Le temps de transfert de la rivière vers l'extrémité du drain s'obtient par différence entre le temps nécessaire pour aller de la rivière vers un puits circulaire et le temps nécessaire pour parcourir, dans le terrain naturel, la distance l_1 : cela revient à dire que le temps de résidence dans le drain est quasi nul. Il suffit donc de lire les temps réduits de transfert θ_1 et θ_2 et d'écrire que

$$T_m = \frac{\pi E m_c d^2}{Q} (\theta_2 - \theta_1)$$

Pour les MODELE E (puits isolé), MODELE F (ligne de puits), MODELE G (puits et front), on consultera avantageusement le fac-similé de l'article (cf. annexe 1).

III.2 - Calcul de la durée de la pollution

Comme il a été dit précédemment, dès lors qu'une pollution entre dans un système, son temps de résidence est infini. Il est cependant possible de calculer ou d'estimer, par exemple, la durée pendant laquelle la concentration est égale ou supérieure à un seuil donné. Une solution théorique approchée donne la relation suivante établie pour un écoulement monodimensionnel.

La concentration à une date t , à une distance x d'une injection instantanée d'une masse M de contaminant, dans un milieu de dispersivité D_L , où l'écoulement de la nappe de porosité n_e est unidirectionnel, peut s'estimer par :

$$C(x,t) = \frac{M}{n_e} (4 \pi D_L t)^{-1/2} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4 D_L t}}$$

Cette fonction est analogue à une distribution gaussienne d'écart-type :

$$\sigma_x = (2 D_L t)^{1/2}$$

Dans le cas où l'on se trouve dans un régime de type III ou IV, on peut aussi écrire

$$D_L = \alpha_L |u^*| \quad \text{mais aussi} \quad T_m = \frac{\bar{x}}{|u^*|}$$

T_m : temps moyen de transfert et \bar{x} = distance moyenne de la pollution •

Il s'ensuit que la durée pendant laquelle la concentration est "sensible" (représentant 68 % de la masse totale injectée) peut s'estimer par la durée T_d nécessaire à faire avancer la pollution de $\bar{x}-\sigma_x$ à $\bar{x}+\sigma_x$, soit :

$$T_d = \frac{2 \cdot \sigma_x}{|u^*|} = 2 \cdot \sqrt{2 \cdot \alpha_L \cdot \frac{T_m^2}{\bar{x}}}$$

avec :

α_L : coefficient de dispersivité longitudinale,

T_m : temps moyen de transfert ,

et \bar{x} = distance moyenne de la pollution

Le problème se trouve ainsi ramené à celui de l'évaluation du coefficient de dispersivité intrinsèque et du temps moyen de transfert.

Dans la pratique, on estimera T_d par deux méthodes :

- soit par le calcul précédent en connaissant T_m et α_L
- soit en interprétant directement les courbes de restitution fournies par la modélisation hydrodispersive (voir chapitre suivant).

III.3 - Paramètres nécessaires pour ce type de calcul

111.3.1 - Calcul du temps de transfert moyen par la durée de renouvellement

Epaisseur mouillée des alluvions
 Porosité cinématique
 Débit d'exploitation moyen du ou des puits
 Distance par rapport à la Moselle
 Longueur de la ligne de puits
 (Carte piézométrique pour définir l'aire d'appel)

NB : imprécision au niveau du choix de la surface du champs capté.

111.3.2 - Calcul du temps de transfert moyen à l'aide d'abaques

Longueur drains rayonnants et angle entre les drains
 Epaisseur mouillée des alluvions
 Porosité cinématique
 Débit d'exploitation moyen du (ou des) puits
 Distance par rapport à la Moselle

111.3.3 - Calcul de la durée de la pollution

Dispersivité longitudinale
 Porosité cinématique
 Masse de polluant

III.4 - Conclusion sur les méthodes de calcul "simples"

Précisons tout d'abord que ces méthodes de calcul ne concernent que le calcul des temps de transfert **moyens** et non le temps de transfert selon la ligne de courant la plus courte.

De plus, ces calculs sont faits dans des cas simples (puits isolé, puits à drains, puits réalimenté, puits avec **un** front étanche et ligne de puits) qui ne sont pas du tout représentatif de la réalité (conditions aux limites imposées afin de pouvoir résoudre les équations ou simplification à outrance);

Ce sont donc des méthodes que l'on utilise dans l'urgence, lorsqu'il n'y a pas de données et lorsqu'il y a nécessité de connaître des ordres de grandeur des temps de transfert et des concentrations attendues au niveau des puits (ce sont les méthodes que nous avons utilisées lors de l'incident de la **SANE**).

Les autres méthodes analytiques plus complexes requièrent l'utilisation d'un ordinateur et sont rangées dans la catégorie des méthodes "plus complexes" (modèles dits analytiques) avec les modèles de résolution numérique que nous allons étudier dans le chapitre suivant.

IV - INVENTAIRE DES METHODES DE CALCUL ~~'PLUS COMPLEXES'~~ (MODELES)

(cf. annexes 2 et 3)

Lors des vingt dernières années, les modèles d'écoulement et de transfert de masse en milieu poreux, se sont développés d'une manière intensive et nous avons donc cherché à connaître les critères de sélection à prendre en considération afin de disposer d'un outil **prédictif** relativement simple requérant le moins de paramètres possibles.

Dans un premier temps, nous avons fait un inventaire des codes disponibles actuellement sur le marché (liste non exhaustive) puis nous avons réfléchi aux critères permettant de les classer pour ensuite trouver une méthodologie de choix d'un modèle approprié à notre cas.

IV.1 Critères de classification des codes

Nous allons essayer ici de décrire un certain nombre de critères qui seront à prendre en compte lors du choix d'un modèle (caractéristiques techniques, méthodes de calcul, paramètres, nature des phénomènes simulés...)

IV.1.1 Approches couplée ou découplée

Nous avons vu précédemment que l'évolution spatio-temporelle de la concentration d'un soluté revient à résoudre le système formé par l'équation d'écoulement et l'équation de transport.

En fonction du mode de résolution numérique de ce système, deux types d'approches sont possibles :

- l'approche "découplée"
- ou l'approche "couplée".

IV.1.1 Approche découplée

Si l'on suppose que les variations de la concentration obtenues par l'équation de transport occasionnent des variations négligeables de la densité de l'eau, les équations de **transport** et d'écoulement peuvent être résolues indépendamment. Dans ce cas, l'équation d'écoulement exprimée en terme de charge hydraulique, est résolue avant l'équation de transport. Les composantes du vecteur vitesse du domaine d'étude, peuvent ainsi être calculées à chaque pas de temps. L'équation de transport est résolue en utilisant ces vitesses comme données d'entrée. Cette approche découplée est efficace **numériquement** et est implantée dans les codes de transport les plus utilisés tel que **MOC**, **INTERTRANS**, **MT3D**, **RANDOM WALK**, **RANDOMOD**...

IV.1.1.2 Approche couplée

En revanche, si le déplacement du soluté obtenu par les équations de transport est à l'origine d'une variation significative de la densité de l'eau, il faut alors que les deux équations soient résolues d'une manière dite couplée. Tout d'abord, l'équation d'écoulement, exprimée en terme de charge **hydraulique**, par un premier pas de temps en utilisant une distribution supposée de la densité de l'eau. **Les vitesses sont ainsi** calculées et injectées dans l'équation de transport, pour obtenir une approximation initiale de la concentration en soluté pour ce premier pas de temps. Ces concentrations sont utilisées pour faire une mise à jour de la distribution de la densité de l'eau, qui à son tour est utilisée comme donnée d'entrée pour l'équation de transport pour le premier pas de temps. Cette façon de procéder est répétée de manière itérative jusqu'à la stabilisation des profils de charges hydrauliques et de concentrations pour ce premier pas de temps. Cette procédure est ensuite répétée pour le deuxième pas de temps et pour tous les suivants.

Cette approche couplée requiert plus d'efforts en matière de calcul que l'approche découplée mais s'avère parfois nécessaire pour résoudre les problèmes de transport pour lesquels la densité du fluide varie en réponse au transport du soluté. Cette approche a été implantée dans des codes généralistes tels que SUTRA, **HST3D**, DEDALE, MARTHE...

Cependant dans le cas d'un problème où le soluté d'intérêt est présent à de faibles concentrations, comme cela est généralement le cas pour les pollutions par des composés organiques, la densité est généralement considérée comme constante et les équations d'écoulement et de transport peuvent être résolues de manière indépendante comme dans l'approche découplée.

N.B. : le seul cas où cela pourrait s'avérer intéressant serait celui d'une importante pollution due à des hydrocarbures avec un fort contraste de densités et de viscosités.

IV.1.1.3 Conclusion

Dans le cas de notre étude il ne nous semble pas nécessaire d'avoir recours à une approche couplée (pas de variation de densité) d'autant plus que cette approche serait moins performante en terme de temps de calcul. Nous opterons donc pour une approche découplée.

IV.1.2 Différentes approches mathématiques

Les modèles et les codes sont généralement décrits par le nombre de dimension de l'espace simulée et par l'approche mathématique utilisée. A la base de tout modèle ou code numérique, il y a des équations représentant le modèle ou le système à modéliser. Différentes approches de la formulation ou de la résolution du problème sont possibles.

IV.1.2.1 Approches déterministe ou stochastique

Un modèle **déterministe** suppose qu'un système ou procédé fonctionne de telle manière qu'une série d'événements conduit à la définition d'un résultat unique (principe d'unicité de la solution). Les équations gouvernant le système définissent des relations de cause à effet ou des relations entrée-réponse.

Au contraire un modèle **stochastique** suppose qu'un système ou procédé opère de telle manière qu'une série d'événements conduit à un résultat incertain. De tels modèles calculent la probabilité d'occurrence d'une valeur spécifique en tout point pour un niveau de signification donné.

La plupart des modèles disponibles sont des modèles déterministes; cependant les hétérogénéités des environnements hydrogéologiques et plus particulièrement la variabilité des paramètres tels que la porosité effective et la conductivité hydraulique jouent un rôle clef sur l'influence de la crédibilité de la modélisation des eaux souterraines dans un but **prédictif**.

Les approches stochastiques caractérisent la variabilité spatiale à l'aide de méthodes géostatistiques, telles que le krigeage et sont de plus en plus utilisées pour caractériser les sols et les données hydrogéologiques.

