

Transferts de masse en milieux poreux: le modèle Hydrochem

Autor(en): **Perrochet, Pierre / Musy, André**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Ingénieurs et architectes suisses**

Band (Jahr): **117 (1991)**

Heft 22

PDF erstellt am: **10.05.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-77657>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Transferts de masse en milieux poreux : le modèle HYDROCHEM

1. Introduction

Les exigences actuelles en matière de gestion et d'exploitation judicieuse des ressources en eaux confèrent à des sciences à caractère assez théorique, telle l'hydrodynamique souterraine, un rôle de plus en plus déterminant. En effet, la satisfaction des besoins fondamentaux en eaux propres à la consommation ou à l'irrigation de terres agricoles devient souvent critique

PAR PIERRE PERROCHET
ET ANDRÉ MUSY,
LAUSANNE

lors d'irrégularités climatiques, de surexploitation ou de dégradation chimique des eaux souterraines. Dès lors, on conçoit aisément la nécessité de mettre au point des méthodes objectives de prévision – des outils d'aide à la décision – concernant les mesures à prendre pour préserver, voire même reconstituer, les quantités et la qualité des eaux disponibles. Dans cette optique, il est heureux de constater que l'empirisme, encore fort répandu dans les différents domaines des sciences de la terre, cède progressivement le pas à un déterminisme quantitatif dont les éléments de base sont la physique, les mathématiques, la statistique et l'informatique.

L'approche rigoureuse des phénomènes liés aux écoulements souterrains conduit directement à l'élaboration de modèles conceptuels et, partant, à la simulation numérique de ces processus. Par rapport à une réalité complexe, un modèle en est une version simplifiée dont les propriétés majeures sont de reproduire les tendances essentielles du système réel. Ainsi, afin d'assurer la fiabilité d'un modèle de simulation dans le cadre de prévisions à long terme, il est nécessaire d'intégrer les lois élémentaires de la physique tout en respectant l'allure géométrique et l'hétérogénéité des couches poreuses, la nature des fluides en écoulement ainsi que les conditions climatiques susceptibles d'influencer significativement le régime hydraulique souterrain.

Les simulations présentées dans cette communication font donc essentiellement appel aux équations classiques de la physique mathématique relative aux phénomènes de diffusion, dispersion et convection qui nous intéressent directement pour les divers cas d'application présentés ci-après. La démonstration de ces lois déterministes ainsi

que les développements mathématiques relatifs à leur intégration numérique (éléments finis) sortent du cadre de cet article, et nous conseillons au lecteur intéressé par ces aspects de se référer aux ouvrages de base (par exemple [1]¹ ou [4]), ou à un document plus spécifique récent [3]. D'autre part, nous supposons dans ce qui suit que ces équations fondamentales, vérifiées par de nombreux chercheurs sur des modèles réduits expérimentaux, sont applicables à grande échelle.

2. Eléments physico-mathématiques

2.1 Les équations

Dans un système tridimensionnel de coordonnées cartésiennes (x, y, z), où x et y définissent le plan horizontal et z la direction verticale, le flux volumétrique d'un fluide au travers d'un matériau poreux est déterminé par la loi dynamique

$$\vec{q} = -\frac{k}{\hat{\mu}} (\text{grad } p + \hat{g} \text{ grad } z) \quad (1)$$

Dans cette équation, k [m^2] est la perméabilité géométrique du milieu poreux, fonction de la distribution granulométrique des pores ainsi que de leur degré de saturation, $\hat{q}$ [kg/m^3] et $\hat{\mu}$ [kg/ms] sont respectivement la masse volumique et la viscosité du fluide, g [m/s^2] est la constante de gravitation et p [N/m^2] est la pression du fluide. L'équation (1) montre que le flux $\vec{q}$ est obtenu en multipliant un terme conducteur $k/\hat{\mu}$ par une combinaison des effets de pression et de masse volumique. Dans un cas complexe d'écoulement, les grandeurs k , $\hat{q}$, $\hat{\mu}$ et p varient dans l'espace et dans le temps. Lorsque deux liquides miscibles sont en écoulement dans le même système, par exemple de l'eau pure et un polluant, $\hat{q}$ et $\hat{\mu}$ représentent les caractéristiques physiques du mélange des deux liquides, ce mélange étant lui-même déterminé par le flux volumétrique du polluant au travers du système. Ce flux de polluant s'exprime par la somme d'une composante dispersive (mouvements du polluant dus aux gradients de concentration et aux coefficients de diffusion et dispersion) et d'une composante convective (mouvements du polluant directement associés à la vitesse d'écoulement du mélange), soit

¹ Les chiffres entre crochets renvoient à la bibliographie en fin d'article.

