

## THEORIE DE L'APPROCHE HYDROGEOLOGIQUE DES ECOULEMENTS ET TRANSPORTS EN ZONE PARTIELLEMENT SATUREE

Alain DASSARGUES<sup>1</sup>

(16 figures)

*1. Laboratoires de Géologie de l'Ingénieur, d'Hydrogéologie et de Prospection Géophysique,  
B.19 Sart-Tilman, B 4000 Liège (Belgique)*

**RESUME.** Les définitions, conventions et hypothèses relatives à la prise en compte des milieux poreux partiellement saturés, sont rappelées en soulignant les particularités par rapport à la zone saturée habituellement considérée par les hydrogéologues. Ensuite, les fondements de l'hydrostatique et de l'hydrodynamique de ces milieux partiellement saturés est détaillée. L'accent est mis sur la similitude des lois avec les écoulements monophasiques et multiphasiques en milieu poreux saturé, mais également sur les fortes variations des paramètres (comme par exemple la perméabilité) en fonction de la teneur en eau ou du degré de saturation régnant dans le milieu poreux.

Les transports de polluants miscibles et non-miscibles en zone partiellement saturée sont des processus complexes qui sont simplifiés conceptuellement afin de pouvoir établir leurs équations. Néanmoins, malgré les hypothèses prises, il apparaît qu'il est difficile de réaliser des modèles de transport de polluant en zone non-saturée, surtout à cause du manque de données expérimentales, nécessaires à la paramétrisation des lois constitutives. Par contre, les moyens numériques actuels et les programmes existants permettent la prise en compte de couplages et non linéarités complexes.

**MOTS-CLES:** Ecoulements, transports, non-saturé, équations, modélisation.

**ABSTRACT.** *Theory of the hydrogeological approach for groundwater flow and transport in the partially saturated zone.* Definitions, conventions and assumptions which are generally accepted when considering partially saturated porous media are proposed. The differences with the saturated zone (more usually studied by hydrogeologists) are pointed out. Then the basic hydrostatic and hydrodynamic theories are detailed. Emphasis is given on the similitudes with single and multiphase flows in saturated porous media, but also on the strong variations of the parameters (as for example the hydraulic conductivity) in function of the water content or the saturation degree.

Miscible and immiscible pollutant transport in the partially saturated zone are described as complex processes. In order to be able to simulate them by numerical models, they are conceptually simplified in the constitutive laws. Nevertheless, despite all the chosen assumptions, it appears that modelling transport in the non saturated zone is still a difficult exercise due essentially to the general lack of experimental data. These data are needed for the parameterization of the constitutive laws which are implemented in very sophisticated numerical codes allowing to take into account very complex coupled and non linear situations.

**KEYWORDS:** Non saturated zone, flow and transport, equations and modelling.

## 1. INTRODUCTION

Précédemment, la zone non-saturée était seulement considérée par les hydrogéologues comme un domaine à travers lequel l'eau d'infiltration due à la pluviométrie percolait pour rejoindre et réalimenter l'aquifère. Le détail du parcours réel de l'eau à travers la zone non-saturée n'avait pas grande importance; dans le meilleur des cas, on calculait juste un "déphasage" entre la pluviométrie enregistrée à la surface et la réalimentation de l'aquifère.

Depuis que sont étudiés avec précision les problèmes de contamination des aquifères par des polluants venant, dans la plupart des cas, de la surface du sol ou de la proximité de celle-ci, la situation a complètement changé. En effet, ces polluants sont transportés vers le bas par l'eau d'infiltration à travers la zone non-saturée. Les hydrogéologues sont donc de plus en plus consultés pour utiliser leur expérience des écoulements souterrains, des problèmes de contamination ou de nettoyage de la zone non-saturée. En effet, en enlevant ou en remédiant à la pollution se trouvant dans cette zone, on évite de mettre en danger la qualité de l'eau de l'aquifère sous-incombant.

De plus, les processus prenant cours dans la zone non-saturée sont loin d'être simples. Il s'agit d'un système complexe que l'on peut qualifier de "réacteur biochimique géant" à travers lequel le transport de polluant est réalisé via une série de processus biologiques, chimiques et physiques.

Le polluant peut également former une phase distincte de l'eau (exemple: les hydrocarbures). Dans la zone non-saturée, on se trouve alors face à un problème triphasique: eau, air, fluide non aqueux. Malgré que ce fluide non aqueux forme une phase à part entière, une certaine quantité de ce produit peut également se dissoudre dans l'eau et donc être également transporté au sein de cette phase. La complexité des problèmes oblige les scientifiques et les professionnels à travailler avec des experts d'autres spécialités : agronomie, chimie, chimie des sols, microbiologie,...

## 2. DEFINITIONS, CONVENTIONS ET HYPOTHESES

Les roches meubles ou indurées constituant le sol et le sous-sol peuvent toutes être considérées comme formant ce qu'on appelle un milieu poreux se caractérisant par la présence d'une matrice solide et d'espaces. Ces espaces correspondent aux pores de la roche ou aux chenaux, fissures, fractures, cavités que l'on peut rencontrer dans

diverses formations géologiques. Des phases fluides (par exemple: l'air, l'eau, des hydrocarbures, ...) occupent ces espaces disséminés dans le milieu. Ces espaces peuvent être interconnectés ou isolés. On supposera généralement qu'une portion suffisante de ceux-ci constitue un espace interconnecté de manière à rendre possible le mouvement de fluides et le transport de contaminant.

Une phase peut être définie comme un domaine séparé des autres par une interface (transition) qui paraît abrupte à l'échelle macroscopique (sans utiliser de microscope). Chaque phase est supposée constituer un milieu continu. Les variables d'état décrivant les propriétés de la phase (exemple: pression du fluide, concentration en polluant dissout) et les paramètres ou coefficients relatifs à cette phase (exemple: viscosité, compressibilité...) peuvent être attribués à chaque point de la phase. Par exemple, macroscopiquement, en chaque point du domaine étudié, il existe une valeur de concentration de polluant dans l'eau alors qu'en réalité ce n'est pas le cas microscopiquement. En fait, les variables d'état et les paramètres sont obtenus en calculant pour chaque élément de volume représentatif (macroscopique et autour du point concerné), les valeurs moyennes des propriétés décrites au niveau microscopique. Les notions de phases solides et fluides sont donc des concepts issus de l'hypothèse de continuité et obtenues à partir du calcul de valeurs moyennes ou équivalentes pour un certain volume.

Pour la modélisation, la définition d'un milieu poreux sera donc une zone occupée par un certain nombre de phases parmi lesquelles au moins une est solide et pour laquelle un Élément de Volume Représentatif (EVR) peut être trouvé. Cela signifie que si un EVR ne peut être trouvé, le domaine considéré ne peut être qualifié de milieu poreux (Bear, 1991). On constate que les notions de continuité, de milieu poreux et d'EVR sont indissociables dans l'approche réalisée.

Dans les réservoirs assimilés à des milieux poreux, l'écoulement d'un fluide à travers le réseau de pores, de chenaux et de fissures s'effectue moyennant des conditions aux frontières, correspondant aux interfaces microscopiques eau-solide en zone saturée et eau-air en zone non-saturée. Immédiatement se pose le problème de l'échelle à laquelle les processus doivent être étudiés. À l'échelle microscopique, on se heurte très rapidement à l'impossibilité de décrire *in extenso* la géométrie tortueuse et non répétitive des frontières imposées à l'écoulement, ainsi qu'au manque de vérification par des mesures éventuelles. Le niveau de description à utiliser est donc l'échelle

macroscopique avec, comme hypothèse indispensable et sous-jacente, la continuité des différentes phases composant le milieu. Les paramètres utilisés seront donc macroscopiques et représenteront certaines moyennes de propriétés microscopiques correspondantes.

L'hypothèse du *continuum* est utilisée pour passer du niveau microscopique au niveau macroscopique, par un processus de calcul de valeur moyenne. Selon cette hypothèse, un EVR de milieu poreux réel (comprenant plusieurs phases qui occupent seulement une portion du volume concerné) est remplacé par un modèle de cet EVR dans lequel chaque phase est continue et présente (conceptuellement) en chaque point de l'EVR.

La zone est saturée lorsque la totalité de l'espace poreux est occupé par de l'eau et peut-être une autre phase liquide. La zone est non-saturée ou partiellement saturée (zone vadose, zone d'aération,...) là où seulement une partie de l'espace poreux est occupé par l'eau, le reste étant occupé par une phase gazeuse et peut-être une autre phase liquide. Dans la zone partiellement saturée, la teneur en eau joue un rôle très important non seulement pour les écoulements ultérieurs d'eau mais surtout pour le transport d'éventuels contaminants, la transformation ou le stockage provisoire de substances dissoutes. La zone non-saturée est parfois divisée en 3 sous-zones : (1) le sol ou zone enracinée près de la surface; (2) la zone vadose ou intermédiaire; (3) la frange capillaire. Le terme aquifère désigne une formation géologique saturée d'eau et permettant à l'eau de se mouvoir. Il s'agit d'une définition relative en fonction de son aisance à stocker et transporter de l'eau.

Le premier fluide est la phase gazeuse, le plus souvent considérée comme uniquement l'air, mais parfois il est important de tenir compte de fractions gazeuses provenant de contaminants et notamment de produits chimiques organiques volatiles. Le deuxième fluide est d'habitude la phase aqueuse (ou solution aqueuse). Quand arrive un polluant, ce dernier peut parfois être considéré comme totalement non-miscible dans l'eau. C'est très rare car des quantités dissoutes de 5 parts par billion (ppb) peuvent déjà être considérées comme polluantes car détectées par le goût (exemple des hydrocarbures) ou nocives pour la santé; de ce fait, même des solubilités très faibles doivent rester significatives dans nos calculs. Cependant, on remarque que bien souvent, les produits chimiques caractérisés par de très faibles solubilités dans l'eau sont par contre fort absorbés sur la matrice solide des sols. Les substances chimiques

présentes dans l'eau peuvent également réagir avec la matrice solide ou avec les composés chimiques présents au préalable, avec pour résultat la précipitation de certaines substances ou la dissolution de la matrice du sol.

Que les processus soient considérés en zone saturée ou partiellement saturée, les interactions entre écoulements, transports, tassements (géomécanique), thermodynamique et phénomènes physico-chimiques sont, selon les circonstances, à prendre en compte. En zone partiellement saturée, les couplages sont souvent encore plus importants à prendre en compte et les paramètres sont tous affectés par des variations hautement non linéaires.

Rappelons que la surface phréatique est la surface constituant la limite supérieure de la zone saturée. Elle est définie comme la surface où la pression de l'eau est atmosphérique. Elle peut être mesurée par des piézomètres ouverts, crépinés dans la partie saturée. La frange capillaire est la zone située au-dessus de la surface phréatique mais où l'espace poreux est "virtuellement" encore saturé par l'eau. Elle a une épaisseur de 0 à quelques mètres selon la granulométrie du matériau poreux. La surface libre est alors la surface lissée constituant le sommet de la frange capillaire, tout ce qui est en-dessous étant "pratiquement" saturé. Cependant d'habitude, sauf mention explicite contraire, les termes surface libre et surface phréatique sont considérés comme équivalents. La surface piézométrique d'un aquifère est déterminée en reprenant l'ensemble des hauteurs piézométriques mesurées. Pour un aquifère libre, la surface libre ou phréatique coïncide avec la surface piézométrique.