Toutefois, les équations qui régissent les modèles déterministes et stochastiques peuvent aussi bien être résolues analytiquement que numériquement.

Nous avons vu lors des rappels généraux que le problème du transport d'une pollution pouvait être mis en équation. Notamment l'équation d'advection-dispersion. Pour résoudre ce problème, il y a deux grandes directions :

- soit on cherche des solutions exactes à ces équations (méthode analytique) et pour y parvenir il faut faire de très nombreuses simplifications
- soit on opte pour la recherche de solutions approchées (approximation logarithmique).

IV. 1.2.2 Modèles analytique ou numérique

IV.1.2.2.1 - Méthodes analytiques

Il existe dans la littérature toute une panoplie de solutions analytiques (ou **semi** analytiques) de l'équation de transport. Ces solutions mathématiques, qui ont des expressions plus ou moins simples, présentent l'avantage d'être mathématiquement exactes mais elles ne peuvent être utilisées que pour des cas très simples : cas académiques ou études de laboratoire lorsque les conditions initiales et les conditions aux limites peuvent être bien imposées.

Dans la plupart des problèmes, ces conditions ne sont pas contrôlées et les méthodes analytiques deviennent vite inextricables.

A) Avantages

- Les solutions analytiques représentent probablement la meilleure alternative lorsque les données nécessaires à l'identification du problème sont clairsemées et incertaines.
- Lorsqu'elles sont applicables, ces méthodes constituent l'approche la plus économique.
- Elles constituent toujours le meilleur moyen d'obtention d'une estimation initiale de l'ordre de grandeur de l'extension de la contamination.
- Des modélisateurs expérimentés ainsi que l'utilisation de codes numériques complexes ne sont pas nécessaires.

B) Inconvénients

- Les solutions disponibles se limitent souvent à des conditions idéales et ne sont pas applicables pour des problèmes de terrain comportant des conditions aux limites complexes.
- Les variations temporelles et spatiales des propriétés du système étudié telles que la perméabilité et la dispersivité ne peuvent pas être traitées avec les solutions analytiques

C/ Conditions initiales et aux limites

Ces conditions doivent impérativement être fixées (et donc connues) afin de pouvoir résoudre l'équation de transport.

* Conditions initiales : il faut connaître la répartition des concentrations en tout point du domaine au temps initial ($t = 0$).

* Conditions aux limites : elles sont de trois types :

- Conditions de Dirichlet (valeurs de concentration connues sur toutes les frontières du domaine)
- Conditions de Neumann (valeurs du flux de matière ou gradient de concentration traversant toutes les frontières du domaine)
- Conditions de Cauchy (mixtes entre Dirichlet et Neumann)

D/ Méthode de résolution analytique

Pour quelques cas simples de conditions aux limites et pour une équation de dispersion sous une forme simplifiée (en général en coordonnées cartésiennes canoniques) des solutions analytiques ont été développées.

Nous ne ferons que citer ces méthodes sans rentrer dans le détail de leur résolution.

* Méthode de la séparation des variables (méthode de Fourier)

La solution recherchée est supposée être le produit de fonctions qui ne dépendent que d'une seule variable.

Cette méthode est utilisable lorsque l'on peut connaître les conditions initiales et aux limites et dans le cas d'une diffusion pure sans terme convectif.

NB : ce n'est donc pas notre cas puisque nous sommes dans une nappe qui aura un sens d'écoulement et donc un terme convectif non négligeable.

* Méthode de la transformée de Laplace

On suppose l'existence d'une fonction continue (ou continue par morceaux) qui est solution de l'équation et on travaille avec sa transformée de Laplace, qui a la propriété de transformer une convolution en un produit direct, on résout le problème puis on utilise la transformée inverse de Laplace pour retrouver la solution initiale.

NB : en général, le calcul des transformées de Laplace est long et compliqué.

E/ Exemples de résolutions analytiques

Dans certains cas, pour des conditions limites et initiales données, il existe dans la littérature des solutions analytiques explicitant la résolution de l'équation de convection-dispersion. Ces solutions qui ont l'avantage d'être exactes, ont des expressions plus ou moins simples et sont plus ou moins faciles à mettre en oeuvre. Elles sont valables dans le cas du transport de traceurs parfaits ou de solutés se comportant comme tels.

Enumérons les cas où des solutions de l'équation de convection ont été trouvées mais sans donner leurs expressions qui sont assez compliquées et dépendent de fonctions erreur ("erf") et erreur complémentaire ("erfc") dont les valeurs sont tabulées.

*E.1 Solutions dans le cas d'un écoulement **monodimensionnel** uniforme*

* Réponse à une injection d'un échelon de concentration

Ceci peut être réalisé en laboratoire sur une colonne suffisamment longue pour que l'effet de la limite aval soit faible.

Par contre, pour appliquer ce schéma à une expérience de terrain, il faudrait effectuer le traçage à partir d'un canal rectiligne ou une rivière qui alimenterait un aquifère homogène sur toute l'épaisseur de celui-ci.

La solution de l'équation de convection-dispersion pour ces conditions est donnée par Ogata et Banks (1961):

* *Cas d'une injection ~~continue~~ continue*

Cette condition, peu étudiée car elle ne correspond pas aux modes d'expérimentation en laboratoire, s'applique à l'introduction d'une substance traçante dans l'aquifère par une rivière (cas qui nous concerne).

La solution de l'équation de convection-dispersion pour ces conditions est donnée par **Sauty** (1980).

Cette expression nécessite la connaissance de la vitesse, de la concentration initiale et de la dispersivité.

* *Cas d'une injection instantanée ou brève.*

La solution de l'équation de convection-dispersion pour les conditions d'une injection instantanée est donnée par **Sauty** (1980).

* *Cas d'une source ponctuelle à concentration constante et de durée finie.*

Il faut considérer un milieu unidimensionnel isotrope **semi** infini pour lequel on a un écoulement en régime permanent. A l'une des extrémités de ce milieu, on injecte une substance chimique (non réactive, traceur parfait) dont on connaît la concentration qui reste constante pendant un temps donné.

La solution de ce problème, déterminée à l'aide des transformations de Laplace, est donnée par Van Genuchten (1982).

E.2 Solutions dans le cas d'un écoulement bidimensionnel uniforme

Le schéma d'écoulement bidimensionnel à vitesse uniforme s'applique à l'injection de traceur en un point d'une nappe homogène, d'épaisseur constante et à gradient hydraulique sensiblement uniforme dans la direction des x :

- les dimensions de la source de pollution doivent être faibles devant les distances horizontales.
- le traceur doit être injecté uniformément sur toute la hauteur de l'aquifère; sinon il est nécessaire que la distance du point d'injection au point de prélèvement soit grande par rapport à la distance nécessaire pour que la dispersion verticale homogénéise les concentrations après réflexions sur les épontes inférieure et supérieure.

* *Cas d'une injection continue*

- Régime transitoire : Solution de Emsellem.

En pratique il n'est possible d'utiliser les tables de Hantush que pour les nombres de Peclet mixtes de valeurs inférieures à 10; au delà de cette valeur, il est préférable d'utiliser les résultats des travaux de **Sauty** (1977).

- Régime stabilisé : Solution de **Bear** avec valeur de la concentration maximale observable.

° *Cas d'une injection instantanée (ou brève)*

La solution de l'équation de convection-dispersion dans ces conditions a été développée par Fried et Combamous.

F/ Conclusion sur les solutions analytiques

Les solutions analytiques présentent l'avantage pratique de tester et de valider les codes de calculs de transport en terme de dispersion des valeurs obtenues puisqu'elles calculent les solutions exactes dans les cas les plus simples qui peuvent également être simulés par les modèles numériques.

En ce qui concerne les paramètres qu'elles requièrent, il est évident que compte tenu des simplifications nécessaires à leur résolution, elles ont besoin d'un nombre plus restreint de paramètres.

Nous donnons, ci-dessous, la liste des paramètres nécessaires pour le fonctionnement d'un modèle analytique d'écoulement (par exemple WINFLOW)

* Données obligatoires

Gradient régional et direction de l'écoulement (carte piézométrique)
Conductivité hydraulique (transmissivité, perméabilité)
Cote du mur et du toit de l'aquifère (épaisseur des alluvions)
Concentration en tête (conditions initiales)

* Si on travaille en régime transitoire

S : coefficient d'emmagasinement (en %),
Facteur de Hantush : débit de fuite (L ou B en mètre)
Porosité
Temps de calcul

* Données optionnelles

Implantation des puits, rayon du puits et courbes de pompage (débit)
Pourcentage de réalimentation
Position des plans d'eau (réalimentation)

* Paramètres pour le modèle couplé (par exemple WINTRAN = éléments finis)

Dispersion dans deux directions au moins
Densité du polluant
Coefficient de retard du polluant

Ces méthodes analytiques ne sont applicables que dans certains cas, pour des conditions initiales et aux limites données qui ne correspondent malheureusement le plus souvent qu'aux conditions d'expérimentation en laboratoire et non à la réalité du terrain. De plus, ces solutions ne sont valables que dans le cas de traceurs parfaits ou de solutés se comportant comme tels et on ne tient pas compte de la nature du polluant.

IV.1.2.2.2 Méthodes numériques

Les modèles numériques sont moins astreints à des hypothèses très simplificatrices et sont capables de résoudre des problèmes beaucoup plus compliqués que les modèles analytiques, mais ils requièrent davantage de données (sauf dans les cas simples) et leurs solutions sont approchées (approximations numériques). Par exemple les hypothèses **d'homogénéité** et d'isotropie ne sont **plus** nécessaires car le modèle attribue des valeurs ponctuelles (nodales) des paramètres hydrodynamiques et de transfert. De même, la capacité d'incorporer des conditions aux limites complexes permet une plus grande flexibilité.

L'utilisateur est toutefois confronté à des choix difficiles pour ce qui concerne le pas de temps, le choix du maillage et le moyen d'éviter les erreurs de **troncatures** ou les oscillations numériques.