Résumé

Les fondements physiques et mathématiques du modèle numérique de simulation HYDROCHEM (transferts associés d'eau et de substances chimiques en solution) sont brièvement exposés dans cet article. Des exemples d'application traitant de problèmes d'écoulement couramment rencontrés dans la nature démontrent l'efficacité de la méthode et sa capacité à produire des résultats d'utilité pratique.

La nature spécifique de ces cas d'application évoque la variété et la complexité des situations auxquelles l'ingénieur praticien fait face lorsqu'il est chargé d'évaluer, en termes de réserves disponibles et, de plus en plus, en degré de contamination, l'état et le devenir de systèmes hydrauliques souterrains.

Ecoulements en milieux variablement saturés, transferts couplés de phases fluides contrastées et processus de pollution-dilution engendrés par des champs de vitesse complexes sont traités à l'échelle réelle par le modèle HYDROCHEM. Celui-ci fournit ainsi à l'ingénieur des représentations synthétiques et directement interprétables de ces phénomènes.

$$\vec{m} = -\theta [D] \text{ grad } C + C \vec{q} \quad (2)$$

où $\vec{m}$ [m/s] est le flux du polluant, θ [-] la teneur en eau volumique, $[D]$ [m^2/s] le tenseur de macrodispersion hydrodynamique, et C [-] la teneur relative du mélange en liquide polluant.

Pour compléter la description mathématique de ces phénomènes, il convient encore d'appliquer aux relations de flux (1) et (2) établies ci-dessus le principe fondamental de conservation de la matière qui conduit à l'établissement des deux équations régularisant l'ensemble du processus (équations de continuités), à savoir pour l'écoulement de la masse fluide

$$\begin{aligned} & \text{div} \left\{ \hat{q} \frac{k}{\hat{\mu}} \text{ grad } p + \right. \\ & \left. + \hat{q}^2 g \frac{k}{\hat{\mu}} \text{ grad } z \right\} + \hat{q} i = \\ & = \frac{\delta (\hat{q} \theta)}{\delta t} \end{aligned} \quad (3)$$

et pour le transport de pollution

$$\begin{aligned} & \text{div} \{ \theta [D] \text{ grad } C - C \vec{q} \} + \\ & + C' i = \frac{\delta (C \theta)}{\delta t} \end{aligned} \quad (4)$$

où i [$1/\text{s}$] est l'intensité volumique de source de concentration C' [-].

Les équations (3) et (4) décrivent deux phénomènes bien différents, à savoir : - l'écoulement d'une masse fluide dans un milieu poreux variablement saturé

- la propagation d'un polluant dans cette masse fluide en mouvement. La solution simultanée de ces deux équations non linéaires est donc requise si on veut calculer les transferts d'eau et de solutés dans un milieu donné et leur évolution spatio-temporelle.

De plus, si le fluide polluant présente une masse volumique et une viscosité bien différenciées par rapport au fluide pollué, le traitement non linéaire des équations (3) et (4) au moyen des fonctions de couplage appropriées [2] est indispensable. En effet, le champ de vitesse $\vec{q}$, qui détermine dans une large mesure l'avancement de la pollution, dépend de la valeur de plusieurs paramètres à un instant donné (équation (1), ces paramètres dépendant à leur tour de l'avancement de la pollution.