Un milieu poreux est homogène pour une propriété si la valeur de celle-ci est inchangée en tous points du domaine. Si ce n'est pas le cas, le milieu est hétérogène. En pratique, ces propriétés dépendent de la taille des éventuelles hétérogénéités du milieu poreux par rapport à l'ensemble du problème considéré: des hétérogénéités à l'échelle microscopique peuvent être "homogénéisées" par le calcul des valeurs moyennes des paramètres, effectué à l'échelle macroscopique de l'EVR choisi.

### 3. SATURATION ET TENEUR EN FLUIDE

La quantité d'une phase fluide en un temps  $t$  et à un point de l'EVR de milieu poreux peut être définie par :

- (1) le contenu en fluide (pour les hydrogéologues, souvent la teneur en eau)

$$\theta = \frac{\text{volume de la phase fluide dans l'E. V. R.}}{\text{volume de l'E. V. R.}}$$

avec  $0 \leq \theta \leq n$  où  $n$  est la porosité du milieu poreux.

(2) la saturation en fluide (souvent ... en eau)

$$S = \frac{\text{volume de la phase fluide dans l'E. V. R.}}{\text{volume de l'espace poreux dans l'E. V. R.}}$$

avec  $0 \leq S \leq 1$

Ces deux définitions sont liées entre elles par :

$$\theta = n \cdot S$$

Il est à remarquer que si le milieu poreux est déformable, la valeur de  $n$  peut varier.

#### 4. HYDROSTATIQUE DE LA ZONE NON-SATURÉE

L'étude de la zone non-saturée est, par bien des aspects, plus complexe que celle de la zone saturée. En effet, non seulement les écoulements et transports peuvent être considérés comme se passant dans un milieu multiphasique, mais de plus, l'hétérogénéité s'ajoute au fait que les paramètres vont dépendre de la saturation en fluide. Cette zone est donc bien difficile à décrire de façon fiable dans les modèles.

Dans la suite de cet article, nous tenterons de synthétiser l'essentiel de la théorie de l'hydrostatique et de l'hydrodynamique en zone partiellement saturée. Cette synthèse est réalisée en vue de l'établissement des équations nécessaires aux modèles numériques qu'utilisent les hydrogéologues. L'approche agronomique et de la physique des sols relative à la zone non saturée poursuit d'autres buts que les nôtres et se limite bien souvent à une couche superficielle des terrains de l'ordre de 3 à 5 mètres d'épaisseur.

##### 4.1. TENSION D'INTERFACE

La tension d'interface est la tension existant à l'interface entre deux phases non-miscibles jusqu'à un certain point. Considérons deux liquides (ou un liquide et un gaz) pas trop miscibles, possédant une interface commune abrupte. Pour comprendre ce qui se passe dans les zones d'interfaces, il faut passer aux échelles plus petites : microscopique et moléculaire. Lorsqu'au niveau de l'échelle inférieure, les processus seront compris (pourquoi a-t-

on telle ou telle porosité, perméabilité, etc...), alors on pourra retourner à l'échelle supérieure en faisant des moyennes des paramètres caractéristiques du processus étudié sur les Eléments de Volume Représentatifs (EVR).

Si on prend la figure 1 comme une "photo" à l'échelle microscopique, on ne comprend pas encore les processus en cours ; il faut descendre à l'échelle moléculaire pour voir à quoi correspond cette interface.

En termes simples, les molécules d'eau situées à l'intérieur de la phase aqueuse sont entourées d'autres molécules d'eau; elles sont donc en équilibre car les attractions sont identiques dans toutes les directions. C'est la même chose dans la phase gazeuse. Quand on considère une molécule qui est sur l'interface liquide-gaz (air), elle subit une force résultante (de toutes les attractions) vers l'intérieur du liquide. La résultante de la force est vers le liquide. Si on voulait allonger cette interface entre l'eau et l'air en y ajoutant des molécules, on devrait réaliser un travail pour amener ces molécules dans la zone mélangée que constitue la zone de transition (interface vue au niveau moléculaire). Cette zone est épaisse de quelques molécules.

Conceptuellement, on peut se représenter ce processus en imaginant une fine membrane tendue qui séparerait tout à fait les molécules d'eau et de gaz. Pour les conditions de pression, de température et de concentration ( $p$ ,  $T$ ,  $C$ ) régnant dans le milieu, la surface de cette membrane est minimale, correspondant à un minimum d'énergie au niveau moléculaire.

L'énergie par unité de surface correspond à la tension d'interface entre les 2 fluides concernés ou entre un fluide et un gaz. Cette tension d'interface ou tension de surface dépend fort de la température et des concentrations en produits dissous dans l'eau. Au niveau microscopique, on observe des ménisques entre les deux phases (fig. 1).

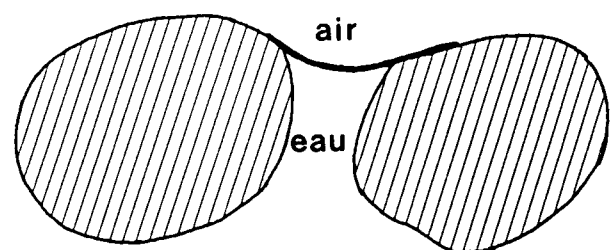


Fig. 1. Interface air-eau en milieu poreux non-saturé (vue microscopique).

## 4.2. ANGLE DE CONTACT

L'angle de contact ou angle de mouillabilité  $\theta$  est l'angle entre la surface solide (prise conventionnellement comme référence) et l'interface fluide-gaz (ou fluide 1 - fluide 2). Cet angle est mesuré conventionnellement à travers le fluide le plus dense (fig.2). Si  $\theta < 90^\circ$ , le liquide est le fluide mouillant, l'autre phase (pour laquelle  $\theta > 90^\circ$ ) étant le fluide non mouillant. En termes simples, le fluide mouillant "aime" le solide, il essaie de s'étaler dessus; le fluide non mouillant "déteste" le solide, il essaie de s'éloigner..., de diminuer au maximum la surface de contact (fig. 3). Pour la zone non-saturée, l'eau est mouillante sur les grains solides, l'air est non-mouillant et les produits non-aqueux ("NAPL" pour "Non Aqueous Phase Liquid") qui sont souvent des hydrocarbures sont moyennement mouillants.

Le comportement et la présence ou non de l'eau dans la zone non-saturée dépend étroitement des tensions d'interfaces et des angles de contact. Si on considère les forces agissant sur les molécules d'eau au voisinage d'un grain de solide, les forces d'attraction vont décroître rapidement à mesure que l'on s'éloigne du solide. Par conséquent, lorsque l'on désature un échantillon de milieu poreux, les pores les plus larges seront les premiers drainés. La quantité d'eau adhésive ou même adsorbée est d'autant plus importante que le pore est étroit. Lors d'un drainage complet, il y a toujours un film d'eau qui reste par capillarité. Pour sortir la totalité de l'eau du milieu poreux, ces forces de capillarité devraient être vaincues en imposant une pression de succion.

## 4.3. PRESSION CAPILLAIRE

Sur le ménisque entre l'eau et l'air (fig. 1), les pressions ne sont pas les mêmes de part et d'autre de l'interface à l'échelle moléculaire. La différence entre la pression dans l'eau et dans l'air est la pression capillaire. Le rayon de courbure de l'interface air-eau peut tendre vers l'infini si la dimension des pores fait de même, tendant à annuler la pression capillaire. Au contraire, dans les pores étroits, la pression capillaire augmente très fort.

A l'échelle macroscopique de l' EVR, et si on prend la convention que la pression atmosphérique est nulle, on a :

$$p_c = - p^w \quad (1)$$

où  $p^w$  est la pression moyenne dans la phase mouillante de l'EVR.

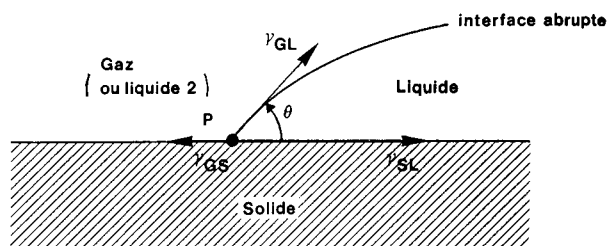


Fig. 2. Tension de surface et angle de contact  
 $\gamma_{SL}$  = tension de surface solide - liquide  
 $\gamma_{GS}$  = tension de surface gaz - solide  
 $\gamma_{GL}$  = tension de surface gaz - liquide

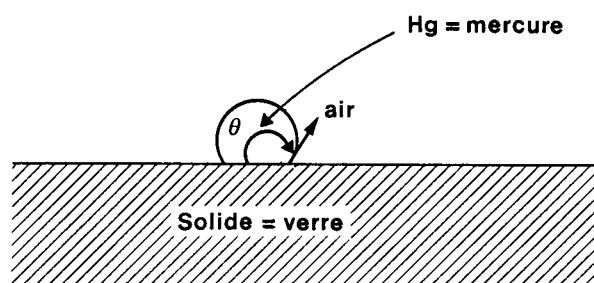


Fig. 3. Exemple de fluide non mouillant, la goutte de mercure sur du verre.

La pression capillaire ( $p_c$ ) est définie comme une grandeur positive et la pression (moyenne) dans la phase mouillante ( $p^w$ ) est négative. Il en découle simplement les faits suivants: (a) on ne peut pomper dans un puits qui ne traverse que la zone non-saturée; (b) si on veut de l'eau, il faut créer une pression de succion  $p < p^w$ ; (c) on ne peut nettoyer la zone non-saturée sans créer une dépression.

Les spécialistes des sciences des sols utilisent habituellement la notion de hauteur de succion, ou succion, notée  $\psi$  ("matric suction"; capillary pressure head) :

$$\psi = - \frac{p^w}{\rho_w \cdot g} > 0 \quad (2)$$

où  $\rho_w$  est la masse volumique de l'eau. Cette relation ne peut être utilisée que quand la densité de l'eau a une valeur moyenne constante. De façon générale, lorsque pour le problème considéré, la densité du fluide est variable, on utilise toujours les pressions comme variable d'état. Si la densité est constante, on peut prendre la hauteur piézométrique comme variable d'état.

