



HAL
open science

Transfert d'une pollution soluble dans un aquifère par une approche multi-agents

Cyril Fleurant

► **To cite this version:**

Cyril Fleurant. Transfert d'une pollution soluble dans un aquifère par une approche multi-agents. *Cybergeo : Revue européenne de géographie / European journal of geography*, 2016, 767, 10.4000/cybergeo.27475 . hal-01262154

HAL Id: hal-01262154

<https://hal.science/hal-01262154>

Submitted on 31 Oct 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Transfert d'une pollution soluble dans un aquifère par une approche multi-agents

Pollution transfer in groundwater using a multi-agents system

Cyril Fleurant



Édition électronique

URL : <https://journals.openedition.org/cybergeo/27475>

DOI : [10.4000/cybergeo.27475](https://doi.org/10.4000/cybergeo.27475)

ISSN : 1278-3366

Éditeur

UMR 8504 Géographie-cités

Ce document vous est offert par Nantes Université



Référence électronique

Cyril Fleurant, « Transfert d'une pollution soluble dans un aquifère par une approche multi-agents », *Cybergeo: European Journal of Geography* [En ligne], GeOpenMod - Modèles et logiciels, document 767, mis en ligne le 26 janvier 2016, consulté le 31 octobre 2022. URL : <http://journals.openedition.org/cybergeo/27475> ; DOI : <https://doi.org/10.4000/cybergeo.27475>



Creative Commons - Attribution 4.0 International - CC BY 4.0
<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Transfert d'une pollution soluble dans un aquifère par une approche multi-agents

Cyril Fleurant

UMR 6554 CNRS LETG – Angers

Université d'Angers

cyril.fleurant@univ-angers.fr

La modélisation des pollutions solubles dans les aquifères nécessite une bonne connaissance des processus hydrogéologiques ainsi que de fortes compétences numériques pour utiliser les outils classiques qui lui sont associés. Ces aspects techniques sont souvent un frein pour aborder la problématique de la modélisation des pollutions souterraines, auprès des étudiants par exemple. Dans cet article nous proposons de reprendre les concepts de base nécessaires pour modéliser le transfert de polluants dans un aquifère. Les processus sont ensuite modélisés de façon explicite par une approche multi-agents, et implémentés sur la plateforme ouverte Netlogo (Wilensky, 1999). Les processus modélisés sont ainsi plus facilement exploitables et modifiables dans le cadre d'activités pédagogiques mais aussi dans des contextes de recherche, proposant des cas relativement simples.

Mots-clés : modélisation, multi-agents, transfert, pollution, nappe phréatique

Modelling soluble pollutants in aquifers requires sufficient knowledge of hydrogeological processes as well as strong digital skills to use basic associated tools. These technical aspects often prevents from addressing the problem of groundwater pollution, for instance with students. In this paper, the basic necessary concepts to model the transfer of pollutants into an aquifer are summed up. The processes are then explicitly modelled with multi-agents techniques and implemented into the Netlogo open platform (Wilensky, 1999). The modelled processes are thus easy to use and to modify for educational activities but also for research with relatively simple digital experiments.

Keywords: modelling, multi-agents, transport, pollution, groundwater

Introduction

Les eaux souterraines représentent le deuxième réservoir d'eau douce sur Terre après celui des glaciers polaires. Les aquifères sont donc exploités pour l'irrigation mais surtout pour l'alimentation en eau potable des populations. Cette ressource, indispensable à la vie, est trop souvent sujette à des problématiques de pollutions domestiques, industrielles ou agricoles. La préservation de cette ressource nécessite de bien comprendre les processus de transfert de polluants.

Tous les réservoirs souterrains ne sont pas des aquifères. Tout d'abord, le terme aquifère signifie que le fluide contenu dans la roche est de l'eau. En effet, le fluide n'est pas forcément de l'eau, il peut également être gazeux ou pétrolier. Ensuite, un aquifère indique que la roche est poreuse et perméable, c'est-à-dire qu'elle peut contenir une quantité importante d'eau (porosité) et que cette eau est mobilisable (perméabilité). Ces deux propriétés importantes qui caractérisent un aquifère sont inhérentes à la structure géométrique interne de la roche : on parle de milieux poreux et/ou de milieux fracturés. Cette géométrie est primordiale car c'est elle qui va guider la dynamique du fluide : on comprend bien qu'il est plus facile de décrire cette dynamique dans un tuyau parfaitement cylindrique que dans un milieu dont on ne connaît pas la forme.

Certains modèles de transfert de masse dans les milieux poreux et/ou fracturés prennent en compte cette géométrie complexe pour simuler les écoulements. On peut citer par exemple les modèles géométriques fractals qui ont été largement utilisés dans cette thématique (e.g. Fleurant and Jeong, 2001; Jin *et al.*, 2015; Cihan *et al.*, 2009; Hsu and Chen, 2010; Hunt and Gee, 2002). Toutefois, devant la grande difficulté à représenter la structure poreuse ou à la modéliser, la plupart des modèles de transfert de fluide en milieux poreux est basée sur l'équation classique de convection-dispersion. Cette équation prend en compte le comportement du fluide dans le milieu plutôt que le milieu lui-même. Ainsi, plutôt que de modéliser la forme du milieu poreux, on simule l'hydrodynamique qui découlerait de la complexité de ce milieu. Ces modèles de transfert en milieu poreux utilisent trois processus de déplacement : la convection, la diffusion moléculaire et la dispersion (Goblet, 1981).

Dans les aquifères, les fluides sont en mouvement. Même s'il est extrêmement lent, ce déplacement est dû au gradient de la charge hydraulique ; on parle alors de convection. La convection est l'entraînement d'une masse par le seul mouvement du fluide (éq. 12). La diffusion moléculaire est un phénomène physique lié à l'agitation thermique moléculaire. Dans un liquide au repos, les particules de fluide subissent un mouvement brownien et sont déplacées uniformément dans toutes les directions de l'espace. Le résultat de cette agitation moléculaire est le transfert de particules des zones de fortes concentrations vers les zones de plus faibles concentrations. Dans un milieu poreux saturé en eau, cette agitation moléculaire ne peut se faire de façon isotrope à cause des grains solides du milieu. Pour tenir compte de ce phénomène qui réduit la possibilité qu'a une particule à diffuser, on définit un coefficient de diffusion moléculaire effectif caractérisant la diffusion de l'élément dans le milieu considéré (éq. 13). Lorsqu'un fluide est en mouvement, différents mélanges viennent s'ajouter au processus purement diffusif que nous venons de décrire, on parle alors de dispersion cinématique. La dispersion cinématique est la conséquence de la non-uniformité du champ des vitesses dans le milieu poreux à différentes échelles :

- L'espace entre deux grains de milieu poreux peut être considéré comme un capillaire. La vitesse est nulle à la surface et augmente vers le centre où elle est maximale ;
- La géométrie des grains produit des variations de direction et de module des vitesses locales.

Lorsque la dispersion cinématique opère dans la direction principale de l'écoulement, on parle de dispersion longitudinale. Dans le cas d'une dispersion cinématique dans le plan normal à la direction principale d'écoulement, on parle de dispersion transversale. Si l'on veut considérer l'écoulement d'un soluté en milieu poreux saturé, on ne peut pas séparer la diffusion moléculaire de la dispersion cinématique. On regroupe donc ces deux phénomènes sous le terme de dispersion hydrodynamique (éq. 14).

Si on prend en compte les trois processus que l'on vient de développer (convection, diffusion et dispersion), on peut écrire mathématiquement le déplacement d'un fluide en milieu poreux saturé (éq. 19) :

$$\operatorname{div}(\overrightarrow{D \operatorname{grad}}(C) - C\vec{U}) = \frac{\partial C}{\partial t}$$

L'équation de transfert peut être résolue numériquement par différentes méthodes : différences finies, éléments finis ou marche au hasard. Lorsque le problème posé est assez simple (paramètres constants dans l'espace et le temps, conditions initiales et aux limites simples), il existe des solutions exactes de l'équation de transfert, appelées solutions analytiques. Elles permettent de déterminer la valeur de la concentration en un point de l'espace, à un temps donné. Les solutions analytiques existent pour des cas mono-, bi- et tridimensionnels et pour des injections ponctuelles instantanées et ponctuelles à durée variable (Annexe 1).

L'objectif de cet article est de présenter un modèle de transfert de polluant en milieu poreux, en utilisant une approche multi-agents. L'article est structuré suivant le formalisme ODD (Grimm *et al.*, 2006). Le modèle représente une situation simple d'un aquifère dont les eaux souterraines sont connectées hydrauliquement à un cours d'eau. Une source de pollution, dont on peut déterminer la taille, est positionnée sur le versant de cet aquifère. Le modèle simule le transfert du nuage de polluant pour différentes propriétés préalablement données (caractéristique de l'aquifère, introduction d'un forage, nature du polluant, etc.) et indique l'évolution de sa concentration en fonction du temps lorsqu'il atteint le cours d'eau. Cette situation simple permet d'illustrer de façon visuelle des scénarios de transfert relativement complexes, le modèle est donc un bon outil pédagogique pour aborder les problématiques de pollutions souterraines auprès des étudiant-e-s. Il est également un bon outil de recherche pour donner des ordres de grandeurs et étudier des comportements hydrodynamiques simples.