2.2 La résolution des équations

Le code de simulation HYDROCHEM résout les équations (3) et (4) en les mettant sous forme matricielle. L'intégration numérique de ces équations en trois dimensions fait notamment appel aux spécificités techniques suivantes :

- La méthode des éléments finis (schéma de Galerkin) est utilisée pour la représentation de l'espace, la discrétisation temporelle s'effectue selon le schéma standard de Crank-Nicholson et les phénomènes non linéaires sont amenés à convergence par la procédure itérative de Picard.
- Le traitement simultané, dans l'espace à trois dimensions (3-D), d'éléments finis isoparamétriques quadratiques à une et/ou deux et/ou trois dimensions requiert l'utilisation des vecteurs de base et du tenseur métrique covariants [6]. Les éléments 1-D et 2-D considérés peuvent ainsi présenter une orientation et une courbure quelconques dans l'espace 3-D. Une telle approche permet d'attribuer aisément des paramètres de simulation particuliers aux arêtes ou aux faces d'éléments 3-D et d'y délimiter certains calculs d'intégration. Cette souplesse de discrétisation de l'espace est notamment pratique pour la modélisation de structures d'écoulement particulières à une ou deux dimensions (fissures, aquifères captifs) dans un système tridimensionnel. A plus petite échelle, ce procédé facilite l'étude des écoulements hypodermiques ainsi que celle des transferts hydriques en zones racinaires [9].
- Les équations matricielles sont résolues par la méthode frontale [5]. Cette méthode de solution directe rend possible l'étude de systèmes comprenant plusieurs milliers d'éléments sans que la taille des matrices de travail soit démesurée.

En alternant l'assemblage des matrices élémentaires et l'élimination des variables, et en faisant un large usage de fichiers à accès direct, la méthode minimise - pour un réseau d'éléments finis à topologie donnée - la mémoire vive utilisée par l'ordinateur. En conséquence, elle produit des résultats dans des temps de calcul raisonnables, ce qui n'est souvent pas le cas lors de la simulation de grands systèmes non linéaires avec les méthodes conventionnelles.

D'une façon générale, si la résolution d'une équation de diffusion telle que l'équation (3) ne pose pas de problèmes majeurs, il n'en est pas de même avec l'équation de diffusion-convection (4) lorsque les phénomènes de convection sont prépondérants (vitesses d'écoulement élevées et/ou faibles coefficients de dispersivité). Dans de tels cas en effet, et cela pour des raisons purement numériques, des solutions irréalistes, sous forme d'oscillations instables (évoluant avec le temps), sont obtenues (voir par exemple [7]). En revanche, en présence d'effets convectifs mineurs, l'équation (4) tend vers une équation de diffusion, résoluble aussi aisément que l'équation (3).

Il y a donc une limite dans le domaine des solutions stables de l'équation de diffusion-convection, limite en deçà de laquelle les solutions ont un sens physique pour l'ingénieur, mais au-delà de laquelle toute interprétation raisonnable devient impossible.

Des développements récents [10] [8] ont abouti à un remède efficace qui élimine les phénomènes oscillatoires évoqués ci-dessus, et qui rend possible une simulation réaliste des phénomènes de transports convectifs à l'échelle des problèmes rencontrés dans la pratique. Davantage de détails techniques sont contenus dans [11].

3. Exemples d'application

Dans ce chapitre sont présentés trois exemples d'application du modèle HYDROCHEM. Ces exemples, de nature bidimensionnelle, sont fictifs mais démontrent que la méthode peut traiter avec souplesse, à petite ou à grande échelle, des problèmes variés et de divers degrés de complexité. Dans chaque cas, les paramètres numériques utilisés en simulation sont représentatifs de valeurs réelles (ordres de grandeur); le détail de ces valeurs n'est toutefois pas mentionné afin de préserver la généralité de la présentation.

Le cas 1 met en évidence les facultés de traitement de domaines d'écoulements présentant des structures hétérogènes et discontinues. Application

type: description régionale et évaluation des ressources.

Le cas 2 démontre l'adéquation du critère de stabilisation numérique évoqué plus haut dans le cas des transferts convectifs couplés. Application type: calcul d'une pollution convective locale.

Le cas 3 illustre un processus de convection-dilution en régime permanent dans une nappe libre horizontale. Application type: évaluation de l'impact d'une décharge contenant des produits chimiques.

3.1 Cas 1: bilan hydrologique et représentation d'un système d'écoulement régional

Dans cet exemple, l'écoulement variablement saturé de l'eau dans une structure hydrogéologique est considéré. En supposant les paramètres physiques de l'eau constants, on peut réécrire l'équation (3) sous une forme plus classique, à savoir l'équation de Richards, en prenant en considération la conductivité hydraulique, la pression relative et la charge hydraulique. L'intégration de cette équation sur le domaine d'écoulement résulte en une carte isopieze du système évoluant dans l'espace et dans le temps, selon les conditions d'écoulement imposées (conditions initiales et aux limites).

