

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution



Charge – Transfert de masse en solution – modélisation du transfert de masse en solution

Vevey, 31 Mars 2104

N° 20140331-Chloronet-Charge-Modélisation

Distribution Groupe TP8.2 - Charge

Élaboration HydroGeAp
Pr. Dr. Yvan Rossier

ChloroNet - Groupe Charge

TABLE DES MATIERES

1.	Introduction	8
2.	Définition de la charge	9
3.	Lien entre charge et transfert de masse en solution	11
4.	Processus de modélisation du transfert de masse en solution	16
4.1	Premier processus de modélisation : étude hydrogéologique	17
4.1.1	Informations et données de base :	17
4.1.2	Méthodologie et Résultats	18
4.1.3	Applications et apports	21
4.1.4	Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude	22
4.1.5	Critique de cette approche méthodologique	22
4.2	Deuxième processus de modélisation : techniques analytiques	24
4.2.1	Informations et données de base :	24
4.2.2	Méthodologie et Résultats	24
4.2.3	Applications et apports	25
4.2.4	Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude	26
4.2.5	Critique de cette approche méthodologique	26
4.3	Troisième processus de modélisation : les techniques numériques	27
4.3.1	Informations et données de base :	27
4.3.2	Méthodologie et Résultats	28
4.3.3	Applications et apports	30
4.3.4	Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude	31
4.3.5	Critique de cette approche méthodologique	32
5.	Processus de modélisation : Exemples	32
5.1	Applications possibles	32
5.2	Exemples	33
5.2.1	Approche utilisant l'étude hydrogéologique de base	33
5.2.2	Processus de modélisation utilisant une approche analytique pour résoudre le problème du transfert de masse en solution	48
5.2.3	Approche utilisant la simulation numérique du transfert de masse en solution	56

ChloroNet - Groupe Charge

6. En guise de conclusion

64

ChloroNet - Groupe Charge

TABLES DES ILLUSTRATIONS

Figure 1 . Nappe alluviale de l'Arve au niveau de Carouge – La Praille (GE)

Figure 2 : Localisation des points d'accès à l'aquifère des alluvions de l'Arve surveillés par le GESDEC (Administration en charge des sites et sols pollués du canton de Genève)

Figure 3 : Mesure de la concentration en différents produits Chlorés au niveau des ouvrages donnant accès à l'aquifère et suivis par le GESDEC

Figure 4 : Altitude du substratum, mur des alluvions de l'Arve (en m au dessus du niveau de la mer)

Figure 5 : Epaisseur (ou puissance du magasin aquifère constitué par les alluvions de l'Arve (4 dans la nomenclature genevoise)

Figure 6 : Carte piézométrique et lignes de courant issues de cette carte piézométrique

Figure 7 : Les différents systèmes d'écoulement (limite des systèmes en vert sur la carte) qui partitionnent l'aquifère des alluvions de l'Arve dans la partie Ouest : secteur Praille et propagation d'un contaminant en provenance du CIDEC

Figure 8 : Evolution de la concentration [g/l] depuis la section où la charge a été calculée jusqu'à 150 m à l'aval hydraulique

Figure 9 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, au niveau de la surface libre

ChloroNet - Groupe Charge

Figure 10 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, coupe passant par l'axe du panache

Figure 11 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, à une distance de 250 m à l'aval hydraulique de la section

Figure 12 : Modèle théorique - Section sur laquelle la charge a été mesurée (483 g/j) et panache de contamination résultant de ce terme source

Figure 12 : Evolution du panache de contamination depuis l'aval hydraulique immédiat du CIDEC jusqu'à l'Arve, exutoire du système d'écoulement

Figure 13 : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à l'Arve, exutoire du système d'écoulement, au centre du panache

Figure 14 : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à 250 m (limite Nord du stade de Genève)

Figure 15 : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à 25 m (vision proche du site contaminé)

Figure 16 : Modèle théorique - Section sur laquelle la charge a été mesurée (483 g/j) et panache de contamination résultant de ce terme source

Figure 17 : Modèle théorique – Panache de contamination à l'aval hydraulique du terme source considéré comme une section sur laquelle la charge a été mesurée

Figure 18 : Ecoulement dans le magasin aquifère de la Praille. On distingue les lignes équipotentielles (équidistance 0.5 m, en violet) qui cons-

ChloroNet - Groupe Charge

tituent la carte piézométrique, les lignes de courants issues des puits de réinjection de la station TAMOIL au Nord du centre commercial de la Praille et les lignes de courant de la réinjection issues des eaux récupérées par le centre commercial MIGROS. La ligne de pression nulle, correspondant à la surface libre de l'aquifère est également représentée (en noir)

Figure 19 : Panache de contamination issu d'une charge (flux massique) unitaire située juste à l'aval hydraulique immédiat de l'ancien site du CIDEC

ChloroNet - Groupe Charge

1. Introduction

La charge, ou flux massique, est une grandeur physique qui fait partie intégrante du bilan de masse. Un bilan de masse, c'est la somme de l'ensemble des flux massiques qui entrent ou qui sortent d'un domaine d'étude, pourvu que l'on puisse donner des limites à ce domaine d'étude. Cette charge peut se calculer sur une section délimitée de l'aquifère

Si un bilan de masse c'est calculer des flux massiques qui entrent dans un volume et des flux massiques qui sortent du même volume et rendre compte du déséquilibre entre les deux, alors il s'agit alors d'établir la divergence de ces flux massiques. Mais, la divergence des flux massiques n'est que l'expression d'une équation aux dérivées partielles qui représente l'ensemble des phénomènes physiques participant au transfert de masse en solution que sont l'advection, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique pour ceux qui ne sont que conservatifs.

Aussi, rendre compte d'un bilan de masse, c'est résoudre l'équation du transfert de masse en solution. Et la résolution de l'équation du transfert de masse en solution relève de la modélisation.

Ainsi, il existe un lien étroit entre charge, ou flux massique, et modélisation du transfert de masse en solution.

La charge est une grandeur physique que l'on peut mesurer. Si l'on se donne une limite, une section délimitée d'un aquifère, si l'on connaît la concentration en cette limite et si l'on connaît le flux d'eau qui traverse cette limite, alors on connaît la charge, le flux massique.

Dans le présent document nous nous proposons d'établir le lien entre charge et processus de modélisation. Il est possible passer de la charge à la concentration et inversement. Ce passage est possible uniquement dans le processus de

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

modélisation. Le lien entre charge et concentration est intéressant dans la mesure où, dans la réglementation (Osites), seule la concentration est prise en considération.

Nous proposons, dans un premier chapitre, de définir la charge au sens d'une grandeur physique que l'on peut mesurer. Dans un deuxième chapitre nous établirons le lien entre flux massique et modélisation. Le troisième chapitre concerne le processus de modélisation et ce qu'il faut entendre par « modélisation » et le quatrième et dernier chapitre présentent divers exemples d'application du processus de modélisation.

2. Définition de la charge

Pourvu que nous puissions délimiter un volume d'un milieu poreux soumis à un écoulement et obéissant à une physique particulière qui est celle décrite par l'équation de diffusivité ou celle de Richards, et qui transporte, en solution, divers éléments, obéissant à une physique qui est celle du transfert de masse en solution, alors il est possible d'établir un bilan de masse qui se fera aux limites du volume poreux pris en considération.

Pour autant que

1. Le champ de potentiels hydrauliques (relevant d'une des physiques décrivant les écoulements) et le champ de concentration (relevant de la physique du transfert de masse en solution) soient connus,
2. Les différents champs de caractéristiques physiques dépendant des différentes physiques soient connus (à minima conductivité hydraulique pour l'écoulement, coefficient de dispersion cinématique et coefficient de diffusion moléculaire pour le transfert de masse en solution),

Alors sur n'importe quelle section limitant ce volume il est possible d'effectuer un calcul du flux massique, ou de la charge.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Sous ces hypothèses, la charge est une grandeur physique que l'on peut estimer sur le terrain. Elle suppose un dispositif donnant accès à l'aquifère, dimensionné de telle manière que l'on puisse y effectuer des mesures et des prélèvements d'eau. Les mesures concernent principalement le potentiel hydraulique. Des prélèvements sont nécessaires si l'on veut déterminer les espèces chimiques et leur concentration.

Dès lors que l'on dispose des informations suffisantes, il est possible de déterminer la charge.

On prend en considération une section S [L^2], de longueur ΔL [L] et de largeur Δl [L] dans la **partie saturée** d'un **aquifère poreux, perpendiculaire à l'écoulement**.

Le flux d'eau qui traverse cette section correspond au flux de Darcy q [LT^{-1}]

La substance, mesurée par sa concentration C , est transportée par ce flux q et la quantité de matière q_c , est obtenue par le produit du flux de darcy par la concentration C [ML^{-3}] : $q_c = q \times C$ [$ML^{-2}T^{-1}$]. Cette quantité de matière correspond à un flux massique spécifique.

Le flux massique Q_c traversant la section normale à l'écoulement correspond au produit du flux massique spécifique q_c par la section normale à l'écoulement S : $Q_c = q_c \times S$ [MT^{-1}]

Le flux massique Q_c représente **la charge**. Il (elle) a la dimension d'une masse rapportée au temps ; **c'est la masse d'une substance considérée qui passe au travers d'une section pendant un temps donné.**

Les questions que l'on peut se poser quant au calcul de la charge :

Position de la section par rapport à la source de contamination

Dimension de la section au regard du panache de contamination

Détermination de la concentration passant à travers cette section

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Détermination du flux de Darcy au regard de ses différents constituants (conductivité hydraulique et gradient de charge hydraulique)

La réponse à toutes ces questions suppose une connaissance, non seulement du site contaminé et de ses alentours proches, mais également une connaissance plus étendue de la nature des écoulements souterrains.

On rappellera que la concentration que l'on mesure est celle produite ou issue de l'ensemble des phénomènes qui participent au transfert de masse en solution (advection, diffusion moléculaire et dispersion cinématique pour les phénomènes conservatifs, voire l'adsorption et la dégradation pour les phénomènes qui ne sont pas conservatifs).

3. Lien entre charge et transfert de masse en solution

Le transfert de masse en solution est représenté par trois phénomènes physiques : la diffusion moléculaire, la dispersion cinématique et l'advection (la convection).

Ces trois phénomènes physiques ont une représentation mathématique. L'agrégation de ces trois phénomènes physiques, et de ce fait, de leur représentation mathématique, aboutit à l'équation générale dite d'advection-diffusion (ou de convection-dispersion). Ces trois phénomènes sont conservatifs, en ce sens que la masse est conservée. Il existe des phénomènes qui ne sont pas conservatifs ; ceux qu'on représente habituellement sont l'adsorption et la dégradation.

L'équation qui régit le transfert de masse en solution, pour chaque espèce ou substance, s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon R C) + \frac{\partial}{\partial x}(qC) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{D} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \varepsilon \lambda RC = Q_c \quad [ML^{-3}T^{-1}]$$
$$R = 1 + \frac{(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \kappa$$

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Avec :

C, la concentration d'une espèce chimique, ou d'une substance [ML⁻³]

R, le coefficient de retard qui caractérise l'adsorption ou κ est un isotherme (linéaire, Freundlich, Langmuir) [-]

ε , la porosité dynamique [-]

q, le flux de Darcy [L³L⁻²T⁻¹]

\bar{D} , le tenseur de dispersion cinématique [L²T⁻¹]

λ , le coefficient de dégradation (ln 2/t^{0.5}) [T⁻¹]

Dans un domaine d'étude, cette équation est résolue en concentration [C] et fournit un champ de concentration : un panache qui représente le comportement à un moment donné de la substance. La résolution en régime transitoire fournit tous les champs de concentration au cours du temps.

Cette équation tient compte des phénomènes conservatifs (dispersion cinématique et diffusion moléculaire [$-\frac{\partial}{\partial x}(\bar{D} \frac{\partial C}{\partial x})$], convection [$\frac{\partial}{\partial x}(qC)$]) et des phénomènes non conservatifs (dégradation [$\varepsilon \lambda RC$] et adsorption [$R = 1 + \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \kappa$]).

La résolution de cette équation suppose un domaine d'étude dans lequel différents champs de caractéristiques physiques seront introduits et en bordure duquel il faut attribuer des conditions aux limites :

C, la concentration imposée sur une frontière [ML⁻³] (condition du premier type ou Dirichlet)

$\frac{\partial C}{\partial \vec{n}}$, le flux massique imposé sur une section en limite de domaine d'étude ou à l'intérieur du domaine d'étude [MT⁻¹] (condition du deuxième type ou Neuman)

Cette équation ne représente qu'un bilan de masse (la divergence des flux massiques). C'est d'ailleurs par ce biais qu'elle a été établie pour chacun des phénomènes physiques intervenant dans le transfert de masse en solution.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Si l'on dispose d'un domaine d'étude tridimensionnel D limité par une frontière S , le bilan de masse peut s'écrire de la manière suivante : L'intégrale sur S du flux massique unitaire de l'élément transporté entrant dans D est égale à la variation de la masse de l'élément dans le volume D dans l'intervalle de temps unité.

Dans le transfert de masse en solution, les trois phénomènes sont pris en considération : la diffusion moléculaire, la dispersion cinématique et l'advection (la convection).

Ce qui nous intéresse ici, c'est la première partie du bilan de masse ; pour chacun des phénomènes, l'intégrale sur S du flux massique unitaire de l'élément transporté entrant dans D s'écrit la manière suivante.

- Pour l'advection (la convection),

$$\int_S C \vec{u} \vec{n} dS \quad [MT^{-1}]$$

Avec :

C , la concentration $[ML^{-3}]$

\vec{u} , le flux de Darcy $[LT^{-1}]$

- Pour la diffusion moléculaire

$$\int_S f_{diff} \vec{n} dS \quad [MT^{-1}]$$

Avec :

$f_{diff} = -d_0 \frac{dC}{dx}$. le flux diffusif ou loi de Fick $[ML^{-2}T^{-1}]$

C , la concentration $[ML^{-3}]$

d_0 , le coefficient de diffusion moléculaire $[L^2T^{-1}]$

$\frac{dC}{dx}$, le gradient de concentration $[ML^{-3}L^{-1}]$

- Pour la dispersion cinématique

$$\int_S f_{disp} \vec{n} dS \quad [MT^{-1}]$$

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Avec :

$f_{disp} = -\bar{D} \frac{dC}{dx}$, le flux dispersif analogue à loi de Fick [$ML^{-2}T^{-1}$]

\bar{D} , le tenseur de dispersion [L^2T^{-1}] , $\frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} \vec{u}\alpha_L & 0 & 0 \\ 0 & \vec{u}\alpha_T & 0 \\ 0 & 0 & \vec{u}\alpha_T \end{bmatrix}$

C , la concentration [ML^{-3}]

\vec{u} , le flux de Darcy [LT^{-1}]

α_L , la dispersivité longitudinale [L]

α_T , la dispersivité transversale [L]

$\frac{dC}{dx}$, le gradient de concentration [$ML^{-3}L^{-1}$]

Dans les trois cas, il s'agit d'un flux massique, une charge.

L'intégrale des flux massiques unitaires constitue l'un des éléments du bilan de masse. La somme des trois flux massiques de chacun des phénomènes physiques constitutifs représente le flux massique total qui transite aux limites d'un volume, au travers de la surface (section) qui en constitue la limite. Ce flux massique correspond à la charge totale entrant et sortant. Le flux massique, ou la charge, fait partie intégrante de la constitution de l'équation qui régit le transfert de masse en solution. L'équation qui régit le transfert de masse en solution permet d'établir le lien qui existe entre flux massique ou charge et la concentration ; il est possible d'aller de l'un vers l'autre. Cette propriété est exploitée dès lors que l'on simule le transfert de masse en solution.

