
Utilisation de modèles numériques pour simuler les processus d'écoulement et de transport dans les eaux souterraines

Abdelmadjid Chabani* — **Abdelmalek Bekkouche**** — **Yazid Abdelaziz***

* Université de Béchar, Faculté des sciences et de la Technologie, Département de Génie civil. [majdchsah@yahoo.fr](mailto:madjchsah@yahoo.fr), abdelaziz970@yahoo.fr

** Université Aboubakr Belkaïd Tlemcen, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Département de Génie Civil, BP 230 - 13000 Tlemcen, Algérie, a_bekkouche@mail.univ-tlemcen.dz

RESUME: Dans notre travail, nous utiliserons le terme polluant ou contaminant pour désigner toute espèce chimique dissoute transportée par l'eau et accumulée dans les aquifères, avec des concentrations n'atteignant pas nécessairement des niveaux dangereux.

Dans la majorité des cas, ces espèces chimiques ont été introduites dans le sol suite aux activités humaines à la surface du sol. La concentration peut être suffisamment élevée pour rendre l'eau impropre pour certains usages (eau potable ou irrigation).

Les facteurs qui gouvernent la migration des contaminants dans l'eau souterraine peuvent être considérés en termes de processus de transport et processus de retardement

La simulation numérique et l'expérimentation sont deux outils indispensables pour l'étude de l'écoulement de l'eau et du transport des polluants dans les aquifères

ABSTRACT : In our paper, we shall use the term 'pollutant' or 'contaminant' to denote dissolved chemical species which are carried with the water, and accumulate in the aquifers, without inferring that concentration have necessarily reached dangerous levels.

In most cases, these chemical species have been introduced into the subsurface as result of human activities at ground surface. Concentration may be sufficiently high as to render the water unfit for certain usage (e.g., drinking water and irrigation).

The factors which govern the migration of contaminant in groundwater can be considered in terms of transport processes and attenuation processes.

Both numerical simulations and field experiments are indispensable tools for the study of water flow and contaminant transport in aquifers.

MOTS-CLES : Aquifère, contaminant, milieu poreux, convection, dispersion, adsorption, modèle numérique.

KEYWORDS : Aquifer, contaminant, porous medium, Advection, dispersion, adsorption, numerical Model.

1. Introduction

La pollution des eaux souterraines compte parmi les problèmes de l'environnement les plus menaçants et les plus discutés actuellement.

L'intensification des activités industrielles et agricoles, ainsi que la diversification des modes de disposition des sous-produits de production ou des déchets après consommation, comptent parmi les facteurs qui ont favorisé l'augmentation des cas de pollution des eaux souterraines.

La vulnérabilité des nappes d'eau souterraines aux pollutions dépend des conditions hydrogéologiques (hydrodynamiques et hydrodispersifs) du site. En effet, ces conditions hydrodynamiques et hydrodispersifs déterminent la vitesse de circulation de l'eau et par la suite la vitesse d'apparition d'une pollution éventuelle et son temps de séjour dans l'aquifère

La préservation de la qualité de l'eau souterraine est d'autant plus importante que cette ressource lorsque contaminée est difficile à réhabiliter. De plus certains polluants peuvent persister durant des dizaines et même des centaines d'années, du fait des processus d'atténuation (adsorption, dégradation...) limités en milieu aquifère. Aussi la décontamination des eaux souterraines, lorsqu'elle est possible exige des techniques et des coûts souvent inabordables, et l'abandon de l'exploitation de cette eau (polluée) entraîne alors de sévères conséquences économiques et sociales.

Dans ces conditions, la gestion durable de l'eau souterraine doit notamment intégrer la prévention ainsi que la connaissance du devenir des polluants existants ce qui permet concrètement d'éviter ou de limiter les conséquences de toute pollution. La modélisation numérique pour simuler les processus d'écoulement et de transport dans les eaux souterraines est indispensable pour une meilleure gestion de ces ressources qui ont un intérêt économique important. En effet le milieu souterrain est difficile d'accès et le modèle numérique est le seul outil qui permet par simulation de comprendre et de prévoir la propagation des polluants.

Dans les eaux souterraines, la migration (transport) d'un soluté (polluant) est régie par cinq phénomènes physico-chimiques:

La convection, la diffusion moléculaire, la dispersion cinématique, les interactions soluté/matrice correspondant à l'adsorption/désorption et enfin les réactions chimiques et microbiologiques.