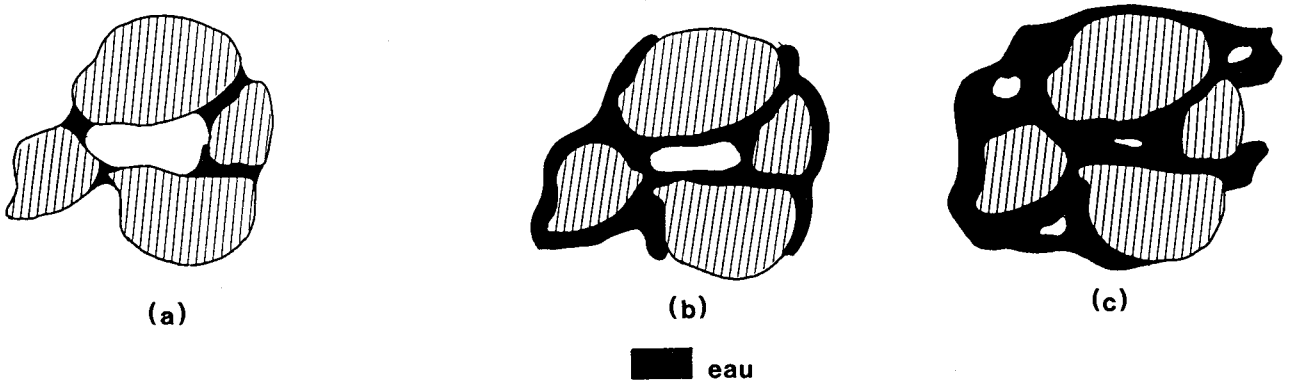


Fig. 4. Répartitions de l'eau et de l'air à différentes saturations : a) formation de ménisques à faible saturation, b) augmentation de la saturation en eau, c) bulles d'air piégées correspondant à une saturation résiduelle en air.

#### 4.4. COURBES DE VARIATION DE LA PRES- SION CAPILLAIRE

Lors du drainage du milieu poreux non-saturé, lorsque la saturation en eau ( $S_w$ ) devient faible, l'eau tend à rester dans le milieu sous forme de ménisques entre les grains (fig. 4). Comme on l'a signalé précédemment, ceci est le résultat du jeu des tensions de surface amenant les pores les plus larges à se drainer les premiers. Graduellement, il devient impossible pour l'eau résiduelle de se mouvoir, la perméabilité à l'eau du milieu poreux non-saturé devenant quasi nulle.

Au contraire, lorsqu'un essai d'imbibition (de saturation) du milieu poreux est réalisé, l'air se retire d'abord librement, ensuite une certaine quantité reste piégée sous forme de bulles dans l'eau (fig. 4). Le milieu garde donc une saturation résiduelle en air, mais la pression ne peut plus se transmettre dans cette phase.

Lorsque le milieu est drainé, la pression capillaire augmente et on peut obtenir une courbe de variation de pression capillaire en fonction de la saturation en eau ( $S_w$ ) ou de la teneur en eau ( $\theta_w$ ):

$$p_c = p_c(S_w) = p_c(\theta_w) \quad (3)$$

On constate (fig. 5) que la courbe obtenue, appelée aussi courbe de rétention, dépend de la granulométrie du sol, c'est logique puisque les pressions capillaires dépendent des tensions d'interface qui dépendent des rayons de courbure des ménisques entre grains solides.

De nombreuses méthodes sont utilisées pour déterminer les pressions capillaires en laboratoire et *in situ*. En laboratoire, on utilise l'extracteur à plaque poreuse ou un autre procédé relevant plu-

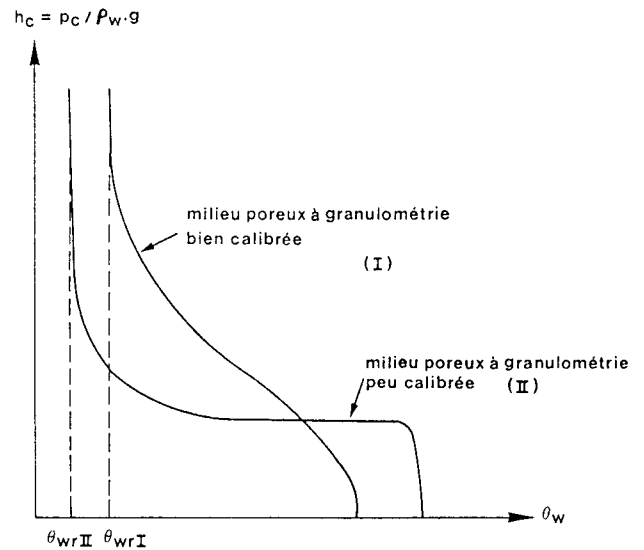


Fig. 5. Courbes typiques de la pression capillaire en fonction de la teneur en eau.

tôt de la marmite à pression (pour les plus hautes pressions capillaires). Sur le terrain, on utilise des tensiomètres, ou des capteurs à membrane (Musy et Soutter, 1991).

Des méthodes ont également été développées pour établir la courbe  $p_c = p_c(S_w)$  en fonction des données granulométriques du milieu poreux étudié. Bien que très attrayantes, elles n'ont donné, jusqu'à présent, que de piètres résultats lorsque ceux-ci sont confrontés à la réalité.

Se basant sur la similarité des courbes obtenues pour des sols ou milieu poreux de types similaires, de nombreux auteurs ont proposé des expressions analytiques pour les courbes de rétention de fluide, avec des coefficients à ajuster par comparaison aux mesures. Pour le système air-eau en milieu poreux (non-saturé), souvent la pression de l'air est considérée nulle ( $p_a = 0$ ) et les relations suivantes sont proposées :

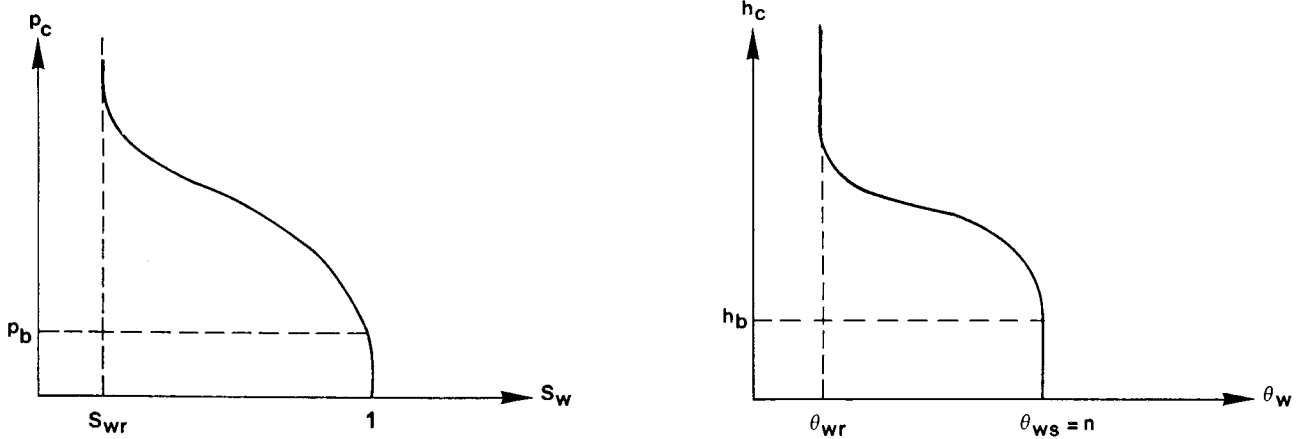


Fig. 6. Courbe de rétention.

- Brooks & Corey (1964) expriment la saturation relative ou effective par

$$\tilde{S}_w = \begin{cases} (p_b/p_c)^\lambda & \text{si } p_c \geq p_b \\ 1 & \text{si } p_c < p_b \end{cases} \quad (4)$$

où  $\lambda$  est l' "indice de distribution de la taille des pores ou indice porosimétrique,  
 $p_b$  est la pression d'entrée d'air correspondant à la valeur minimum de  $p_c$  pour laquelle l'air contenu dans le milieu peut constituer une phase continue.

$$\text{avec } \tilde{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (5)$$

où  $S_{wr}$  est la saturation résiduelle en eau.

Lorsque la densité de l'eau est constante, les hauteurs d'eau capillaire sont liées aux pressions capillaires par:  $h_c = p_c / \rho_w \cdot g$ . La relation (5) peut s'écrire en fonction des teneurs en eau et des hauteurs d'eau capillaire (fig. 6).

$$\theta_w = \begin{cases} \theta_{wr} + (\theta_{ws} - \theta_{wr}) \cdot \left(\frac{h_b}{h_c}\right)^\lambda & \text{si } h_c \geq h_b \\ \theta_{ws} & \text{si } h_c < h_b \end{cases} \quad (6)$$

où

$\theta_{wr}$  est la teneur en eau résiduelle

$\theta_{ws}$  est la teneur en eau à saturation  $\equiv n$

$h_b$  est la hauteur d'eau correspondant à la pression d'entrée d'air  $p_b$

- En fonction de la succion (cf. équation 2), Brutsaert (1966) a proposé :

$$\tilde{S}_w = \begin{cases} \frac{1}{1 + (A\psi)^B} & \text{si } \psi \geq 0 \\ 1 & \text{si } \psi < 0 \end{cases} \quad (7)$$

A et B étant des coefficients positifs à ajuster.

- Dans le même ordre d'idée, Vauclin *et al.* (1979) ont introduit :

$$\tilde{S}_w = \begin{cases} \frac{1}{1 + (A \ln \psi)^B} & \text{si } \psi \geq 1 \text{ cm} \\ 1 & \text{si } \psi < 1 \text{ cm} \end{cases} \quad (8)$$

- Van Genuchten (1980) a proposé :

$$\theta_w = \theta_{wr} + \frac{\theta_{wr} - \theta_{ws}}{[1 + (\alpha \cdot h_c)^n]^m} \quad \text{pour } h_c > 0 \quad (9)$$

$$\alpha, n \text{ et } m = (1 - 1/n)$$

- Yeh (1993) utilise :

$$\theta_w = \theta_{wr} + (\theta_{ws} - \theta_r) \cdot \frac{A}{A + |h_c - h_a|^B}$$

pour  $h_c > 0$

A et B étant les paramètres à ajuster.

$$(10)$$

#### 4.5. HYSTERESIS ET SAUTS DE SATURATION

Lorsque l'on désature un milieu poreux puis qu'on le resature (fig. 7), on remarque qu'il est impossible de revenir au point de départ de la courbe et que les courbes de saturation et de désaturation ne se confondent pas: il y a un hystérésis.

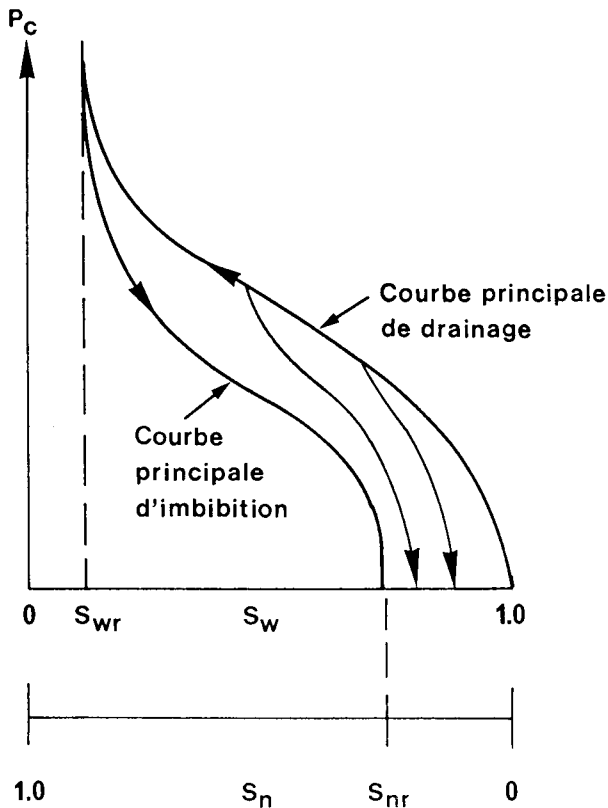


Fig. 7. Hystérésis des courbes de pression capillaire.