L'un des fondements de l'approche numérique est la création de la grille qui représente l'aquifère simulé. Cette grille, formée d'une interconnexion de noeuds pour lesquels des paramètres d'entrées vont être spécifiés, sera à la base de la matrice des équations à résoudre. Pour chaque simulation spécifique d'un site, une nouvelle grille sera tracée d'après les données recueillies à la suite de la campagne de prélèvement (analyse de polluants). Un bon tracé de la grille de calcul est l'un des éléments critiques majeurs assurant la précision des résultats calculés.

A/ Différentes techniques de résolution

L'équation de transport peut s'exprimer selon deux systèmes de coordonnées : eulérien (repère fixe par rapport au terrain) ou lagrangien (repère suivant le déplacement de la matière à sa vitesse de transport).

La plupart des méthodes numériques résolvant l'équation de convection-dispersion peuvent être classées comme étant eulérienne, lagrangienne ou eulérienne-lagrangienne mixte.

Dans ce qui suivra, nous exposerons les principes généraux de ces différentes techniques de résolution de l'équation de transport ainsi que leurs avantages et inconvénients.

*** Méthodes eulériennes**

Dans ces méthodes, l'équation de transport est résolue par une discrétisation dans l'espace à partir d'une grille ou d'une maille fixe. La figure de l'annexe 3 illustre les tracés des grilles pour différentes méthodes : différences finies et éléments finis.

a. Méthode des différences finies

Cette méthode repose sur une discrétisation de l'espace sous forme de mailles de forme carrée ou rectangulaire (ou parallépipède rectangle pour les modèles tridimensionnels). Pour chacune de ces mailles, un bilan de concentration est effectué sur un intervalle de temps donné. En réunissant l'ensemble des équations de bilan, on obtient un système qui peut être résolu de façon implicite ou explicite en faisant appel à des méthodes de résolution des systèmes d'équations linéaires.

Cette méthode fournit une valeur de la concentration au centre de chaque maille ou noeud.

b. Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis discrétise l'aquifère en éléments ayant des formes irrégulières. Elle approche la concentration en tout point du maillage par l'intermédiaire de fonctions d'interpolation dont les plus simples sont des fonctions d'interpolation linéaires.

La solution de l'équation d'advection-dispersion C est estimée par une fonction $C_{moyenne}$ qui somme sur i les $w_i C_i$, c'est-à-dire qu'on définit élément par élément une interpolation de la solution exacte. On impose de plus, une contrainte à respecter sur le domaine initial : la fonction $C_{moyenne}$ doit être le plus près possible de la solution exacte C , ce qui se traduit par la condition de minimisation du résidu (méthode des résidus pondérés). Cela permet donc d'obtenir un système d'équations pour les concentrations en formulant n conditions sur les noeuds qui minimisent l'erreur d'approximation.

Cette méthode présente l'avantage de permettre une grande souplesse dans le choix des limites du modèle car les éléments peuvent prendre des formes quelconques. On a également la possibilité de discrétiser en éléments plus ou moins petits le maillage du domaine, en sachant que plus la taille des mailles est petite dans une région du maillage, plus la précision y sera importante.

c. Comparaison de ces deux méthodes dites classiques

Pour plus de détails, on pourra se reporter à l'annexe 2, qui offre une comparaison des paramètres et des avantages/inconvénients de chacune de ces méthodes à travers deux modèles (A.S.M. et H.P.P.-G.S.M.).

La méthode des éléments finis (E.F.) comparée à celle des différences finies (D.F.) est plus difficile à mettre en oeuvre, mais elle permet plus de facilités au niveau de la discrétisation pour le maillage que la méthode des différences finies.

En effet, ces méthodes traditionnelles utilisées lors de la résolution de l'équation de transport peuvent être la cause d'une diffusion artificielle due à la méthode de discrétisation choisie et nommée dispersion numérique.

En différences finies, on constate :

- * une dispersion numérique transversale dès que l'écoulement n'est pas strictement parallèle à l'un des côtés du quadrillage, car le modèle procède par un bilan des flux sur les quatre faces de chaque maille et n'autorise pas un déplacement en oblique.
- * une dispersion numérique longitudinale due au calcul de concentrations moyennes dans chaque maille, à chaque pas de temps.

Les méthodes des éléments finis permettent de diminuer cet artefact numérique par le recours à des éléments d'ordre élevé, au prix de modifications plus complexes et par la mise en place d'un maillage tel que les bords des éléments suivent exactement les directions des écoulements (lignes de courant et équipotentielles), mais encore faut-il que le champ de vitesses reste stationnaire pendant la durée de la période simulée.

Globalement ces difficultés numériques traduisent des conflits inhérents à la résolution de l'équation de convection-dispersion qui contient simultanément des termes paraboliques (dispersion) et hyperboliques (convection).

Parfois ces problèmes numériques peuvent être surmontés par un raffinement du maillage mais avec des répercussions sur le temps de calcul. En effet, si l'on veut éviter toute diffusion numérique, il faut respecter des contraintes strictes pour le choix de la taille du maillage. En particulier, on doit vérifier la relation suivante :

$Pe_{local} = uAx/D \ll 2$ soit $Ax \ll 2a$

avec :

Pe local : nombre de Peclet dynamique de maille ou local

Ax : taille d'une maille (**1D**)

D : coefficient de dispersion (**D** = a u) avec a : coefficient de dispersivité (**1D**); cette approximation correspond au régime IV de la classification de Plankuch pour lequel la dispersion mécanique est prépondérante.

d. Méthodes eulériennes plus récentes

Des méthodes plus récentes, utilisent le schéma décentré amont incorporé dans les méthodes des différences finies et des éléments finis (Richtmeyer et Morton 1967; Zienkiewicz, 1986; Sun & Yeh, 1993 in C. Oltéan, 1995). Ces méthodes permettent d'obtenir des approximations stables, mais avec une diffusion numérique non négligeable au niveau des fronts de concentration. Pour résoudre ce problème, des schémas d'ordre supérieur plus précis dans la discrétisation du front et de limiteurs de pente ont été utilisés.

Putti et al. (1990) ont appliqué ce schéma pour la méthode des volumes finis utilisant la théorie des éléments finis discontinus.

* La méthode des volumes finis (Putti et al., 1990) :

0

En définissant un volume de contrôle (ou maille) triangulaire sur lequel la variable concentration de l'équation d'advection-dispersion est moyennée, cette méthode combine une bonne flexibilité dans le choix de la forme des mailles, avantage de la méthode des éléments finis, avec la simplicité d'utilisation de la méthode des différences finies. Le schéma décentré amont est utilisé pour la discrétisation du terme advectif. Le calcul numérique du flux advectif est basé sur une ~~extension~~ des schémas de Godunov types à des mailles triangulaires. La technique repose sur le concept d'une "interpolation monotone" pour garantir la propriété de monotonie du schéma et sur la recherche de la solution exacte des problèmes locaux de Riemann au niveau des interfaces entre des volumes de contrôle voisins. Ainsi, les oscillations numériques sont entièrement évitées pour un grand éventail de nombres de Peclet de maille. Avec, en plus, une discrétisation des flux dispersifs, on obtient alors une approximation qui est localement du premier ordre (elle entraîne une diffusion numérique du premier ordre au voisinage de fronts de concentration raides) et globalement du second ordre.

Comparé aux schémas décentrés habituels, on obtient beaucoup moins de diffusion numérique au niveau des fronts de concentration raide. Ainsi beaucoup de résultats numériques obtenus par cette méthode montrent une bonne concordance avec ceux obtenus par les solutions analytiques.

On voit donc que cette méthode est très robuste pour résoudre l'équation d'advection-dispersion (et en général les problèmes non linéaires) tout en étant facile d'utilisation et très flexible car avec des mailles triangulaires, elle permet de définir des géométries et des conditions aux limites complexes.

* La méthode des éléments finis discontinus stabilisée avec des limiteurs de pente (Gowda V. & Jaffré J., 1993)

Des schémas d'ordre supérieur avec des limiteurs de pente multidimensionnels ont été développés en utilisant la méthode des éléments finis discontinus par G. Chavent & J. Jaffré (1986) in C. Oltéan (1995). Cette méthode utilise une discrétisation en triangle ou quadrangles dans le cas bidimensionnel. Le schéma standard aux différences finies d'ordre 1 est obtenu avec une approximation constante par morceaux, tandis que des approximations polynomiales de degré plus élevé fournissent des schémas plus précis. Aux points de discontinuité de la solution approchée, les flux numériques advectif et dispersif sont calculés par des solveurs de Riemann unidimensionnels.

La méthode est stabilisée par des limiteurs de pentes multidimensionnels. Pour chaque pas de temps, une limitation de pente est effectuée et elle est considérée comme un pas de temps supplémentaire après un calcul en éléments finis.

Dans le cas monodimensionnel, on a montré que l'approximation linéaire est à variation totale diminuante (T.V.D. : total variation diminishing) et est convergente. Cette méthode a été testée sur des maillages structurés ou non, triangulaires ou quadrangulaires et dans tous ces cas, a donné de bons résultats.

* Combinaison éléments finis discontinus / éléments finis mixtes hybrides (Siegel P., Mosé R., Ackerer Ph., 1994)

Une autre méthode dérivée de ces théories consiste en la combinaison entre éléments finis discontinus et éléments finis mixtes. Le terme advectif de l'équation d'advection-dispersion est alors résolu par la méthode des éléments finis discontinus et le terme dispersif est résolu par la méthode des éléments finis mixtes hybrides.

⁹ Dans le cas bidimensionnel, on discrétise l'aquifère en éléments triangulaires **K**; Avec cette méthode, la conservation de la masse est exacte pour chacun des éléments **K**. Les flux advectifs sont résolus par la méthode des éléments finis discontinus et le terme dispersif est résolu par la méthode des éléments finis mixtes hybrides.

Aux discontinuités de la solution approchée, les flux numériques advectifs sont calculés par des solveurs de Riemann de dimension 1. La méthode est stabilisée avec des limiteurs de pente multidimensionnels. Ces limiteurs de pente entraînent un peu de diffusion numérique au niveau des fronts de concentration raide.



Le flux dispersif est continu d'un élément à l'élément voisin. Les conditions aux limites de type Dirichlet doivent être imposées pour les sommets et les noeuds de chaque élément.

Avec cette méthode, les oscillations numériques sont totalement évitées pour un large éventail de nombres de Peclet de maille. La combinaison de ces deux méthodes peut alors être appliquée pour des modèles bidimensionnels ou tridimensionnels en utilisant différentes sortes d'éléments avec des maillages réguliers ou irréguliers.