La figure 1a illustre les dimensions et la structure d'un domaine d'écoulement multicouche. Celui-ci est constitué d'un socle peu perméable, d'un aquifère captif surmonté d'une couche de type aquitard peu perméable, celle-ci étant partiellement recouverte d'un bassin alluvial contenant une nappe libre. L'aquifère captif qui est alimenté en altitude par les précipitations se décharge à son extrémité inférieure affleurante; il est également sectionné par une faille qui parcourt le système de bas en haut. Selon les champs de perméabilités et de porosités considérés, et selon l'importance et la répartition des précipitations en surface, cette faille peut drainer ou recharger la nappe alluviale.

La figure 1b représente la distribution spatiale du champ des potentiels hydrauliques (équipotentiels) obtenue en solution à l'équation de Richards, sous des conditions d'écoulement données. On constate dans cette situation particulière que la faille, mise en pression au contact de l'aquifère captif, conduit l'eau profonde au travers de la nappe alluviale et donne naissance en surface à une source artésienne. Le code de calcul positionne également le niveau de la nappe libre et peut fournir, à chaque instant, les valeurs numériques des termes du bilan hydrologique (débits d'infiltration, de suintement et de décharge, stock en eau des différentes couches, etc.).

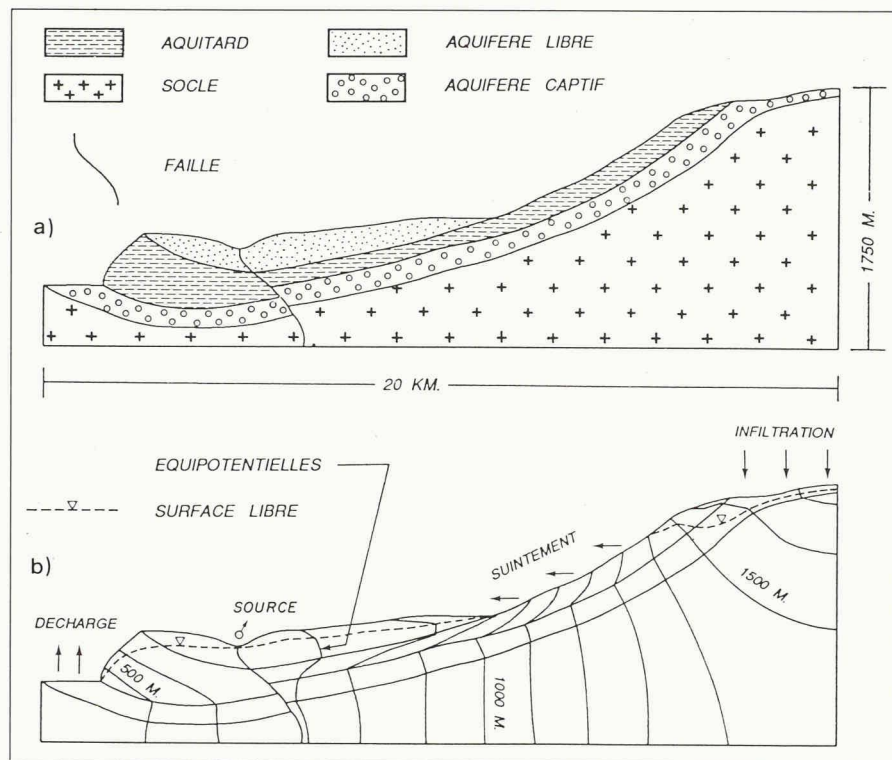


Fig. 1. – Écoulement variablement saturé dans un système multicouche complexe.

a) Structure du domaine d'écoulement

b) Equipotentiels et surface de la nappe libre

3.2 Cas 2 : contamination convective localisée

Dans cet exemple une contamination par convection pure (effets dispersifs et diffusifs supposés nuls ou négligeables) dans un sol agricole homogène est analysée localement. Il s'agit de l'écoulement variablement saturé d'une nappe libre vers un drain, la nappe étant alimentée par un canal d'irrigation.