Cet hystérésis ou phénomène d'hystérèse est dû à plusieurs facteurs :

- (a) la présence d'air piégé dans les pores, en quantités variables, selon l'historique des saturations et désaturations
- (b) l'angle de contact varie selon la direction dans laquelle le ménisque se déplace; il dépend également du fait que le milieu ait été déjà mouillé auparavant ou non
- (c) l'effet de la distribution irrégulière de la dimension des pores, faisant en sorte que l'eau circule dans des passages étroits puis larges; il résulte un effet "bouteille d'encre". Durant le drainage et le remouillage, des ménisques ayant la même courbure (même tension d'interface, ... même pression capillaire) peuvent se manifester à différents endroits, caractérisés par des saturations différentes en eau.

Pour pouvoir comprendre et tenir compte de l'hystérésis, il faudrait disposer de l'histoire complète de tous les mouvements de saturation et de désaturation qu'a subi le milieu poreux étudié (fig. 8). La complexité de ces phénomènes et le manque de données disponibles habituellement pour les caractériser conduit le plus souvent à les négliger. Ce faisant, il faut cependant être bien conscient des hypothèses que cela implique.

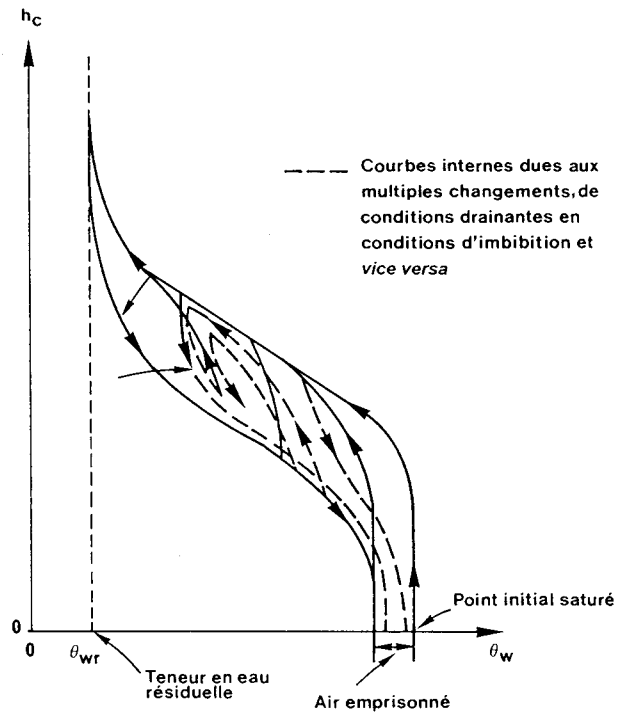


Fig. 8. Hystérésis multiples (d'après Bear, 1993).

Jusqu'à présent, les courbes de rétention ou de pression capillaire ont été discutées en considérant le milieu poreux homogène. Que se passe-t-il à l'interface entre deux milieux poreux différents ? Considérant le cas de la figure 9, il est évident que pour chaque couche on obtient une courbe de rétention différente. Les pressions doivent cependant être égales; la courbe de pression doit être continue. Par conséquent, la saturation doit subir un saut (fig. 10).

#### 4.6. TROIS PHASES FLUIDES: AIR, EAU, PHASE NON AQUEUSE

Considérons que dans la zone non-saturée, une 3ème phase fluide non aqueuse soit présente: NAPL (Non Aqueous Phase Liquid). Cette phase peut être moins dense que l'eau (LNAPL : Light NAPL) ou plus dense que l'eau (DNAPL : Dense NAPL). Par rapport au solide, l'eau est mouillante, la phase NAPL est moyennement mouillante et l'air est non-mouillant (fig. 11).

Les saturations respectives sont  $S_w$ ,  $S_o$  et  $S_a$ . Les indices suivants sont pris conventionnellement:  $w$  pour l'eau ("water"),  $o$  pour la phase "NAPL" ("oil") et  $a$  pour l'air, avec:

$$S_w + S_o + S_a = 1 \quad (11)$$



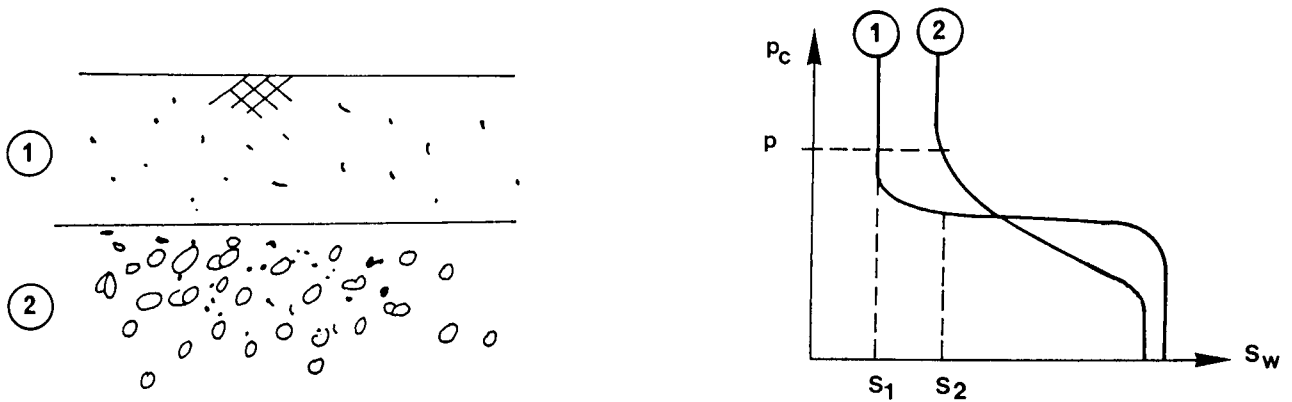


Fig. 9. Discontinuité de la saturation à une pression capillaire donnée (p), à l'interface entre 2 milieux poreux.

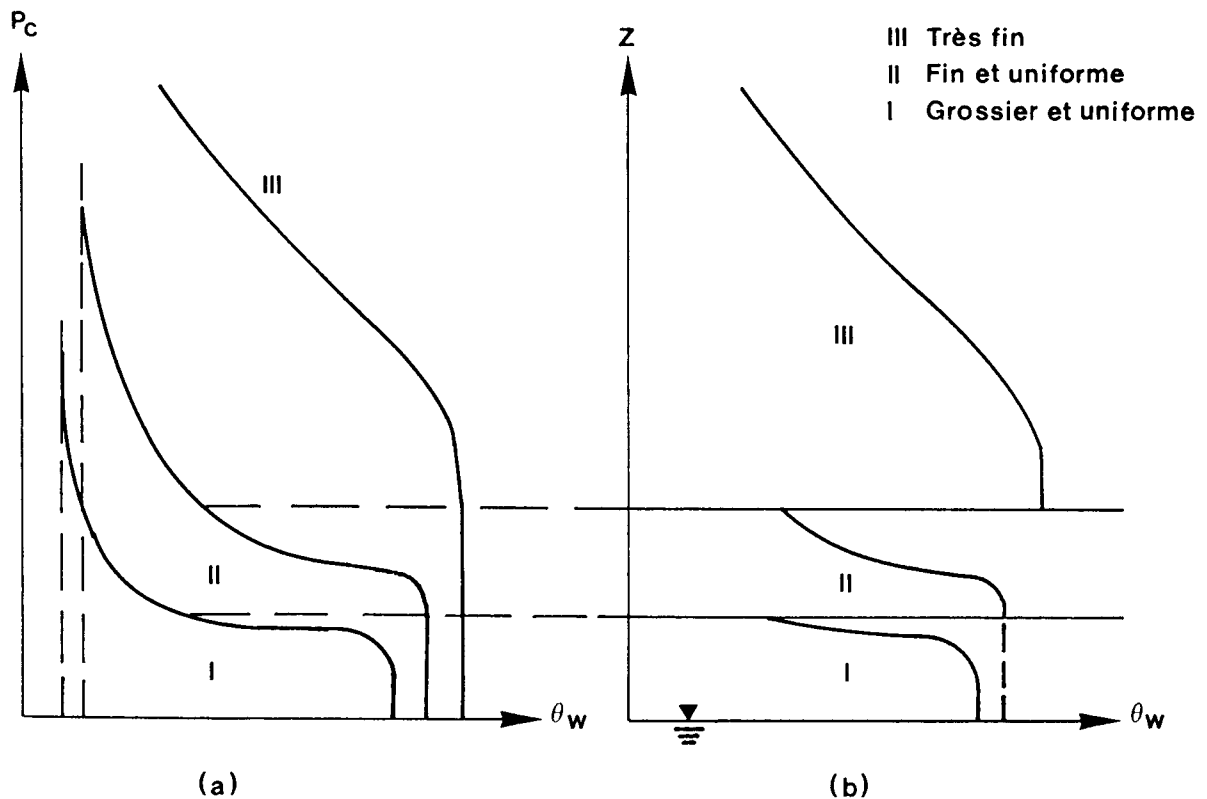


Fig. 10. Sauts de saturation en conditions statiques: (a) courbes de pression capillaire pour les 3 sols, (b) profil vertical de la saturation ou de la teneur en eau dans un système à 3 couches (d'après Bear, 1993).

Le concept de pression capillaire entre 2 phases fluides peut être généralisé aux 3 phases occupant les pores du milieu. Pour simplifier les équations et surtout la détermination pratique des valeurs des paramètres de ces équations, on considère souvent une seule phase liquide regroupant l'eau et la phase NAPL, avec:

$$S_{\text{liquide}} = S_l = S_w + S_o = 1 - S_a \quad (12)$$

On considère souvent une seule phase liquide regroupant l'eau et la phase NAPL, avec:

On considère souvent que la relation  $S_w(p_{ow})$  est indépendante de la pression d'air et serait donc identique à la relation trouvée dans un système à deux phases. De même la relation  $S_l(p_{ao})$  serait identique à la relation trouvée dans un système air-NAPL. Dans ce cas, le problème se ramène à deux phases distinctes: l'air et le liquide.