Vue d'ensemble

Objectif

L'objectif principal du modèle est de prédire l'évolution spatio-temporelle d'une source de polluant dans un aquifère (Figure 1). Le modèle proposé permet de simuler les processus de transfert, c'est-à-dire la convection, la diffusion et la dispersion. Ces processus sont modélisés dans le cadre simplifié d'un aquifère homogène (même composition en tout point de l'espace) et isotrope (invariance des propriétés en fonction de la direction). Le contexte de la simulation se fait pour une condition aux limites de Dirichlet : une rivière impose un potentiel constant, c'est-à-dire que le niveau de la rivière reste à une hauteur constante. Enfin, un forage (terme source) est introduit dans cet aquifère comme élément d'exploitation de l'eau souterraine.

Variables d'état et échelles

Le modèle est constitué de deux entités : l'aquifère, qui est le support spatial fixe et dont les propriétés sont constantes dans le temps, et les particules de polluant qui utilisent les propriétés de l'aquifère pour se mouvoir.

L'aquifère est caractérisé par sa charge hydraulique, c'est-à-dire la hauteur de l'eau (zone saturée) qu'il contient en chaque point. La valeur de la charge hydraulique permet de calculer la vitesse d'écoulement

de l'eau souterraine (convection) ainsi que la dispersion qui est produite par cet écoulement dans un milieu poreux (diffusion + dispersion). Ces variables spatiales sont données dans le Tableau 1, et sont déterminées à partir des paramètres de l'aquifère (Tableaux 2 et 3).

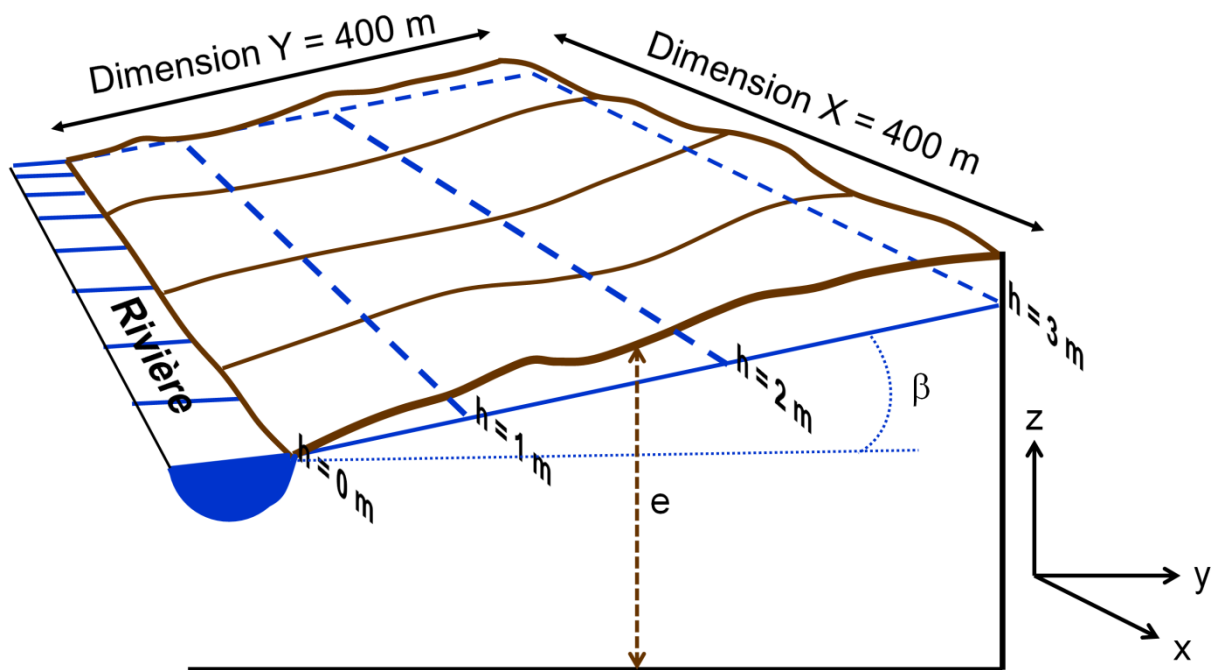


Figure 1 : Caractéristiques du système modélisé. Un aquifère d'épaisseur moyenne e que l'on étudie sur une extension de 400 m par 400 m. Dans un aquifère, les eaux souterraines s'écoulent des charges hydrauliques les plus fortes vers les plus faibles, donc vers la rivière qui a ici une charge hydraulique imposée (condition aux limites de Dirichlet) de $h=0$ m. Dans le cas présenté ici on voit que sur distance de $X=400$ m, la charge hydraulique varie de 3 m, la pente moyenne de l'aquifère est donc de $\beta=0.0075$.

Tableau 1 : Variables spatiales de l'aquifère

Nom	Nom dans le code Netlogo	Unité (S.I.)	Symbole mathématique
Charge hydraulique	<i>ChargeHydrau</i>	m	h
Vitesse longitudinale (Y)	<i>VitesseY</i>	m/s	V_L
Vitesse transversale (X)	<i>VitesseX</i>	m/s	V_T
Vitesse moyenne	<i>VitesseMoy</i>	m/s	V_m
Dispersion longitudinale (Y)	<i>DispersionLong</i>	m ² /s	D_L
Dispersion transversale (X)	<i>DispersionTrans</i>	m ² /s	D_T

Tableau 2 : Paramètres du système étudié. Les propriétés de l'aquifère données (porosité, perméabilité) correspondent à des valeurs représentatives d'un réservoir calcaire fracturé.

Nom	Nom dans le code Netlogo	Unité (S.I.)	Valeur typique	Symbole mathématique
Dimension X		m	400	x
Dimension Y		m	400	y
Epaisseur (Z)	<i>EpaisseurAquifere</i>	m	50	e
Perméabilité	<i>Permeabilite</i>	m/s	10^{-4}	k
Transmissivité	<i>Transmissivite</i>	m ² /s	$5 \cdot 10^{-3}$	T
Dispersivité	<i>Dispersivite</i>	m	1.0	α
Porosité	<i>Porosite</i>	-	0.15	ω
Pente	<i>Pente</i>	-	10^{-2}	β
Localisation X	<i>PositionForageX</i>	m	0	x_f
Localisation Y	<i>PositionForageY</i>	m	250	y_f
Débit du forage	<i>DebitForage</i>	m ³ /s	$2 \cdot 10^{-3}$	q

Tableau 3 : Paramètres du polluant

Nom	Nom dans le code Netlogo	Unité (S.I.)	Valeur typique	Symbole mathématique
Localisation X	<i>PositionSourceX</i>	m	300	x_s
Localisation Y	<i>PositionSourceY</i>	m	300	y_s
Facteur de retard	<i>FacteurRetard</i>	-	1.0	R
Nombre de particules	<i>NombreParticules</i>	-	2 000	N
Taille de la source	<i>TailleSource</i>	m	30	
Trace de la trajectoire	<i>Trace</i>	-	FALSE	

Processus et étapes

Les étapes du modèle sont décrites sur le logigramme de la Figure 2. Ces étapes permettent l'établissement d'une succession de processus :

- Le système aquifère – source de polluant est préalablement caractérisé par l'utilisateur grâce à des paramètres. Ces paramètres permettent une configuration spatiale du système mais aussi le réglage des propriétés du système ;

- Les valeurs des paramètres conduisent aux valeurs de la charge hydraulique, et consécutivement à celles des vitesses et des coefficients de dispersion. Chacune de ces variables est spatialisée et est donc affectée à chacun des patches (*patches-own*). En effet, la charge hydraulique, les vitesses et les coefficients de dispersion ont des valeurs qui dépendent de leur position par rapport à la rivière et au forage.
- Les agents mobiles (*particules*) utilisent pour se mouvoir les propriétés de convection (vitesses) et de diffusion-dispersion (coefficients de dispersion) du patch sur lequel ils se trouvent. Ce transfert est réalisé à pas de temps discrets (*ticks*), convertis ensuite en temps continu : $temps = ticks * PasTempsJ$. Pour des raisons d'homogénéité des calculs, les unités des variables et des paramètres sont toutes données en Unité du Système International (U.S.I.).