Il existe un lien direct entre flux massique, ou charge, et représentation du transfert de masse par l'équation d'advection-diffusion (convection-dispersion).

Remarquons que le transfert de masse en solution nécessite la connaissance des flux de Darcy qui interviennent dans deux phénomènes : l'advection (la convection) et la dispersion cinématique.

Pour reconnaître le flux de darcy en tout point il faut résoudre l'équation qui régit l'écoulement et qui peut s'écrire de manière généralisé au moyen de

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

l'équation de Richards qui s'intéresse à l'ensemble du magasin aquifère, zone saturée et non saturée comprises. L'équation de diffusivité, qui régit les écoulements dans la zone saturée uniquement dérive de cette équation, c'est un cas particulier de l'équation de Richards. L'équation de Richards exprimée en potentiel hydraulique s'écrit :

$$\begin{aligned} [S \cdot s(\psi) + \varepsilon C(\psi)] \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla q &= Q \\ \nabla q &= K_r(s) K \nabla h \quad [T^{-1}] \end{aligned}$$

Avec :

h , la charge hydraulique [L]

$C(\psi)$, la fonction capacité capillaire (variation de la teneur en eau par variation de charge de pression $\frac{\partial s}{\partial h}$ qui est donnée par la pente de la courbe $s(\psi)$),

$s(\psi)$, la fonction reliant la saturation à la pression,

$K_r(s)$, la fonction reliant la perméabilité relative à la saturation [-]

S , le coefficient d'emménagement,

ε , la porosité [-]

K , la conductivité hydraulique à saturation [LT^{-1}]

t , le temps [T]

Q , un débit entrant ou sortant du système [$L^3T^{-1}L^{-3}$]

en disposant des conditions aux limites qui pourraient être les suivantes :

h_i , un potentiel imposé (condition du premier type - Dirichlet)

$\frac{\partial h}{\partial \vec{n}}$, un flux imposé (condition du deuxième type - Cauchy)

$\frac{\partial h}{\partial \vec{n}} + h_i$, la condition mixte, flux et potentiel imposé (condition du troisième type - Neuman)

Les fonctions $K_r(s)$ et $\psi(s)$ (ou son inverse $s(\psi)$) peuvent être approximées au moyen des fonctions de Van Genuchten – Mualem pour la seconde et Van Genuchten pour la première. On peut écrire :

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

$$s_s = \frac{1}{[1 + (\alpha |\psi|)^n]^m}$$
$$K_r = s_e^{0.5} \left(1 - \left[1 - (s_e)^{\frac{1}{m}} \right]^m \right)^2$$
$$s_e = \frac{s - s_r}{s_s - s_r}$$

La résolution de l'équation de l'écoulement, sur l'ensemble d'un domaine d'étude, similaire à celui du transfert de masse en solution, fournit un champ de potentiel hydraulique [H] à un moment donné. La résolution en régime transitoire permet la reconstitution de tous les états hydrodynamiques au cours du temps, sur l'ensemble du domaine d'étude.

4. Processus de modélisation du transfert de masse en solution

L'équation de convection-dispersion provient d'un bilan de masse dans lequel les flux massiques, les charges, sont directement pris en compte.

Le processus de modélisation suppose que l'on résolve cette équation, qui représente le phénomène physique du transfert de masse en solution, dans un domaine d'étude préalablement défini. La résolution de cette équation fournira un champ de concentration connaissant des conditions aux limites et des caractéristiques physiques qui dépendent de la physique considérée (perméabilité à saturation, champ de potentiel, flux de Darcy, porosité cinématique, coefficients de dispersion, coefficient de diffusion moléculaire).

A partir d'un champ de concentration et d'un flux de Darcy, il est possible, en tout point de l'aquifère de rechercher un flux massique unitaire ou spécifique et en toute section que l'on se donne de calculer un flux massique.

La résolution de l'équation met en œuvre plusieurs approches..

La **première** considère l'**étude hydrogéologique**. La **deuxième** considère des **solutions analytiques** et la **troisième** des **solutions numériques**.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Dans l'étude hydrogéologique, l'équation qui régit le transfert de masse en solution et celle qui régit l'écoulement sont résolues implicitement.

Ces trois méthodes sont différentes tant par leurs méthodes que par les moyens mis en œuvres pour reconstituer des champs de concentration et pour rendre compte de variables associées (flux de Darcy, flux massique unitaire, flux massique). Les prérequis ne sont pas les mêmes dans les trois approches.

L'étude hydrogéologique peut se suffire à elle-même. Elle peut apporter suffisamment d'informations pour que le processus de modélisation puisse s'arrêter à ce point. Si l'on veut poursuivre le processus de modélisation vers la voie analytique ou/et vers la voie numérique, alors il est nécessaire, au préalable de disposer de l'étude hydrogéologique, qui constitue, dans ce cas, la première étape du processus de modélisation.

4.1 Premier processus de modélisation : étude hydrogéologique

4.1.1 Informations et données de base :

Il faut définir un domaine d'étude, c'est-à-dire discriminer tout ou partie d'un magasin aquifère sur un territoire.

Sur ce domaine d'étude il faut reconnaître les variables, grandeurs et caractéristiques propres à la physique des écoulements et à celle du transfert de masse en solution, ou du moins celles qui nous permettent d'établir un bilan de masse, à minima : champ des potentiels hydrauliques H , champ des conductivités hydrauliques à saturation K (perméabilité des hydrogéologues), champ des concentrations C , puissance de l'aquifère e .

Pour accéder à ces grandeurs il faut disposer d'ouvrages permettant l'accès à l'aquifère au sein du magasin aquifère poreux. Sur chacun de ces ouvrages il faut pouvoir mesurer la concentration et le potentiel hydraulique.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Des caractéristiques physiques de l'aquifère, en particulier sa conductivité hydraulique à saturation doivent être reconnues. On fera remarquer que la conductivité hydraulique n'est pas forcément identique sur la totalité du domaine d'étude ; aussi, il convient de disposer de plusieurs valeurs de cette caractéristique physique (un champ).

A défaut de conductivité hydraulique, il faut disposer de valeur de transmissivité. Dans ce cas, il est nécessaire de disposer conjointement de l'épaisseur de l'aquifère au moment de la mesure.

4.1.2 Méthodologie et Résultats

La méthodologie retenue suppose l'exploitation directe des mesures effectuées sur le terrain.

Deux des trois phénomènes qui interviennent dans le transfert de masse en solution (la convection et la dispersion cinématique) suppose la connaissance du flux de Darcy. Pour ce faire, il faut connaître en tout point d'un domaine d'étude la répartition du potentiel hydraulique et la valeur de la conductivité hydraulique.

Les points de mesure du potentiel hydraulique servent de points d'appui pour la création d'un champ de potentiels hydrauliques, autrement dit une carte piézométrique. Cette carte piézométrique est issue d'une interpolation et, sur les bords du domaine d'étude d'une extrapolation. Si dans le cas d'un aquifère libre on accepte les hypothèses de Dupuit, Forsheimer, Boussinecq, la vision plane de la répartition des potentiels hydrauliques est suffisante ; en effet, dans ce cas, le potentiel hydraulique est constant sur toute l'épaisseur de l'aquifère.

S'il existe plusieurs aquifères superposés et que la contamination en provenance du site pollué les a atteints, il faut pouvoir établir la carte piézométrique sur les aquifères qui sont atteints par la contamination. Dans ce cas, en plus de l'élaboration des cartes piézométriques planes sur chacun des aquifères, il faut dresser, sur plusieurs coupes, des cartes de la distribution des potentiels. Sur toute l'épaisseur de chacun des aquifères le potentiel est constant, les lignes

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

équipotentiels décrivent l'écoulement dans chacun des aquifères. L'aquitard ou l'aquiclude qui existe entre ces deux aquifères dispose également de valeurs du potentiel hydraulique qu'il faut distribuer verticalement sur cette coupe. De ce fait, dans le cas d'aquifères multiples atteints par une contamination en provenance de la surface, il ne suffit pas d'effectuer des cartes piézométriques, il faut distribuer le champ de potentiels hydrauliques en profondeur, dans les aquifères et dans les couches intermédiaires, aquitards ou aquicludes. Cette répartition permettra la compréhension du lien hydraulique qui existe entre les aquifères.

Les points sur lesquels un échantillonnage a été effectué pour effectuer une mesure de la concentration servent de points d'appui pour l'élaboration d'un champ de concentration, autrement dit un panache de contamination. Ce panache de contamination est issu d'une interpolation et d'une extrapolation sur les bords du domaine d'étude ou dans les secteurs où la mesure n'existe pas.

Ces deux résultats, la variation des potentiels hydrauliques sur tout le volume du domaine d'étude, c'est-à-dire la **carte piézométrique**, et la variation de la concentration sur tout de domaine d'étude, c'est-à-dire la représentation **du panache de contamination**, issues d'une interpolation et d'une extrapolation, **sont des résultats de base.**

A partir de ces résultats de base, il faut produire des résultats plus élaborés.

A partir de la carte en équipotentiels (carte piézométrique), il faut **déterminer les systèmes d'écoulement**. Un système d'écoulement est représenté par un exutoire relié à une aire d'alimentation par des lignes de courant. Aussi, dans tout le domaine d'étude, pour discriminer les systèmes d'écoulement il faut dresser une carte des lignes de courant. Depuis tous les amonts hydrauliques dans le domaine d'étude, il faut tracer chaque ligne de courant. jusqu'à son aval hydraulique. Pour se faire, toujours en suivant les approximations de Forsheimer-Dupuit-Boussinecq, on sait que les lignes de courant sont perpendiculaires aux lignes équipotentiels. Aussi, à partir des lignes équipotentiels dont on

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

dispose sur les cartes piézométriques il est possible de tracer les lignes de courant.

Quand l'ensemble des lignes de courant est tracé, alors il faut partitionner l'aquifère en système d'écoulement, relier chaque exutoire à une aire d'alimentation.

Un système d'écoulement est une unité hydrogéologique autonome ; ces limites sont à flux nul. Autrement dit tout ce qui entre dans un système d'écoulement reste dans ce système d'écoulement. Il n'existe aucune communication hydraulique entre système d'écoulement.

Cette propriété des systèmes d'écoulement, à fort potentiel opérationnel, doit être utilisée dans l'étude du transfert de masse en solution. Une contamination qui entre dans un système d'écoulement contaminera l'exutoire de ce système d'écoulement. Ainsi, l'analyse par système d'écoulement apporte des informations prédictives sur le devenir des contaminants

Connaissant une source de contamination ou connaissant un état de contamination à un moment précis (panache de contamination mesuré à un instant donné), il est aisé de superposer cette source ou ce panache à la distribution cartographique des systèmes d'écoulement et d'en déduire le devenir du contaminant, son cheminement dans l'espace jusqu'à l'exutoire constituant, in fine, la cible.

La représentation cartographique des systèmes d'écoulement, celle des potentiels et des lignes de courant et celle de la concentration permettent d'établir un bilan de masse tant pour l'écoulement que pour le transfert de masse, si on utilise l'information portant sur la conductivité hydraulique et l'épaisseur de l'aquifère. Etablir un bilan de masse, c'est calculer des charges aux exutoires et aux alimentations de chaque système d'écoulement. La charge peut, d'autre part, être calculée à n'importe quel niveau d'un système d'écoulement.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Le calcul de la charge peut s'effectuer de la manière suivante. Il faut choisir un système d'écoulement. Sur ce système, choisir une section qui recoupe l'ensemble du système d'écoulement perpendiculairement aux lignes de courant, le long d'une ligne équipotentielle. Sur cette section qui recoupe toute l'épaisseur de l'aquifère il faut d'abord calculer la moyenne des concentrations. Ensuite il faut calculer le flux de Darcy sur une ligne de courant. Pour ce faire, il faut simplement calculer le gradient de potentiel à partir de la carte piézométrique et effectuer le produit de ce gradient par la conductivité hydraulique à saturation au droit de la section. La surface de la section ayant été appréciée, la charge, le flux massique, est simplement le produit du flux de Darcy par la concentration et la section.

4.1.3 Applications et apports

L'étude hydrogéologique fournit une vision globale de la distribution des écoulements dans un aquifère et permet de comprendre le comportement global d'un contaminant se transférant dans cet aquifère.

En toute section de système d'écoulement, il est possible de calculer une charge, et ceci le plus rigoureusement possible. Dès lors, si l'on calcule des charges en sortie de sites contaminés, il est possible d'établir une hiérarchie à partir de la charge et de prioriser les actions à mener.

A l'issue de traitement d'un site contaminé, il est possible de rechercher la charge en sortie de site ou en n'importe quel secteur d'un aquifère.

Cette technique permet la prévision ; on sait où vont les contaminants, quel exutoire sera contaminé, même si cette prévision n'est que qualitative et non pas quantitative. Comme la prévision est possible, elle peut être utilisée pour discriminer et choisir les sites à décontaminer en priorité.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

4.1.4 Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude

Le grand intérêt de cette approche est que tout peut se faire « à la main ». A priori il n'est pas nécessaire d'utiliser un quelconque logiciel.

Un fond de plan issue d'une carte topographique suffit pour travailler avec, éventuellement des feuilles de papier calque pour superposer les différentes représentations cartographiques.

Sentant bien que cette approche « tout à la main » ne correspond plus à une époque où l'ordinateur peut tout, il convient de réfléchir sur une approche qui permette la conservation en mémoire.

Pour cela l'outil qui convient est un SIG. Il existe plusieurs logiciels de SIG sur le marché. Il faut simplement qu'il soit capable de récupérer des cartes géoréférencées, de disposer d'un module de géostatistique pour l'établissement des cartes en équipotentiels et les cartes en concentration ainsi que la carte en ligne de courant.

Même avec l'utilisation d'un SIG, la partition de l'aquifère en systèmes d'écoulement ne pourra se faire que manuellement.

En ce qui concerne le calcul des charges ou du bilan de masse, l'usage d'un tableur de type Excel peut s'avérer utile (cf. exemple de H. Adler : Abschätzung von Schadstofffrachten innerhalb einer Grundwasser-bilanzierung Zelle, au chapitre suivant)

4.1.5 Critique de cette approche méthodologique

C'est sur les résultats bruts que portent la plupart des critiques (carte en équipotentiels et carte en isoconcentration). Ces cartes sont issues en partie d'une interpolation et en partie d'une extrapolation, en particulier aux bordures du domaine d'étude et là où la connaissance manque.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

En ce qui concerne la carte piézométrique, la forme des lignes équipotentielles en bordure dépend en grande partie de l'idée que l'on se fait de la condition aux limites. Selon que l'on varie d'un flux nul à une limite à potentiel, alors la forme de l'équipotentielle variera de 90 degrés et les lignes de courant suivront les mêmes variations. Dès lors les systèmes d'écoulement pourront être très différents selon l'expertise que l'on a pour attribuer une condition aux limites.

En ce qui concerne le transfert de masse en solution, les concentrations suivent les lignes de courant en se dispersant latéralement. Aussi, avant de construire toute carte en isoconcentration, il convient d'abord de partitionner l'aquifère en systèmes d'écoulement. C'est en s'appuyant sur cette carte des systèmes d'écoulement que l'on établira la carte en isoconcentration.

Le calcul de la charge suppose la connaissance de la valeur de la concentration sur la section d'un système d'écoulement. Il est probable que la valeur ne soit pas identique partout sur cette section. Il existe de ce fait plusieurs possibilités pour apprécier le flux massique.