Des exemples sont donnés aux figures 12 et 13 pour les profils verticaux des saturations à l'équilibre, dans le cas respectivement de systèmes air-eau-LNAPL (LNAPL = phase non-aqueuse moins dense que l'eau) et air-eau-DNAPL (DNAPL = phase non-aqueuse plus dense que l'eau). La

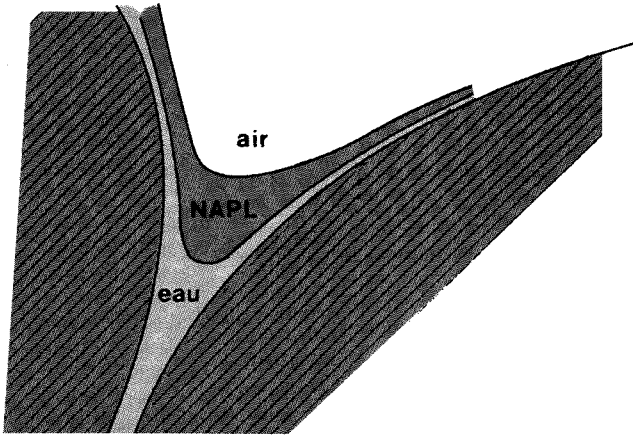


Fig. 11. Image d'un pore du milieu avec les 3 phases fluides.

littérature pétrolière contient beaucoup de données sur ce type de système à 3 phases.

## 5. MOUVEMENT DE FLUIDE(S) EN ZONE NON-SATUREE

### 5.1. ECOULEMENT A DEUX PHASES: ECOULEMENT NON-SATURE

#### 5.1.1. Equations des écoulements

Les mêmes principes qu'en zone saturée sont appliqués par extension et généralisation de la loi de Darcy. Une équation d'écoulement sera trouvée pour chacune des phases, les coefficients de perméabilité du milieu poreux à l'une ou l'autre phase seront dépendants de la saturation du milieu en ces phases et la porosité sera remplacée par la fraction volumétrique de l'espace poreux occupé par la phase considérée.

L'hypothèse fondamentale qui est faite le plus souvent dans les milieux non-saturés consiste à négliger les transferts de moments entre l'air et l'eau par rapport à ceux qui existent entre l'eau et le solide. Dans ce cas, on peut écrire des équations d'écoulement macroscopiques sur l'EVR ayant la forme (dans ce texte, les vecteurs sont les grandeurs soulignées une fois et les tenseurs sont soulignés deux fois):

$$\underline{q}_{rw} = \frac{\underline{k}_w(S_w)}{\mu_w} (\underline{\text{grad}} p_w + \rho_w \cdot g \underline{\text{grad}} z) \quad (13)$$

$$\underline{q}_{ra} = \frac{\underline{k}_a(S_a)}{\mu_a} (\underline{\text{grad}} p_a + \rho_a \cdot g \underline{\text{grad}} z) \quad (14)$$

$\underline{q}_{rw}$  = vecteur flux relatif à l'eau (phase mouillante)

$\underline{q}_{ra}$  = vecteur flux relatif à l'air (phase non - mouillante)

$\underline{k}_w(S_w)$  = tenseur des perméabilités effectives à l'eau

$\underline{k}_a(S_a)$  = tenseur des perméabilités effectives à l'air

Le couplage entre les équations (13) et (14) s'exprime par:

$$S_w + S_a = 1 \quad (15)$$

et par le fait que  $p_w$  et  $p_a$  ne sont pas indépendantes puisque par l'équation 1, on a implicitement:

$$p_c(S_w) = (p_a - p_w) \quad (16)$$

De plus, rappelons que les perméabilités effectives à l'eau et à l'air dépendent respectivement de  $S_w$  et  $S_a (= 1 - S_w)$ . Lorsque les densités de l'eau et de l'air restent constantes (ou sont supposées telles), on peut réécrire les équations (13) et (14) de la façon suivante :

$$\underline{q}_{rw} = - \underline{K}_w(S_w) \underline{\text{grad}} h_w \quad (17)$$

$$\underline{q}_{ra} = - \underline{K}_a(S_w) \underline{\text{grad}} h_a \quad (18)$$

où on a:

$$h_w = z + \frac{p_w}{\rho_w \cdot g} \quad \text{et} \quad h_a = z + \frac{p_a}{\rho_a \cdot g} \quad (19)$$

Dans ce cas, les tenseurs des coefficients de perméabilité effective à l'eau et à l'air sont :

$$\underline{K}_w(S_w) = \frac{\underline{k}_w(S_w) \cdot \rho_w \cdot g}{\mu_w} \quad (20)$$

$$\text{et} \quad \underline{K}_a(S_a) = \frac{\underline{k}_a(S_a) \cdot \rho_a \cdot g}{\mu_a}$$

Si la pression de l'air est choisie égale à zéro, on peut écrire l'équation restante en terme de succion:

$$\psi = - \frac{p_w}{\rho_w \cdot g} = (z - h_w) \quad (21)$$

et on obtient :

$$\underline{q}_{rw} = \underline{K}_w(S_w) \underline{\text{grad}} (\psi - z) \quad (22)$$

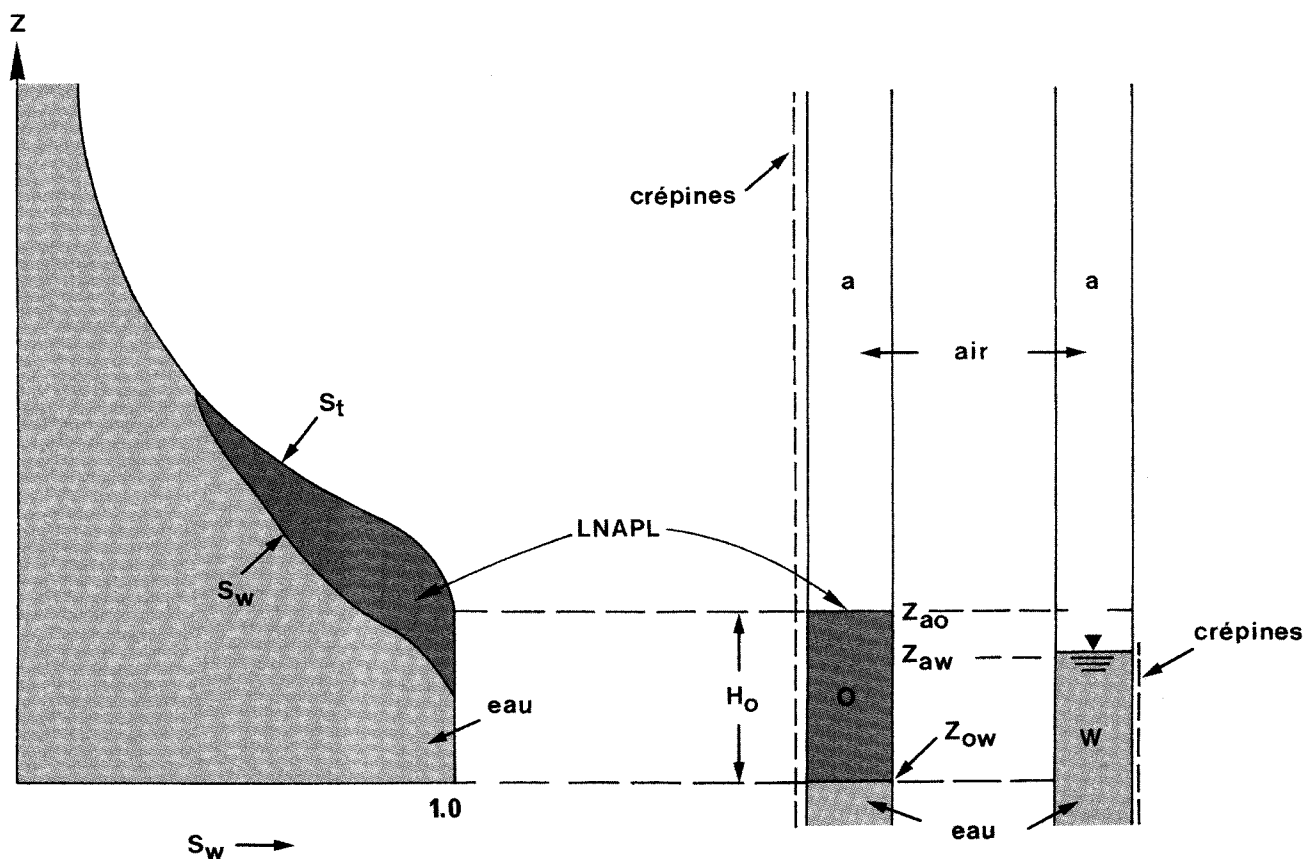


Fig. 12. Profil vertical des saturations et hauteurs piézométriques, obtenues pour un système air-eau-LNAPL.

Les agronomes écrivent encore cette équation autrement en se basant sur l'hypothèse que les relations  $p_c = p_c(S_w)$  et  $\psi = \psi(S_w)$  sont uniques. Ils écrivent :

$$\underline{q}_{rw} = \underline{K}_w(S_w) \left( \frac{d\psi}{dS_w} \underline{\text{grad}} S_w - \underline{\text{grad}} z \right) \quad (23)$$

ou

$$\underline{q}_{rw} = - \underline{D}_w(S_w) \underline{\text{grad}} S_w - \underline{K}_w(S_w) \underline{\text{grad}} z \quad (24)$$

en définissant  $\underline{D}_w = - \frac{\underline{K}_w(S_w)}{(dS_w/d\psi)}$  comme

étant le tenseur des diffusivités d'un sol.

Dans les domaines de l'hydrogéologie, la notion de diffusivité n'est pas souvent utilisée. Il est important de remarquer que les équations d'écoulement écrites ci-dessus sont toutes non linéaires, car la perméabilité effective dépend de la variable d'état: saturation, teneur en eau ou pression capillaire. C'est une caractéristique fondamentale des problèmes relatifs à l'écoulement multiphasique (et donc en zone non saturée).

### 5.1.2. Perméabilités effectives et relatives

Un problème majeur réside dans la détermination des relations  $\underline{K}_w = \underline{K}_w(S_w)$  et  $p_c = p_c(S_w)$  qui sont souvent mal connues et qui de plus ne sont pas uniques et sont sujettes à des phénomènes d'hystérésis. Les perméabilités effectives à l'eau et à l'air sont des grandeurs macroscopiques qui dépendent des propriétés (microscopiques) de configuration de l'espace poreux occupé par chaque fluide. Pour chacune de ces phases, la configuration dépend de la saturation. On a donc :

$$\underline{k}_w = \underline{k}_w(S_w) \quad \text{et} \quad \underline{k}_a = \underline{k}_a(S_a)$$

Pour un milieu anisotrope, ces tenseurs de perméabilités effectives sont symétriques et d'ordre 2 avec chacun 9 composantes pouvant être des fonctions différentes de la saturation (Bear & Verruijt, 1987). Pour un milieu isotrope, on définit des perméabilités scalaires relatives à l'eau ou à l'air comme suit (fig. 15) :