2. Modélisation d'écoulement et de transport des contaminants

La modélisation numérique est au cœur des sciences appliquées et joue un rôle fondamental dans presque toutes les disciplines des sciences et du génie. La modélisation ou simulation numérique, consiste à représenter un phénomène physique par un modèle mathématique sous forme de très grands systèmes d'équations (de l'ordre du million) qui sont résolues à l'aide de l'ordinateur.

Les phénomènes d'écoulement et de transport de polluants dans les nappes d'eau souterraines sont un cas particulier des phénomènes d'écoulement et de transport de masse en milieu poreux. Les modèles mathématiques utilisés pour résoudre les problèmes d'écoulement et de transport en milieu poreux sont issus des lois physiques régissant ces phénomènes. Ces lois physiques sont pour l'écoulement la loi de Darcy et l'équation de continuité, et pour le transport de masse, l'équation de convection-dispersion.

2.1. Utilisation

La modélisation est largement utilisée pour:

- Décrire et comprendre les processus régissant la migration des substances chimiques dans les eaux;
- Prévoir l'évolution dans le temps et dans l'espace, en prédisant la distribution des concentrations en polluants à différentes périodes (en utilisant pour cela des bases de données historiques);
- Recommander et orienter le choix en matière de localisation des points d'échantillonnages, mais aussi de fréquence de prélèvements, en particulier en cas de nécessité de mise en place d'un système de suivi de la qualité des milieux;
- Aider à l'interprétation et à l'extrapolation des résultats obtenus sur le terrain ;
- Calculer les concentrations attendues en un point d'exposition, et ce sur la base des scénarios d'exposition élaborés par le site étudié;
- Mais aussi, apprécier l'efficacité d'un système de résorption d'une pollution.

2.2. Les différents types de modèles

Les modèles pour simuler les processus d'écoulement et de transport dans les eaux souterraines sont essentiellement des modèles mathématiques déterministes. Ces modèles nécessitent généralement la résolution d'équations différentielles partielles dont les solutions sont obtenues par méthodes analytiques (solutions exactes) ou par méthodes numériques (solutions approchées)

Les modèles analytiques sont généralement basés sur des hypothèses simplificatrices d'uniformité, d'homogénéité, des propriétés et des structures. Leurs

principaux avantages sont la simplicité des hypothèses, de la mise en œuvre et de l'exécution.

Les modèles numériques peuvent assouplir les conditions trop idéalistes des modèles analytiques, ils permettent de prendre en compte des systèmes hétérogènes plus complexes, ils peuvent ainsi plus réalistes et flexibles pour simuler les conditions réelles.

2.3. Les données nécessaires

La nature des données nécessaires variera selon les modèles retenus. Parmi les informations les plus couramment recherchées pour la modélisation, on retiendra:

- La conductivité hydraulique;
- La porosité de l'aquifère (totale et effective);
- La géométrie et les limites du système aquifère;
- Le gradient et le sens d'écoulements de la nappe;
- Les relations nappes- eaux de surfaces;
- Les conditions de recharge et de sortie du système.

3. Transport des polluants (solutés) dans un aquifère

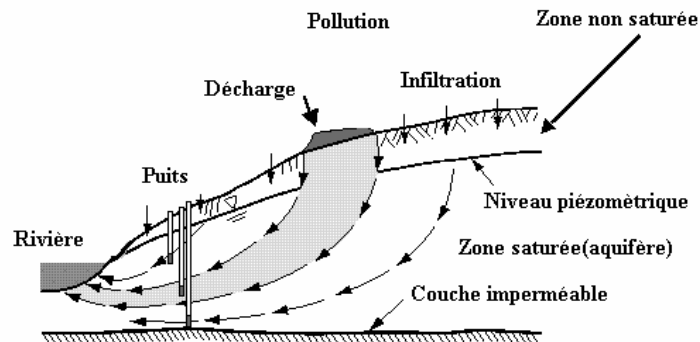


Figure 1. Migration des contaminants depuis la surface jusqu'au point de captage

3.1. Mécanismes de transport

Le transport du soluté dans les aquifères obéit aux phénomènes de convection et de dispersion hydrodynamique. La dispersion hydrodynamique peut être mathématiquement exprimée par la somme de deux processus dispersifs : la dispersion mécanique et la diffusion moléculaire.

3.2. La convection

Dans ce processus on considère que le déplacement du soluté dans le milieu poreux saturé se fait avec un déplacement moyen de la masse d'eau. Pour ce type de transport l'écoulement des particules constituant le soluté dépend strictement de l'écoulement de l'eau et la force motrice pour l'écoulement de ces particules sera celle qui stimule l'écoulement de l'eau.