Les simulations ~~numériques~~ effectuées avec cette combinaison de deux méthodes montrent une bonne concordance avec les solutions analytiques dans le cas monodimensionnel et bidimensionnel (Siegel et al., 1994).

* Etude comparative des trois dernières méthodes présentées

Une étude comparative a été effectuée entre une solution analytique et les résultats obtenus par les trois méthodes précédentes (eulériennes récentes) sur un exemple dans la thèse de C. Oltéan, d'après Siegel (1995). Les résultats sont comparés pour des valeurs du nombre de Peclet de maille différents au bout d'un temps arbitraire de 50 s et sur des maillages réguliers et irréguliers, en considérant que le terme **advectif** est prédominant.

De cette comparaison il ressort que :

- * pour un maillage régulier, la méthode des éléments finis mixtes est la seule à représenter, au niveau du front, des oscillations et de la diffusion numérique;
- * pour un maillage irrégulier, la méthode des éléments finis discontinus donne de bons résultats et la méthode des volumes finis engendre de la diffusion numérique.

Ces conclusions restent valables lorsque le nombre de Peclet de maille augmente. On peut donc dire que, parmi ces méthodes, la méthode des éléments finis discontinus est la plus robuste quand le phénomène d'advection est prépondérant.

* **Méthodes lagrangiennes**

Comme nous venons de le voir, les méthodes eulériennes souffrent de problèmes tels que des oscillations ou des dispersions numériques, notamment lorsqu'elle sont appliquées à des phénomènes de transport dominés par la convection. Malgré les efforts de développement en vue d'une amélioration de la performance de ces méthodes classiques (voir méthodes eulériennes récentes), des méthodes alternatives ont vu le jour et ont été testées avec succès.

Pour limiter ou éviter ces problèmes numériques, plusieurs méthodes alternatives ont été développées comme la méthode des caractéristiques ou la méthode de marche au hasard, méthodes basées sur un déplacement de particules.

Les méthodes lagrangiennes traitent le transport de soluté en considérant un grand nombre de particules mobiles permettant ainsi une résolution directe de l'équation de convection-dispersion. Il résulte de ces méthodes lagrangiennes, l'absence de problème de dispersion numérique notamment dans le cas des problèmes dominés par la convection. La méthode de marche au hasard est un exemple de type d'approche lagrangienne.

* La méthode de la marche au hasard

Cette méthode consiste à considérer le nuage de polluant comme un ensemble de particules discrètes; le déplacement de chaque particule dépend en partie du hasard mais les propriétés statistiques du déplacement global du nuage de particules sont connues et régies par les propriétés du milieu et les paramètres d'écoulement.

Cette méthode de marche au hasard consiste à lâcher des particules dans le domaine maillé qui se déplacent selon l'algorithme suivant **(1D)** :

$$x(t+At) = x(t) + u(x(t)) At + z \sqrt{2D_x} \left(\frac{1}{\sqrt{ht}} \right)$$

où x est la position de la particule, t le temps, Δt le pas de temps, u_x la vitesse moyenne de l'eau dans les pores, D_L le coefficient de dispersion longitudinal et z un nombre aléatoire de distribution centrée et réduite.

En milieu hétérogène, il convient d'ajouter un terme supplémentaire au terme advectif pour avoir l'équivalence entre ce type de formulation et l'équation d'advection-dispersion (Ackerer & Kinzelbach, 1985). Ce terme nécessite le calcul de la dérivée de la vitesse, ce qui impose de disposer d'un champ de vitesses calculées le plus précis possible.

Les **concentrations** sont **ensuite** calculées en comptant le nombre de particules dans un volume donné. Chaque **particule** a une masse déterminée en fonction du nombre de particules injectées et du débit massique de la source de pollution.

Le principal avantage de cette méthode réside dans le fait qu'elle n'est pas sujette à la dispersion numérique et que le calcul de masse est conservatif, mais, néanmoins, elle génère quelques fluctuations en concentrations.

Cette approche statistique a l'inconvénient de produire des oscillations dans les zones de basses concentrations (faibles densités de particules), mais en contrepartie ne génère pas de biais systématique : les oscillations se situant de part et d'autre de la solution exacte, il est possible de visualiser l'incertitude due à la méthode numérique. D'autre part, cette méthode présente l'avantage de respecter strictement les bilans massiques, même si le champ de vitesses n'est calculé qu'approximativement (par une méthode eulérienne par exemple) ce qui serait risqué si l'équation de transport était résolue par différences finies. L'accroissement de la précision nécessite un grand nombre de particules : le temps de calcul peut alors devenir long.

* Méthodes mixtes eulériennes-lagrangiennes

La troisième catégorie de méthodes numériques permettant la résolution de l'équation de convection-dispersion est basée sur une approche mixte eulérienne-lagrangienne. Nous avons vu ci-avant que les méthodes lagrangiennes se prêtent plus à la résolution des termes convectifs alors que les méthodes eulériennes sont plus appropriées à la résolution des termes dispersifs. Cette troisième approche est un compromis entre les deux précédentes (termes convectifs résolus par une approche lagrangienne et dispersifs par une approche eulérienne).

* La méthode des caractéristiques

Cette méthode consiste en une discrétisation de l'aquifère en mailles carrées. L'objectif est de simuler le terme advectif. Chaque maille contient un certain nombre de particules et à chaque particule est allouée une certaine masse. Cette méthode repose sur trois étapes :

- les particules sont déplacées par advection le long des lignes de courant selon l'algorithme suivant (2D) :

$$x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + u_x \Delta t$$

$$y_p(t+\Delta t) = y_p(t) + u_y \Delta t$$

- le terme dispersif est ensuite calculé par différences finies à partir d'une concentration moyenne calculée à l'aide des particules

- on répartit alors la nouvelle concentration moyenne sur les particules puis on renouvelle le calcul pour le pas suivant.

En fonction des techniques lagrangiennes adoptées lors de l'approximation du terme de **convection**, plusieurs méthodes mixtes eulériennes-lagrangiennes peuvent être classées en :

- méthodes des caractéristiques (MOC)
- méthodes modifiées des caractéristiques (MMOC)
- méthodes hybrides des caractéristiques (HMOC)

* Conclusion sur les modèles numériques

Quand le phénomène d'advection pure est prédominant, l'utilisation des méthodes classiques (différences finies et-éléments finis) pour les simulations numériques concernant la propagation d'un polluant dans une nappe aquifère est peu fiable et entraîne des oscillations et de la diffusion numérique. Ce problème ne peut être surmonté que par une discrétisation très fine du maillage, qui est souvent limitée par les moyens informatiques.

Pour palier ces problèmes numériques, de nouvelles méthodes se sont développées : les méthodes particulières et la méthode des volumes finis et des éléments finis discontinus et la combinaison entre éléments finis discontinus et éléments finis mixtes hybrides. Ces méthodes donnent de meilleurs résultats que les techniques classiques, en particulier, la méthode des éléments finis discontinus que le maillage choisi soit régulier ou irrégulier.

D'autres méthodes alternatives (lagrangiennes ou eulériennes-lagrangiennes) se sont développées et dans le cadre de notre étude, nous avons retenu la méthode de la marche au hasard pour les simulations de la propagation d'un polluant en milieu poreux saturé. En effet, la mise en oeuvre de cette méthode est relativement simple et efficace et son avantage principal réside dans le fait qu'elle n'engendre pas de diffusion numérique au sens classique du terme. De plus, les simulations effectuées en mono ou bidimensionnel à l'aide de la méthode de marche au hasard et celles effectuées par les méthodes analytiques ont montré une bonne concordance (Ajallouéian, 1996).

zv.1.3 - Autre critère de sélection d'un modèle : nature des phénomènes simulés

Un autre critère important pour le choix d'un modèle est la nature des phénomènes simulés. Présentons donc, ci-dessous, les différentes catégories que nous avons rencontrées lors de notre recherche.

1) Codes d'écoulement en milieu poreux (une centaine de modèles)

2) Codes de transport de soluté (73 codes) pouvant se répartir en quatre sous-catégories

- Code de dispersion
- Code de convection-dispersion
- Code de rétention-dispersion
- Code de transport incluant les réactions chimiques

3) Code géochimiques :

ils simulent les réactions chimiques dans les hydrosystèmes sans considérer le processus de transport . Ces codes ne nous intéressent pas particulièrement dans le cadre de notre étude.

4) Codes spécifiques :

cette catégorie comprend des cas spécifiques de code d'écoulement et de transport de soluté incluant :

- les milieux rocheux fracturés
- le transport de chaleur
- l'écoulement polyphasique.

Parmi ces trois caractéristiques, une seule pourrait éventuellement nous intéresser : l'écoulement polyphasique (hydrocarbures liquides non miscibles NAPL). Mais le nombre de codes susceptibles de simuler l'écoulement et le transport polyphasique demeure limité.

Nous avons aussi rencontré des codes qui sont spécialisés dans le transfert des pesticides (PESTAN) ou dans le transport de radionucléides... mais il s'agit de codes plus sophistiqués et vraiment spécialisés dans un domaine précis alors que l'objectif est plutôt de se doter d'un outil susceptible de résoudre l'ensemble des problèmes.

IV.2 Recensement et classification des codes

IV.2.1- Tableau récapitulatif

Un recensement des codes existants sur le marché et dans la littérature a été réalisé. Pour chaque code, huit rubriques ~~ont été~~ étudiées ~~avec~~ les critères décisionnels pour le choix d'un code :

- 1) Le type de code : Analytique, Numérique
- 2) Les méthodes de calcul adoptées : Différences Finies (D.F.), Eléments Finis (E.F.), Méthode des Caractéristiques (MOC), Marche au Hasard (RW = Random Walk)
- 3) Le régime d'écoulement : Permanent (Pet-m) ou Transitoire (Trans).
- 4) Le nombre de dimensions considérées : **1D, 2D, 3D**
- 5) Le milieu considéré : Saturé (Sat) ou non Saturé (Nsat)
- 6) Les éléments de transport pris en compte : **Convection (conv)**, Dispersion (disp), Adsorption (~~ads~~)
- 7) Ecoulement polyphasique possible ou non
- 8) Découplage possible

Vu le très grand nombre de codes recensés (sans compter tous ceux qui ne le sont pas), il est évident qu'il est impossible de faire un inventaire exhaustif et par conséquent nous avons étudié plus en détail un groupe de 50 codes que nous avons classés.