Au temps initial, le régime hydraulique est supposé permanent et l'eau du canal est subitement remplacée par un liquide toxique à caractéristiques physiques données. Dans ce cas, le calcul de la propagation du polluant dans le système s'effectue par solutions couplées et simultanées des équations (3) et (4). Traitant de convection pure, une fonction stabilisante de nature tensorielle [11] complète également le système d'équations.

Les figures 2a, 2b et 2c mettent en évidence les différentes solutions obtenues selon les contrastes de masse spécifique et de viscosité que le fluide polluant présente par rapport à l'eau initialement dans le système. Sur chacune de ces figures, le «front» (lignes d'isoconcentration 0,1-0,9) calculé après une semaine d'écoulement représente une zone de mélange entre les deux liquides, en amont de laquelle il n'y a que le polluant et en aval de laquelle il n'y a que l'eau propre. Les polluants simulés ont les caractéristiques suivantes :

Figure 2a. – Un polluant quelconque présentant les mêmes paramètres que l'eau propre, telle une eau faiblement

contaminée. Dans ce cas, vu l'homogénéité des masses spécifiques et viscosités, le polluant se propage comme dans le cas d'un écoulement découplé et n'affecte en rien le régime hydraulique permanent imposé en condition initiale.

Figure 2b. – Un polluant plus léger et moins visqueux que l'eau propre, telle

l'acétone. Celle-ci a tendance à flotter sur l'eau et à s'étendre latéralement ; cette extension latérale est renforcée par une viscosité plus faible (vitesse plus élevée) et par le fait que l'eau propre, soumise à une pression amont plus faible (le polluant pesant moins), ne s'évacue plus avec le même débit au drain.

Figure 2c. – Un polluant plus lourd que l'eau propre, tel le carbone tétrachlorure. Dans ce cas le polluant coulera rapidement au fond de la nappe en chassant l'eau propre plus légère à la surface. On note ainsi un bombement de la nappe ainsi qu'une mise en charge du drain, celui-ci n'arrivant pas à évacuer assez vite le volume cédé à l'eau lourde.

La prise en compte des caractéristiques physiques propres à chaque fluide joue donc ici un rôle considérable si on en juge par comparaison de ces trois figures. On remarquera surtout les cheminements différenciés de la masse infiltrée dans la nappe, ainsi que la déformation de celle-ci selon la substance introduite.

3.3 Cas 3 : processus de pollution-dilution dans un bassin versant

Cet exemple traite d'un petit bassin versant dans lequel une nappe libre quasi horizontale, alimentée uniquement par les précipitations, s'écoule vers un ruisseau. En deux points du bassin P1 et P2, de l'eau potable est extraite par pompage. Une décharge implantée en amont du bassin consti-