Cette approche méthodologique suppose l'existence de points d'appuis sur lesquels les mesures ou les échantillonnages sont effectués. En général il s'agit de piézomètres. Il va de soi que plus la quantité de mesure est importante, meilleurs seront les résultats obtenus. Un petit nombre de données ou d'informations ne permet pas cette approche ou alors elle sera entachée d'incertitudes qu'il faudra lever en utilisant, de manière complémentaire une autre approche.

Enfin, même si le site contaminé présente une petite superficie, il est nécessaire pour comprendre le fonctionnement d'un aquifère et pour rendre compte du comportement d'un contaminant de prendre en considération une superficie beaucoup plus grande que la petite superficie du site contaminé.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

4.2 Deuxième processus de modélisation : techniques analytiques

4.2.1 Informations et données de base :

Il s'agit des mêmes informations que pour l'approche précédente. Ces informations seront nécessaires pour documenter le modèle analytique et pour établir la comparaison avec les résultats en provenance du modèle analytique. On les rappellera ici.

Dans ce domaine d'étude, il faut disposer d'ouvrages permettant l'accès à la nappe. Sur chacun de ces ouvrages il faut connaître la concentration et le potentiel hydraulique. Des caractéristiques physiques de l'aquifère, en particulier sa conductivité hydraulique à saturation doivent être reconnues (champ des conductivités hydrauliques). A défaut de conductivité hydraulique, il faut disposer de valeur de transmissivité. Dans ce cas, il est nécessaire de disposer conjointement de l'épaisseur de l'aquifère au moment de la mesure.

Toutes ces données ont servi à l'établissement de l'étude hydrogéologique qui sert de référence.

4.2.2 Méthodologie et Résultats

Il s'agit de résoudre l'équation régissant le transfert de masse en solution en utilisant des solutions analytiques.

La méthodologie consiste à identifier une ligne de courant qui part d'un site contaminé. Cette ligne de courant est supposée constante dans le temps, en terme de direction, de sens et d'intensité (mesurée au moyen du flux de Darcy). A l'aval hydraulique du site contaminé, on calcule sur cette ligne de courant, la charge qui sort du site.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Cette charge est une condition aux limites, terme source d'une solution analytique pour un problème de transfert de masse en solution.

La solution analytique peut se faire en une, deux ou trois dimensions. Elle peut prendre en considération des sources continues dans le temps, sur un créneau ou instantanée. Elle peut prendre en considération une évolution dans le temps, c'est-à-dire prendre en compte le régime transitoire ou, si l'on cherche simplement une solution à long terme, prendre en considération un régime stationnaire ou permanent.

Les résultats que l'on obtient sont toujours une fonction de la concentration. Si la résolution s'effectue en 2D ou 3D, alors un panache de concentration est représenté à l'aval hydraulique du site contaminé. En général, nous pouvons disposer d'un graphe de l'évolution de la concentration ; il est possible que la concentration soit reliée à un point précis du domaine d'étude et dans ce cas, on s'intéresse en ce point à l'évolution avec le temps. Il est possible que la concentration soit reliée avec le temps et dans ce cas regardera la manière dont la concentration évolue avec la distance au point source de contamination pour un temps particulier.

4.2.3 Applications et apports

L'approche analytique ne peut pas s'utiliser seule, sauf pour un « screening ». Elle suppose que l'étude hydrogéologique la précède, de sorte que tous les systèmes d'écoulement soient connus, ou au moins celui qui porte le site contaminé.

Une solution analytique permet la reconstitution d'un panache de contamination en 1D, 2D ou 3D. à partir d'une hypothèse sur la charge à l'aval hydraulique du site contaminée. Elle permet la quantification. Elle permet de donner une valeur de la concentration en tout point à l'aval hydraulique du site contaminé, donc au niveau de n'importe quelle cible identifiée.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Dès lors il est possible d'établir une hiérarchisation sur les cibles, d'estimer les sites qu'il faut traiter en priorité.

Elle permet de tester diverses solutions correctives que l'on peut mettre en place sur un site contaminé. Ces actions correctives supposent une diminution de la charge à l'aval hydraulique immédiat du site contaminé dont le processus de modélisation utilisant des techniques analytiques va permettre de visualiser le panache de concentration résultant.

4.2.4 Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude

Deux voies sont possibles.

Il existe des logiciels, libres ou non, sur le marché, assez généraux pour y développer soi-même des solutions analytiques. Dans le mode libre on pourra citer Maxima (WxMaxima) qui est l'analogue de Maple dans le monde commercial. On pourra citer également Octave qui dans le monde libre est le pendant de MATLAB dans une vision commerciale. Dans ces logiciels qui ne sont pas dédiés, plusieurs autres outils de programmation sont disponibles.

Il existe des logiciels dédiés, en ce sens que les solutions analytiques sont pré-programmées et qu'il suffit d'introduire un jeu de données pour aboutir à l'établissement d'un panache. Un voyage sur l'internet peut permettre la récupération de ces logiciels, libres ou commerciaux.

4.2.5 Critique de cette approche méthodologique

Dans la très grosse majorité des cas, les solutions analytiques supposent des écoulements simples, unidimensionnels et qui ne changent pas dans le temps, ni de sens, ni de direction, ni d'intensité. L'écoulement est toujours permanent. Cela suppose que la conductivité hydraulique à saturation ne varie pas dans l'espace. Enfin, le milieu poreux représentant le domaine d'étude est infini et isotrope.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Quand on dispose d'une étude hydrogéologique sous jacente, avec la discrimination des systèmes d'écoulement, il est parfois difficile d'établir le lien entre la forme de l'écoulement dans le système d'écoulement tel qu'il se présente dans la réalité (tel que mesuré) et les résultats d'une solution analytique dans laquelle l'écoulement est unidimensionnel et invariant (comment projeter le panache de contamination issu d'une solution analytique dans un système d'écoulement ?).

4.3 Troisième processus de modélisation : les techniques numériques

4.3.1 Informations et données de base :

Il s'agit des mêmes informations que pour l'approche précédente. Ces informations seront nécessaires pour documenter le modèle numérique et pour établir la comparaison avec les résultats en provenance du modèle numérique. On les rappellera ici.

Dans ce domaine d'étude, il faut disposer d'ouvrages permettant l'accès à la nappe. Sur chacun de ces ouvrages il faut connaître la concentration et le potentiel hydraulique. Des caractéristiques physiques de l'aquifère, en particulier sa conductivité hydraulique à saturation doivent être reconnues (champ des conductivités hydrauliques). A défaut de conductivité hydraulique, il faut disposer de valeur de transmissivité. Dans ce cas, il est nécessaire de disposer conjointement de l'épaisseur de l'aquifère au moment de la mesure.

Toutes ces données ont servi à l'établissement de l'étude hydrogéologique qui sert de référence.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

4.3.2 Méthodologie et Résultats

Dans l'approche numérique, on commence par discriminer un domaine d'étude. L'étude hydrogéologique ayant été réalisée auparavant, c'est dans cette étude que le domaine d'étude a été défini.

L'approche numérique suppose le choix d'une physique ou de plusieurs physiques. Dans notre cas, les physiques que nous prendrons en considération seront celle qui concerne l'écoulement (en domaine saturée sous la forme de l'équation de diffusivité ou en domaine variablement saturé sous la forme de l'équation de Richards exprimée en potentiel) et celle qui concerne le transfert de masse en solution (équation d'advection-diffusion ou de convection-dispersion). Ces deux physiques ne sont généralement pas prises en considération conjointement ; on s'occupe d'abord de celle qui concerne l'écoulement puis de celle qui concerne le transfert de masse en solution.

L'approche numérique suppose ensuite le choix d'une technique de résolution de ou des équations qui représentent le ou les phénomènes physiques. De manière traditionnelle, trois techniques sont couramment utilisées comme technique de résolution : les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Notre propos n'est pas de détailler les différentes techniques, ni les différents logiciels que l'on peut trouver sur le marché ou ailleurs qui les utilisent. Ce qu'il faut retenir, c'est que pour pouvoir résoudre une équation aux dérivées partielles avec n'importe laquelle de ces techniques, il est nécessaire de subdiviser le domaine d'étude en une multitude de petits éléments constituant un maillage. Le domaine d'étude est ainsi subdivisé en plusieurs mailles, éléments ou volumes, sur lesquels la grandeur physique dont on veut connaître le champ (le potentiel hydraulique pour l'écoulement et la concentration pour le transfert de masse en solution) sera calculée. Ce maillage se substitue au domaine d'étude initial.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Le maillage étant connu et la physique étant choisie, il faut aux limites du maillage imposer des conditions aux limites et sur chacune des mailles introduire des caractéristiques physiques.

Les conditions aux limites dépendent de la physique choisie et de la connaissance dont on dispose à l'interface entre le domaine d'étude et le monde extérieur (limite à potentiel pour un lac ou un fleuve ou une équipotentielle arbitraire sur une carte piézométrique, limite à flux là où une alimentation ou une perte sur une limite est connue, colmatage au niveau des cours d'eau, infiltration efficace sur le domaine d'étude, puits de pompage ou de restitution, concentration imposée en un point ou sur un secteur du domaine, charge imposée sur une section du domaine d'étude, etc.). Comme pour les conditions aux limites, les caractéristiques physiques dépendent de la physique choisie et de la connaissance dont on dispose sur le milieu poreux constitutif du domaine d'étude (champ de conductivité hydraulique, champ des dispersivités, champs de toute grandeur décrivant un phénomène physique).

Le domaine étant connu avec son maillage, la physique étant choisie, les conditions aux limites et les caractéristiques physiques ayant été introduites, le problème est prêt à être résolu. On va reconstituer le champ de la grandeur qui intéresse la physique choisie (le potentiel hydraulique pour l'écoulement et la concentration pour le transfert de masse en solution) en résolvant numériquement l'équation correspondant à une physique choisie.

Ce champ distribué, il est comparé à un champ de référence (piézométrie de référence ou panache de référence, ou valeurs de ces deux grandeurs en différents points de l'espace). Cette étape constitue la calibration ; elle se poursuit pour autant qu'elle n'est pas jugée convenable.

A l'issue de l'étape de calibration, le modèle reproduit correctement les phénomènes physiques dont on s'occupe ; il peut alors être utilisé pour tout autre usage ; c'est l'étape de prospective.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

La dernière phase de ce processus de modélisation correspond à la production de résultats exploitables et lisibles pour tout un chacun : carte piézométrique, coupe représentant l'écoulement, lignes de courant, détermination des systèmes d'écoulement, panache de contamination, bilan de masse, position de la surface libre de l'aquifère, etc.

A partir de cette étape de production et sur la base des résultats obtenus, une analyse, suivie d'une synthèse, sera effectuée qui mesurera l'impact d'une contamination sur l'aquifère ainsi qu'au niveau des cibles que l'on veut bien se donner.

4.3.3 Applications et apports

L'approche numérique ne peut pas s'utiliser seule. Elle suppose que l'étude hydrogéologique la précède. C'est elle qui fournit le modèle conceptuel qui sera mis en œuvre dans le processus de modélisation utilisant la voie numérique,

Une solution numérique permet la reconstitution d'un panache de contamination en 1D, 2D ou 3D en régime permanent ou transitoire, associé à un écoulement permanent ou transitoire.

L'analyse et la synthèse des résultats issus d'un processus de modélisation utilisant la voie numérique permet de mesurer ou de quantifier l'impact de toute contamination en provenance d'un site contaminé sur la totalité d'un aquifère et, de ce fait, sur les différentes cibles qui pourraient se trouver au sein de cet aquifère.

Dès lors que l'impact est reconnu, en retour, le processus de modélisation utilisant la voie numérique permet de mettre en place des actions correctives et d'en mesurer l'efficacité.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

4.3.4 Les outils logiciels pour permettre ce genre d'étude

L'utilisation de l'approche numérique nécessite un logiciel permettant la résolution, par une méthode numérique (différences finies, éléments fins, volumes finis) de l'équation régissant l'écoulement (diffusivité ou Richards) et celle du transport de masse en solution (advection-diffusion). Il s'agit d'un solveur.

Mais un solveur ne suffit pas. Il faut également un logiciel permettant le traitement des données ou informations nécessaires à la construction et à la gestion du modèle numérique (celui qui est dans l'ordinateur) et permettant le traitement pour exploiter les résultats en provenance du modèle numérique.

Il existe plusieurs solveurs disponible facilement, soit dans le monde libre soit de nature commercial ; notre propos ici n'est pas d'en faire la liste ou les moyens de se les procurer.

Les solveurs peuvent, en plus du module permettant la résolution des équations aux dérivées partielles, disposer d'un module permettant l'introduction des informations nécessaires à l'élaboration du modèle numérique et disposer d'un module permettant le traitement des résultats provenant du solveur pour produire des informations élaborées directement exploitable par l'hydrogéologue.

En général, les modules d'introduction des données et de traitement des résultats dans les logiciels dédiés à la résolution des équations aux dérivées partielles ne permettent pas le traitement de données élaborées. Il faut alors disposer d'autres logiciels permettant le traitement de la donnée, tant pour la production d'informations qui alimenteront le solveur que pour la production de résultats directement exploitables en provenance du solveur.

Pour fixer les idées il est possible de prendre un exemple. FeFlow est un logiciel dédié à la résolution de plusieurs équations aux dérivées partielles utilisées dans le domaine de l'hydrogéologie (écoulement saturé, écoulement variablement saturée, transfert de masse en solution, transfert de chaleur, etc.). Ce logiciel dispose de modules de traitements de l'information pour rentrer les don-

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

nées nécessaires à l'élaboration du modèle et de modules de traitement des résultats issus de la résolution des équations. Pour autant, quelle que soit la performance de ces modules, le passage par un logiciel de type SIG de type ArcMap s'avère nécessaire si l'on veut traiter aux mieux le flot d'informations nécessaire à FeFlow ou en provenance de FeFlow.

4.3.5 Critique de cette approche méthodologique

L'approche numérique permet la gestion de problèmes de contamination de manière globale, au sens où cela intéresse tout un aquifère ou une grande partie d'un aquifère.

Dès lors, il faut disposer d'informations et de données en quantité suffisantes pour rendre compte de cette globalité. Le manque d'informations peut générer des incertitudes sur l'expression des résultats les rendant par la même caduques.

Toutefois l'incertitude est parfois un bon moyen pour montrer les lacunes ou les manques et qu'il faudrait combler. En ce sens l'approche numérique est un bon outil pour localiser les secteurs d'un aquifère qui nécessiterait une instrumentation et des mesures pour aboutir à la compréhension la plus rigoureuse possible du fonctionnement d'un aquifère.

5. Processus de modélisation : Exemples

5.1 Applications possibles

Nous ne présenterons ici que quelques cas d'applications. Nous ne prétendons pas être exhaustif. Pour chacun des processus de modélisation, nous présentons un ou plusieurs exemple qui permettront de faire comprendre la démarche utilisée.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Dans le cas de **l'étude hydrogéologique** nous présentons l'approche utilisée par le canton de Saint-Gall pour gérer les aquifères. Nous présentons également une étude hydrogéologique appliquée aux alluvions de l'Arve, dans le secteur de la Praille-Carouge dans le canton de Genève.

Pour **l'approche analytique de la modélisation**, nous présentons un exemple théorique d'utilisation d'une solution analytique pour reconnaître le comportement d'un contaminant et un exemple qui concerne le devenir d'un PCE dont on connaît la charge juste à l'aval hydraulique d'un site contaminée et qui intéresse l'aquifère des alluvions de l'Arve au niveau de la Praille dans le canton de Genève.

Enfin pour **l'approche numérique de la modélisation**, nous présentons un exemple théorique d'utilisation d'un modèle tridimensionnel d'écoulement et de transfert de masse en solution. A l'aval hydraulique d'un site contaminée, sur une section de l'aquifère, une charge est imposée et on regarde comment le panache, issu de cette charge, va se déployer dans le domaine d'étude tridimensionnel.