Le tableau récapitulatif est présenté en annexe 3.

IV.2.2 Méthodologie pour choisir un code adapté : étapes et critères de sélection

1) En fonction des objectifs :

En ce qui concerne notre étude, les objectifs et la situation sont connus : il s'agit d'une étude qui porte sur les captages qui sont situés dans la nappe alluviale de la Moselle. Par ailleurs, nous sommes dans une approche de prévention de pollution accidentelle.

Le choix du code sera orienté par le degré de précision désiré lors des simulations ainsi que par la quantité des données disponibles.

L'objectif est de donner une estimation des temps de transfert et des concentrations attendues au niveau des ouvrages de **captage**. Dans notre cas, il s'agit donc de donner une première **estimation** et nous savons d'ores et déjà qu'il y a peu de données disponibles sur les sites (le plus souvent que 'I' ou S). De plus, comme il s'agit d'une opération de grande envergure sur l'ensemble des sites de captages d'eau potable situés dans les alluvions de la Moselle, il n'est pas envisageable, par exemple de vouloir faire des mesures des transmissivités dans les trois directions de l'espace et on ne pourra pas non plus imposer de gros travaux (un pompage étant déjà considéré comme un luxe).

Il faudra donc rester dans la gamme des modèles relativement simples.

Si on se place dans le contexte de l'utilisation d'un modèle hydrogéologique fonctionnant selon les modes de calcul retenus (c'est à dire un modèle de résolution basé sur la méthode des éléments finis en ce qui concerne la partie "écoulement" et la méthode de la marche au hasard en ce qui concerne la partie "transport du polluant"), il peut être intéressant d'avoir un ordre d'idée de l'erreur qui peut être commise sur le temps de transfert que l'on va obtenir.

Concernant cette question, nous tenons tout d'abord à spécifier que la précision est un des paramètres d'entrée du modèle, c'est à dire qu'il s'agit d'une valeur qui est choisie par l'utilisateur (à l'intérieur d'une fourchette conseillée).

* L'erreur commise au niveau du calcul lui-même est faible et va dépendre du degré de précision que l'on souhaite qui est lui même dépendant du temps de calcul (et du coût de la modélisation); mais cette erreur est bien inférieure à celle qui est généralement commise sur les paramètres d'entrée du modèle.

En effet, concernant le calcul effectué par le modèle, on dispose de paramètres de contrôle du travail qui sont choisis par l'utilisateur. Ainsi en régime transitoire ou permanent, il convient de fixer les précisions suivantes : la précision relative et la précision absolue.

Explications du fonctionnement du modèle lors de la résolution du problème :

La résolution du problème est de type itératif : autrement dit, on fournit au départ une solution initiale qui est progressivement corrigée jusqu'à l'équilibre, pour chaque maille, entre les flux entrants, sortants et stockés (dans le cas du régime transitoire).

En régime permanent, la solution initiale n'est pas définie par l'utilisateur : elle est automatiquement calculée à partir de la moyenne des potentiels imposés. Dans le cas du régime transitoire, la solution initiale doit être fournie par l'utilisateur : elle peut correspondre par exemple à un état permanent initialement calculé.

La précision relative représente la moyenne des corrections relatives effectuées entre l'itération en cours et la précédente.

La précision absolue représente la plus grande correction effectuée sur l'un des noeuds du maillage.

On donnera également un nombre maximum d'itérations autorisées. Le programme de résolution s'arrêtera dès lors que l'une ou l'autre des circonstances suivantes est réalisée :

- * les précisions absolue et relative demandées sont toutes deux atteintes ou dépassées,
- * le nombre d'itérations demandé est atteint ou dépassé.

Par expérience et en tenant compte des temps de calculs, les valeurs conseillées pour ces paramètres sont les suivantes :

- * la précision relative choisie doit se trouver dans la fourchette 10^{-5} à 10^{-3} .
- * la précision absolue choisie doit se trouver dans la fourchette 10^{-4} à 10^{-5} .
- * le nombre d'itération maximum choisi doit se trouver dans la fourchette 100 à 500.

Lorsque le programme de résolution s'arrête, il affiche alors les informations suivantes :

- le pas de temps (régime transitoire)
- le nombre d'itération

- la précision absolue
- la précision relative

ce qui permet de vérifier quelles sont les conditions remplies et nous donne donc les informations concernant les erreurs "créées" par le modèle de calcul du logiciel HYDROMOD, qui sont ainsi maîtrisées et "faibles".

Cependant ce ne sont **pas**, et de loin, les erreurs prédominantes, car même si on ne tient pas compte des simplifications qui sont **faites** lors de la création du maillage représentant le milieu naturel, nous avons vu qu'il fallait entrer un certain nombre de paramètres qui sont nécessaires aux calculs (comme par exemple la transmissivité, ou la porosité...); or ces valeurs ne sont pas toujours connues ou si elles le sont, il s'agira certainement d'une donnée ponctuelle que l'on va extrapoler sur l'ensemble d'un domaine. Les erreurs commises sur les paramètres mesurés peuvent déjà être importantes : de l'ordre de 20 % (soit $2 \cdot 10^{-1}$); on peut dès lors facilement imaginer qu'elles sont nettement plus élevées en ce qui concerne les extrapolations. Ces erreurs sont donc bien supérieures à la précision demandée au niveau des calculs.

Toujours est-il, qu'à partir des fichiers de sortie, il est ensuite possible d'obtenir une cartographie de la piézométrie qui résulte des conditions et paramètres d'entrée et ensuite on essaie de faire le calage du modèle hydrogéologique : ce dernier peut se faire de différentes manières :

- * calage sur les piézométries,
- * calage sur les flux,
- * calage sur des cartes de concentrations.

Le calage le plus simplement réalisable est celui qui se fait par rapport aux piézométries (données que l'on peut avoir assez facilement), car les flux ne sont parfaitement connus que sur les sites expérimentaux ou en laboratoire ce qui rend difficile leur type d'utilisation. Quant au calage à l'aide de cartes de concentrations, il exige des prises d'échantillons dans des piézomètres et des analyses, ce qui représente toujours un coût bien plus important que la prise d'un simple niveau d'eau.

Le calage se fait donc par détermination des paramètres hydrodynamiques pour avoir la meilleure adéquation entre la piézométrie calculée par le modèle et celle observée sur le terrain. Mais cette adéquation n'est pas toujours parfaite en tout point du maillage et il y a donc également une incertitude à ce niveau.

Pour notre part, nous retiendrons de cette réflexion que les erreurs les plus importantes sont dues à l'entrée des paramètres et des conditions nécessaires à la résolution du problème, puis ensuite aux erreurs de calage entre les piézométries calculées et observées et, en tout dernier lieu, au calcul proprement dit du modèle.

Au vu de la multiplicité des niveaux où interviennent ces incertitudes, on se rend compte qu'il est quasiment impossible de calculer les incertitudes en terme de "temps de transfert" en ce qui concerne les paramètres d'entrée ou bien le calage d'autant plus que cela sera très variable en fonction des sites et des données dont on disposera sur chacun de ces sites. La seule solution serait de faire varier les différents paramètres un à un sur un modèle au préalable parfaitement **calé** et de voir quelles sont les répercussions sur les temps de transfert après avoir fait ensuite tourner la simulation concernant le transfert du polluant.

En conclusion et pour simplifier, nous retiendrons qu'il est difficile d'estimer l'erreur commise (ou l'incertitude) de par l'utilisation d'un modèle. Il est toutefois plus que probable que l'erreur due au mode de calcul est négligeable face aux erreurs dues aux simplifications ou extrapolations lors de la conception du maillage ou de l'entrée des paramètres nécessaires aux calculs. La précision des résultats sera donc fonction du nombre de données dont on pourra disposer sur chaque site **mais en tout état de cause il ne faut pas espérer avoir une précision inférieure à plusieurs jours.**

Notons au passage que cette précision est théoriquement indépendante de la valeur du temps de transfert estimé.

2) Critères techniques :

Dans notre cas, nous' avons vu qu'il était inutile d'avoir recours à une méthode couplée puisqu'il n'y a pas de variation de densité (pas d'eau salée) et que cela permet une plus grande rapidité de calcul. Ainsi, nous **utiliserons** de préférence un modèle découplé : modèle d'écoulement et modèle de transfert de polluant.

* Modèle d'écoulement de l'eau souterraine :

Enumérons ci-dessous les caractéristiques du milieu d'étude et du modèle d'écoulement correspondant à notre cas :

- Nappe libre
- Ecoulement en milieux poreux
- Hétérogénéité 3D mais 2D suffisant et plus en rapport avec les données que l'on pourra acquérir simplement.
- Monophasique pour la quasi totalité des pollutions
- Hétérogène mais on a pas toujours les données
- Une seule couche d'alluvions
- Epaisseur des couches variable (entre mur et toit de l'aquifère ou l'épaisseur mouillée des alluvions)
- Régime permanent normalement suffisant (transitoire seulement en cas de fluctuations de niveaux)
- Méthode des éléments finis (simple, classique et mieux que les différences finies si on en juge par la comparaison de l'annexe 2)

Parmi les modèles d'écoulement de ce type (restitution d'un champ de vecteurs vitesses dans un aquifère), nous pouvons citer entre autres : HYDROMOD, **SEEP/W**, FLONET, INTERSAT...

* Modèle de transport de polluant :

Enumérons ci-dessous les caractéristiques du milieu d'étude et du modèle d'écoulement que nous recherchons:

- Source plane (verticale)
- Source à valeur initiale
- Dimension 2D
- Dispersion à prendre en compte
- Adsorption à prendre en compte avec un coefficient de retard qui devrait suffire pour donner une idée de ce phénomène
- Dégradation non nécessaire
- Variation de densité (polyphasique) : inutile
- Méthode de marche au hasard (pas de dispersion numérique engendrée par cette méthode)

La question peut se poser en ce qui concerne l'utilité de prendre en compte un coefficient de retard lors de telles simulations.