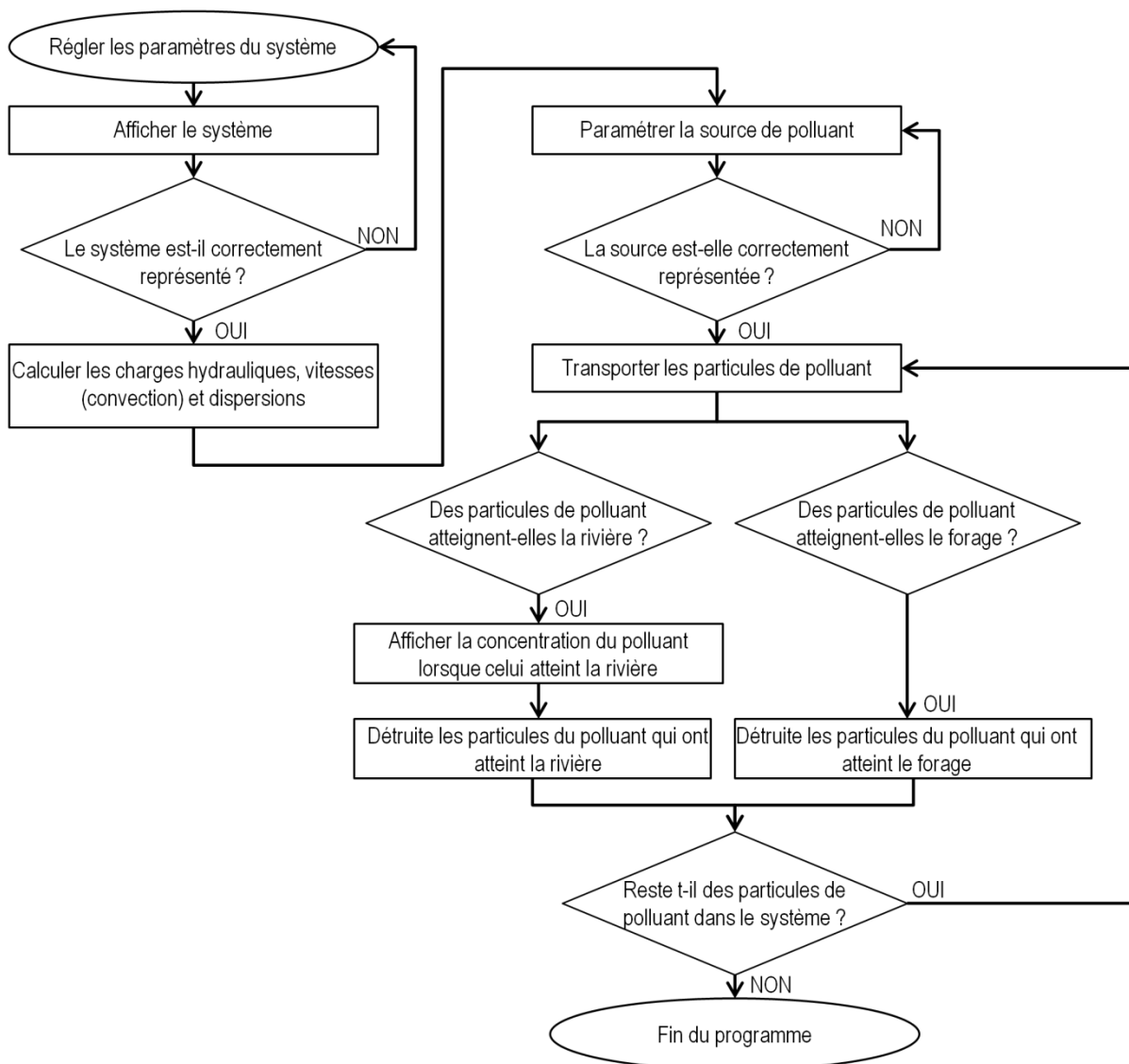


Figure 2 : Logigramme du modèle

Elaboration des concepts

L'émergence : les propriétés de déplacement des agents mobiles (*particules*) sont individuelles et dépendantes de leur position locale (*patch*). Le nuage de polluant est donc discrétisé en particules qui transportent une proportion de la masse du polluant. Si par exemple la source du polluant est de 100 kg et qu'on modélise le nuage du polluant par 1 000 particules, on estime alors que chaque particule transporte une quantité équivalente de $100 / 1\,000 = 0.1$ kg, soit 100 g. La structure du nuage de polluant ou de particules est dépendante des vitesses de l'eau souterraine dans l'aquifère et des coefficients de dispersion, eux-mêmes dépendants des nombreux autres paramètres spatiaux et physico-chimiques. Le champ des vitesses et les coefficients de dispersion font donc émerger la forme globale du nuage de polluant qui dépend des conditions locales sur les patches. La distribution spatio-temporelle des concentrations du nuage de polluant (variable globale) est donc issue des multiples configurations possibles des particules et de leurs variables locales.

Adaptation : les agents mobiles (*particules*) adaptent leur condition de déplacement aux propriétés locales qu'ils tirent des patches sur lesquels ils se trouvent. Ces propriétés sont caractérisées par leurs vitesses longitudinale et transversale ainsi que par leurs coefficients de dispersion longitudinale et transversale.

Perception : les agents statiques (*patches*) localisés sur la rivière et aux alentours du forage ont une action de perception des agents mobiles (*particules*). Lorsque ces derniers sont dans un rayon égal à la valeur de *RayonPuits* mètres du forage, ils sont détruits (*die*) puisqu'ils sortent du système aquifère. Lorsque les agents mobiles arrivent dans la rivière ils sont également détruits pour les mêmes raisons que précédemment mais avant cela, ils sont comptabilisés afin de déterminer la concentration du polluant dans la rivière.

Interaction : Il n'y a pas d'interaction des agents mobiles (*particules*) entre eux. En revanche l'interaction entre le polluant (agents mobiles *particules*) et le milieu poreux (agents statiques *patches*) est modélisée par le biais d'un coefficient de retard R . Le transfert d'un polluant n'est pas conservatif (il se dégrade) et il est réactif (il a des échanges avec la matrice solide du milieu poreux). Dans les modèles géochimiques, on associe donc au transfert soit des phénomènes d'interactions simples (coefficient de retard, isothermes de Langmuir ou de Freundlich), ou plus complexes comme la spéciation. La réaction d'un soluté avec le milieu regroupe un ensemble de processus physico-chimiques qui retiennent le soluté sur les grains solides du milieu poreux. Parmi ces réactions on peut citer les échanges cationiques (les ions positivement chargés qui viennent en contact avec des surfaces négatives, des argiles par exemple) et les réactions chimiques (précipitation, dissolution, oxydoréduction). Dans le cas le plus simple et le plus fréquent, ces réactions sont considérées comme instantanées et réversibles. Cela signifie que les cinétiques de réactions sont très rapides et de même ordre de grandeur entre soluté et solide. Il apparaît dans ce cas un retard du soluté par rapport à un traceur non réactif. Ce retard s'exprime dans l'équation de transfert par un facteur appelé coefficient de retard R . Ce coefficient divise les vitesses et donc les coefficients de dispersion et agit ainsi comme une résistance au déplacement dans le milieu poreux. On note que le cas où $R = 1$, correspond à un polluant qui a les mêmes conditions hydrodynamiques et hydrodispersives que l'eau souterraine.

Stochasticité : le principe même du présent modèle de transfert des particules est basé sur une approche stochastique puisque leur déplacement se fait par une marche aléatoire lagrangienne. Le transfert des particules de polluant se fait suivant deux processus : la convection et la diffusion-

dispersion. La partie convective est la partie déterministe du processus, elle ne dépend que de la valeur des vitesses, constantes sur un *patch* donné. La partie diffusivo-dispersive est destinée à modéliser la complexité du milieu poreux dans lequel les particules se déplacent. La diffusion des particules tend à homogénéiser leur concentration dans l'espace (Figure 3 : Lors de la diffusion moléculaire, les particules tendent à occuper tout l'espace et donc à homogénéiser la concentration.). La diffusion est modélisée par un mouvement brownien et grâce à une marche aléatoire. Le processus de dispersion des particules se fait à deux échelles différentes (Figure 4). Au sein du pore, l'espace interstitiel a un comportement identique à celui d'un tube. On y retrouve donc un profil des vitesses de type Poiseuille, c'est-à-dire des vitesses plus rapides au milieu du pore et plus faibles à mesure qu'on se rapproche du grain solide du milieu poreux. A l'échelle d'un volume élémentaire représentatif de milieu poreux, et bien que le nuage de particules se déplace à une vitesse constante (en direction et en module), les particules empruntent elles des trajectoires très différentes du fait de la tortuosité du milieu poreux.