Nous présentons aussi un problème de transfert de masse en solution appliqué à une contamination en provenance d'un ancien site contaminé, le CIDEDEC, et qui se propage dans l'aquifère de la Praille-Carouge (canton de Genève).

5.2 Exemples

5.2.1 Approche utilisant l'étude hydrogéologique de base

Exemple 1: Bilan de masse sur un aquifère

cf. H. Adler : Abschätzung von Schadstofffrachten innerhalb einer Grundwasser-bilanzierung Zelle. Feuille Excel associée à ce texte.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Cet exemple ne porte que sur les bilans de masse et le calcul des charges pour obtenir ce bilan de masse.

Exemple 2 : Aquifère de la la Praille (Canton de Genève) et devenir des contaminants en provenance d'un ancien abattoir utilisant des produits chlorés (CIDEDEC).

L'aquifère correspond à la nappe alluviale de l'Arve dont la localisation est présentée à la **figure 1**, qui forme une dépression topographique de quelques km² présentant une légère pente vers le Nord en allant vers le cours d'eau (z = 388 m au Sud à la limite de la dépression topographique à z = 375 m au Nord au niveau de l'Arve).

Le magasin aquifère est celui des alluvions de l'Arve (4 dans la nomenclature genevoise). Le substratum est formé, à l'Ouest, du côté de La Praille, par le retrait würmien (7 dans la nomenclature genevoise) et à l'Est, du côté de Carouge, par l'aquifère du Genevois (9 dans la nomenclature genevoise). Le toit du magasin aquifère est formé par une couverture limoneuse (2 dans la nomenclature genevoise). Ainsi, il est possible de définir un domaine d'étude, formé par un milieu poreux, qui est latéralement circonscrit dans la limite rouge de la **figure 1** et qui contient, en profondeur l'ensemble des limons superficiels et les alluvions de l'Arve.

Le problème que nous avons à résoudre dans ce milieu poreux est un problème de transport de masse en solution, qui suppose également la résolution, préalable d'un problème d'écoulement.

Pour acquérir les informations relatives à la résolution du problème posé nous disposons d'ouvrages donnant accès à l'aquifère des alluvions de l'Arve, qui sont surveillés par le GESDEC, en charge des sites et sols pollués dans le canton de Genève (**figure 2**).

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

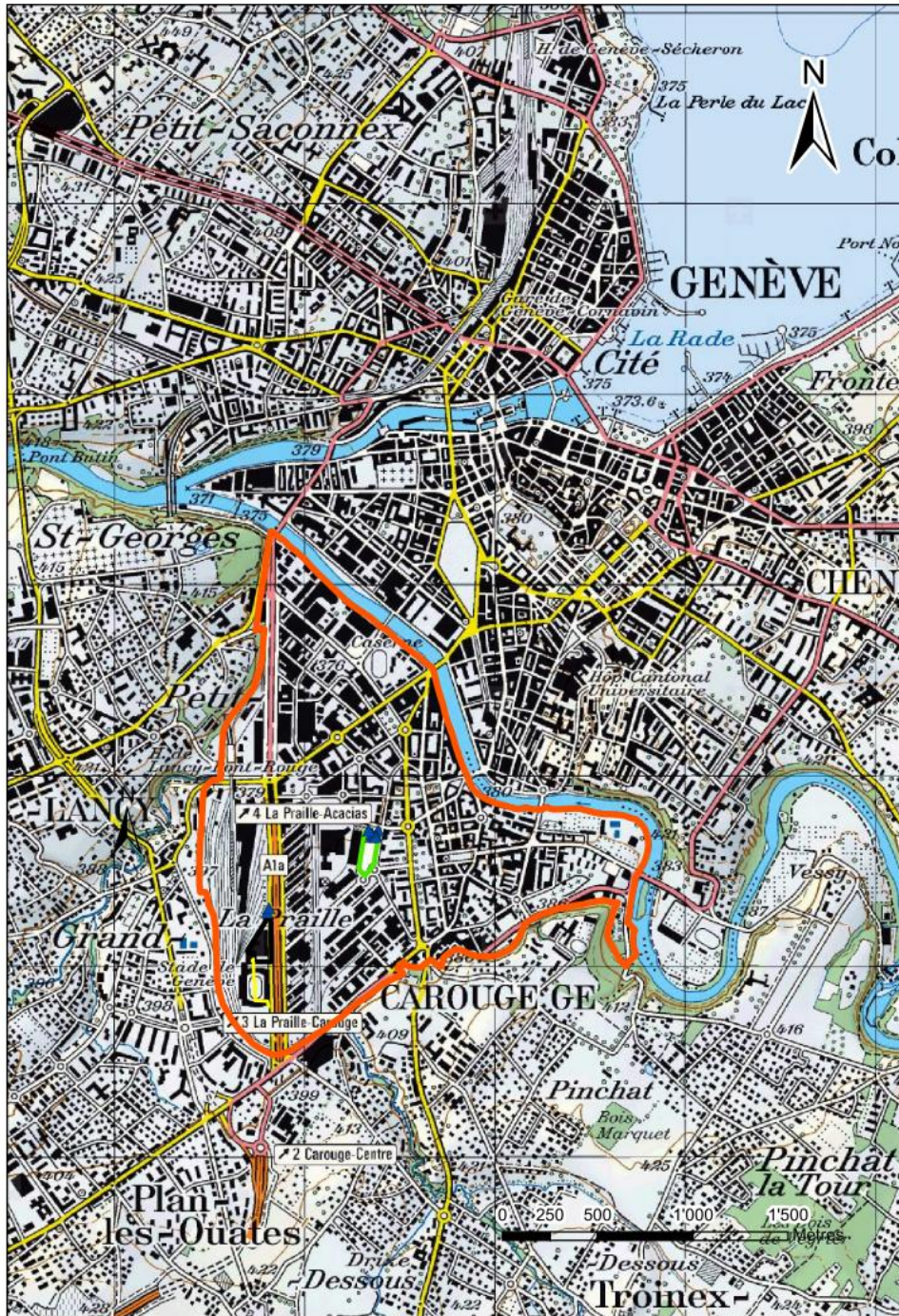


Figure 1 . Nappe alluviale de l'Arve au niveau de Carouge – La Praille (GE)

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Sur ces ouvrages, nous avons accès à la valeur du potentiel hydraulique, à celle de la concentration et, éventuellement, de mesures issues de tests donnant accès à la conductivité hydraulique à saturation.

C'est les mesures que l'on a pu faire sur les valeurs de concentration sur ces ouvrages qui nous a permis de mettre en avant un problème de contamination (**Figure 3**). La problématique peut se présenter de deux manières différentes : Dans plusieurs ouvrages on observe la présence de produits chlorés ; il existe un site reconnu, le CIDEDEC, au Sud de la Praille, qui a utilisé tout le long de son existence des produits Chlorés ; quelle est la part du CIDEDEC dans la dissémination de ces produits dans l'aquifère. D'un autre point de vue, il est possible de se poser la question de la provenance de ces produits dès lors que, sur le secteur, il existait d'autres industrie potentiellement polluantes. Aussi, la problématique révélée par la présence de chlorés dans les ouvrages suivis par le GESDEC est celle de l'origine, de la source ou des sources de contamination.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

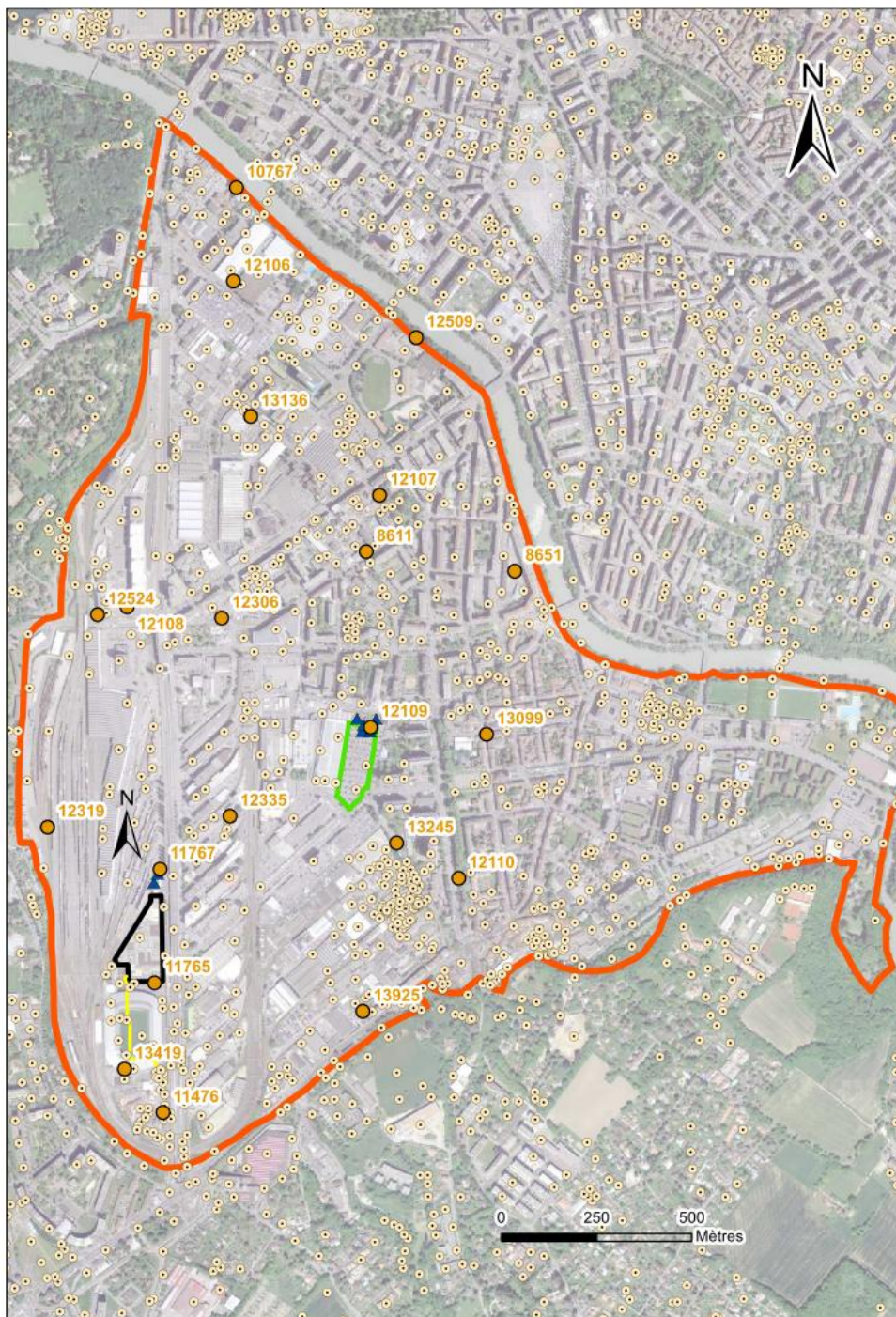


Figure 2 : Localisation des points d'accès à l'aquifère des alluvions de l'Arve surveillés par le GESDEC (Administration en charge des sites et sols pollués du canton de Genève)

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

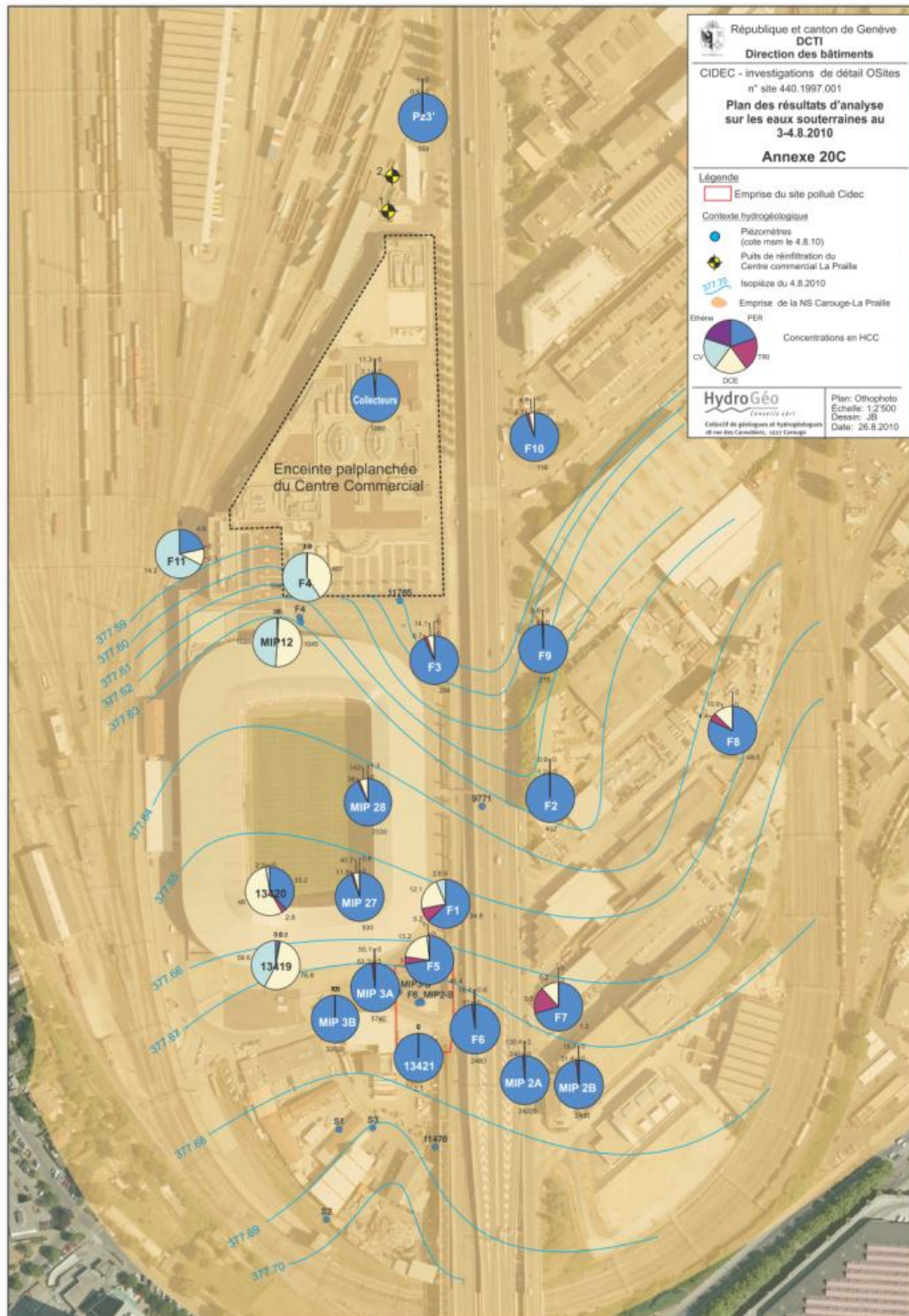


Figure 3 : Mesure de la concentration en différents produits Chlorés au niveau des ouvrages donnant accès à l'aquifère et suivis par le GESDEC

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Pour comprendre le comportement des contaminants, il faut tout d'abord comprendre le fonctionnement de l'aquifère ; il faut le partitionner en systèmes d'écoulement.

Pour ce faire, nous utilisons les informations portant sur les mesures de niveau d'eau disponibles sur les ouvrages suivis par le GESDEC. Mais pas seulement ; en divers secteurs du magasin aquifère nous disposons d'ouvrages qui réinjectent de l'eau dans l'aquifère, ce qui permet d'estimer la valeur du potentiel hydraulique dans ces secteurs, par l'utilisation de solutions analytiques de type de celles qui utilisent la formule de Theis par exemple. De plus, sur certains ouvrages, nous disposons de tests permettant d'accéder à la conductivité hydraulique à saturation. Même si le domaine d'étude a été défini, son extension en profondeur n'a pu être reconnue qu'au moyen des différents logs disponibles sur les ouvrages suivis par le GESDEC et dans la base de données du sous-sol du canton de Genève.