La réponse qui vient immédiatement à l'esprit est qu'il semble logique de prendre en compte un tel coefficient car une pollution qui arrive par la Moselle transite dans l'eau mais devra nécessairement également transiter par la nappe alluviale et être au contact avec les terrains. Ainsi si le polluant est fortement retenu par les alluvions, il se peut qu'il mette suffisamment de temps pour qu'il y ait un changement dans les condition hydrologiques ou une destruction "naturelle" sur le trajet avant qu'il ne parvienne au niveau du puits.

La quantité de polluant qui pourra arriver au niveau du **captage** va dépendre de plusieurs facteurs dont les deux principaux sont, du moins en ce qui concerne la nature du polluant : son coefficient de partage K_d (ou coefficient de retard) qui représente ce qui peut se passer comme interaction entre le polluant et les alluvions; sa solubilité qui correspond à son comportement vis à vis de la phase "eau" de la nappe alluviale.

La solubilité joue donc **un** rôle similaire à celui de K_d en terme de transfert dans la zone non saturée du sol; c'est à dire que **pour deux** composés ayant des coefficients de partages K_d voisins, le composé le plus soluble va se retrouver plus rapidement dans la nappe et en plus grande quantité à un instant donné. Cependant si la solubilité agit sur la valeur maximale du flux enregistré pour les composés les plus solubles, ce n'est pas le cas pour le K_d dont les variations n'ont pas **d'influence** sur la valeur maximale de ce flux.

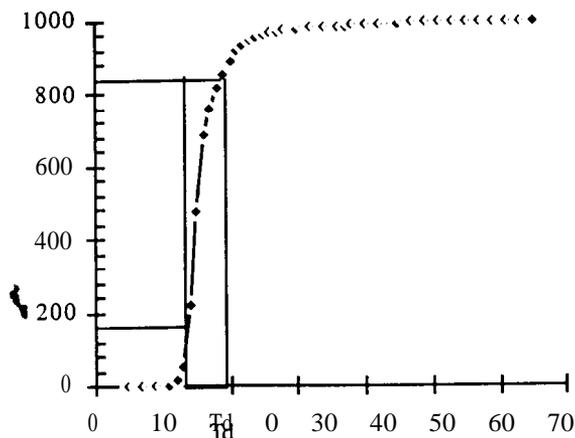
Les expériences faites sur le coefficient de retard semblent montrer que ce paramètre est aussi important que la solubilité et nous ne pouvons pas le négliger complètement. Toutefois, en cas de problème, on pourra toujours se placer dans le cas le plus défavorable en prenant un coefficient de retard qui donnera le temps de transfert correspondant à un traceur parfait, donc le plus rapide.

Parmi les modèles de transport de polluant de ce type nous pouvons citer entre autres : RANDOMOD, CTRANW, FLOTRANS, INTERTRANS...

3) Autres aspects **nouvant** influencer le choix du modèle :

- Convivialité (langue française, table à digitaliser pour la construction des maillages, encadrement des valeurs avec message d'erreur...)
- Documentation (mode d'emploi)
- Sortie graphique

Pour le Logiciel RANDOMOD, par exemple, à partir d'un champ de vitesses, la restitution dans les puits de pompage est ensuite, après un traitement très simple sous tableur (**EXCEL**) peut être représentée et ses caractéristiques, notamment le temps moyen de transfert, peut être calculé.



MODELE J (RANDOMOD) : la modélisation par une méthode de marche au hasard permet de connaître la courbe de restitution. Celle-ci est simplement traitée sous tableur pour en calculer directement la courbe cumulative et graphiquement la durée de passage de la pollution

- Assistance technique et maintenance
- Coût du matériel informatique et des logiciels

Il va de soi que les modèles les plus sophistiqués sont les plus coûteux et qu'ils exigent les machines les plus performantes et coûteuses. De plus, on se rend vite compte qu'il est inutile de prendre les logiciels et les machines les plus performantes, si on n'a pas de données en nombre suffisant pour exploiter correctement leurs capacités.

N.B. : attention les codes sont nombreux mais ils sont loin d'être tous validés, que ce soit au niveau des calculs utilisés ou au niveau du terrain (opération délicate et coûteuse).

V - PARAMETRES ET BASE DE DONNEES

(Cf. annexes 4 à 7)

V.1 Types de paramètres à prendre en compte dans les modèles

Les modélisations des hydrosystèmes souterrains étudient et simulent deux mécanismes distincts se produisant dans les aquifères : d'une part, l'écoulement des eaux, et d'autre part, le transport des composés dissous dans l'eau. Ceci implique toute une série d'hypothèses simplificatrices concernant les paramètres des systèmes physiques simulés. Ces paramètres auront une influence sur la nature et la complexité des équations utilisées lors de la représentation mathématique du modèle.

Six paramètres majeurs doivent être pris en considération lors du développement et lors de la sélection du code de simulation des écoulements souterrains auxquels s'ajoutent six autres paramètres relatifs au transport du contaminant.

V.1.1 Paramètres liés à l'écoulement

- * Nature de l'aquifère (type, épaisseur)
- * Caractéristiques de la matrice (milieu poreux ou fracturé)
- * Homogénéité et isotropie (**ID**, 2D ou 3D)
- * Nombre de phases
- * Nombre d'aquifères
- * Condition d'écoulement (permanent ou transitoire)
 - permanent (vitesse de l'écoulement constante en intensité, en direction et en tout point du champ d'écoulement)
 - transitoire (fluctuations du niveau de la nappe seulement)

V.1.2 Paramètres liés au transport

- * Géométrie de la source de pollution (plan vertical ou source volumique)
- * Nature de la source de pollution :
en allant dans le sens du degré de complexité croissante : Injection sous forme d'une impulsion instantanée ou d'un créneau, injection continue d'intensité constante ou variable dans le temps.
- * Dispersion :
intervention de la macrodispersion en plus du transport convecto-dispersif conventionnel
- * Adsorption :
la plupart des modèles formalisent l'adsorption selon un partage linéaire. Ce type de partage entre la phase solide et liquide simplifie considérablement les équations à résoudre. Il consiste "tout simplement" à introduire un coefficient de retard R (voir paragraphe suivant à ce sujet).
- * Dégradation (biodégradation et décroissance radioactive) :

tout comme pour l'adsorption, une représentation de la biodégradation en utilisant un coefficient de dégradation du premier ordre est souvent utilisée par souci de simplification des écritures mathématiques.

Les modèles de dégradation d'ordres multiples, plus réalistes, qui intègrent la variation des nombreux paramètres tels que le **pH**, la concentration du substrat, la densité de population microbienne sont plus complexes et figurent rarement dans les codes.

La simulation de la décroissance radioactive est également compliquée mais plus facile à modéliser car les différentes chaînes de la décroissance sont en général bien connues.

* Effet de contraste de densité et de viscosité

il faut en tenir compte lorsque les variations de la concentration et de la température du panache de pollution sont telles qu'elles ont une influence sur les variations de la densité et de la viscosité de l'eau.

V.1.3 Réflexions sur les différents types de polluants

V.1.3.1 Rappels des conditions et des objectifs de l'étude

Par définition l'objectif général de l'étude est de savoir comment réagir à une pollution de type accidentel qui arriverait par la Moselle (donc on ne sait ni où elle se fera, ni de quel type elle sera); dès lors, il est difficile de pouvoir prévoir toutes les possibilités.

En ce qui concerne sa localisation, le seul point qui nous intéresse est de savoir qu'il s'agit d'une pollution que l'on va retrouver dans le cours de la Moselle et ce que l'on doit estimer est ce qui va se passer ensuite entre la Moselle et les ouvrages de **captage**.

Par contre, en ce qui concerne la nature du polluant, on ne peut pas la connaître à l'avance. En effet, il y a des voies de communication avec des camions transportant toutes sortes de produits (inventaire réseau routier) mais il y aussi la voie ferrée, les canaux et toutes les installations classées ou non faisant des rejets autorisés ou non dans la Moselle.

Donc ce qu'il faut essayer de savoir, ce sont les caractéristiques à connaître afin de faire une classification des polluants qui permette d'attribuer un coefficient de retard à chacun. Ce coefficient sera utilisé lors de la modélisation.

A première vue, le critère de la solubilité semblait important pour connaître le comportement d'un polluant et nous avons envisagé de définir des classes; mais comme nous allons le voir par la suite, la solubilité est loin d'être un critère représentatif et suffisant pour faire un tel classement (même très approximatif).

V.1.3.2 **Le coefficient** de retard(R)

Dans la plupart des modèles tenant compte des phénomènes **d'absorption/désorption**, ce coefficient intervient et représente la capacité du polluant à être retenu par le sol.

Il peut être évalué de différentes façons

- test en grandeur "nature" par traçage avec un polluant; mais on comprend aisément que ces tests ne sont pas réalisables facilement (site expérimental ou suite à un accident)
- test en **batch** sur une colonne en laboratoire.
- approximation avec des formules empiriques et des coefficients macroscopiques (coefficients de partage entre le sol et l'eau, entre le carbone organique et l'eau ou entre l'octanol et l'eau qu'il est possible de trouver dans la littérature).

Parfois, il y a déjà un facteur d'au moins 3 entre ces trois méthodes de mesure et de calcul de R, ce qui montre bien la difficulté d'obtenir un tel paramètre (voir annexe 5).

En effet, ce coefficient de retard va synthétiser à lui seul l'ensemble de **trois** grandes classes de phénomènes et facteurs :

* Les mécanismes d'interaction solide-liquide (adsorption-désorption) que nous ne ferons qu'énumérer sans nous appesantir sur les détails.

Principaux mécanismes de rétention (idem que adsorption si réversibles) :

- Les forces de Van der Waals
- Les liaisons hydrogène
- Les ponts **cationiques** et hydriques
- Les interactions **électrostatiques** en ions de charges opposées
- L'échange de ligand >
- Les liaisons par transfert de charge
- Les liaisons de coordination
- Les liaisons covalentes
- Les liaisons hydrophobes

* Les paramètres physico-chimiques (pH, T°, composition du milieu...)

* La nature de la molécule étudiée

- La structure électronique
- L'ionisation
- Les substitutions
- Le volume moléculaire
- L'hydrosolubilité
- La lipophilie (l'hydrophobie)

Vu la complexité des mécanismes qui entrent en jeu, il est plus facile de se baser sur une approche empirique des phénomènes et de déterminer des coefficients macroscopiques qui interviennent dans des lois de partitions entre les différentes phases.