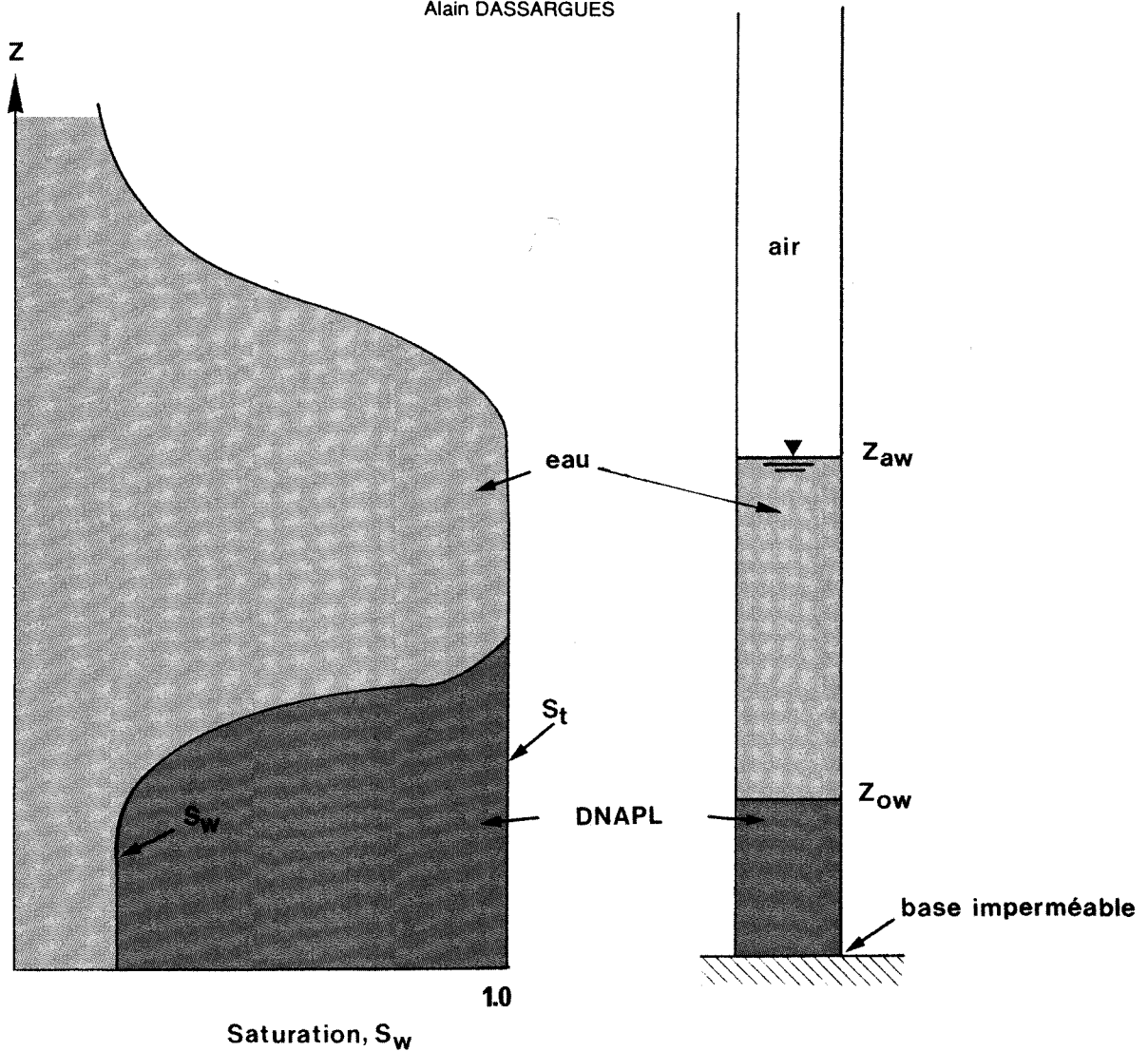


Fig. 13. Profil vertical des saturations et hauteurs piézométriques, obtenues pour un système air-eau-DNAPL.

$$k_{rw} = \frac{k_w(S_w)}{k_{sat}} \quad \text{et} \quad k_{ra} = \frac{k_a(S_a)}{k_{sat}} \quad (25)$$

avec

$$0 \leq k_{rw} \leq 1$$

$$0 \leq k_{ra} \leq 1$$

Les courbes de perméabilité relatives (fig. 14) doivent être déterminées sur la base de résultats d'essais. Il faut remarquer que  $k_{ra} = 0$  pour  $S_a < S_{ar}$  et  $k_{rw} = 0$  pour  $S_w < S_{wr}$ . De nombreux auteurs ont proposé des expressions analytiques avec des coefficients à ajuster en fonction des résultats observés sur le terrain ou en laboratoire (cfr. littérature spécialisée ou par exemple Bear, 1993).

## 5.2. ECOULEMENT A TROIS PHASES

### 5.2.1. Equations des écoulements

Les mêmes principes que ceux décrits précédemment sont applicables pour un système à 3 phases: une phase mouillante, une phase à mouillabilité intermédiaire et une phase non mouillante. Dans la suite, le système comportant respectivement l'eau (indice  $w$ ), un produit NAPL (indice  $o$ ) et l'air (indice  $a$ ) sera considéré. Comme précisé plus haut, l'indice ( $o$ ) se réfère à la phase non aqueuse (NAPL) et pas nécessairement à un produit hydrocarbure.

Les saturations de ces 3 phases sont liées par la relation :

$$S_w + S_a + S_o = 1 \quad (26)$$

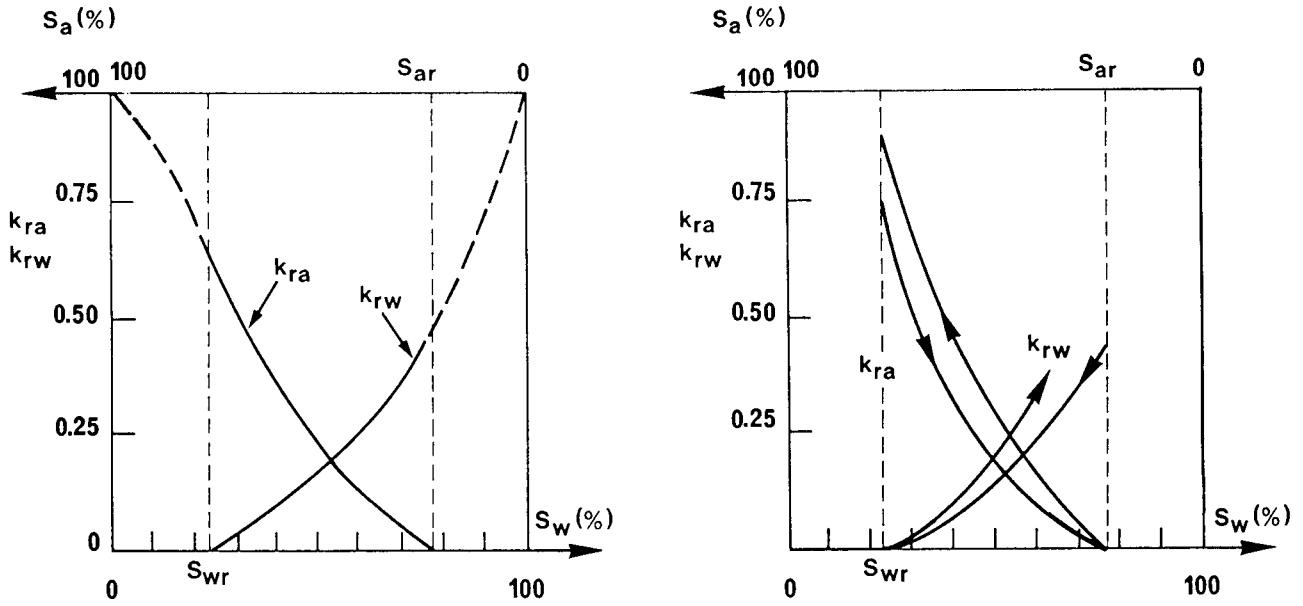


Fig. 14. Courbes de perméabilités relatives typiques: (a) sans hystérésis, (b) avec hystérésis.

Par conséquent, deux saturations seulement sont indépendantes. Toujours en prenant l'hypothèse qu'il n'y a aucune interaction à travers les interfaces (microscopiques) entre phases adjacentes, les équations d'écoulement s'écrivent sous la forme :

$$q_{rw} = - \frac{k_{w(oa)}(S_w)}{\mu_w} (\text{grad } p_w + \rho_w \cdot g \text{ grad } z)$$

$$q_{ro} = - \frac{k_{o(wa)}(S_o)}{\mu_o} (\text{grad } p_o + \rho_o \cdot g \text{ grad } z) \quad (27)$$

$$q_{ra} = - \frac{k_{a(ow)}(S_w, S_a)}{\mu_o} (\text{grad } p_a + \rho_a \cdot g \text{ grad } z)$$

avec, par exemple,  $\underline{k_{w(oa)}}$  = tenseur des perméabilités effectives à la phase mouillante (l'eau) en présence des phases intermédiaires ou non mouillantes (NAPL et air).

**5.2.2. Perméabilités effectives**

Pour pouvoir obtenir ces valeurs de perméabilités, habituellement on considère l'hypothèse suivante :

$$\underline{k_{w(oa)}} = \underline{k_w}(S_w), \quad \underline{k_{a(ow)}} = \underline{k_a}(S_a), \quad \underline{k_{o(wa)}} = \underline{k_o}(S_w, S_a)$$

Cette hypothèse est basée sur les résultats d'études de nombreux auteurs (provenant de l'étude des réservoirs pétroliers). De ceci découle les simplifications suivantes (Bear, 1993) :

- dans un système biphasique, les perméabilités effectives des phases mouillantes (eau) et non-mouillante (air), dépendent de leurs saturations respectives :

$$\underline{k_{w(a)}} = \underline{k_{w(a)}}(S_w), \quad \underline{k_{a(w)}} = \underline{k_{a(w)}}(S_a) \quad (28)$$

- dans un système triphasique, les perméabilités effectives des phases mouillantes (eau) et non mouillantes (air) sont les mêmes fonctions de leurs saturations que dans le système biphasique :

$$\underline{k_{w(ao)}} = \underline{k_{w(o)}}(S_w), \quad \underline{k_{a(ow)}} = \underline{k_{a(o)}}(S_a) \quad (29)$$

- la perméabilité effective à la phase moyennement mouillante (NAPL) est une fonction des saturations en phases mouillante (eau) et non-mouillante (air) :

$$\underline{k_{o(wa)}} = \underline{k_{o(wa)}}(S_w, S_a) \quad (30)$$

Même moyennant ces simplifications et l'hypothèse d'un milieu poreux isotrope, il reste très difficile en pratique d'obtenir expérimentalement les courbes de variations des perméabilités en fonction des saturations. De nombreux auteurs (pétroliers pour la plupart) ont proposé des fonctions analytiques à ajuster à des courbes expérimentales, mais ces dernières se font rares!

## 6. TRANSPORT DE POLLUANT EN ZONE NON-SATUREE

Tout comme pour la zone saturée, en conditions isothermes, selon la nature du polluant, deux types de transport peuvent être envisagés: (1) le transport de contaminant au sein du fluide, (2) le transport de produits formant une phase séparée liquide ou gazeuse.

En général, les processus du transport en zone partiellement saturée de produits dissous dans l'eau, obéissent aux mêmes lois que ceux décrits par de nombreux auteurs dans la zone saturée. Une brève description de ces processus est présentée ci-après. Par contre, les transports de polluants, tels des hydrocarbures ou des composés organiques volatiles qui forment des phases liquides ou gazeuses qui peuvent être distinctes de celles qui préexistent dans le milieu poreux, sont traités par des lois d'écoulement multi-phases comme celles évoquées précédemment. Ces derniers processus sont abondamment décrits dans la littérature pétrolière.