Plusieurs cartes ont été produites. Celle qui correspond à la position du substratum (**figure 4**), celle complémentaire qui correspond à l'épaisseur du magasin aquifère (**figure 5**). Le substratum tel que le visualise la **figure 4** n'est pas régulier ; il présente un aspect chenalisé complexe et pour lequel il est difficile de trouver une structure d'ensemble. L'épaisseur du magasin aquifère présente une grande variabilité ; de moins de 27 centimètres à plus de 7 mètres et cela sans structure apparente. C'est dans ce magasin aquifère d'épaisseur variable que s'effectue l'écoulement.

Cet écoulement est représenté par une carte piézométrique à la **figure 6**.. Des lignes de courant y figurent également. A partir de ces lignes équipotentielles et de ces lignes de courant, les systèmes d'écoulement qui partitionnent cet aquifère ont pu être discriminés (**figure 7**).

Il est possible de distinguer cinq systèmes d'écoulement. Deux sont liés à une réalimentation : le Centre commercial MIGROS et les deux puits de réinjection au niveau de la station TAMOIL au Nord du Centre commercial de la Praille.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Les eaux sont récupérées au niveau des toitures et des parking du centre commercial MIGroS et elles sont réinjectées dans le magasin aquifère. Cette réinjection constitue l'aire d'alimentation d'un système d'écoulement dont l'exutoire se situe au Nord, au niveau de l'Arve.

Les deux puits de réinjection de la station TAMOIL, au Nord du centre commercial de la Praille, constituent l'alimentation d'un système d'écoulement dont l'exutoire se trouve plus au Nord, au niveau de l'Arve.

Entre ces deux systèmes d'écoulement, nous disposons d'un système d'écoulement dont l'aire d'alimentation se situe au Sud du domaine d'étude, au niveau d'une zone de forts potentiels (supérieurs à $H = 378.5$ m) et dont l'exutoire se situe au Nord au niveau de l'Arve. Cette zone à forts potentiels est aussi l'aire d'alimentation du système d'écoulement le plus à l'Est du domaine d'étude, sur le secteur de Carouge. Là encore, l'exutoire du système d'écoulement est au niveau de l'Arve.

Le cinquième et dernier système d'écoulement se trouve tout à l'Ouest du domaine d'étude. L'aire d'alimentation est formée par le secteur à forts potentiels que l'on trouve au Sud ($H > 381.5$ m) et l'exutoire se situe au niveau de l'Arve au Nord.

Il est toutefois un système d'écoulement que la carte piézométrique ne peut pas représenter car cette carte ne présente que la surface libre de l'aquifère. En profondeur, au niveau du centre commercial e la Praille, les lignes de courant convergent vers l'intérieur du Centre commercial dans la mesure où il existe des pompes qui récupèrent l'eau qui transite par les palplanches qui enserrant le Centre commercial. Dès lors, le centre commercial constitue un exutoire à un système d'écoulement dont l'aire d'alimentation est identique au système d'écoulement qui se situe le plus à l'Ouest.

Cet aquifère peut être partitionné en six systèmes d'écoulement dont le bilan de masse, en terme de flux, peut se présenter de la manière suivante.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Les flux qui transitent dans le système d'écoulement dont le parking du centre commercial MIGROS est l'aire d'alimentation correspondent simplement à ce qui est récupéré, soit $57 \text{ m}^3/\text{j}$ en moyenne ; c'est ce flux qui arrive au Nord dans l'Arve. Le bilan de masse portant sur le système dont l'aire d'alimentation est le centre commercial de la Praille correspond à un flux de l'ordre de $98 \text{ m}^3/\text{j}$ à $132 \text{ m}^3/\text{j}$, selon la valeur de conductivité hydraulique que l'on attribue aux terrains qui se situent dans ce système d'écoulement. Cette valeur, calculée à partir du gradient, d'estimations de la conductivité hydraulique et de l'épaisseur moyenne de l'aquifère est semblable à ce qui est injecté aux niveau des puits de la station TAMOIL et qui ne sont que les points de rejet de ce qui est récupéré sous le centre commercial de la Praille. Le système d'écoulement situé le plus à l'Ouest laisse transiter un flux qui est de $1'205 \text{ m}^3/\text{j}$ entre son aire d'alimentation au Sud et son exutoire au niveau de l'Arve. Le système d'écoulement le plus à l'Est laisse transiter un flux de faible valeur : $9 \text{ m}^3/\text{j}$. Enfin, le système d'écoulement central laisse transiter un flux que l'on peut estimer à $441 \text{ m}^3/\text{j}$.

Ces systèmes d'écoulement reconnus, il est possible de rendre compte du comportement d'un contaminant. Tout contaminant ayant sa source dans un système d'écoulement se transférera dans ce système d'écoulement. Dès lors, connaissant la localisation de la source de contamination, il est possible de suivre le cheminement du contaminant en le superposant à la géométrie du système d'écoulement . les différentes cibles se trouvant dans ce système sont potentiellement impactées et l'exhaure de la contamination correspond à l'exutoire du système d'écoulement.

Si l'on prend en considération une contamination en provenance du CIDEDEC (**figure 7**), alors elle se propagera dans le système d'écoulement le plus à l'Ouest en passant sous le stade de Genève et en longeant le centre commercial de la Praille par le Sud et l'Est. Elle poursuivra son cheminement vers le Nord pour atteindre l'Arve. La contamination peut intéresser un deuxième système d'écoulement. Du fait du pompage sous le centre commercial de la Praille lié au

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

manque d'étanchéité de la paroi qui enserre le centre commercial, le système d'écoulement dont l'exutoire est constitué par le pompage sous le centre commercial est atteint. Dès lors, un troisième et dernier système d'écoulement serait intéressé par une contamination en provenance du CIDEC. L'eau en provenance du pompage sous le centre commerciale de la Praille, exutoire d'un système d'écoulement devient l'alimentation du système d'écoulement du fait de la réinjection au niveau des deux puits au droit de la station TAMOIL. Dès lors, le contaminant, injecté au niveau de l'aire d'alimentation, se propagera dans l'ensemble du système d'écoulement pour atteindre, potentiellement, au Nord l'Arve, exutoire du système et exhaurer de la contamination. Il s'agit à minima de trois systèmes d'écoulement qui sont atteints par une contamination en provenance du CIDEC.

L'interprétation sur le transport de contaminant n'est toutefois pas parfaite. Un contaminant qui se transporte dans le flux d'eau obéit, en régime conservatif, à deux phénomènes principaux, l'advection et la dispersion cinématique (la diffusion moléculaire n'est pas un phénomène majoritaire dans le cas de l'aquifère de la Praille, aussi il ne sera pas pris en considération). Quand on s'intéresse au cheminement d'un contaminant par le biais des systèmes d'écoulement, en prenant en considération les lignes de courant, alors seul le phénomène d'advection est pris en considération, le phénomène de dispersion est négligé. Ce dernier phénomène est responsable, entre autre, de l'étalement latéral de la contamination. Il s'en suit que, en superposition du panache de contamination dû à la seule advection on dispose d'un étalement dû à la dispersion. De ce fait, le panache de contamination peut dépasser les limites d'un système d'écoulement et se propager, dans une certaine mesure dans un autre système d'écoulement.

Cette limite de l'étude « manuelle » du transfert de masse ne peut se résoudre que par le biais d'une modélisation plus poussée à base de résolution de l'équation qui régit les phénomènes de transport de masse en solution.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Il existe une autre limitation à cette étude « manuelle », En effet le comportement du contaminant n'est ici vu que d'un point de vue qualitatif, ce qui est déjà, en soi, un excellent résultat. Si l'on veut disposer, en plus, d'une approche quantitative, il est nécessaire de procéder à une modélisation plus poussée à base de résolution de l'équation qui régit les phénomènes de transport de masse en solution.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution



Figure 4 : Altitude du substratum, mur des alluvions de l'Arve (en m au dessus du niveau de la mer)

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

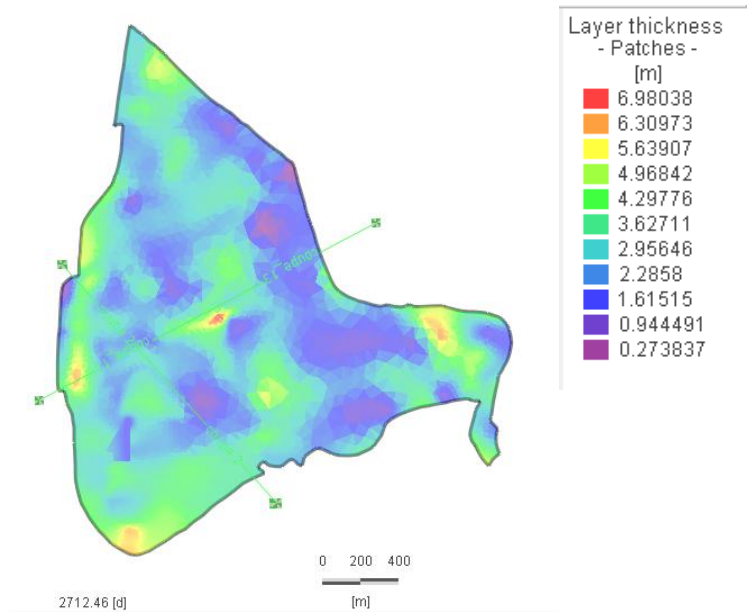


Figure 5 : Epaisseur (ou puissance) du magasin aquifère constitué par les alluvions de l'Arve (4 dans la nomenclature genevoise)

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

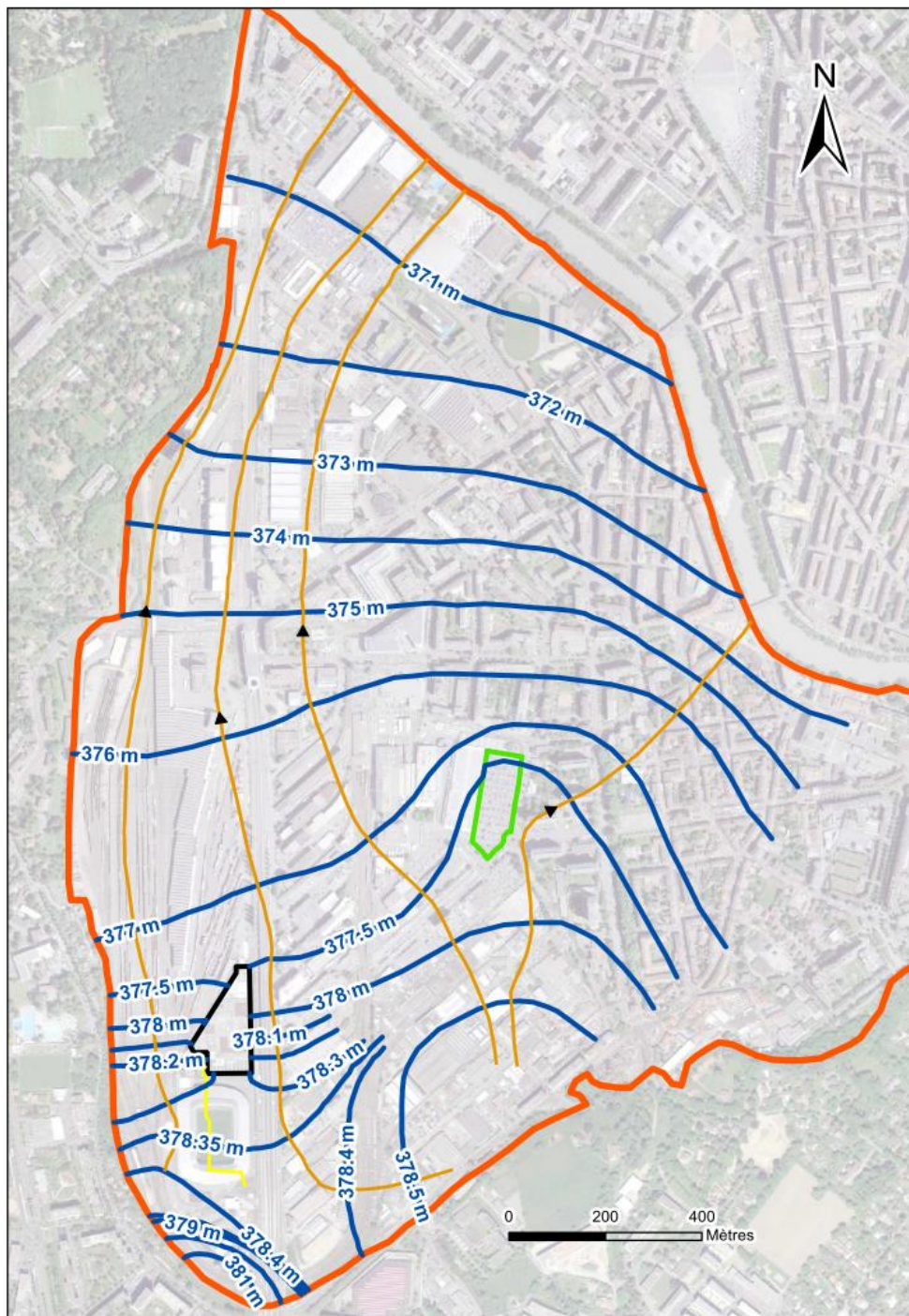


Figure 6 : Carte piézométrique et lignes de courant issues de cette carte piézométrique