Kd : coefficient de partition entre le sol et l'eau pour un polluant.

Koc = **Kd/foc** est le coefficient de partition entre la matière organique (carbone) et l'eau pour un polluant.

En se reportant aux valeurs disponibles dans la littérature, nous avons choisi foc = 1% **(0,01)** comme teneur en carbone organique total du sol (alluvions de la Moselle).

Ensuite, comme il existe de très nombreuses relations empiriques pour passer du Kow (coefficient de partition entre l'octanol et l'eau pour un polluant) au Koc, nous avons choisi de prendre celle qui s'applique au plus grand nombre de polluants (sauf dans le cas particulier des amines et des acides carboxyliques). Cette relation est la suivante :

$$\text{Log } K_{ow} = 0,98 \text{ Log } K_{oc} - 0,26$$

Avec l'aide de tous ces coefficients qui sont liés les uns aux autres, il est possible de calculer le coefficient de retard qui nous intéresse plus particulièrement, grâce à la formule suivante :

$$R = 1 + (\rho * \text{Log } K_{ow})/nc$$

où ρ est la masse sèche du sol exprimée en **g/cm³** ou en **kg/dcm** ou sans unité si c'est une densité. Elle sera prise égale à **1,6** en se reportant aux valeurs disponibles dans la littérature.

La porosité cinématique (nc), quant à elle, sera prise toujours en se reportant aux valeurs disponibles dans la littérature, égale 20 % **(0,2)**.

* Démarche entreprise :

Nous avons recherché les valeurs pour environ 170 composés organiques et nous avons calculé les **coefficients** de retard correspondants. Nous avons classé ces derniers par ordre croissant.

Nous avons ainsi pu vérifier les corrélations existant entre le coefficient de retard et les coefficients de partition (Kd, Koc et Kow) qui varient globalement dans le même sens : plus un produit est retenu dans le sol, plus il est attiré par la matière organique et plus il est hydrophobe (lipophile).

Notons que la solubilité semble varier en sens contraire du **coefficient** de retard mais ce n'est pas si évident que cela (même si pour certains produits il existe des relations empiriques

entre la solubilité et les autres coefficients de partition). Ainsi nous avons pu faire un classement en fonction du coefficient de retard qui est plus représentatif du comportement réel du polluant. Enumérons ci-dessous les différentes classes définies et pour plus de précisions, il est possible de se rapporter au tableau de l'annexe 4 :

- Classe I

SUBSTANCE HYDROPHILE : très grande à grande mobilité dans le sol

Log Kow < 2 (soit Kow < 100)

$1 < R < 10$

- Classe II

SUBSTANCE MOYENNEMENT HYDROPHOBE : mobilité dans le sol modérée à lente

$2 < \text{Log Kow} < 3$ (soit $100 \leq \text{Kow} < 1000$)

$10 < R < 100$

- Classe III

SUBSTANCE HYDROPHOBE : mobilité dans le sol réduite à nulle

Log Kow > 3 (soit Kow > 1000)

$R > 100$

* Méthodologie de détermination du coefficient de retard d'un polluant

A partir de ce classement, nous avons donc cherché une méthodologie pratique pour savoir quoi faire lorsque l'on se trouve confronté à une pollution. Cette méthodologie de détermination du coefficient de retard est proposée dans l'organigramme de l'annexe 5. Commentons-la ci-dessous.

La première chose qui nous intéresse est d'avoir des renseignements sur la densité du polluant :

- S'il est très léger, une partie de celui-ci va partir dans l'air et une autre passera sous forme dissoute dans l'eau
- S'il est moins dense que l'eau, il va flotter (HC léger)
- S'il est de densité comparable à celle de l'eau, il va se répartir sur toute la hauteur
- S'il est beaucoup plus lourd, il va faire un "paquet" au fond qui devra être considéré comme une source de pollution, mais on pourra assez facilement en traiter une partie sur place.

Dans notre cas nous ne traiterons que les pollutions qui se retrouvent effectivement dans l'eau (pas la phase gazeuse) et en cas de densité très forte, on traitera le produit sur place. Dès lors, il n'y aura qu'une faible partie dissoute qui se retrouvera dans l'eau et sera à l'origine d'une pollution possible des captages d'eau potable situés dans la nappe alluviale.

Nous aurons donc à nous préoccuper des polluants dont une partie au moins peut se dissoudre ou être transportée par entraînement dans l'eau. On peut distinguer, de manière très générale, au moins trois types de pollutions :

- Pollution par un composé chimique ou organique
- Pollution par un produit radioactif
- § - Pollution par des éléments bactériologiques

Pour les pollutions de type bactériologique, les bactéries ou les virus seront en partie éliminés par le sol (pouvoir épurateur naturel) ou bien facilement traitées par **chloration** et ne poseront donc pas de gros problème.

Les pollutions nucléaires ont normalement **moins** de risques de se produire que les autres et mis à part leurs effets nocifs sur la santé humaine et leur décroissance, ces éléments devraient, en terme de comportement, pouvoir être traités comme les autres métaux **lourds**.

Il nous reste donc à nous préoccuper plus en détails des pollutions chimiques ou organiques.

Pour être transporté par l'eau et pour arriver au niveau des captages, il faut que le polluant considéré soit soluble dans l'eau. Or nous avons vu que cela n'était pas suffisant pour établir une classification représentative, les mécanismes qui interviennent dans les phénomènes d'adsorption-désorption étant beaucoup plus complexes que cela. En effet, il faut surtout s'intéresser au caractère hydrophobe ou non hydrophobe, car si il est hydrophobe il sera peut-être retenu par les terrains (MO) soit au niveau des berges soit au niveau du sol.

Donc il faut se poser la question de savoir si il s'agit d'un composé HYDROPHOBE ou HYDROPHILE

Pour cela on se basera sur la valeur du Kow qui représente la lipophilie et donc également l'hydrophobie.

Ainsi pour $\text{LogKow} > 2$ on dira que le composé est hydrophobe et pour $\text{LogKow} < 2$ il sera hydrophile.

Un composé hydrophile (classe 1) aura un coefficient de retard qui sera faible (compris entre 1 et 10) et aura une solubilité qui est normalement importante (mais critère à prendre avec prudence).

Ensuite, si le composé est hydrophobe, cela ne signifie pas pour autant qu'il est impossible qu'il parvienne aux captages (intervention des autres mécanismes). De plus s'il s'agit d'un produit chimique "plus simple" (comme par exemple les métaux lourds ou les chlorures . ..). il faut également savoir de quel signe il sera dans l'eau de la Moselle puis au niveau de l'eau dans la nappe alluviale.

Ainsi, on se rend compte que si cela est facile pour le cas des bases fortes (cations dans l'eau) ou des acides forts (**anions** dans l'eau), c'est déjà moins évident pour les bases et acides faibles car il faut tenir compte entre autres de la valeur de leur pka ou pkb par rapport au pH de l'eau.

Toujours est-il que l'on peut énoncer la règle générale suivante :

* pour les **anions** qui se retrouvent dans l'eau, on aura un Kd très faible et un coefficient de retard égal à 1 : le comportement sera alors comparable à celui d'un traceur presque parfait . Ceci peut expliquer par exemple que l'on puisse retrouver des chlorures dans les puits de **Loisy**.

* Les cations, quant à eux, seront plus adsorbés par la matière organique (négative) et donc piégés dans les sols (leur Kd sera très grand et leur coefficient de retard aussi) et ils auront donc beaucoup moins de chance d'arriver au niveau des captages d'eau.

Notons que pour les composés organiques de type complexe (pesticides, herbicides hydrocarbures...), nous avons fait la recherche des coefficients de partitions (**Kow**, Koc, Kd) et que nous avons calculé les coefficients de retard pour les 170 composés organiques les plus courants que nous donnons en annexe 4.

* Conclusion

En conclusion, nous pouvons dire, qu'après réflexion, le seul paramètre de solubilité est tout à fait insuffisant pour représenter le comportement d'un polluant et qu'il paraît plus sage de s'intéresser à son coefficient de retard ou bien encore aux autres paramètres de partition.

Nous avons également défini la démarche à suivre pour déterminer à quel type de polluant on a affaire en fonction de sa densité, de sa solubilité, de sa charge et de son caractère hydrophobe (avec Kow) pour avoir un ordre de grandeur du coefficient de retard à prendre en compte dans la modélisation. Ce dernier nous a permis de faire trois classes (I, II, III) et d'avoir les correspondances pour les autres coefficients de partitions qui peuvent être connus par la littérature.

V.1.4 Application à notre cas d'étude

Plus on augmente la sophistication du modèle et plus le nombre de paramètres à prendre en compte est grand dans les deux groupes de paramètres (écoulement ou transport). C'est ce qui a motivé notre choix d'une simulation en **2D**, qui devrait être beaucoup plus accessible et nous donner tout de même une précision suffisante en terme de résultat.

Mise à part toutes les informations de type "géographique" (implantation des ouvrages de pompage et des éléments caractéristiques du sites (rivière, canal, plans d'eau, seuil...)), il y a un certain nombre de données numériques qui sont absolument nécessaires, c'est à dire que si on ne les a pas, il faut les "inventer".

* En ce qui concerne la partie modèle d'écoulement :

- Les transmissivités (perméabilités)
- Le coefficient d'emmagasinement
- Les hauteurs piézométriques (cartes en étiage et hautes eaux)
- L'épaisseur de l'aquifère
- Les infiltrations d'eaux pluviales
- Les flux aux frontières (conditions aux limites)
- Le débit de pompage des puits
- La rivière

* En ce qui concerne la partie modèle de transport :

- La restitution du champ de vecteurs vitesses issue du modèle d'écoulement précédent
- La porosité
- Le coefficient de retard ou K_d , K_{ow} , K_{oc}
- La masse initiale de polluant

V.2 Base de données

V.2.1 Contenu de la base de données au sens général

- * Les données nécessaires pour faire tourner le modèle seront de deux types :
- cartographique (ou géographique)
 - numérique ou de type **oui/non**.