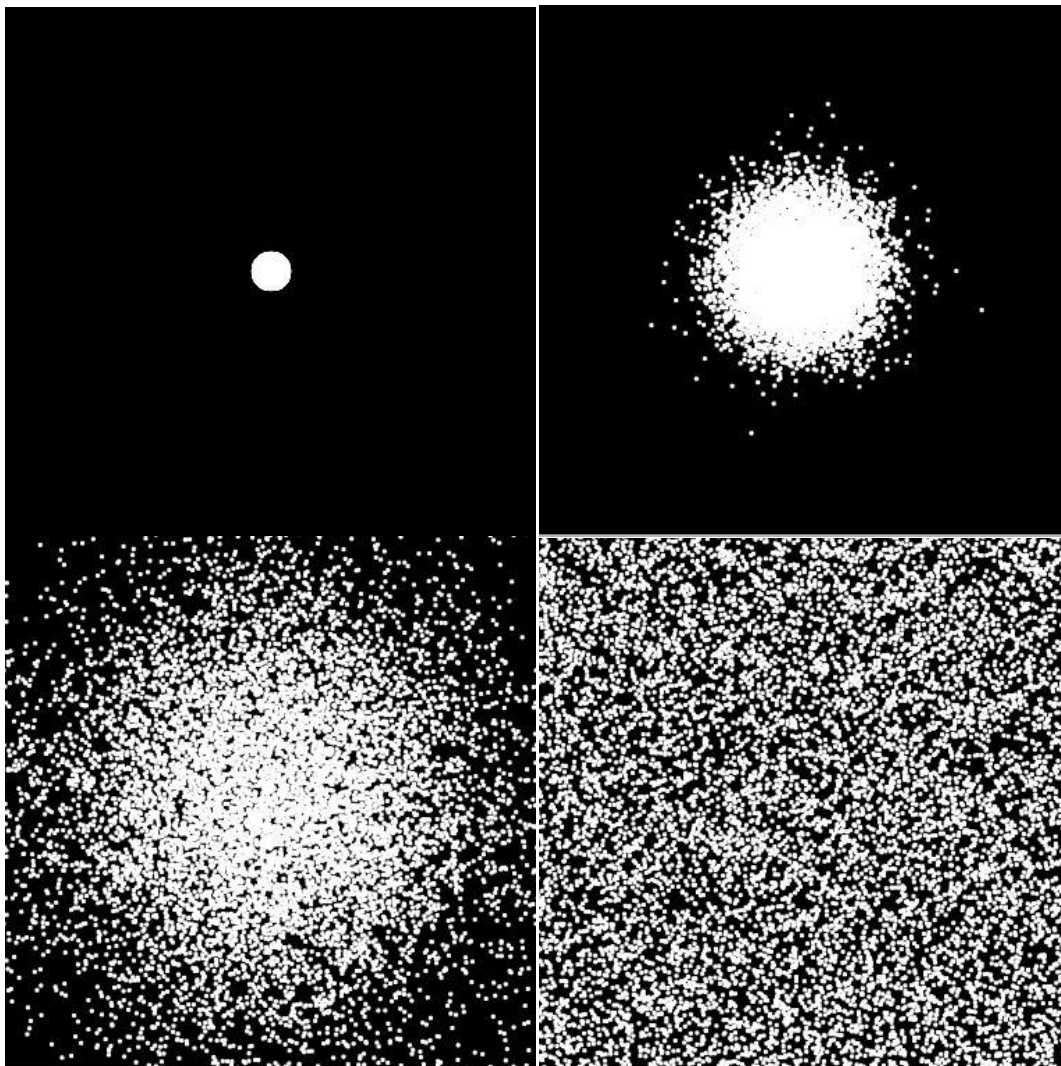


Figure 3 : Lors de la diffusion moléculaire, les particules tendent à occuper tout l'espace et donc à homogénéiser la concentration.

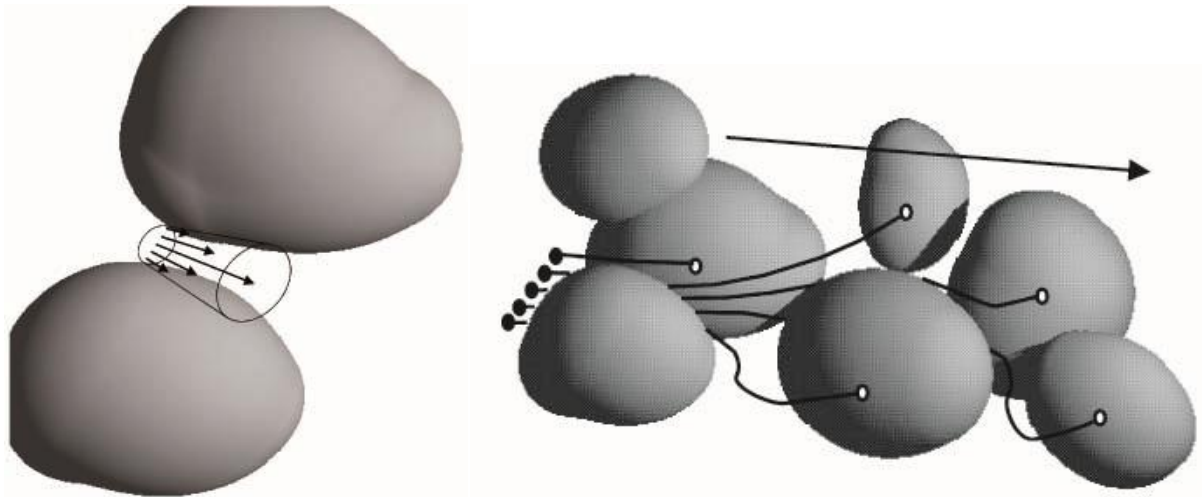


Figure 4 : La dispersion des particules se fait à deux échelles différentes. Au sein du pore (à gauche), et du fait de la tortuosité des chemins à parcourir (à droite).

Collectivité : le nuage de polluant est composé de particules individuelles qui, par leur comportement local, engendrent une forme particulière du nuage à une échelle macroscopique. Le passage des variables locales aux variables globales se fait par un simple calcul de moyenne. En effet, si le nuage est composé de n particules i de coordonnées (x_i, y_i) , on peut en déduire par exemple le centre de gravité du nuage de particules qui sera de coordonnées $(X = \sum_i \frac{x_i}{n}, Y = \sum_i \frac{y_i}{n})$. Les variables locales ou microscopiques sont (x_i, y_i) et les variables globales ou macroscopiques sont (X, Y) .

Détails

Initialisation

Chaque simulation débute par une initialisation des variables (conditions initiales et conditions aux limites) qui va contrôler le comportement de la simulation. Cette phase d'initialisation se fait par le biais des fonctions *InitialisationVariables* et *InitialisationPatches*. Elle consiste à calculer la charge hydraulique et les vitesses pour chaque patch, en fonction des paramètres qui ont été entrés par l'opérateur.

Entrées

Il n'y a pas d'entrées à proprement dit dans ce modèle, c'est-à-dire de données extérieures qui viendraient modifier dans le temps ou dans l'espace les conditions d'une simulation.

Fonctions

Le transfert de masse en milieu poreux.

Ce transfert est modélisé par l'équation dite de convection-dispersion ou équation de transfert (éq. 1):

$$\text{div}(\overrightarrow{D \text{ grad}}(C) - C\vec{U}) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{éq. 1}$$

Dans une vision très dichotomique, on peut dire qu'il existe deux types d'approches de résolution numérique de l'équation de transfert :

- Les méthodes aux différences finies et aux éléments finis. Elles ont l'inconvénient d'être peu précises pour les grands nombres de Péclet (cas où la convection domine sur la dispersion). En effet, leurs résultats sont biaisés par la dispersion numérique lorsque la convection devient prédominante. Cette dispersion numérique est liée à la double nature de l'équation de transfert : la dispersion donne une équation hyperbolique et la convection donne une équation parabolique. Ce problème ne peut être résolu que par un affinement poussé du maillage et donc avec de lourds temps de calculs.
- Les méthodes explicites ou encore appelées individu-centré, marcheur aléatoire, à base d'agents.

Les méthodes explicites.

Les méthodes à base d'agents ou de marche au hasard ("particle tracking", "random walk") sont issues de la physique statistique. Le polluant est représenté par des particules, des individus, des agents qui ont un mouvement de convection auquel s'ajoutent des fluctuations aléatoires rendant compte de la dispersion des vitesses dans le milieu poreux et de la diffusion moléculaire (Ackerer & Kinzelbach, 1985; Kinzelbach, 1986; Kinzelbach, 1988; Delay, *et al.*, 1994). Les propriétés statistiques du déplacement global du nuage de polluant sont connues et régies par les propriétés du milieu et les paramètres d'écoulement. Ces méthodes ne sont pas sujettes à la dispersion numérique dont souffrent les méthodes des différences finies ou aux éléments finis, mais elles génèrent des fluctuations de concentrations dues aux déplacements aléatoires des particules, fluctuations qui peuvent être atténuées en augmentant le nombre de particules. Ces oscillations sont générées dans les zones de basses concentrations (faible densité de particules). La méthode de marche au hasard demande, en général, un temps de calcul plus long qu'avec les autres méthodes. Mais la puissance de calcul croissante des ordinateurs donne à cette méthode une actualité scientifique riche et un avenir prometteur (Rahmatian, *et al.*, 2015, Bodin, 2015).

La méthode de marche au hasard est une méthode issue de la physique statistique utilisée pour les phénomènes de diffusion et de dispersion. La description déterministe du transfert d'un polluant en milieu poreux est rendue impossible du fait de la complexité de la géométrie du milieu. Puisque le mouvement d'un polluant ne peut pas être déterministe, la meilleure approche est de considérer la probabilité des mouvements possibles dans le milieu poreux. La méthode de marche au hasard traite l'équation de transfert de façon hyperbolique. Elle consiste à remplacer le nuage de polluant par un nombre de particules discrètes qui subissent un déplacement par convection, avec une vitesse moyenne, auquel s'ajoutent des fluctuations aléatoires (diffusion et dispersion) autour de ce mouvement moyen (Ackerer, *et al.*, 1990).