### 6.1. TRANSPORT DE CONTAMINANT DISSOUS AU SEIN DU FLUIDE

Les lois de transport sont tout à fait similaires à celles qui sont utilisées en zone saturée. De nombreux auteurs ont traité de façon détaillée des différents processus à prendre en compte, de leur conceptualisation et de leur traduction en équations (Bear & Verruijt, 1987, de Marsily, 1986,...) Les différents processus du transport de substances miscibles en milieu poreux saturé sont décrits succinctement ci-dessous, préalablement à l'établissement de l'équation générale qui les décrit.

La concentration  $C(x, y, z, t)$ , utilisée dans la suite est la concentration massique du polluant dans le fluide du système ( $kg(m)$  de polluant /  $kg(m)$  de fluide). Couramment, on la définit en "part par million" (ppm) ou en "part par billion" (ppb). Il faut éviter d'utiliser les concentrations volumiques car elles ne sont pas conservées dans un système à densité variable.

#### 6.1.1. Diffusion moléculaire

Si on considère un système parfaitement binaire et libre au repos, composé d'un solvant et d'un soluté en concentration modérée, ce dernier tendra à se déplacer pour uniformiser la composition du système et créer ainsi un minimum d'énergie. On quantifie le flux vectoriel  $\underline{f}$  qui est dirigé suivant la direction de la plus grande différence en concentration. Pour l'Elément de Volume Représentatif (EVR) du milieu poreux, on a:

$$\underline{f}_m = -D_m \cdot \rho \cdot \underline{grad}C \quad (31)$$

où  $D_m$  représente le coefficient de diffusion moléculaire effectif dans le milieu poreux ( $m^2/s$ ). Ce processus existe, indépendamment de tout mouvement du fluide.

#### 6.1.2. Convection

A partir de la loi de Darcy, les composantes du vecteur de vitesse moyenne réelle microscopique  $\underline{v}_e$  sont obtenues en considérant que la section de passage de l'eau est limitée à la proportion de vides accessibles à l'écoulement. Le flux de Darcy est donc divisé par la porosité efficace du milieu poreux ( $n_e$ ). C'est à cette vitesse moyenne, appelée également vitesse de convection, que sera transporté le polluant présent dans l'eau à la concentration massique  $C$ . On définit le flux convectif de polluant ( $\underline{f}_c$ ) par :

$$\underline{f}_c = \rho \cdot C \cdot \underline{v}_e = \rho \cdot C \cdot \underline{v} / n_e \quad (32)$$

Cette relation montre qu'il est très important de connaître avec précision la valeur de la porosité efficace du milieu poreux pour quantifier la composante convective du transport d'un polluant dissous dans l'eau.

#### 6.1.3. Dispersion mécanique

Si on calcule de manière moyenne les trajets des particules de polluant transportées par convection, ces trajets ne sont pas égaux aux trajets réels microscopiques à travers les chenaux poreux. Par conséquent, dans les modèles déterministes basés sur des EVR macroscopiques, il faut ajouter au flux convectif (défini ci-dessus), un terme de correction permettant de tenir compte de la dispersion cinématique de la substance miscible. C'est le flux de dispersion mécanique traduisant l'étalement de la substance miscible par rapport à sa position convective moyenne.

Pour exprimer ce flux de dispersion, de nombreux auteurs ont proposé une loi qui s'écrit :

$$\underline{f}_d = -\rho \cdot \underline{D} \cdot \underline{grad}C \quad (33)$$

où  $\underline{D}$  est le tenseur, du deuxième ordre, de dispersion mécanique.

Pour un milieu poreux isotrope, Scheidegger (1961), Bear (1961 & 1972), Konikow & Grove (1977), ...et d'autres décrivent les neuf composantes de ce tenseur en fonction des coefficients de dispersivité et de la vitesse ( $v_e$ ) de convection :

$$D_{ij} = (a_L - a_T) \cdot \frac{v_{e_i} \cdot v_{e_j}}{|\underline{v}_e|} + a_T \cdot |\underline{v}_e| \cdot \delta_{ij} \quad (34)$$

où  $v_{e_i}$  est la composante dans la  $i$  ème direction de  $\underline{v}_e$  (en  $m/s$ )

$|\underline{v}_e| = \sqrt{v_{e_1}^2 + v_{e_2}^2 + v_{e_3}^2}$  est la norme de  $\underline{v}_e$  (en  $m/s$ )

$a_L$  est la dispersivité longitudinale (en  $m$ )

$a_T$  est la dispersivité transversale (en  $m$ )

Certains auteurs (Bear & Bachmat, 1990 et Biver, 1993) expriment ce tenseur de façon plus générale et notamment lorsque le milieu est anisotrope. Les mesures de terrains par essais de traçages ont montré que dans la plupart des cas, le rapport  $a_L/a_T$  est compris entre 3 et 10, en considérant les milieux poreux isotropes.

#### 6.1.4. Adsorption/ désorption

Le polluant a tendance à se fixer sur le solide pour minimiser la tension superficielle (état d'équilibre correspondant à une énergie minimum) de ce dernier et donc son énergie de surface. Le solide ne peut donc plus être considéré comme inerte. L'adsorption correspond à des processus physiques et chimiques dépendant de la température, impliquant (dans le cas isotherme) l'utilisation de relations d'équilibres isothermes. Le plus souvent on essaie de linéariser la relation d'équilibre pour l'approximer par une équation du type :

$$\bar{C} = K_d \cdot \rho \cdot C \quad (35)$$

où  $K_d$  est le coefficient de partitionnement (en  $m^3/kg$ ) et  $\bar{C}$  est la concentration massique de polluant "fixé" sur la phase solide

Dans l'EVR, la quantité de polluant passant du fluide vers le solide par unité de masse de solide s'exprime par :

$$\rho_b \cdot R_{f,s} \quad (36)$$

où  $R_{f,s}$  est le taux de transfert de polluant passant du fluide vers le solide par unité de masse ( $kg(m)$  de polluant /  $s.kg(m)$  de solide). Il sera déterminé dans la suite grâce à l'expression de l'équation de conservation de la masse de polluant attaché au solide.

$\rho_b$  est la masse volumique apparente de l'ensemble du milieu poreux sec, on a :

$$\rho_b = \rho_s \cdot (1 - n) \quad (37)$$

où  $\rho_s$  est la masse volumique du solide.

#### 6.1.5. Dégradation

De nombreux processus physico-chimiques peuvent encore intervenir tendant à réduire la quantité d'une substance polluante dans l'eau. Citons notamment: (1) la désintégration radioactive; (2) la dégradation chimique (transformation d'un élément chimique en un autre plus stable dans les conditions du milieu poreux saturé); (3) un déséquilibre chimique partiel. L'équation de la dégradation est le plus souvent ramenée à :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda \cdot C \quad (38)$$

qui a pour solution :

$$C = C_0 \cdot \exp(-\lambda \cdot t) \quad (39)$$

où  $\lambda$  est la constante de dégradation linéaire (en  $s^{-1}$ ).

#### 6.1.6. Conservation de la masse de polluant fixé au solide

En regroupant les effets de l'adsorption et de la dégradation sur la masse de polluant restant "attaché" à la phase solide, on obtient :

$$\frac{\partial(\rho_b \cdot \bar{C})}{\partial t} = \rho_b \cdot R_{f,s} - \lambda \cdot \rho_b \cdot \bar{C} \quad (40)$$

et on peut donc écrire en s'aidant de l'équation (35) :

$$\rho_b \cdot R_{f,s} = \lambda \cdot \rho_b \cdot K_d \cdot \rho \cdot C - \frac{\partial(K_d \cdot \rho \cdot C)}{\partial t} \quad (41)$$

### 6.1.7. Effet d'eau immobile

Rarement considéré dans les études de transport de polluant, cet effet est principalement dû à la diffusion moléculaire pouvant avoir lieu dans l'eau restant immobile dans le milieu poreux. On peut exprimer le flux d'échange entre l'eau mobile et l'eau immobile par :

$$f_m^{im} = \alpha_d^* \cdot (\rho_m \cdot C_m - \rho_{im} \cdot C_{im})$$

où  $\alpha_d^*$  est une constante de transfert de l'eau mobile vers l'eau immobile

$\rho_m$  et  $\rho_{im}$  sont les masses volumiques respectivement de l'eau mobile et immobile

$C_m$  et  $C_{im}$  sont les concentrations massiques en polluant de l'eau mobile et de l'eau immobile.

L'étude détaillée de l'influence de cet effet sur les transports de nitrates en milieu à double porosité a montré la nécessité de déterminer expérimentalement (par essais de traçage) le coefficient  $\alpha_d^*$  qui dépend essentiellement du coefficient de diffusion moléculaire. Le lecteur intéressé consultera les travaux de Biver (1991 & 1993).

Dans la suite de cet exposé, cet effet d'eau immobile sera négligé par rapport aux autres composantes du transport de polluant miscible.

### 6.1.8. Equation de transport

Rappelons l'ensemble des hypothèses que nous avons faites pour établir l'expression de l'équation de conservation d'un polluant miscible dans un fluide:

(a) la diffusion thermique est négligée de même que les diffusions dues à des champs électriques ou autres...;

(b) le transport de soluté par des fluctuations locales ou interstitielles du champ des vitesses d'écoulement et par le mélange aux jonctions des pores, peut être décrit globalement via l'utilisation d'un coefficient de dispersion mécanique (défini plus haut);

(c) la dégradation de polluant est représentée par une loi linéaire couvrant une série de processus possibles: radioactivité, action bactérienne, précipitations, oxydoréductions,...;

(d) l'adsorption / désorption sont les seuls processus d'interaction entre milieu poreux et polluant;

(e) aucune arrivée de polluant pur n'est permise;

(f) les concentrations sont des concentrations massiques;

(g) l'effet d'eau immobile est négligé.

Dans ces conditions, la conservation de polluant dans le fluide s'exprime par :

$$(42) \quad \frac{\partial(n_{\theta} \cdot \rho \cdot C)}{\partial t} = \text{div}(n_{\theta} \cdot \rho \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \text{grad}C) + \text{div}(n_{\theta} \cdot \rho \cdot D_m \cdot \underline{\underline{I}} \cdot \text{grad}C) - \text{div}(n_{\theta} \cdot \rho \cdot v_{\theta} \cdot C) - \lambda \cdot n_{\theta} \cdot \rho \cdot C - \rho_b \cdot R_{f,s} + q \cdot \rho^* \cdot C^* \quad (43)$$

où, pour rappel,

$C$  est la concentration massique du polluant dans le fluide du système (-)

$C^*$  idem pour le fluide entrant dans le système (-)

$\underline{\underline{D}}$  est le tenseur de dispersion mécanique ( $m^2/s$ )

$D_m$  est la diffusivité moléculaire effective du polluant ( $m^2/s$ )

$\lambda$  est la constante de dégradation linéaire ( $s^{-1}$ )

$R_{f,s}$  est le taux de transfert de polluant du fluide vers le solide par unité de masse de solide ( $kg$  polluant / ( $s \cdot kg$ ) solide)

$\rho_b$  est la masse volumique de l'ensemble du milieu poreux sec ( $kg/m^3$ )

## 6.2. ASPECTS PARTICULIERS A LA ZONE NON SATURÉE

Vu les conditions particulières d'écoulement du fluide (l'eau) dans la zone partiellement saturée, les interactions et les échanges entre l'eau mobile et l'eau immobile, sont tout particulièrement importants. Evidemment, les proportions d'eau mobile et immobile dépendront étroitement de la nature du milieu poreux et de sa teneur en eau. Ce flux d'échange de la phase mobile vers la phase immobile est exprimé par l'équation (42).