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

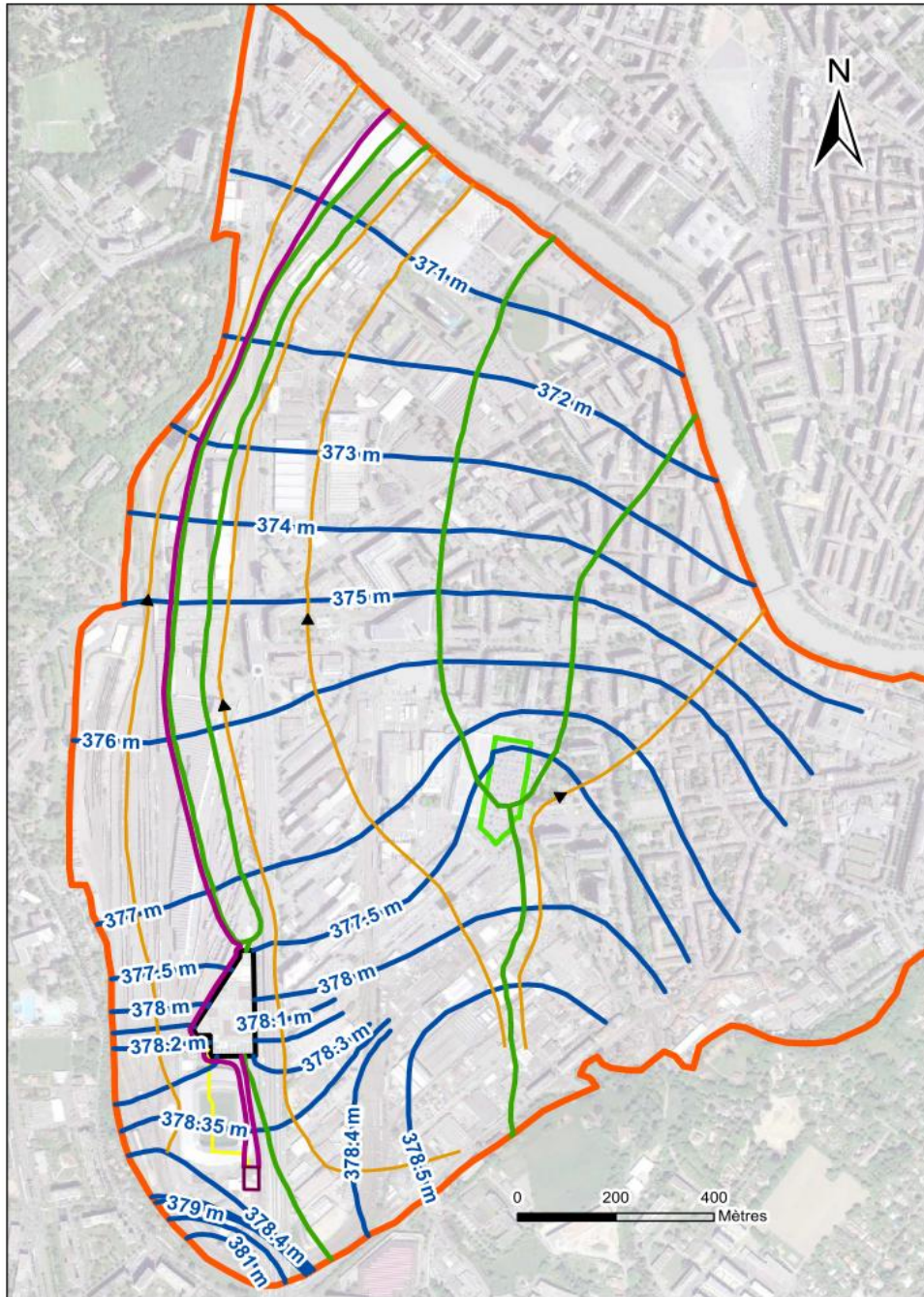


Figure 7 : Les différents systèmes d'écoulement (limite des systèmes en vert sur la carte) qui partitionnent l'aquifère des alluvions de l'Arve dans la partie Ouest : secteur Praille, et propagation d'un contaminant en provenance du CIDEC

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

5.2.2 Processus de modélisation utilisant une approche analytique pour résoudre le problème du transfert de masse en solution

Exemple 1 . cas théorique

A l'aval hydraulique d'un site contaminé, la charge a été évaluée au moyen des informations suivantes :

1. La conductivité hydraulique est de $K = 5.0 \cdot 10^{-4}$ m/s,
2. Le gradient hydraulique est de : grad H = $1.77 \cdot 10^{-3}$ m/m,
3. La section à travers laquelle transite la contamination est de L = 50 m sur l = 1 m, soit S = 50 m²,
4. La concentration moyenne sur cette section est de C = 1 kg/m³, soit 1 g/l.

Dans ces conditions la charge qui transite à l'aval du site contaminé est de $Q_c = 3.82$ kg/j.

Le contaminant est conservatif ; il ne se dégrade pas, ni se retarde.

A partir de cette charge, on se propose d'évaluer la concentration à l'aval hydraulique, c'est-à-dire, cartographier le panache de contamination afin de montrer la concentration qui pourrait exister en une cible située à l'aval hydraulique, ou évaluer en tout point à l'aval hydraulique une valeur de concentration.

La solution utilisée est une solution analytique. Il s'agit d'une solution 3D élaborée par P.A. Domenico (in. P.A. Domenico et F.W. Schwartz : Physical and Chemical Hydrogeology, P.649) et écrite dans le logiciel WxMaxima (version 5.25).

Les résultats se présentent, dans le cas précis qui nous intéresse, sous la forme de 4 figures.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

La première figure (**Figure 8**) représente l'évolution de la concentration [g/l] dans l'axe du panache, au niveau de la surface libre, depuis la section où la charge a été calculée jusqu'à 150 m à l'aval hydraulique.

La deuxième figure (**Figure 9**) correspond au panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, au niveau de la surface libre.

La troisième figure (**Figure 10**) correspond au panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, coupe passant par l'axe du panache.

La quatrième figure (**Figure 11**) correspond au panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, à une distance de 250 m à l'aval hydraulique de la section.

De plus, au moyen de cette solution analytique, il est possible de connaître en tout point la valeur de la concentration issue de la charge à l'amont hydraulique. Par exemple, la valeur de la concentration à 250 m à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, à une dizaine de mètres de l'axe du panache et 10 m sous la surface libre est de $C = 12 \text{ mg/l}$.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

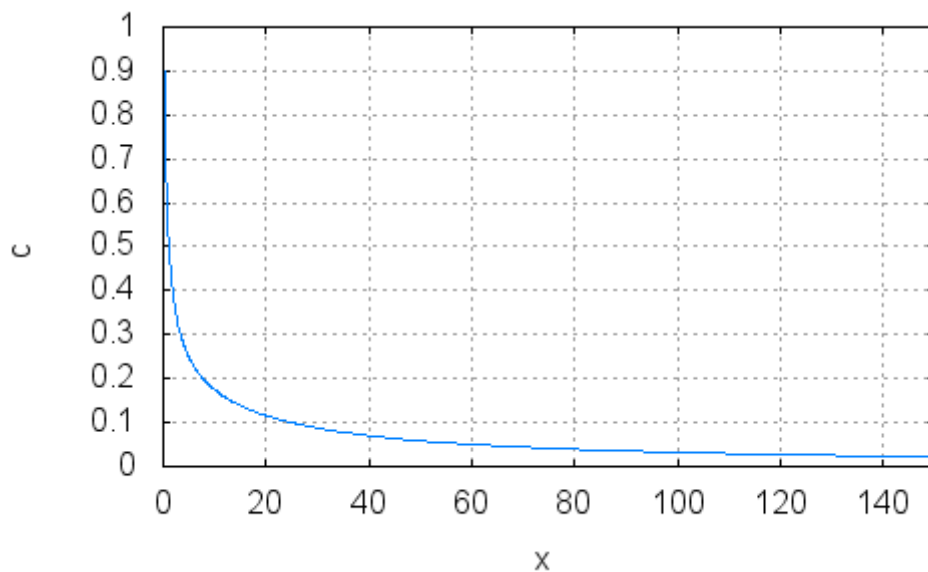


Figure 8 : Evolution de la concentration [g/l] depuis la section où la charge a été calculée jusqu'à 150 m à l'aval hydraulique

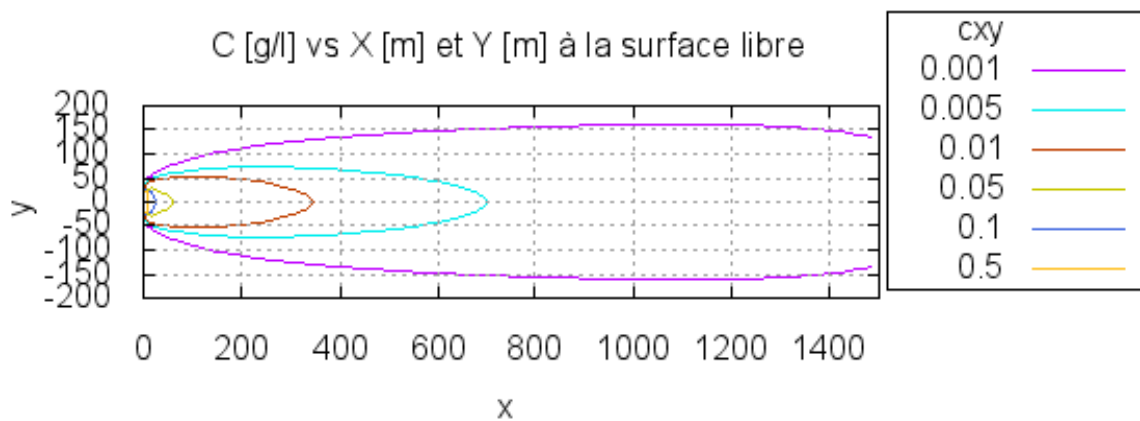


Figure 9 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, au niveau de la surface libre

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

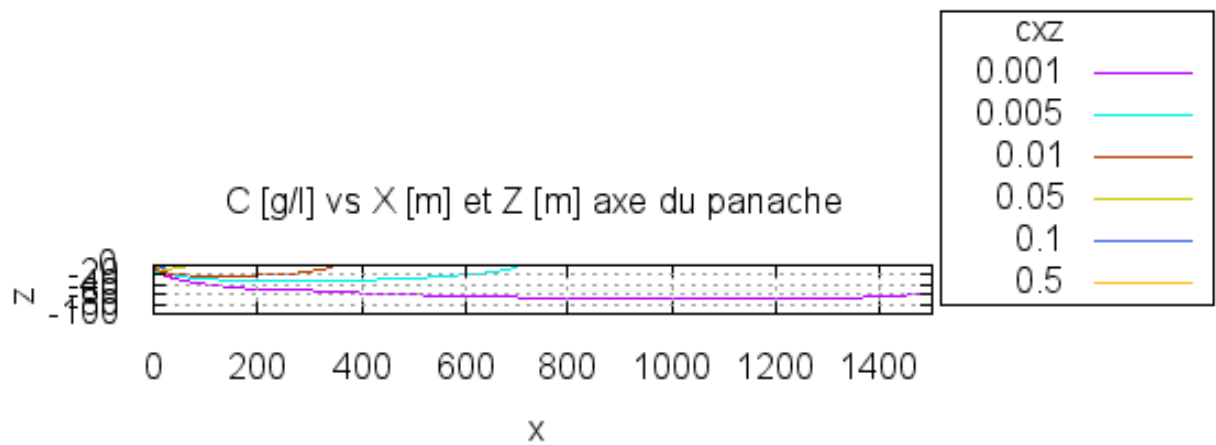


Figure 10 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, coupe passant par l'axe du panache

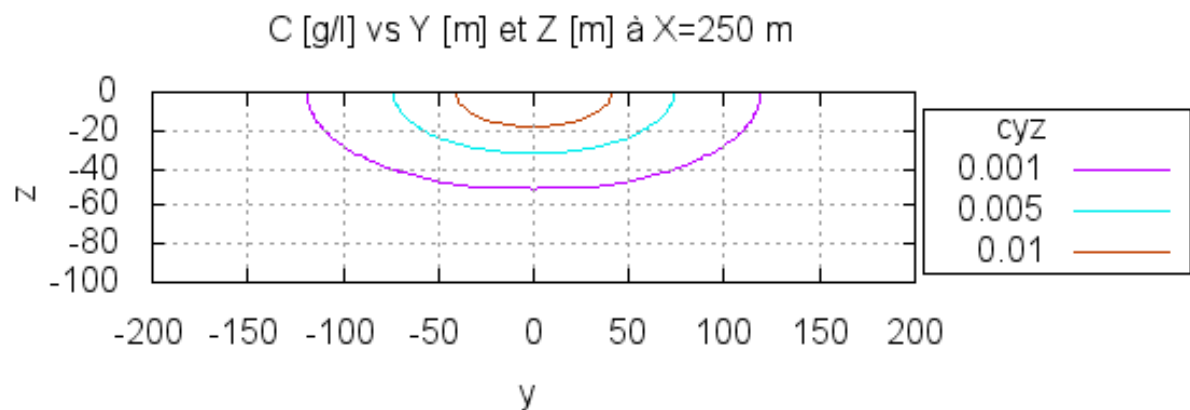


Figure 11 : Panache de contamination (concentration exprimée en g/l) à l'aval hydraulique de la section sur laquelle la charge a été calculée, à une distance de 250 m à l'aval hydraulique de la section

Exemple 2 : Aquifère de la Praille (Canton de Genève) et devenir des contaminants en provenance d'un ancien abattoir utilisant des produits chlorés (CIDEDEC). Solution analytique en trois dimensions

A l'aval hydraulique immédiat du CIDEDEC, le flux massique, la charge, mesurée en Juillet 2008 en PCE a été estimée à $Q_c = 0.137$ kg/an. La section qui inté-

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

resse cette charge est de 30 m de longueur sur une épaisseur d'aquifère de 3.375 m.

On se propose de rendre compte du comportement du PCE à l'aval hydraulique du site contaminé en calculant le champ de concentration au moyen d'une solution analytique de l'équation régissant le transfert de masse en solution.

On supposera que dans les conditions physico-chimiques du moment, le PCE peut être assimilé à une molécule conservative ; on ne tient pas compte d'une éventuelle adsorption ou d'une éventuelle dégradation. Ce cas est pessimiste dans la mesure où le panache résultant est celui qui va le plus loin à l'aval hydraulique.

On travaillera en concentration relative ; dans l'exemple que nous présentons, pour retrouver les valeurs de la concentration exprimée en $\mu\text{g/l}$ il faudra multiplier les valeurs de concentration relative par un facteur correcteur qui ici est de $7.0 \cdot 10^{-5}$.

L'expression des résultats se fera par l'intermédiaire de 4 figures.

La première (**figure 12**) fournit l'extension, en plan, du panache de contamination depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé).

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

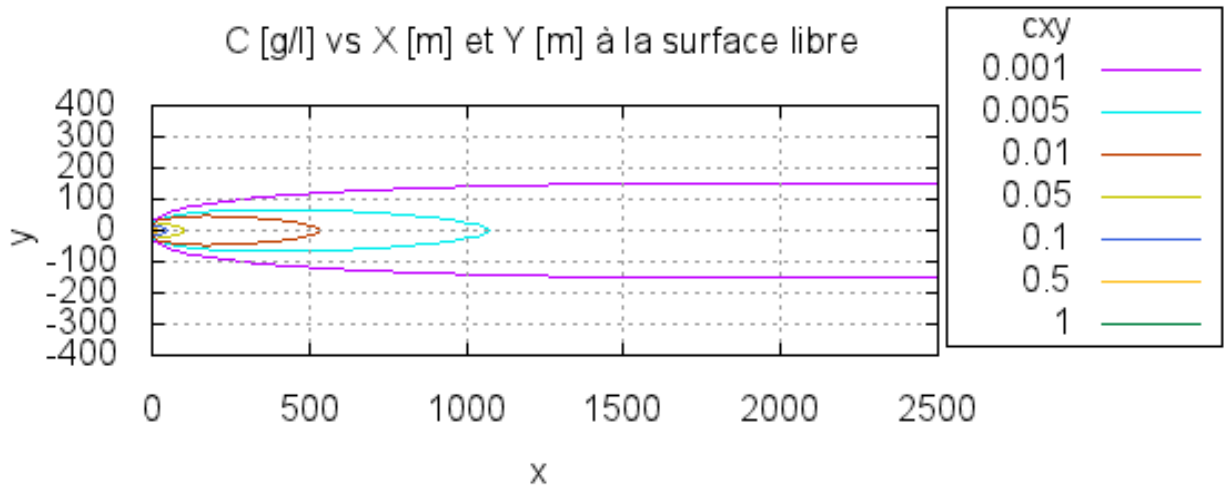


Figure 12 : Evolution du panache de contamination depuis l’aval hydraulique immédiat du CIDEC jusqu’à l’Arve, exutoire du système d’écoulement

Dans les conditions de mise en œuvre de cette solution analytique, le panache de contamination atteindrait l’Arve, exutoire du système d’écoulement qui porte le site contaminé. Au niveau de cet exutoire, la largeur du panache, à la concentration relative de coupure de $C/C_0 = 0.001$ (1/1’000^{ième} de la concentration relative au droit de la section où la charge est mesurée) est de l’ordre de 300 m. La concentration relative au niveau de l’exutoire serait de l’ordre de $C/C_0 = 0.001$. La valeur de concentration en PCE correspondant à cette concentration relative serait de $C = 7.0 \cdot 10^{-8} \mu\text{g/l}$; à cette concentration, le PCE n’est même pas décelable.