On considère $X(t)$, une variable aléatoire qui représente la position de la particule au temps t . Soit t_i , $i = 0, \dots, N$ l'ensemble des dates successives, chacune d'entre elles correspondant à un déplacement $S(t_i)$ de la particule : on parle de saut. Si les intervalles de temps sont égaux, alors $\Delta t = (t_{i-1} - t_i)$. On peut déterminer la trajectoire complète de la particule par :

$$X(t_n) = X(t_0) + \sum_{i=1}^n S(t_i)$$

Les déplacements de la particule sont supposés indépendants les uns des autres, on parle de processus markovien (Zhang, 2005) et dans ce cas la densité de probabilité s'écrit alors

$$W(X, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(X - V_m t)^2}{4Dt}\right)$$

L'écriture explicite dans un espace-temps discrétisé est alors :

$$X(t + \Delta t) = X(t) + \left(U + \frac{\partial D}{\partial t}\right) \Delta t + Z\sqrt{6D\Delta t}$$

Pour le passage en bidimensionnel, l'équation générale s'écrit (Wustmann, 1993) :

$$\frac{\partial W(X, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial X_i} \left(V_i + \sum_{j=1}^2 \frac{\partial D_{i,j}}{\partial X_j} \right) W(X, t) + \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D_{i,j} \frac{\partial W(X, t)}{\partial X_j} \right)$$

La solution explicite à cette équation est donc, en considérant que la dispersion n'est pas fonction de l'espace (les dérivées $\frac{\partial D_{i,j}}{\partial X_{i,j}}$ sont donc nulles) :

$$\begin{cases} X(t + \Delta t) = X(t) + V_T \Delta t + Z_1 \sqrt{6D_T \Delta t} \frac{V_T}{V_m} - Z_2 \sqrt{6D_L \Delta t} \frac{V_L}{V_m} \\ Y(t + \Delta t) = Y(t) + V_L \Delta t + Z_1 \sqrt{6D_T \Delta t} \frac{V_L}{V_m} + Z_2 \sqrt{6D_L \Delta t} \frac{V_T}{V_m} \end{cases} \quad (\text{éq. 2})$$

Avec, $X(t)$ et $Y(t)$ les coordonnées cartésienne d'une particule, V_L et V_T les vitesses longitudinale et transversale respectivement, $V_m = \sqrt{V_L^2 + V_T^2}$ la vitesse moyenne, Δt le pas de temps, $D_L = \alpha_L V_m$ et $D_T = \alpha_T V_m$ les coefficients de dispersion longitudinale et transversale respectivement, α_L et α_T les dispersivités longitudinale et transversale respectivement, Z_1 et Z_2 sont des nombres aléatoires de distribution uniforme entre -1 et 1.

Couplage de la géochimie

L'équation de transfert décrit le transport d'un élément conservatif (il ne se dégrade pas) et non réactif (il n'a pas d'échanges avec le solide), ce qui est très rare en réalité. On associe donc au transfert des phénomènes d'interactions simples (coefficient de retard, isothermes de Langmuir et de Freundlich), ou plus complexes comme la spéciation.

La réaction d'un soluté avec le milieu regroupe un ensemble de processus physico-chimiques qui retiennent le soluté sur les grains solides du milieu poreux. Parmi ces réactions on peut citer les échanges cationiques (les ions positivement chargés qui viennent en contact avec des surfaces négatives, des argiles par exemple) et les réactions chimiques (précipitation, dissolution, oxydoréduction). Dans le cas le plus simple et le plus fréquent, ces réactions sont considérées comme instantanées et réversibles. Cela signifie que les cinétiques de réactions sont très rapides et de même ordre de grandeur entre soluté et solide. Il apparaît dans ce cas un retard du soluté par rapport à un traceur non réactif. Ce retard s'exprime dans l'équation de transfert par un facteur justement appelé coefficient de retard. L'équation devient alors :

$$\text{div}(\overrightarrow{D \text{ grad}}(C) - C \overrightarrow{V_m}) = R \frac{\partial C}{\partial t}$$

Où C est la concentration [ML⁻³], t le temps [T], \vec{V}_m la vitesse moyenne de pore [LT⁻¹], D le tenseur de dispersion [L²T⁻¹] et R le coefficient de retard.

On voit que le facteur de retard diminue la vitesse moyenne V_m et la dispersion D du soluté (en les divisant). Physiquement, le facteur de retard s'exprime en fonction d'un coefficient de partition qui détermine le partage des quantités entre phase liquide (le soluté) et phase solide (les grains du milieu poreux).

La loi de Darcy

Le modèle de transfert décrit par l'équation (éq. 2) décrit le déplacement par convection, diffusion et dispersion des particules qui composent le nuage de polluant. Pour les paramètres donnés de la simulation, il convient maintenant de déterminer les variables du transfert : les vitesses d'écoulement.

Ces vitesses sont calculées grâce à la loi de Darcy. Henri Darcy, en étudiant les fontaines de la ville de Dijon, montra la relation de proportionnalité entre le débit du fluide qui traverse un milieu poreux et la charge hydraulique. Cette équation fondamentale de l'hydraulique permet donc de calculer la perte de charge due à la friction :

$$\begin{aligned} V_L &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \\ V_T &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \end{aligned} \quad (\text{éq. 3})$$

Avec k la perméabilité [LT⁻¹], ω la porosité [sans dimension] et h la charge hydraulique [L].

Calcul des vitesses : cas du régime naturel de l'aquifère

Ce cas correspond à celui présenté sur la Figure 1. Cette configuration correspond au régime naturel d'écoulement de l'aquifère qui fait un angle β constant par rapport à l'horizontal. La charge hydraulique est donc un plan d'équation :

$$h(x, y) = \beta y \quad (\text{éq. 4})$$

En intégrant l'équation (éq. 4) dans l'équation (éq. 3), donc en appliquant la dérivation, on obtient les vitesses :

$$\begin{aligned} V_L &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial}{\partial y} (\beta y) = -\frac{k\beta}{\omega R} \\ V_T &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial}{\partial x} (\beta y) = 0 \end{aligned} \quad (\text{éq. 5})$$

Ainsi, dans le cas d'un régime naturel, la convection est uniquement longitudinale, seules la diffusion et la dispersion permettent aux particules des mouvements transversaux. Si on intègre l'équation (éq. 5) dans le modèle de transfert (éq. 2), on obtient :

$$\begin{cases} X(t + \Delta t) = X(t) + Z_1 \sqrt{6\alpha_T \frac{k\beta}{\omega R}} \Delta t \\ Y(t + \Delta t) = Y(t) - \frac{k\beta}{\omega R} \Delta t + Z_2 \sqrt{6\alpha_L \frac{k\beta}{\omega R}} \Delta t \end{cases} \quad (\text{éq. 6})$$

Calcul des vitesses : cas de la mise en place d'un forage

Lorsqu'un forage est mis en place dans un aquifère, plus son débit q est important et plus la charge hydraulique de l'aquifère va être influencée (Figure 5).

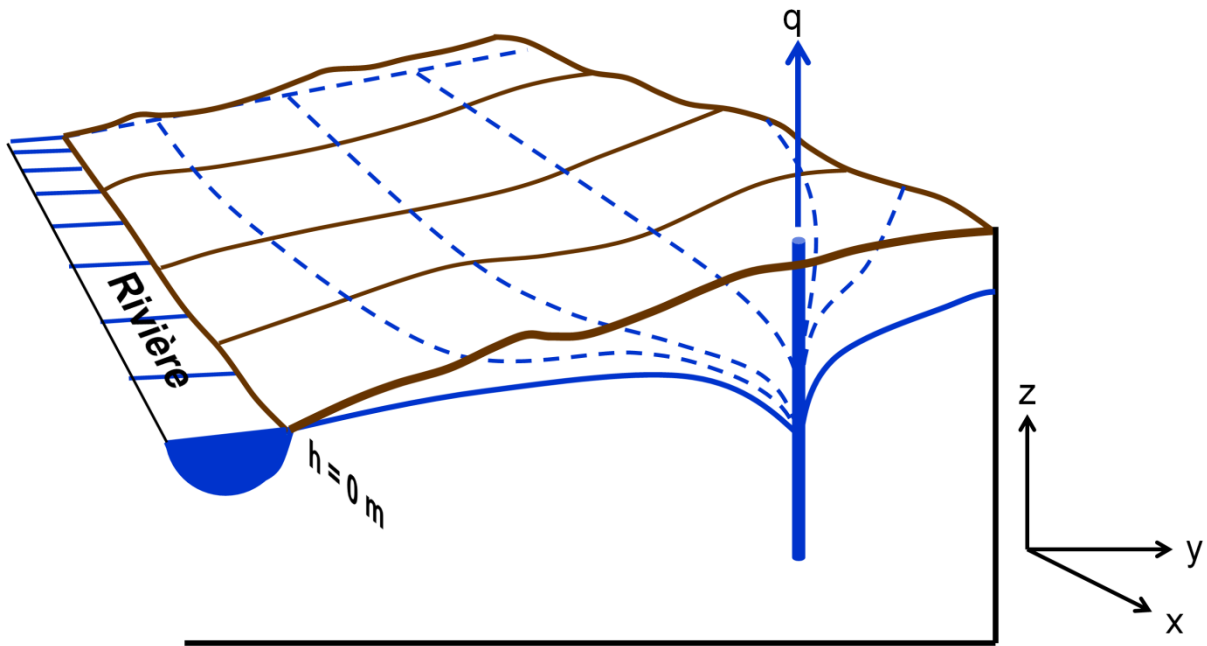


Figure 5 : Déformation de la charge hydraulique sous l'influence d'un forage de débit q .

La détermination de la charge hydraulique $h(x,y)$ en tout point (x,y) de l'aquifère demande de prendre en compte l'ensemble des conditions aux limites de ce système : le forage (appelé également terme source) et la rivière (limite à potentiel imposé, c'est-à-dire que son niveau reste constant, ici à la charge $h = 0$ m). L'expression de la charge hydraulique h influencée par un forage de débit q dans un milieu infini est bien connue (Marsily (de), 1986) et s'écrit :

$$h = -\frac{q}{2\pi T} \ln\left(\frac{R}{r_1}\right) + \beta y \quad (\text{éq. 7})$$

Avec r_1 la distance entre le point considéré et le forage et R le rayon d'action du forage.