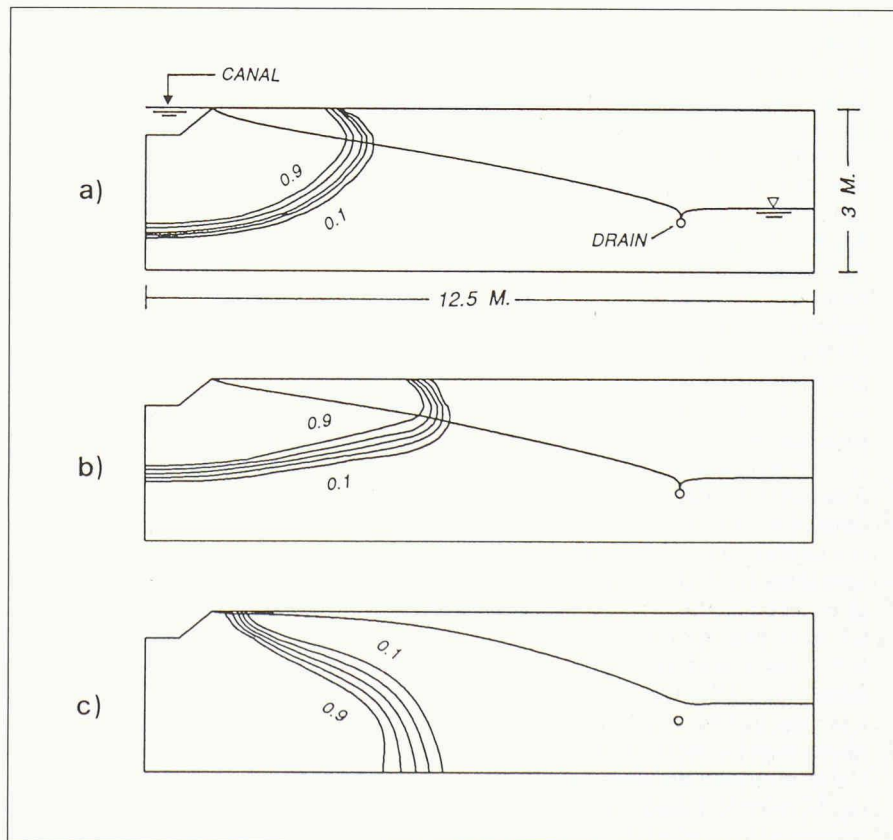


Fig. 2. – Propagation d'un polluant dans un système canal-drain.

a) Traceur léger

b) Acétone

c) Carbone tétrachlorure

Bibliographie

- [1] BEAR (J.), 1972. - *Dynamics of fluids in porous media*, 764 p., American Elsevier, New York.
- [2] CHAUDHARI (N.), 1971. - «An improved numerical technique for solving multidimensional miscible displacement equations», *Society of Petroleum Engineers Journal*, Sept., 277-284.
- [3] GAILLARD (G.), 1989. - «Aspects mathématiques et résolution numérique par éléments finis de l'équation de transfert de l'eau en milieu poreux saturé», rapport interne IATE/EPFL, Lausanne.
- [4] HUYAKORN (P. S.), PINDER (G. F.), 1983. - *Computational methods in subsurface flow*, 473 p., Academic Press, New York.
- [5] IRONS (B. M.), 1970. - «A frontal solution program for finite element analysis», *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 2.
- [6] KIRALY (L.), 1987. - «Large scale 3-D groundwater flow modelling in highly heterogeneous geologic medium», *NATO-Advanced Workshop on Advances in analytical and numerical groundwater flow and quality modelling*, LNE, Lisbon.
- [7] LEONARD (B. P.), 1979. - «A survey of finite differences of opinion on numerical muddling of incompressible defective confusion equation». In T.J.R. Hughes, ed., *Finite element methods for convection dominated flows*, AMD, 34.
- [8] NOORISHAD (J.), PERROCHET (P.), TSANG (C. F.), MUSY (A.), 1991. - «A perspective on the numerical solution of the convection dominated transport problem - A price to pay for the easy way out» (à paraître au *Water Resources Research*).
- [9] PERROCHET (P.), 1987. - «Water uptake by plant roots: A simulation model. 1) Conceptual model», *Journal of Hydrology*, 95.
- [10] PERROCHET (P.), 1990. - «Solution de l'équation de convection par éléments finis», rapport interne IATE/EPFL, Lausanne.
- [11] PERROCHET (P.), MUSY (A.), 1991. - «Transferts convectifs couplés: une méthode de simulation opérationnelle appliquée aux pollutions des eaux souterraines» (soumis à publication dans *La Houille Blanche*).

tue une source de pollution constante pour les eaux souterraines. Cette pollution est transportée par convection dans le système et simultanément diluée par les eaux de pluie tombant sur l'ensemble du bassin. Il s'agit d'évaluer la contamination des pompes et du ruisseau à long terme, c'est-à-dire lorsque concentrations dans la décharge et précipitations sont maintenues constantes durant une longue période.