3.3. La dispersion hydrodynamique

Elle peut être exprimée comme la somme des deux processus dispersifs : la diffusion moléculaire et la dispersion mécanique.

- La diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est un processus microscopique à échelle moléculaire qui résulte d'une agitation (mouvement Brownien) induisant une agitation des molécules du soluté à l'intérieur de la phase liquide; ce processus est indépendant de l'agitation convective de l'eau souterraine et peut être très important pour des vitesses d'écoulement très basses et à proximité de la matrice. On associe à ce processus un coefficient D^* appelé coefficient de diffusion moléculaire.

- La dispersion mécanique

La dispersion mécanique est associée à l'agitation mécanique du soluté, telle agitation est due aux :

- Variations de vitesse dans le milieu poreux saturé.

- Variation de la taille des pores et à la tortuosité, la ramification et l'entrelacement des pores.

- Aux deux processus de transport cités ci dessus il faut ajouter l'existence de l'adsorption qui est un processus qui conduit à l'immobilisation des contaminants.

4. Equations de base

4.1. Equation de l'hydrodynamique souterraine

4.1.1 Notation employée

q : est le vecteur vitesse de Darcy, [LT^{-1}]

μ : viscosité dynamique du fluide, [$ML^{-1}T^{-1}$]

k : est la perméabilité intrinsèque du milieu, [L^2]

p : est la pression, [$ML^{-1}T^{-2}$]

ρ : est la masse volumique du fluide, [ML^{-3}]

g : est l'accélération de la pesanteur, [LT^{-2}]

z : cote du point considéré par rapport au plan horizontal de référence, [L]

$\gamma = \rho g$: poids spécifique de l'eau, [$ML^{-2}T^{-2}$]

$K = \frac{k\rho g}{\mu}$: Conductivité hydraulique, [LT^{-1}]

F : puits ou source

S_0 : coefficient d'emmagasinement

D_{ij} : coefficient de dispersion hydrodynamique, [L^2T^{-1}]

θ : porosité effective

C_s : concentration de la source ou du puits [ML^{-3}]

C_a : concentration du contaminant adsorbé dans le sol [MM^{-1}]

λ : constante de vitesse de réaction de premier ordre [T^{-1}]

r : effets d'adsorption et de réaction chimique [$ML^{-3}T^{-1}$]

Φ : Charge hydraulique

$$\Phi = \frac{P}{\rho g} + z \quad [1]$$

4.1.2. Loi de Darcy

Comme l'énonce la loi de Darcy, la quantité d'eau qui s'écoule à travers un milieu poreux dépend des propriétés de l'eau et de celles du milieu poreux, ainsi que du gradient de charge hydraulique, ce qui peut être formulé de la manière suivante.

$$q = -\frac{k\rho g}{\mu} \nabla \left(\frac{P}{\rho g} + z \right) \quad [2]$$

$$q = -K \text{ grad } \Phi \quad [3]$$

$$K = \frac{\kappa \rho g}{\mu} \quad [4]$$

cas d'un écoulement tridimensionnel et un milieu anisotrope

$$q_x = -K_{xx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - K_{xy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} - K_{xz} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad [5]$$

$$q_y = -K_{yx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - K_{yy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} - K_{yz} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad [6]$$

$$q_z = -K_{zx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - K_{zy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} - K_{zz} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad [7]$$

4.1.3. Equation de continuité

$$\text{div} \mathbf{q} = -S_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} + F \quad [8]$$

4.1.4. Equation de l'hydrodynamique souterraine

A partir de la loi de Darcy et de l'équation de continuité nous obtenons l'équation de l'hydrodynamique souterraine

$$-\left(\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} \right) \pm F \rho = \rho S_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad [9]$$

Lorsque la densité de l'eau reste constante, nous obtenons différentes équations selon la nature du milieu

1. Cas d'un milieu non homogène et anisotrope

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \pm F = S_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad [10]$$

2. Cas d'un milieu isotrope non homogène

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \pm F = S_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad [11]$$

3. Cas d'un milieu homogène et isotrope

$$K \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} \right) \pm F = S_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad [12]$$

4.2. Equation de transport

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \underbrace{\frac{\partial(V_i C)}{\partial x_i}}_{\text{convection}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right]}_{\text{dispersion hydro}} \pm \underbrace{q_s \frac{C_s}{\theta}}_{\text{source et puits}} + \underbrace{r}_{\text{adsorption et réac}} \quad [13]$$

$$V_i = \frac{q_i}{\theta} = \frac{K_{ij}}{\theta} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad [14]$$

$$r = \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_a}{\partial t} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} C_a \right) \quad [15]$$

$$\frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_a}{\partial t} = \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial C_a}{\partial C} \quad [16]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial(V_i C)}{\partial x_i} \pm q_s \frac{C_s}{\theta} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial C_a}{\partial C} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} C_a \right) \quad [17]$$