Le rayon d'action R correspond à la distance au-delà de laquelle le forage n'a plus d'influence sur la charge hydraulique, c'est-à-dire lorsque la charge hydraulique retrouve son régime naturel.

La prise en compte de la rivière comme limite à potentiel imposé ($h = 0$ m) nécessite l'utilisation de la méthode des images. En effet, du fait de sa cote constante à $h = 0$ m, la rivière impose une compensation à la charge hydraulique : lorsqu'on pompe un débit de q m³/s dans l'aquifère, le potentiel imposé de la rivière est équivalent à réinjecter dans l'aquifère un débit de $-q$ m³/s (Figure 6). Ainsi la solution complète de la charge hydraulique en tout point de l'aquifère est la contribution du forage et de la rivière :

$$h = -\frac{q}{2\pi T} \ln\left(\frac{R}{r_1}\right) + \frac{q}{2\pi T} \ln\left(\frac{R}{r_2}\right) + \beta y \quad (\text{éq. 8})$$

Ce qui conduit à (le produit de deux logarithmes est égal au logarithme du produit) :

$$h = -\frac{q}{2\pi T} \ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + \beta y \quad (\text{éq. 9})$$

La Figure 6 permet d'exprimer les rayons r_1 et r_2 en fonction des coordonnées x et y par le théorème de Pythagore :

$$r_1 = \sqrt{(y - y_f)^2 + x^2}$$

$$r_2 = \sqrt{(y + y_f)^2 + x^2}$$

En intégrant la valeur de r_1 et r_2 dans l'équation (éq. 9), on a successivement :

$$\begin{aligned} h(x, y) &= -\frac{q}{2\pi T} \ln\left(\frac{\sqrt{(y + y_f)^2 + x^2}}{\sqrt{(y - y_f)^2 + x^2}}\right) + \beta y \\ &= -\frac{q}{4\pi T} \ln\left(\frac{(y + y_f)^2 + x^2}{(y - y_f)^2 + x^2}\right) + \beta y \quad (\text{éq. 10}) \end{aligned}$$

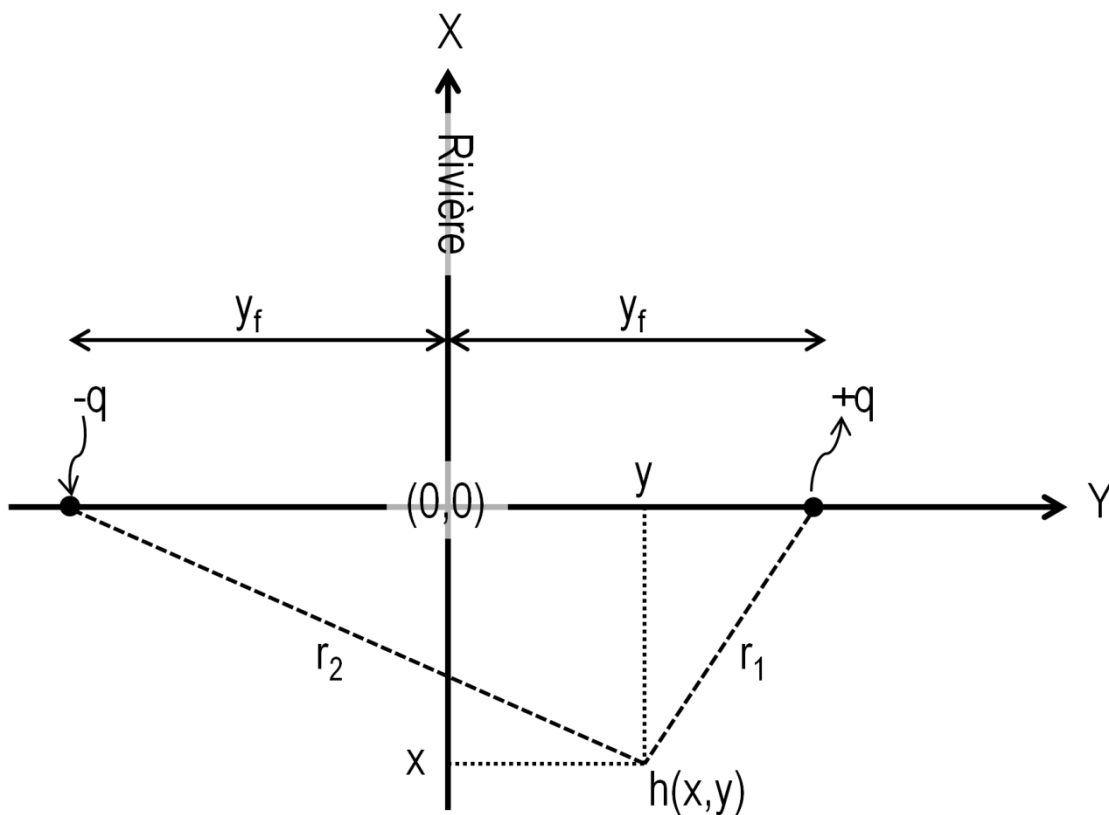


Figure 6 : Principe de la méthode des images pour la prise en compte des conditions aux limites dans le calcul de la charge hydraulique.

A partir de l'expression de la charge hydraulique (éq. 10), on peut calculer les vitesses associées en utilisant l'équation (éq. 3). Il vient alors successivement :

$$\begin{aligned}
 V_L &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial}{\partial y} \left[-\frac{q}{4\pi T} \ln \left(\frac{(y+y_f)^2 + x^2}{(y-y_f)^2 + x^2} \right) + \beta y \right] \\
 &= -\frac{k}{\omega R} \left[\beta - \frac{q}{4\pi T} \frac{\partial}{\partial y} \ln \left(\frac{(y+y_f)^2 + x^2}{(y-y_f)^2 + x^2} \right) \right] \\
 &= -\frac{k}{\omega R} \left[\beta - \frac{qy_f}{\pi T} \frac{x^2 + y_f^2 - y^2}{[(y-y_f)^2 + x^2][(y+y_f)^2 + x^2]} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_T &= -\frac{k}{\omega R} \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{q}{4\pi T} \ln \left(\frac{(y+y_f)^2 + x^2}{(y-y_f)^2 + x^2} \right) + \beta y \right] \\
 &= -\frac{k}{\omega R} \left[-\frac{q}{4\pi T} \frac{\partial}{\partial x} \ln \left(\frac{(y+y_f)^2 + x^2}{(y-y_f)^2 + x^2} \right) \right] \\
 &= -\frac{2kqy_f}{\pi T \omega R} \frac{xy}{[(y-y_f)^2 + x^2][(y+y_f)^2 + x^2]}
 \end{aligned}$$

Donc dans le cas d'un forage et d'une rivière comme potentiel imposé, les vitesses d'écoulement dans un aquifère sont données par le couple :

$$\begin{cases}
 V_L = -\frac{k}{\omega R} \left[\beta - \frac{qy_f}{\pi T} \frac{x^2 + y_f^2 - y^2}{[(y-y_f)^2 + x^2][(y+y_f)^2 + x^2]} \right] \\
 V_T = -\frac{2kqy_f}{\pi T \omega R} \frac{xy}{[(y-y_f)^2 + x^2][(y+y_f)^2 + x^2]}
 \end{cases} \quad (\text{éq. 11})$$

Ces vitesses sont calculées à partir de paramètres entrés par l'opérateur (éq. 11), et permettent à une particule de se mouvoir en fonction de sa position (x,y) dans l'aquifère.

Conclusion

Cet article présente un modèle de transfert de polluants en milieu poreux par une approche multi-agents. Le modèle représente un aquifère connecté hydrauliquement à un cours d'eau. Le modèle simule le transfert d'un polluant et calcule sa concentration en fonction du temps lorsqu'il atteint le cours d'eau. Le modèle est un outil à la fois pédagogique, pour aborder les problématiques de pollutions souterraines auprès des étudiant-e-s, et de recherche afin de donner des ordres de grandeurs et étudier des comportements hydrodynamiques simples.

Le modèle permet donc d'explorer à la fois l'approche multi-agents proprement dite mais aussi les processus de pollution des eaux souterraines. Pour ce qui concerne l'approche multi-agents, il est par exemple intéressant, pour des paramètres donnés, de changer uniquement le nombre de particules (par exemple 100, puis 1 000, puis 10 000) pour voir comment la courbe de concentration devient plus lisse lorsque ce nombre augmente. En effet, plus on augmente le nombre de particules et plus la discrétisation du nuage de polluant est fine. La courbe de concentration calculée se rapproche donc d'une solution exacte que l'on pourrait obtenir avec la solution de l'équation différentielle (éq. 12).

Pour explorer l'influence du forage sur la dynamique du polluant, on peut par exemple, pour des paramètres donnés, changer uniquement la valeur du débit du forage (par exemple 0, puis 0.01 m³/s) et voir comment la charge hydraulique est modifiée et donc comment la trajectoire des particules est influencée. On peut également garder la trace moyenne de ces trajectoires, en positionnant le bouton "Trace" sur "On", afin de voir le décalage spatiale de cette trajectoire lorsque la valeur du forage est augmentée.