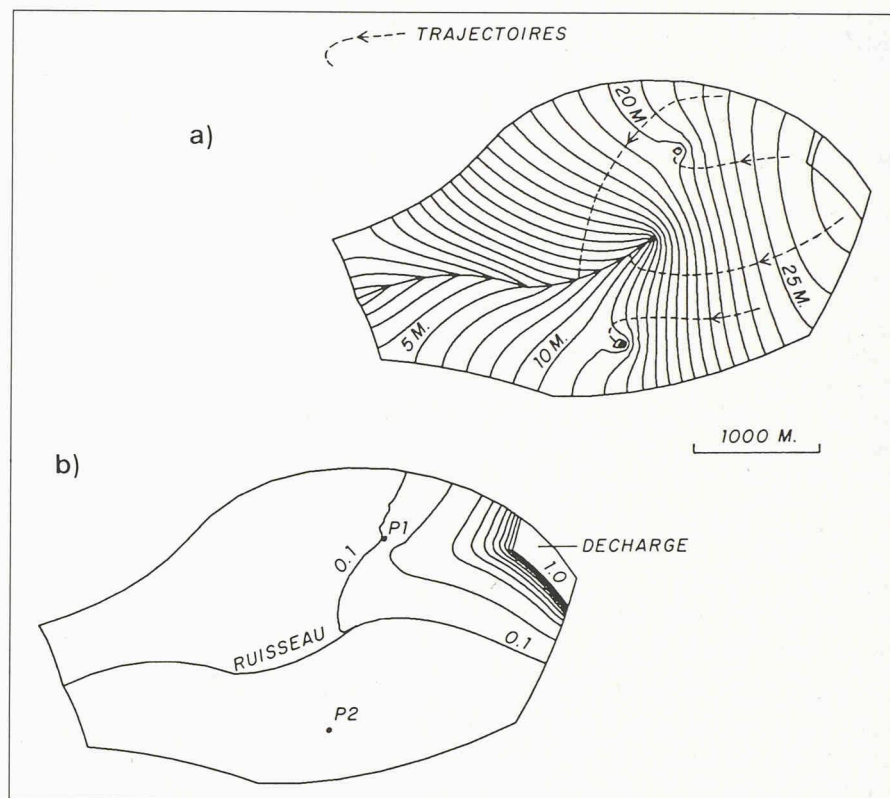


Fig. 3. - Convection et dilution d'un polluant dans une nappe superficielle.
a) Topographie de la nappe libre
b) Isoconcentrations

Ce problème est donc approché en régime permanent. De plus, on suppose dans ce cas qu'il n'y a pas d'interactions significatives entre le polluant et l'eau non polluée (écoulement découplé). En conséquence, les équations (3) et (4) peuvent se simplifier (masse spécifique et viscosité constantes, écoulements stabilisés), mais doivent en revanche inclure un terme conductif intégrant la dimension verticale (transmissivité), celle-ci étant variable puisque la nappe est libre.

En posant dans l'équation (4) que la concentration en polluant de l'eau de pluie est nulle ($C' = 0$), et puisque le phénomène est essentiellement convectif (effets dispersifs-diffusifs négligeables par rapport aux effets de dilution), la relation régularisant le processus de pollution devient après quelques transformations

$$\vec{q} \cdot \vec{\text{grad}} C + C i = 0 \quad (5)$$

où i [m/s] représente ici une intensité de pluie par unité de surface.

La résolution des équations est illustrée par la figure 3a qui donne la topographie de la nappe libre calculée ainsi que quelques trajectoires résultantes, et par la figure 3b qui définit le degré de pollution du système (lignes d'isoconcentration).

On constate, pour les conditions d'écoulement simulées, que les eaux au puits P1 et à l'extrémité supérieure du ruisseau présentent des concentrations environ 10 fois plus faibles que les concentrations (maximales) à la

décharge. Si ces concentrations ne sont pas admissibles (respect de normes), différents scénarios d'assainissement peuvent facilement être testés avec le modèle de simulation (modification des débits pompés en P1 et P2, installation de drains à proximité de la décharge, etc.) afin de sauvegarder la qualité des eaux souterraines du bassin versant.

5. Remarques finales

Ces quelques exemples - volontairement succincts - rendent compte non seulement des capacités du modèle HYDROCHEM à résoudre efficacement des équations complexes, mais aussi - et surtout - de l'utilisation pratique qui peut être faite des résultats produits. L'analyse de ceux-ci montre que les problèmes difficiles et importants de gestion et de protection des eaux souterraines peuvent être abordés avantageusement par la simulation. Celle-ci fournit en effet une aide précieuse et indispensable dans le cadre des prévisions concernant les ressources en eaux ainsi que les études d'impact sur l'environnement naturel.

Adresse des auteurs:

Pierre Perrochet
André Musy
Institut d'aménagement des terres
et des eaux
EPFL
1015 Lausanne