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial(V_i C)}{\partial x_i} \pm q_s \frac{C_s}{\theta} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial C_a}{\partial C} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} C_a \right) \quad [18]$$

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_a}{\partial C} \quad [19]$$

$$V_i = \frac{q_i}{\theta} = \frac{K_{ij}}{\theta} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \quad [20]$$

5. Résolution des équations

Pour résoudre les équations décrivant l'écoulement des eaux souterraines et le transport des contaminants nous utilisons les méthodes analytiques ou numériques. Les avantages de la méthode analytique, quand il est possible de l'appliquer, sont qu'elle fournit en général une solution exacte.

Beaucoup de solutions analytiques ont été développées pour l'équation de l'écoulement. La courbe type de Theis, communément utilisée représente la solution à de tels modèles analytiques.

Les méthodes analytiques sont également possibles pour résoudre l'équation de transport de soluté (contaminant).

En général, pour obtenir la solution analytique exacte à l'équation différentielle, il faut idéaliser fortement, et peut être de manière irréaliste les, les propriétés et les conditions aux limites du système aquifère.

Pour les problèmes où les modèles analytiques simplifiés sont inadaptés, les équations différentielles aux dérivées partielles sont approchées numériquement.

5.1. Méthode analytique : Cas d'un transport avec une vitesse convective constante V_x

Exemple 1. Equation convection + dispersion, 1D.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V_x \frac{\partial c}{\partial x} \quad [21]$$

Conditions initiales : $C(x,t) = 0$

Condition aux limites : $C(0,t) = C_0$

Il s'agit de l'équation de Ogata-Banks (1961)

La solution de cette équation est

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \cdot \left(\operatorname{erfc} \left[\frac{(x-vt)}{2(Dt)^{1/2}} \right] + \exp \left(\frac{vx}{D} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{(x+vt)}{2(Dt)^{1/2}} \right] \right) \quad [22]$$

En négligeant la diffusion moléculaire la solution devient

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \cdot \left(\operatorname{erfc} \left[\frac{(x-vt)}{2(\alpha_x vt)^{1/2}} \right] \right) \quad [23]$$

Avec :

$$\beta = \frac{x - vt}{2(\alpha_x vt)^{1/2}}$$

Le calcul de C est donné par le tableau suivant

β	Er f(β)	Er fc(β)
0	0	1.0
0.1	0.11246	0.88754
0.2	0.22270	0.77730
0.3	0.32863	0.67137
0.4	0.42839	0.571608
0.5	0.52050	0.47950
0.6	0.60386	0.39614
0.7	0.67780	0.322120
0.8	0.74210	0.25790
0.9	0.79691	0.20309
1.0	0.84270	0.15730
1.1	0.88021	0.11970

1.2	0.91031	0.08969
1.3	0.93401	0.06599
1.4	0.95229	0.04772
1.5	0.96611	0.03390
1.6	0.97635	0.02365
1.7	0.98379	0.01621
1.8	0.98909	0.01091
1.9	0.99279	0.00721
2.0	0.99532	0.00468

Tableau 1. Valeurs pour $Erf(\beta)$ et $Erfc(\beta)$ avec $Erf(\beta)$ fonction d'erreur de β et $Erfc(\beta)$ fonction d'erreur complémentaire de β .

5.2. Modélisation numérique

Dans ce domaine on distingue aujourd'hui on utilise trois importants types : les méthodes basées sur les différences finies, les méthodes basées sur les éléments finis et celles des volumes finis.

Dans ce cas nous aurons les deux aspects, l'aspect hydrodynamique qui est régi par l'équation

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \pm F = S_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad [25]$$

Et l'aspect transport de matière (transfert de contaminant) qui est régi par l'équation

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial (V_i c)}{\partial x_i} \pm q_s \frac{c_s}{\theta} + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial c_s}{\partial c} - \lambda \left(c + \frac{\rho_b}{\theta} c_s \right) \quad [26]$$

La simulation numérique spatio-temporelle sera possible grâce aux méthodes numériques suivantes :

Méthode des différences finies

Méthode des éléments finis

Méthode des volumes finis

5.2.1. Modèle d'écoulement des eaux souterraines : MODFLOW

MODFLOW (Three-Dimensional Ground-Water Flow model) basé sur la méthode des différences finies, est utilisé pour simuler les écoulements tridimensionnels des eaux souterraines. Il fut développé par U.S. Geological Survey et consiste en un programme principal avec une série de subroutines. Il existe aujourd'hui sous les versions suivantes :

MODFLOW-83, MODFLOW-88, MODFLOW-96, MODFLOW-2000, MODFLOW-2005.