Pour explorer l'influence de la taille de la source pour des paramètres donnés, on peut changer la taille de la source (par exemple 0 puis 50 m) et voir comment la forme initiale de cette source modifie l'évolution de la concentration du polluant dans la rivière. Plus la source est grande et plus la dispersion de la concentration dans la rivière est importante. Si on positionne le bouton "Trace" sur "On", on voit en revanche que la trajectoire moyenne n'est pas modifiée.

Les possibilités d'exploration sont importantes et peuvent encore être complexifiées en programmant NetLogo : plusieurs sources de polluants, plusieurs forages, ou encore une charge hydraulique qui fluctuerait dans le temps en fonction des précipitations. La rivière pourrait également être remplacée par une étendue d'eau salée (mer ou océan) afin d'explorer les problématiques d'intrusion du biseau salé. La comparaison avec une étude de cas réel pourrait également être envisagée en affectant au Monde de NetLogo les bonnes dimensions (Settings) et en introduisant sur graphique la concentration réelle du polluant. Enfin, il est aisé d'adapter les équations du transfert en 3D, mais là NetLogo n'est plus du tout adapté : le temps de calcul est bien trop important. Dans ce cas il est préférable d'envisager une programmation à compiler de type Fortran, C ou encore C++.

Bibliographie

- Ackerer P., Kinzelbach W., 1985, "Modélisation du transport de contaminant par la méthode de marche au hasard : influence des variations du champ d'écoulement au cours du temps sur la dispersion", in G. d. Marsily (éd), *The stochastic approach to subsurface flow*, 517–529.
- Ackerer P., Mosé R., Semra K., 1990, "Natural tracer test simulation by stochastic particle tracking method", in G. Moltyaner(éd), *Proceeding of the international conference on transport and mass exchange processes in sand and gravel aquifers : field and modelling studies*, 595–604.
- Banton O., Bangoy L., 1997, *Hydrogéologie multiscience environnementale des eaux*, AUPELF.
- Bear J., 1972 *Dynamics of fluids in porous media*, Elsevier.
- Bodin J., 2015, "From analytical solutions of solute transport equations to multidimensional time-domain random walk (TDRW) algorithms", *Water Resources Research*, Vol. 51, No 3, 1860-1871.
- Cihan A., Sukop M.C., Tyner J.S., Perfect E., Huang H., 2009, "Analytical Predictions and Lattice Boltzmann Simulations of Intrinsic Permeability for Mass Fractal Porous Media", *Vadose Zone J.* Vol. 8, 187–196.
- Delay F., Marsily (de) G., Carlier E., 1994, "One-dimensional solution of the transport equation in porous media in transient state by a new numerical method for the management of particle tracking", *Computers and Geosciences*, Vol. 20, No 7/8, 1169–1200.
- Fleurant C., Jeong W.C., 2001, "Dispersion of inert particles in a rough fracture", *Comptes Rendus Acad. Sci.*, Vol. 332, 115–120.
- Goblet P., 1981, *Modélisation des transferts de masse et d'énergie en aquifère*, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Grimm V., Berger U., Bastiansen F., Eliassen S., Ginot V., Giske J., Goss-Custard J., Grand T., Heinz S.K., Huse G., Huth A., Jepsen J.U., Jorgensen C., Mooij W.M., Mueller B., Pe'er G., Piou C., Railsback S.F., Robbins A.M., Robbins M.M., Rossmanith E., Rueger N., Strand E., Souissi S., Stillman R.A., Vabo R., Visser U., DeAngelis D.L., 2006, "A standard protocol for describing individual-based and agent-based models". *Ecol. Model.*, Vol. 198, 115–126.
- Hsu K.-C., Chen K.-C., 2010, "Multiscale flow and transport model in three-dimensional fractal porous media". *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.*, Vol. 24, 1053–1065.
- Hunt A.G., Gee G.W., 2002, "Application of critical path analysis to fractal porous media: comparison with examples from the Hanford site", *Adv. Water Resour.*, Vol. 25, 129–146.
- Jin Y., Zhu Y.B., Li X., Zheng J.L., Dong J.B., 2015, "Scaling Invariant Effects on the Permeability of Fractal Porous Media". *Transp. Porous Media*, Vol. 109, 433–453.
- Kinzelbach W., 1986, *Groundwater modeling*, Elsevier..
- Kinzelbach W., 1988, "Groundwater flow and quality modelling", in D. R. P. Company (éd), *The random walk method in pollutant transport simulation*, 227–245.
- Marsily (de) G., 1986, *Quantitative hydrology*, Academic Press London.

- Rahmatian N., Mei R., Klausner J., Petrasch J., 2015, "A coupled transport model for water splitting within a porous metal oxide thermochemical reactor using the random walk particle tracking method", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, No 13, 4451-4460.
- Wilensky U., 1999, NetLogo. <http://ccl.northwestern.edu/netlogo/>. Center for Connected Learning and Computer-Based Modeling, Northwestern University. Evanston, IL.
- Wustmann P., 1993, *Modélisation du transfert de solutés réactifs dans un milieu poreux saturé*, École Nationale du Génie de l'Eau et de l'Environnement de Strasbourg.
- Zhang Y., 2005, "Simulation of the diffusion process in composite porous media by random walks", *Progress in Natural Science*, Vol 15, No 12, 1117-1125.

Annexe 1 : transfert de masse en milieux poreux

La convection

La convection est l'entraînement d'une masse par le seul mouvement du fluide. Si on considère un volume quelconque représentatif de milieu poreux (on notera \vec{dS} un vecteur perpendiculaire sortant à la surface enveloppe de ce volume), alors l'expression mathématique de ce flux convectif s'écrit :

$$\varphi_c = \iint_S C \vec{V} \cdot \vec{dS} \quad (\text{éq. 12})$$

Où C est la concentration de la masse transportée [ML^{-3}], et \vec{V} la vitesse moyenne de pore [LT^{-1}] dans le milieu poreux.

La diffusion moléculaire

Dans un milieu poreux saturé en eau, cette agitation moléculaire ne peut se faire de façon isotrope à cause des grains solides du milieu. Pour tenir compte de ce phénomène qui réduit la possibilité qu'a une particule à diffuser, on définit un coefficient de diffusion moléculaire effectif (D_m) caractérisant la diffusion de l'élément dans le milieu considéré :

$$D_m = \tau d_0$$

Où τ est appelée la tortuosité (Bear, 1972).

La loi de Fick indique que ce flux de particules est proportionnel (pour un liquide au repos) au gradient de concentration. L'expression mathématique de ce flux diffusif s'écrit :

$$\varphi_d = \iint_S D_m \overrightarrow{\text{grad}}(C) \cdot \vec{dS} \quad (\text{éq. 13})$$

Où C est la concentration de la masse transportée [ML^{-3}], et D_m le coefficient de diffusion moléculaire dans le milieu poreux.

La dispersion

En milieu poreux, l'expression mathématique du flux dispersif s'écrit :

$$\varphi_D = \iint_S D \overrightarrow{\text{grad}}(C) \cdot \vec{dS} \quad (\text{éq. 14})$$

Avec D le tenseur de dispersion [LT^{-2}], symétrique et du second ordre. Sa direction principale est celle du vecteur vitesse de l'écoulement. Les coefficients du tenseur sont des fonctions du module de la vitesse d'écoulement. Si on exprime le tenseur de dispersion dans les directions principales d'anisotropie, on a :

$$D = \begin{pmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{pmatrix}$$

Où D_L est le coefficient de dispersion longitudinale (dans le sens de l'écoulement, ici l'axe Y - Figure 1) et D_T est le coefficient de dispersion transversale (perpendiculaire à l'écoulement, ici l'axe X). La forme générale des coefficients de dispersion est alors :

$$\begin{aligned} D_L &= D_m + \alpha_L V_m \\ D_T &= D_m + \alpha_T V_m \end{aligned}$$

Où α_L et α_T sont respectivement les dispersivités longitudinale et transversale [L] et V_m la vitesse moyenne de pore.

Si on prend en compte les trois processus que l'on vient de développer (convection, diffusion et dispersion), on peut écrire mathématiquement le déplacement d'un soluté en milieu poreux saturé. Il suffit pour cela d'établir une équation de conservation de la masse, c'est-à-dire que les flux convectif, diffusif et dispersif qui entrent ou sortent d'un volume représentatif produisent une variation de la concentration de masse en fonction du temps dans ce même volume. Cette équation de conservation s'écrit

$$\varphi_C + \varphi_a + \varphi_D = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V C dV \quad (\text{éq. 15})$$

Où dV [L³] est le volume représentatif. En intégrant les équations de flux 12, 13 et 14 dans 15, on obtient successivement :

$$\begin{aligned} \iint_S C \vec{v} \cdot \vec{dS} + \iint_S D_m \overrightarrow{\text{grad}}(C) \cdot \vec{dS} + \iint_S D \overrightarrow{\text{grad}}(C) \cdot \vec{dS} &= \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V C dV \\ \iint_S (C \vec{U} + \overrightarrow{D \text{grad}}(C)) \cdot \vec{dS} &= \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V C dV \end{aligned} \quad (\text{éq. 16})$$

Où \overrightarrow{D} est le tenseur de diffusion-dispersion [LT⁻²], symétrique et du second ordre qui associe donc le coefficient de diffusion moléculaire et le tenseur de dispersion.