En effet, pour la réalisation du maillage, par exemple il est nécessaire de connaître les caractéristiques géographiques du site (implantation des ouvrages **captants** et des éléments caractéristiques du site...). De même, les cartes d'écoulement (ou cartes piézométriques) sont des informations nécessaires et précieuses qu'il est inutile de traduire sous forme numérique pour les rentrer dans la base de données.

Par contre, on pourra rentrer les caractéristiques hydrodynamiques et géologiques du site.

En conséquence, les paramètres nécessaires pour faire tourner le modèle seront restitués pour partie sous forme de cartes et pour partie dans la base de données proprement dite.

* **Les** paramètres qui figureront dans la base de données devront être validés, c'est à dire que la démarche consistera à rechercher des informations auxiliaires qui permettront de juger de cette validité même si ces informations ne sont pas directement nécessaires à la modélisation proprement dite. Ces informations n'ont donc pas lieu de figurer dans la base de données.

* Par contre, nous comptons utiliser la base de données comme outil de travail en ce qui concerne la sélection des lots prioritaires et des données manquantes. Elle devra donc contenir au moins au début les informations nécessaires à ces sélections.

•

V.2.2 Démarche de recueil des données

Nous avons décidé de faire une recherche très complète au niveau de chaque site afin de pouvoir nous rendre compte de la validité des données recueillies. Nous avons déjà mis au point un certain nombre de fiches (accompagnées d'une liste de documents à rechercher) que nous comptons pouvoir remplir et qui recueillent l'ensemble des données qui nous seront nécessaires pour mener à bien notre tâche. Nommons ci-dessous les six fiches telles qu'elles se présentent aujourd'hui en sachant qu'elles pourront et seront certainement modifiées au cours de l'avancement de l'étude en fonction des situations rencontrées. Le contenu des différentes fiches est présenté en annexe 6.

- * Fiche des caractéristiques générales du site
- * Fiches puits ou ouvrages
- * Fiches piézomètre
- * Fiches pompage
- * Fiches traçage
- * Fiche de synthèse

Ces fiches regrouperont donc l'ensemble des informations jugées intéressantes qui sont disponibles sur le site après consultation de tous les organismes et visites sur place. Ensuite, on dépouillera et triera les données valides que nous reporterons soit sur un fond de carte soit dans la base de données au sens strict.

Comme nous l'avons déjà signalé ci-avant, la base de données comportera d'une part toutes les informations qui seront nécessaires pour faire tourner le modèle mais aussi les éléments qui vont nous permettre de faire le tri en lots prioritaires et le bilan des données manquantes sans pour autant intégrer l'ensemble des informations qui auront servi à la validation de ces données.

Afin de pouvoir faire le tri en lots prioritaires, il faut se référer à un certain nombre de critères qui nous aideront à faire la synthèse de toutes les informations. Nous proposons ci-dessous les différentes "fiches" qui se trouveront dans la base de données. Leur contenu est présenté en annexe 7.

- * Identification (fiche clef permettant la reconnaissance d'un site)
- * Risques Environnement
- * Vulnérabilité
- * Prévention Réaction
- * Importance stratégique
- * Débits d'exploitation
- * Précipitations
- * Notes classement

VI CONCLUSION

Nous avons donc fait un inventaire des différentes méthodes utilisables pour le calcul des temps de transfert et des abattements de concentrations. Il est possible de citer deux grands groupes de méthodes :

- les méthodes de calcul "simples" (calcul ou utilisation d'abaques pour des cas simples),
- les méthodes de calcul "plus complexes" (modèles analytique ou numérique)

A noter que les méthodes du premier groupe permettent uniquement d'avoir des approches très grossières des temps de transfert moyens et ne sont généralement utilisées que dans les

situations d'urgence ou lorsque l'on ne dispose pas de beaucoup de données (ce qui est malheureusement souvent le cas).

De plus, ces méthodes conduisent à l'évaluation des temps de transfert moyens et non au temps de transfert selon la ligne de courant la plus courte qui donnerait la date d'apparition de la pollution et qui permettrait de savoir à quel moment il faut déclencher les analyses ou **court-circuiter** le puits.

5-

Ces méthodes ne peuvent être utilisées que si on respecte les hypothèses qui ont permis de résoudre l'équation de **convection**; or ces hypothèses ne sont pas du tout en accord avec la réalité du terrain.

De plus, en ce qui concerne l'évaluation des concentrations, ces méthodes laissent à désirer (uniquement cas de traceur parfait, conditions qui ne représentent pas du tout la réalité du terrain, accumulation de l'erreur faite au niveau des temps de transfert moyens...).

Ces méthodes simples ne sont donc pas représentatives de la réalité, mais si on ne dispose pas du temps ou des données nécessaires et qu'il y a urgence, elles permettent d'avoir un ordre de grandeur.

Dans le deuxième groupe qui réunit les méthodes dites plus complexes, nous avons réussi à trouver une cinquantaine de modèles (liste non exhaustive) sur le marché actuel pour lesquels nous avons fait une classification selon différents critères afin de parvenir à une méthodologie de choix du modèle approprié à notre étude.

Dans un premier temps, nous avons noté la faible importance des modèles de type analytique qui de plus exigent des simplifications très contraignantes au niveau des hypothèses de départ afin de permettre la résolution de l'équation de convection-dispersion. Ces modèles ont surtout comme avantage de pouvoir contrôler la validité des modèles numériques.

Nous sommes ensuite parvenus à définir, que dans le cas de notre étude, nous n'avons pas vraiment d'intérêt à utiliser un modèle dit couplé (pas de modification de la densité et gain sur le temps de calcul).

A partir de là, en considérant les différentes méthodes pour un modèle d'écoulement, les deux types les plus classiques étant les éléments finis et les différences finies, nous avons opté vers les éléments **finis** qui permettent de représenter de manière plus précise le milieu (géométrie du milieu flexible). Même si les bases mathématiques ou la programmation sont plus complexes, cela n'intervient pas au niveau de l'utilisateur final et les résultats seront meilleurs.

Notons par ailleurs que le phénomène de dispersion numérique n'intervient pas dans cette phase d'écoulement puisque nous avons choisi le type de modèle découplé.

Rappelons également que les paramètres nécessaires à l'une ou à l'autre de ces méthodes dites classiques (E.F. et D.F.) sont les mêmes et que cela ne peut pas constituer un élément de choix.

Si on se reporte au tableau de l'annexe 3, on peut se rendre compte que le nombre de modèles correspondant à ces critères est déjà beaucoup plus limité; en particulier si on admet qu'il est **absolument** utopique de vouloir utiliser un modèle en 3D alors que, dans la plupart des cas, on dispose et on ne pourra disposer au mieux que des données pour un modèle bidimensionnel.

Ensuite, il faut aussi s'intéresser au modèle du transport qui doit être couplé avec le modèle d'écoulement. En ce qui concerne cet aspect, nous avons à nouveau le choix entre différentes méthodes mais la plus simple et la plus efficace semble être celle de la marche au hasard puisqu'elle ne génère pas de dispersion numérique. Aussi, nous la conseillons pour la réalisation de cette partie de la modélisation.

En résumé, nous arrivons donc à l'utilisation d'un modèle découplé, **2D**, en milieu poreux saturé qui doit rendre compte de l'**adsorption**. Dans la plupart des cas, ce phénomène d'adsorption est modélisé grâce-à un facteur de retard.

Suite à ce choix, nous connaissons maintenant les paramètres dont il faut disposer pour réaliser un telle modélisation.

Ces paramètres **peuvent être** classés en deux types : ceux qui sont liés à l'écoulement et ceux qui sont liés au transport (et au polluant).“.

Les paramètres nécessaires à la modélisation seront présentés sous forme numérique dans la base de données proprement dite mais aussi sous forme cartographique. L'ensemble des paramètres et des données nécessaires à la sélection des lots prioritaires et au bilan des travaux manquants seront intégrés également dans la base de données au moins au début afin qu'elle puisse servir d'outil de travail.

Suite à cela nous avons eu une réflexion sur le type de polluants que l'on pourra rencontrer et sur le moyen de les classer afin de mettre au point une méthodologie pour déterminer le coefficient de retard lors d'une pollution accidentelle.

La donnée qui sera nécessaire au modèle et la plus représentative est le coefficient de retard qui, comme nous l'avons vu est un paramètre très complexe et difficile à évaluer puisqu'il dépend de beaucoup de facteurs. Nous sommes parvenus à une méthodologie de détermination du coefficient de retard en fonction du produit avec renvoi à trois classes de produits qui ont été définies suite à la recherche des valeurs caractéristiques d'environ 170 composés organiques (classes directement faites sur les coefficients de retard avec des correspondances avec les autres coefficients de partition et non uniquement sur la solubilité).

Nous terminerons en rappelant la démarche que nous avons choisi de suivre pour l'étude des captages en nappe alluviale de la Moselle.

Tout d'abord la zone d'étude sera traitée par département et en tenant compte des conditions climatiques, nous avons choisi de commencer par le département de la Moselle puis de poursuivre par celui de la Meurthe et Moselle pour terminer par celui des Vosges

Nous avons également choisi de recueillir le maximum d'informations sur les sites afin de pouvoir juger de la validité des paramètres qui seront stockés au final dans la base de données et qui seront utilisés pour la modélisation.

Pour ce faire, nous avons élaboré un certain nombre de fiches qui sont remplies à partir des données bibliographiques (consultations dans les différents organismes) et des données recueillies sur le terrain lors de la visite des sites.

Ces paramètres ainsi qu'un certain nombre d'autres informations nécessaires à notre travail (tri par lots prioritaires et données manquantes) seront stockées dans la base de données dont nous donnons les grandes lignes de la structure sous forme de fiches.



Christine CACHET
Ingénieur-Hydrogéologue
Association Scientifique
pour la Géologie et ses Applications

Liste des Annexes

- Annexe 1 Détermination des temps moyens de transfert de l'eau vers quelques dispositifs de **captage** par puits
- Annexe 2 Comparaison des ~~deux méthodes~~ méthodes numériques Eléments Finis et Différences Finies sur un exemple
- Annexe 3 Inventaire et classification des modèles
- Annexe 4 Tableau de calcul des coefficients de retard
- Annexe 5 Méthodologie de détermination des coefficients de retard
- Annexe 6 Fiches de travail
- Annexe 7 Fiches de la base de données