5.2.2. *Modèle de transport des contaminants : MT3D*

MT3D (3D Solute Transport Model) est basé sur une structure modulaire qui permet la simulation des composantes du transport de manière conjointe ou indépendante et s'implémente directement avec le programme MODFLOW en employant la même discrétisation et les mêmes conditions hydrologiques. Pour résoudre les équations de transport en trois dimensions MT3D utilise aussi bien les méthodes mixtes Euler-Lagrange que les méthodes basées sur les différences finies.

MT3D existe sous les versions suivantes :

Domaine public : MT3Dv1.1, MT3Dv1.5, RT3Dv1.1, MT3DMS, RT3Dv2.5

Domaine privé : MT3Dv1.86, MT3D96, MT3D99.

5.2.3. *Modèle d'écoulement et de transport des contaminants : Visual MODFLOW*

Visual MODFLOW (Integrated Modeling Environment for MODFLOW, MODPATH, MT3D) permet la modélisation de l'écoulement et du transport des contaminants dans les eaux souterraines en intégrant MODFLOW-2000, MODPATH, MT3DMS et RT3D.

Par exemple Visual MODFLOW 3.0 est un logiciel qui intègre les plus récentes versions du domaine public et privé, de MODFLOW et MT3D pour la simulation respectivement des modèles d'écoulement et de transport de contaminants.

6. Conclusion

En Algérie les eaux souterraines sont désormais reconnues comme une ressource économique et un patrimoine écologique qu'il importe de gérer et de préserver. Ceci est d'autant plus important pour un pays à climat semi-aride, qui comme le notre soutire ses besoins en eaux (pour l'A.E.P, l'irrigation, et l'industrie) principalement des nappes souterraines.

L'utilisation de modèles de transfert des substances dans les aquifères peut constituer une aide précieuse, dans le cadre de l'évaluation du risque. Elle permet :

- La compréhension du fonctionnement des aquifères et des processus interférant sur le transfert des substances (polluantes) à travers ces milieux. Ces processus sont surtout la convection, la diffusion moléculaire, la dispersion mécanique et l'adsorption.

- L'estimation du degré de contamination et de l'extension de la pollution dans le milieu poreux.

- De rendre compte du potentiel de récupération de la pollution (restauration).

7. Bibliographie

- Alaf.A.C., Numerical methods for groundwater flow and transport, Class CEE 362, Advanced Topics in subsurface transport. Stanford university (1999).
- Alami.S K., El Hatri M., .Safouane A., « Effet de la biodégradation sur le transport dispersif d'un polluant au travers d'un milieu poreux, modélisation numérique du processus ». *Journées maghrébines sur la mécanique, Sidi Bel Abbès (1998)*
- Armando Lencastre., Hydraulique générale. Eyrolles, 1996.
- Azzedine Ghachi., Hydrologie et utilisation de l'eau en Algérie, OPU, 1986.
- Benyamine M., Simulation numérique de la convection naturelle en régime laminaire transitoire dans une serre horticole thèse de magistère. Centre universitaire de Béchar , 1999.
- Berné F., Cordonnier J., Traitement des eaux, Editions Technip, 1991.
- Chabani A., Modélisation d'un écoulement au sein d'un milieu poreux: Cas de la contamination chimique d'un aquifère, thèse de magister. Centre universitaire de Béchar, 2004.
- Claude C., Mark R., Hydrologie continentale, Armand Colin, 1985.
- Claudio B., Contaminacion de agua y suelos, Curso internacionalde aspectos geograficos de proteccion ambiental 2001.
- Katia B. Modélisation du transport réactif dans les milieux poreux hétérogènes. Application au processus d'adsorption cinétique non linéaire, thèse de doctorat. Université de Rennes 1 (2003).
- Leonardo D., Aplicacion de Visual MODFLOW para el modelamiento numerico del agua subterranean en el acuífero de Morroa, VI Congreso Colombiano de elementos finites y modelacion numerica, Bogota (2002).
- Konikov.L.F., Use of numerical models to simulate groundwater flow and transport, U S Geological survey, Reston, Virginia, USA.