Le passage à l'équation de transfert est réalisé en appliquant à l'équation 16 les formules d'Ostrogradski (transformation de l'intégrale de surface en intégrale de volume – éq. 17) et celle de Leibniz (passage de la différentielle dans l'opérateur intégral – éq. 18)

$$\iint_S \vec{\varphi} \cdot \vec{dS} = - \iiint_V \text{div}(\vec{\varphi}) \cdot dV \quad (\text{éq. 17})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \varphi dV = \iiint_V \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV \quad (\text{éq. 18})$$

Ainsi, l'équation de transfert s'écrit :

$$\text{div}(\overrightarrow{D \text{grad}}(C) - C \vec{U}) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\text{éq. 19})$$

L'équation de transfert s'écrit en monodimensionnel (Marsily (de), 1986) :

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V_m \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Où C est la concentration du traceur [ML⁻³], D_L est le coefficient de dispersion [LT⁻²] longitudinal et V_m la vitesse moyenne de pore [LT⁻¹]. Pour une injection instantanée d'une masse M de polluant (ce qui est le cas dans le modèle présenté ici), la solution de l'équation de transfert en monodimensionnel est :

$$C(x, t) = \frac{M}{2\omega\sqrt{\pi D_L t}} \exp\left(-\frac{(x - V_m t)^2}{4D_L t}\right)$$

Dans ces équations, D représente le coefficient de dispersion apparent, il inclut à la fois la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire. Il est défini comme étant égal à :

$$D = D_m + \alpha V_m$$

Où α est la dispersivité du milieu considéré et D_m le coefficient de diffusion moléculaire en milieu poreux.

Une solution analytique bidimensionnelle est donnée dans (Banton & Bangoy, 1997). Pour une injection instantanée et ponctuelle dans un milieu bidimensionnel infini une solution de l'équation de transfert 12 est :

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 S}{8\sqrt{\pi^3 t^3 D_L D_T}} \exp\left(-\frac{(y - V_L t)^2}{4D_L t} - \frac{x^2}{4D_T t}\right)$$

Où S est la section d'injection. Cette solution indique que les surfaces d'isoconcentration sont des ellipsoïdes de révolution suivant l'axe Y . Les centres de ces ellipsoïdes sont $(V_L t, 0, 0)$ et les demi-axes sont $(2D_L t, 2D_T t)$.

Annexe 2 : captures d'écran du modèle numérique.

L'utilisation du modèle numérique se déroule en cinq étapes :

- Etape 1, réglage des paramètres de la simulation : porosité, perméabilité et dispersivité de l'aquifère, nombre de particules de polluant ou encore débit du forage (Figure 7).
- Etape 2, positionnement des éléments comme le forage ou la source de pollution (Figure 7).
- Etape 3, visualisation du système aquifère, en cliquant sur le bouton "Visualisation" (Figure 7).
- Etape 4, création de la source du polluant : cette étape est réalisée en cliquant sur le bouton "Source de pollution" et elle positionne le nuage de particules de polluants sur la zone d'étude. De plus elle affiche la charge hydraulique de la nappe par un dégradé de couleur (Figure 8).
- Etape 5, calcul du transfert du nuage de particules : le nuage de polluant se déplace dans les conditions hydrodynamiques données par l'utilisateur dans les étapes 1et 2. Les particules qui atteignent la rivière sont comptabilisées et la concentration en fonction du temps est tracée sur un graphique (Figure 9).



Figure 7 : Le système aquifère et la simulation sont paramétrés lors des étapes 1 et 2. On visualise, en vue d'avion, le système en cliquant sur le bouton "Visualisation", étape 3.

1. Régler les paramètres

Facteur de retard du polluant

FacteurRetard 1.0

Dispersivité de l'aquifère

Dispersivite 1.0 m

Pas de temps

PasTempsJ 3.85 jours

Nombre de Particules

NombreParticules 4330

Débit du forage

DebitForage 0.0093 m3/s

Transmissivité

Transmissivite 0.005201 m2/s

Epaisseur de l'aquifère

EpaisseurAquifere 50 m

Pente de l'aquifère

Pente 0.6 %

Porosité de l'aquifère

PorositeAquifere 18.4 %

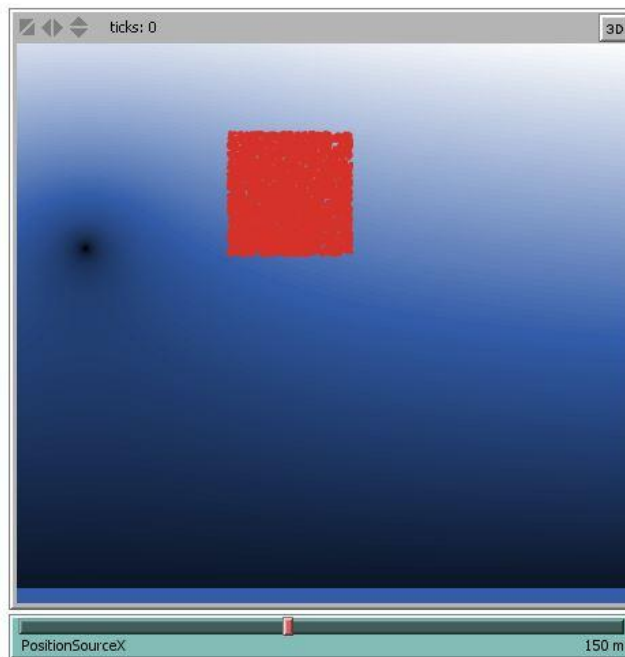
Taille de la source de pollution

TailleSource 45 m

Visualiser la trace moyenne ou non ?

On Trace
Off

2. Choisir les coordonnées du forage et de la source de pollution



3. Visualiser le système

Visualisation

4. Créer la source

Source de pollution

5. Simuler le transfert

Transfert



Figure 8 : En cliquant sur le bouton "Source de polluant" (étape 4), on visualise le nuage de particules ainsi que la charge hydraulique de l'aquifère, en dégradé.

1. Régler les paramètres

Facteur de retard du polluant
FacteurRetard 1.0

Dispersivité de l'aquifère
Dispersivite 1.0 m

Pas de temps
PasTempsJ 3.85 jours

Nombre de Particules
NombreParticules 4330

Débit du forage
DebitForage 0.0093 m³/s

Transmissivité
Transmissivite 0.005201 m²/s

Épaisseur de l'aquifère
EpaisseurAquifere 50 m

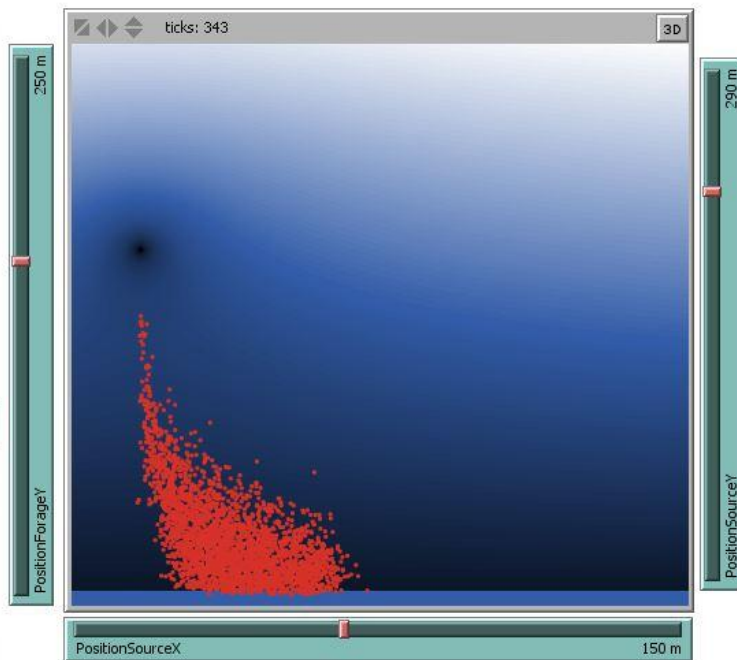
Pente de l'aquifère
Pente 0.6 %

Porosité de l'aquifère
PorositeAquifere 18.4 %

Taille de la source de pollution
TailleSource 45 m

Visualiser la trace moyenne ou non ?
 On Trace
 Off

2. Choisir les coordonnées du forage et de la source de pollution



3. Visualiser le système

Visualisation

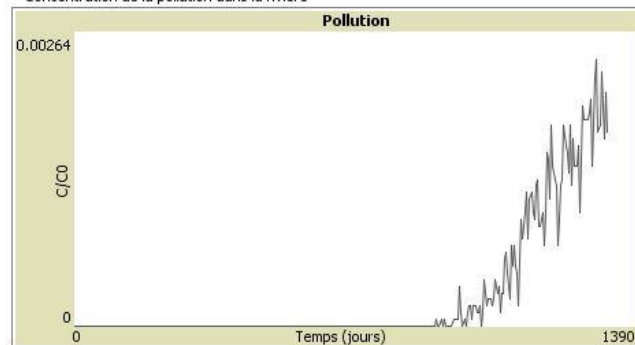
4. Créer la source

Source de pollution

5. Simuler le transfert

Transfert

Concentration de la pollution dans la rivière



Effacer le graphique

Figure 9 : le nuage de polluant se déplace dans les conditions hydrodynamiques données par l'utilisateur. Les particules atteignent la rivière (bande bleue en bas de l'écran) sont comptabilisées et tracées sur le graphique en fonction du temps.