La **figure 13** est un graphe de la variation de la concentration relative depuis l’aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu’à l’Arve, exutoire du système, au centre du panache.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

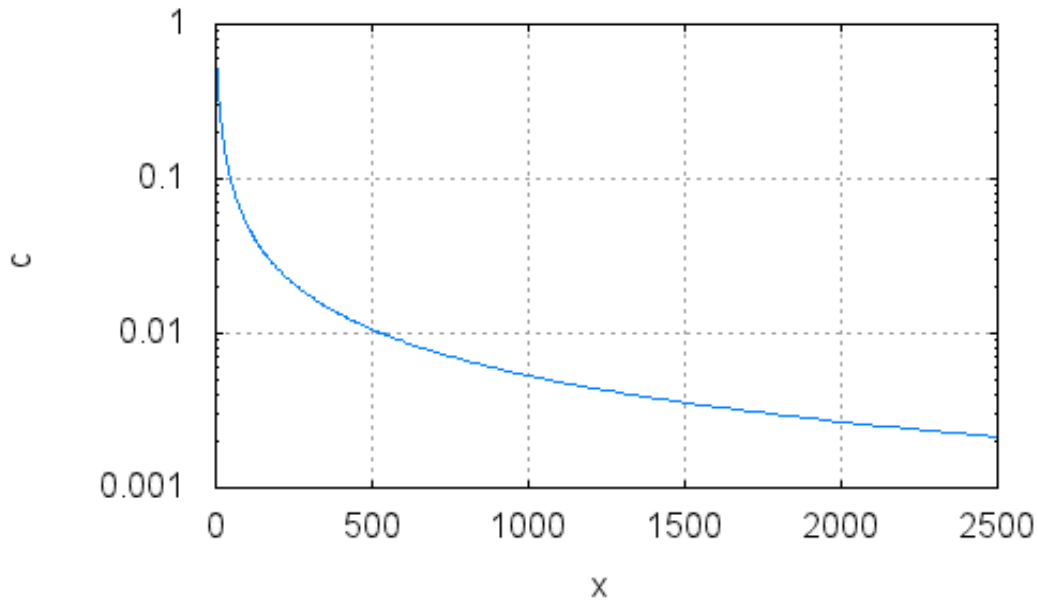


Figure 13 : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à l'Arve, exutoire du système d'écoulement, au centre du panache

Il est possible de préciser la concentration relative maximum attendue au niveau de l'Arve ; elle atteint $C/C_0 = 0.002$, soit une concentration en PCE de $C = 1.4 \cdot 10^{-7} \mu\text{g/l}$, valeur non détectable. On note la décroissance rapide de la concentration relative qui n'est plus que de $C/C_0 = 0.01$, 500 m à l'aval hydraulique du site contaminé. La valeur estimée maximum en PCE serait alors, en ce point de $C = 7.0 \cdot 10^{-7} \mu\text{g/l}$, valeur qui n'est pas détectable.

La **figure 14** présente un graphe d'évolution de la concentration relative sur 250 m à l'aval hydraulique du site contaminé, soit le dixième du parcours pour atteindre l'exutoire. Au bout de la courbe d'évolution on se situerait juste en limite du stade, au Nord.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

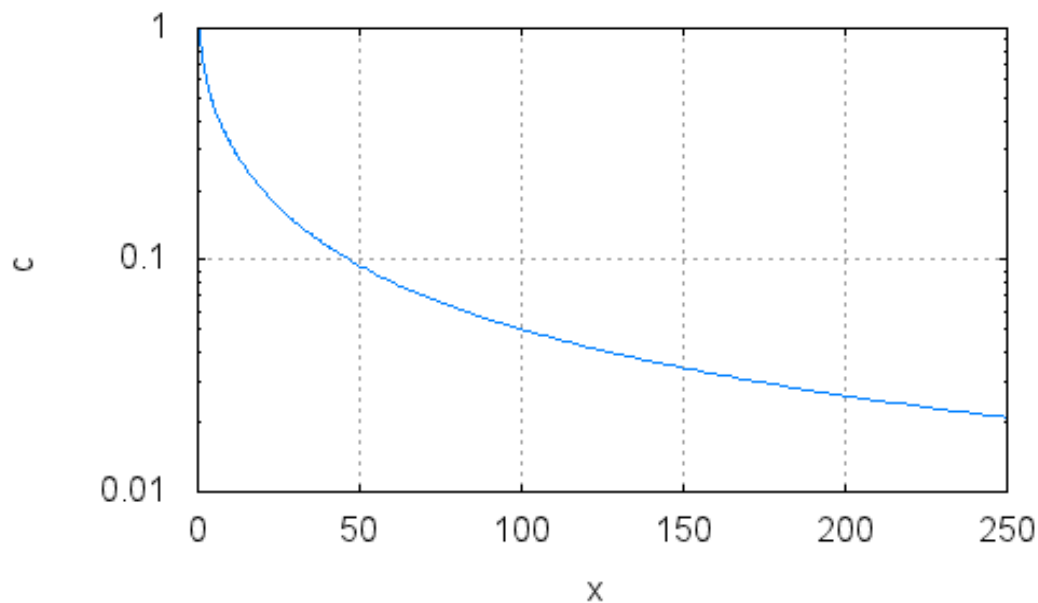


Figure 14 : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à 250 m (limite Nord du stade de Genève)

La concentration relative maximum décroît rapidement. Elle est de $C/C_0 = 0.02$, soit une concentration en PCE de $C = 1.4 \cdot 10^{-6} \mu\text{g/l}$, valeur non détectable. A 50 m à l'aval hydraulique, la concentration relative est de $C/C_0 = 0.1$, 500 m. La valeur estimée maximum en PCE serait alors, en ce point de $C = 7.0 \cdot 10^{-6} \mu\text{g/l}$, valeur qui n'est pas détectable.

Enfin, la **figure 15** présente l'évolution de la concentration relative dans les 25 premiers mètres à l'aval hydraulique du site contaminé. La concentration relative maximum décroît tout aussi rapidement que sur les deux figures précédentes. Elle est de l'ordre de $C/C_0 = 0.2$, soit une concentration en PCE de $C = 1.4 \cdot 10^{-5} \mu\text{g/l}$, valeur non détectable.

Le principal résultat qui ressort de cette analyse est que, au vu de la charge existante à l'aval hydraulique immédiat du site contaminé, telle que déterminée en Juillet 2008, alors le PCE ne serait plus détectable à l'aval hydraulique de ce site et cela dès son aval hydraulique immédiat.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

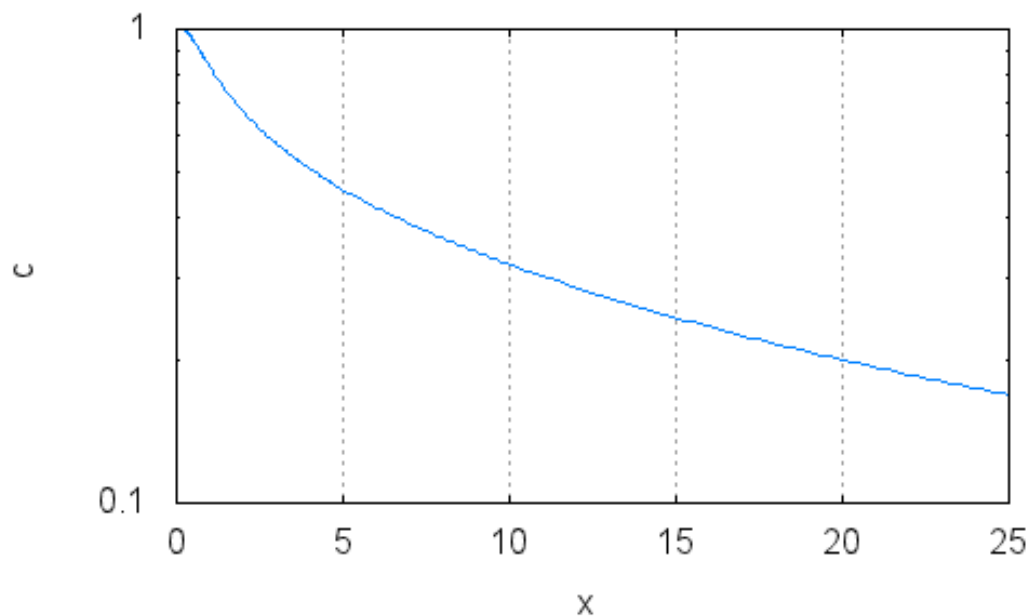


Figure 15 : : Evolution de la concentration relative, depuis l'aval hydraulique immédiat du site contaminé jusqu'à 25 m (vision proche du site contaminé)

5.2.3 Approche utilisant la simulation numérique du transfert de masse en solution

Exemple 1 : Cas théorique de la propagation d'un contaminant dont la source est matérialisée par une charge à l'aval hydraulique d'un site contaminé

Il s'agit d'un cas considérant le devenir d'une contamination à l'aval hydraulique d'un site contaminé dont la solution d'assainissement est arrivée à terme. Juste à l'aval hydraulique du site, on dispose d'une charge et à partir de cette charge, on regarde le devenir de la contamination.

Dès lors que l'on cherche à rendre compte du comportement d'une contamination issue d'un site contaminé à l'aval hydraulique, on présuppose qu'il existe une cible (ou plusieurs) ou un bien à protéger. Cette cible ou ce bien à protéger

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

peut être un captage d'eau potable, un cours d'eau, etc. Comment pourrait intervenir la charge et sa mesure dans un tel contexte ?

Hypothèse de départ : sur un site contaminé, la limite de la technique de réhabilitation employée est atteinte. Il subsiste une quantité de matière à l'intérieur du site qui transite dans le flux d'eau et qui sort du site.

La mesure de la charge à l'aval immédiat du site contaminée correspond à un terme source. La mesure de cette charge présente l'avantage qu'il n'est pas besoin de connaître la concentration sur le site contaminé.

A partir de ce terme source à l'aval hydraulique, il est possible de prévoir, au moyen de l'outil numérique de simulation des écoulements et du transfert de masse en solution, la concentration en tout point à l'aval hydraulique du terme source. En particulier aux cibles répertoriées. La connaissance d'une concentration aux différentes cibles permet la prise de décision quant au devenir : des cibles (que fait-on au niveau des cibles, etc.), de la poursuite à donner à l'assainissement, etc.

Pour illustrer notre propos, un modèle numérique 3D en zone saturée de l'écoulement et du transfert de masse en régime transitoire en solution a été élaboré. Il s'agit d'un domaine d'étude de dimension 2000 m X 2000 m qui contient un aquifère de 30 m de puissance.

A l'aval immédiat d'un site contaminé, une section perpendiculaire à l'écoulement de dimension de 100 m X 29.64 m est prise en considération (la puissance de l'aquifère correspondant à la position de la surface libre en cet endroit est de 29.64 m) (voir **Figure 16**). Le flux de Darcy est de $q = 0.1632$ m/j. La concentration mesurée est de $C = 1$ mg/l. Dans ces conditions, le flux massique Q_C qui correspond à la charge, est de $Q_C = 483$ g/j.

Il est possible avec cette seule donnée de charge de « prévoir » le comportement de la contamination issue du site contaminé (voir **Figure 17**). Dès lors qu'une cible, ou un bien à protéger, se situe dans ce panache, alors il est pos-

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

sible d'y mesurer une concentration et, en fonction de celle-ci, de prendre les mesures nécessaires pour le protéger. Un des principaux intérêts, c'est, qu'à partir d'une donnée sur la charge, il est possible de fournir une information sur la concentration, grandeur reconnue.

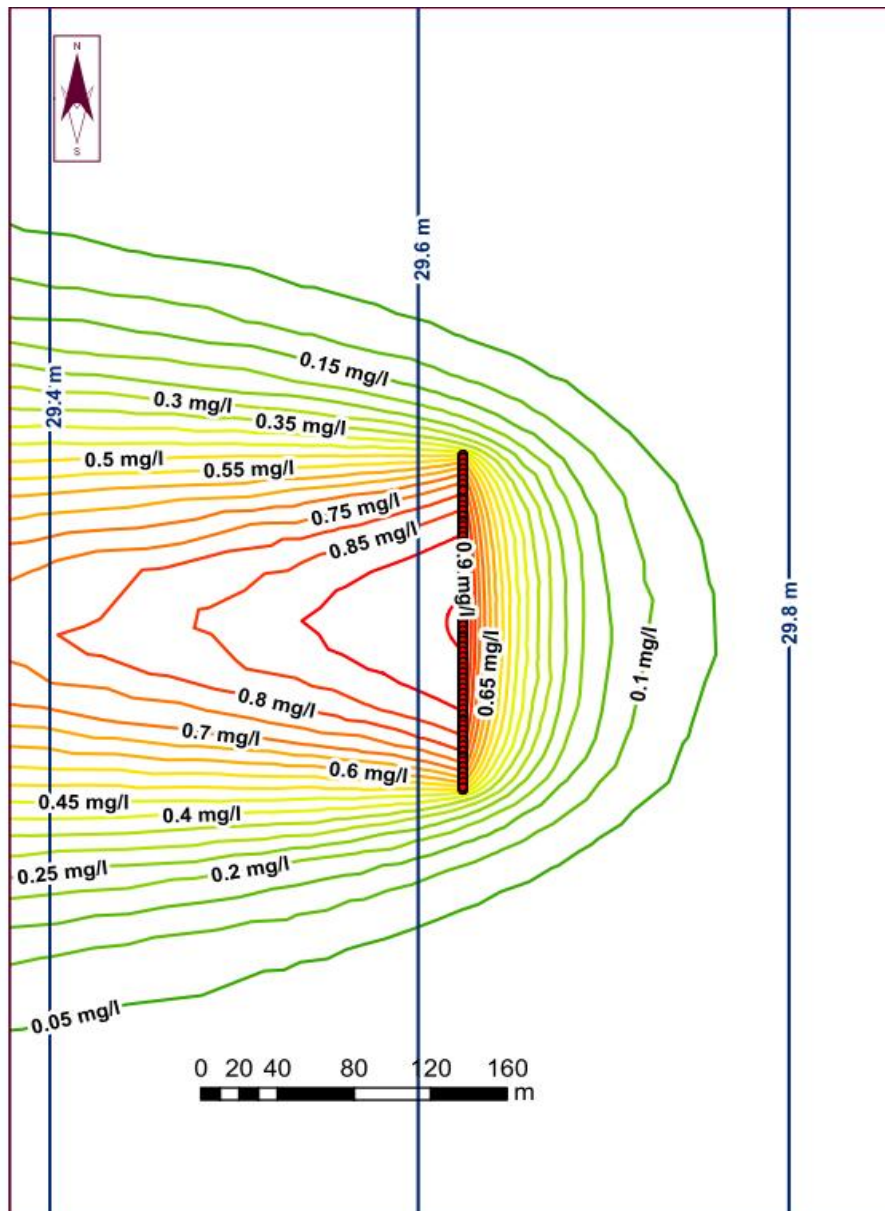


Figure 16 : Modèle théorique - Section sur laquelle la charge a été mesurée (483 g/j) et panache de contamination résultant de ce terme source

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

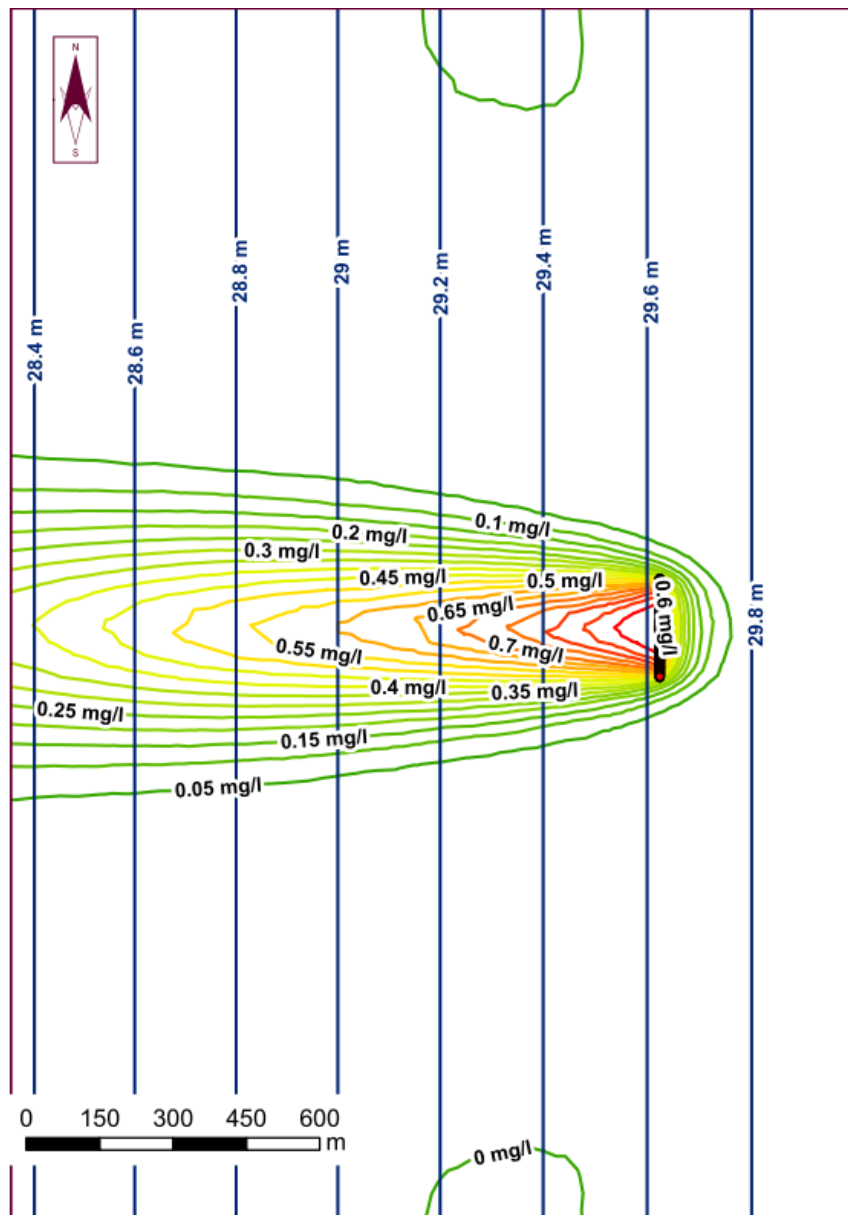


Figure 17 : Modèle théorique – Panache de contamination à l'aval hydraulique du terme source considéré comme une section sur laquelle la charge a été mesurée

Exemple 2 : Aquifère de la Praille (Canton de Genève) et devenir des contaminants en provenance d'un ancien abattoir utilisant des produits chlorés (CIDEK).

Dans ce processus de modélisation, le domaine d'étude est celui du magasin aquifère des alluvions de l'Arve.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Les physiques que nous prenons en considération sont tout d'abord celle qui s'occupe de l'écoulement en zone variablement saturée, l'équation de Richards, et, ensuite, celle qui s'occupe du transfert de masse, l'équation d'advection-diffusion. Pour résoudre ces deux équations, nous n'utiliserons pas une méthode analytique mais nous optons pour une résolution numérique. La méthode de résolution numérique utilisée est celle des éléments finis.

Dans l'espace tridimensionnel tel que celui du magasin aquifère des alluvions de l'Arve, nous résolvons l'équation de Richards et nous obtenons un champ de potentiel hydraulique (**figure 18**). A ce champ de potentiels hydrauliques nous avons ajouté des lignes de courant qui partent des deux ouvrages d'injection au niveau de la station TAMOIL au Nord du centre commercial de la Praille et des lignes de courant qui proviennent de la réinjection sous le centre commercial MIGROS des eaux issues de la récupération sur toutes les parties étanches du centre commercial. Enfin, à ces deux représentations de l'écoulement, nous en avons ajouté une troisième, celle qui limite la zone saturée de la zone non saturée : l'isoligne de pression nulle. La partie saturée représente l'aquifère qui est limitée par une surface libre, là où la pression est nulle.

L'analyse des informations portées sur cette carte permet de définir l'aquifère et dans cet aquifère la partition en systèmes d'écoulement. Le magasin aquifère de la Praille peut se diviser en deux parties : une partie à l'Est, coté Carouge, quasi toujours non saturée et une partie à l'Ouest, sur le secteur Praille, quasi toujours saturée. On notera que la limite se situe approximativement là où on a l'habitude d'arrêter l'aquifère des alluvions de l'Arve. Dans la partie aquifère, dans le secteur de la Praille, on note toutefois un secteur, depuis le centre commercial MIGROS jusqu'à l'Arve qui est non saturé. Ce secteur correspond à une remontée du substratum.

Dans cet aquifère bien défini par sa surface libre, on distingue les mêmes systèmes d'écoulement tels qu'ils ont été définis plus haut (**Cf. paragraphe 5.2.1. Exemple 2**).

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Sur cet écoulement dont on rend compte avec l'équation de Richard, nous résolvons un problème de transfert de masse en solution.

Pour ce faire, à la limite hydraulique aval immédiat du site du CIDEC, nous avons introduit une charge unitaire. Cette charge unitaire permet la création d'un champ de concentration qui va se déployer dans l'aquifère de la Praille. Le panache de contamination résultant est présenté à la **figure 19**.

Ce panache se déploie dans le système d'écoulement le plus à l'Ouest. Il se déploie également dans le système d'écoulement dont les pompages sous le centre commercial de la Praille sont l'exutoire. On remarque que, du fait de la dispersion cinématique, qui disperse latéralement la contamination, le système d'écoulement central est également touché, mais sur une faible superficie dans sa partie occidentale. Le rejet des eaux contaminées dans les puits d'injection au droit de la station TAMOIL issues du pompage sous le centre commercial de la Praille n'est pas représenté ici, même s'il existe dans la réalité.

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

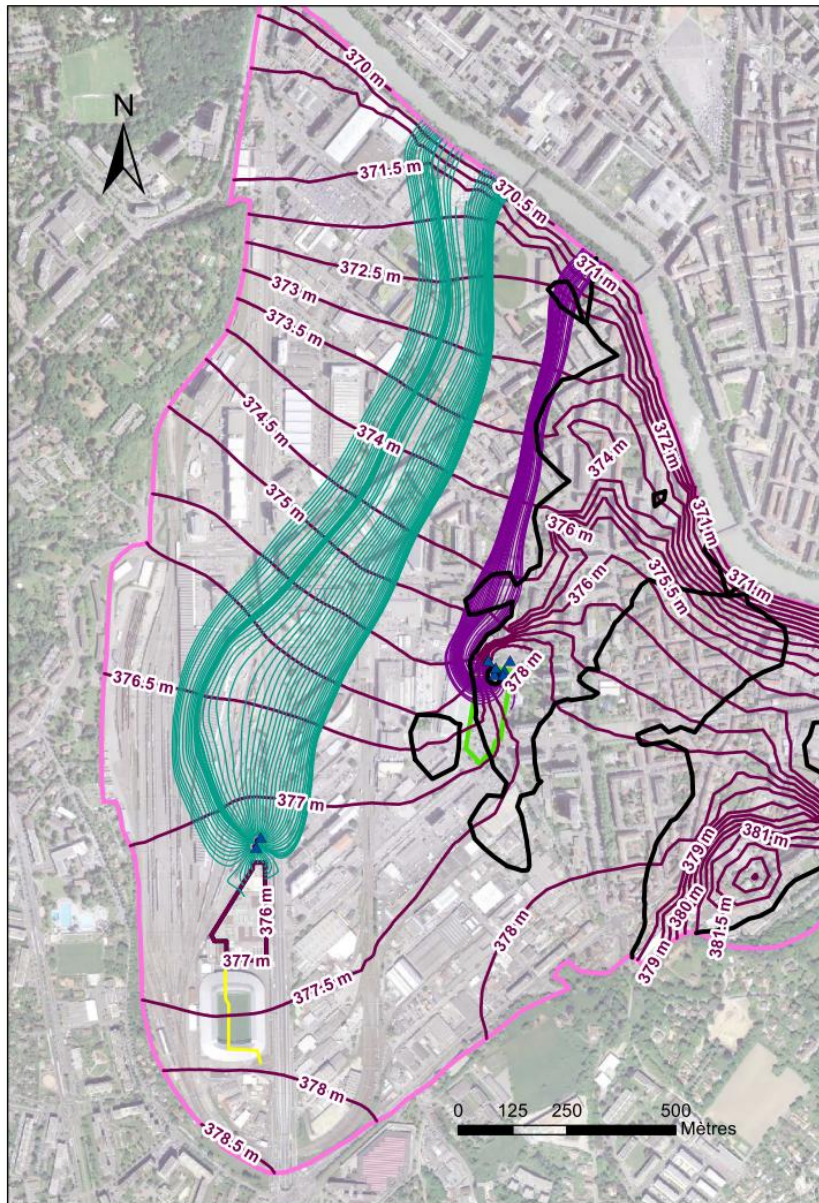


Figure 18 : Ecoulement dans le magasin aquifère de la Praille. On distingue les lignes équipotentiellles (équadistance 0.5 m, en violet) qui constituent la carte piézométrique, les lignes de courants issues des puits de réinjection de la station TAMOIL au Nord du centre commercial de la Praille et les lignes de courant de la réinjection issue des eaux récupérées par le centre commercial MIGROS. La ligne de pression nulle, correspondant à la surface libre de l'aquifère est également représentée (en noir)

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

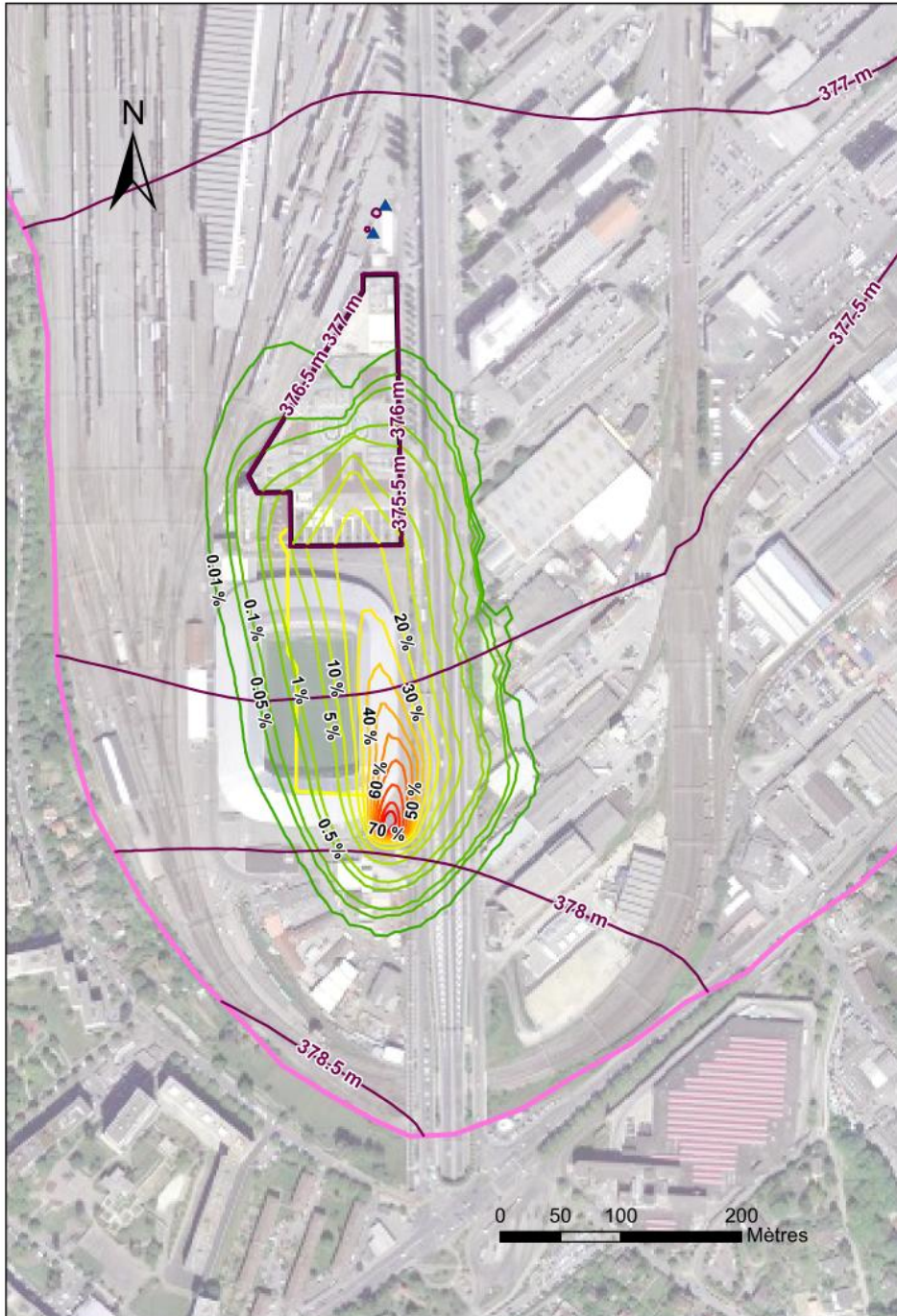


Figure 19 : Panache de contamination issu d'une charge (flux massique) unitaire située juste à l'aval hydraulique immédiat de l'ancien site du CIDEC

ChloroNet - Groupe Charge

6. En guise de conclusion

Charge et processus de modélisation sont liés de différentes manières : dans la nature même de l'élaboration de l'équation qui décrit le transfert de masse de solution, dans le terme source qui sera introduit comme condition aux limites dans le processus de modélisation.

Ce n'est pas la charge mais la concentration qui est utilisée dans la réglementation (Osites) pour rendre compte de l'état de contamination. Le processus de modélisation est le seul outil qui permet le passage de la charge à la concentration (utilisation d'une condition aux limites de flux massique à l'aval immédiat d'un site contaminé) et inversement le passage de la concentration à la charge (par l'établissement d'un bilan de masse). Dès lors, le processus de modélisation présente un intérêt réel.

Les différentes approches de modélisation sont de puissants outils qui permettent de mesurer l'impact d'une contamination en provenance d'un site contaminé et de valider toute action corrective à mettre en œuvre pour une remédiation.

On peut mettre en avant les objectifs suivant en ce qui concerne le processus de modélisation : ce processus peut être utilisé :

- Pour la hiérarchisation des sites et l'individualisation des sources
- Pour la compréhension du devenir des contaminants
- Dans l'évaluation des risques
- Pour l'évaluation de l'urgence et des buts d'assainissement ou pour adapter les buts d'assainissement
- Pour fixer les mesures nécessaires
- Lors de l'évaluation de la réussite de l'assainissement

ChloroNet - Groupe Charge

Charge – Transfert de masse en solution – Modélisation du transfert de masse en solution

Dans le cadre de la réglementation telle qu'elle est décrite dans Osites (état au 1^{er} Aout 2102), le processus de modélisation :

- Peut intervenir au stade de l'étude préliminaire
- Peut intervenir au stade de l'étude de détail
- Peut intervenir au niveau du projet d'assainissement
- Peut intervenir au stade du suivi