En milieu poreux saturé, cet effet d'eau immobile est souvent englobé dans la loi d'adsorption-désorption (linéaire ou non) utilisée dans le modèle. Le schéma conceptuel reprenant les différents processus, se ramène alors à un schéma bipolaire entre l'eau mobile d'une part et le solide et l'eau immobile d'autre part. Lors des simulations utilisant ce dernier modèle conceptuel, l'ajustement des paramètres de la loi d'adsorption-désorption est rendue plus difficile (durant la phase de calibration du modèle) car on intègre dans une seule loi des processus différents. Cette façon de simuler les processus du transport peut être adoptée en zone partiellement saturée si les paramètres ou coefficients intervenant dans la loi d'adsorption-désorption sont actualisés en fonction de la teneur en eau.



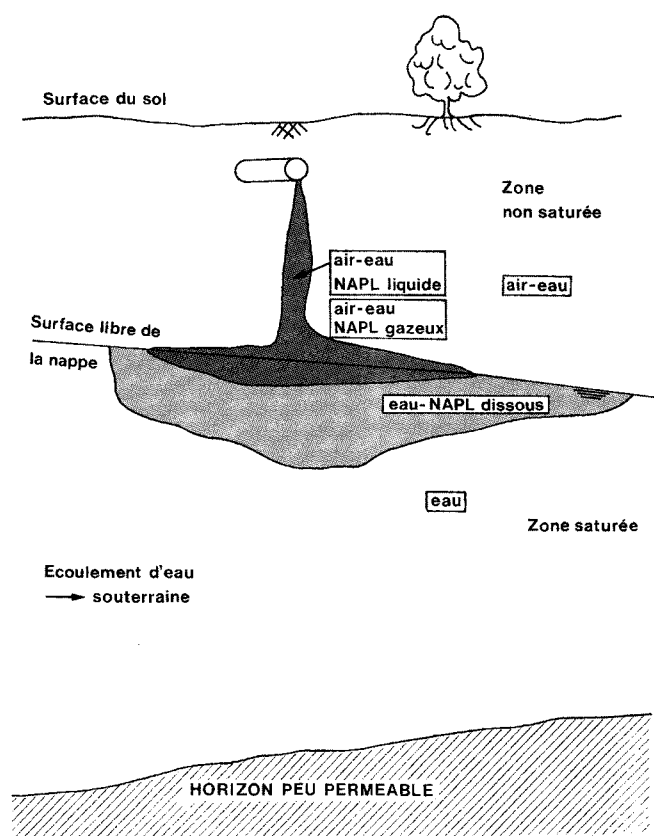


Fig. 15. Situation typique de pollution des zones saturée et non saturée par un produit liquide non aqueux formant une phase séparée ("NAPL"), cas où le liquide est moins dense que l'eau (d'après Celia *et al.*, 1993).

Les procédés numériques de simulation sont similaires à ceux qui sont utilisés en zone saturée (Biver & Dassargues, 1993), mais il faut disposer d'un code permettant l'introduction de non linéarités importantes des paramètres en fonction de la saturation, de la teneur en eau ou de la pression capillaire.

Le programme SUFT (Saturated Unsaturated Flow Transport model) actuellement développé aux L.G.I.H. (Laboratoires de Géologie de l'Ingénieur, d'Hydrogéologie et de Prospection Géophysique) de l'Université de Liège, permet la prise en compte en deux ou trois dimensions de tous ces processus du transport, couplés à l'écoulement de l'eau, en milieu poreux saturé et partiellement saturé. Ce programme utilise la méthode des Éléments Finis assortie de techniques d'upwind et de techniques eulérienne-lagrangiennes permettant la simulation de l'équation du transport dans de bonnes conditions de maillage et de pas de temps.

Dans ce domaine, on peut considérer qu'actuellement, les outils numériques sont en avance sur les recherches expérimentales. En effet, de nombreux logiciels existent et permettent notamment

l'introduction de paramètres hautement non linéaires, comme par exemple la variation de la perméabilité en fonction de la teneur en eau en zone non saturée, alors que ces lois de variation qui doivent provenir des essais *in situ* et en laboratoire sont encore rares.

### 6.3. TRANSPORTS MULTI-PHASIQUES ET MULTI-COMPOSANTS

La problématique de ce genre de transport a traditionnellement été étudiée par les ingénieurs pétroliers dans leurs modélisations de réservoirs. Cependant, les hydrogéologues devront dans l'avenir pouvoir manipuler de tels modèles impliquant (par exemple) les trois phases que sont l'eau, le gaz et un autre fluide, puisque lors d'une injection accidentelle d'un hydrocarbure en zone partiellement saturée (figs. 15 et 16), ils sont confrontés à ce type de système.

Considérons que l'eau, le gaz et l'hydrocarbure occupent la totalité de l'espace poreux disponible. Chacune de ces phases peut, de plus, contenir différents composants, parmi lesquels certains peuvent se mouvoir d'une phase à l'autre par différents mécanismes (précipitation, condensation, évaporation, dissolution,...). L'adsorption-désorption reste également d'actualité entre tous ces produits et la matrice solide.

Au sens des ingénieurs pétroliers, il s'agit d'un "modèle compositionnel" où les compositions chimiques de chaque phase peuvent varier en fonction des conditions physico-chimiques imposées au milieu. Un des exemples est l'extraction d'hydrocarbures volatiles en zone partiellement saturée par ventilation du milieu poreux.

Les lois utilisées dans ces modèles ont été brièvement évoquées précédemment. Elles sont décrites en détail dans Archer & Wall (1986). Leur description dépasse le cadre de cet exposé.

## 7. CONCLUSIONS

La simulation des processus d'écoulement et de transport de polluants en milieu poreux partiellement saturé implique des moyens informatiques (hardwares et softwares) importants puisque des méthodes numériques complexes sont appliquées permettant l'intégration de l'équation du transport assortie de la variation non linéaire de nombreux paramètres.

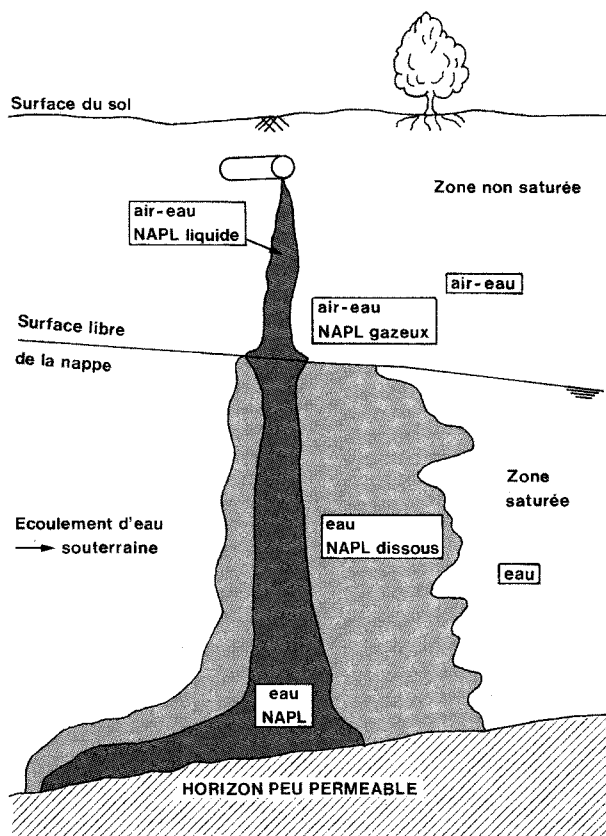


Fig. 16. Même situation qu'à la figure 15 mais le liquide est plus dense que l'eau (d'après Celia *et al.*, 1993).

Cependant, l'étape préalable qui consiste à recueillir des données expérimentales fiables semble être la plus délicate à réaliser. Outre les incertitudes sur les paramètres traditionnels de l'hydrogéologie en milieu saturé, les problèmes étudiés en conditions non-saturées ou partiellement saturées présentent la difficulté supplémentaire qui consiste à déterminer des courbes de variation de ces paramètres en fonction des teneurs en eau, saturations ou pressions capillaires. De plus ces courbes de variation présentent des hystérésis qui font en sorte que idéalement, il faudrait connaître l'historique le plus complet possible des variations de saturation ayant eu lieu dans la zone étudiée.

Les écoulements en milieu non-saturé ou partiellement saturé peuvent être assimilés à des écoulements biphasiques impliquant l'eau et l'air remplissant le vide poreux autour des grains solides. Lorsqu'une phase supplémentaire (exemple: NAPL) apparaît dans le système, celui-ci devient en principe triphasique. Dans ce dernier cas, quelques simplifications notoires (considérer dans certaines équations une seule phase liquide regroupant l'eau et la phase NAPL) sont d'habitude acceptées afin de se ramener à un système quasi-biphasique.

## 8. REMERCIEMENTS

Les développements numériques relatifs au programme SUFT sont réalisés sur une station de travail IBM/Risc 6000 mise à la disposition des L.G.I.H. de l'Université de Liège par la société IBM Belgique dans le cadre d'un partenariat. L'auteur remercie tout particulièrement cette société pour le soutien accordé de la sorte.

Tous mes remerciements vont également à Mr M. Georges pour la correction des traductions en anglais du résumé et des légendes.

## 9. REFERENCES

- ARCHER, J.S. & WALL, C.G., 1986. *Petroleum Engineering, Principles and Practice*, Graham & Trotman, 362p.
- BEAR, J., 1961. On the tensor form of the dispersion, *J. Geophys. Res.*, 66, pp.1185-1197.
- BEAR, J., 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*, American Elsevier.
- BEAR, J., 1991. Eight lectures on mathematical modelling of transport in porous media, *in: Modelling and Applications of Transport Phenomena in porous media*, Bear & Buchlin eds, Kluwer Academic Publisher, pp. 1-190.
- BEAR, J. & BACHMAT, Y., 1990. *Introduction to modeling of transport Phenomena in Porous Media*, Kluwer Academic Publisher.
- BEAR, J. & VERRUIJT, A., 1987. *Modelling groundwater flow and pollution*, 415p., Reidel Publ. Company.
- BEAR, J., 1993. Statics of multiphase systems, and, Motion equations for single and multiphase flows, *in: Modelling of flow and contaminants in the subsoil*, IGWMC-IHE Delft.
- BIVER, P., 1991. Modelling transport in a double porosity medium: an alternative approach, *Proc. of the first Int. Conf. on Water Pollution: modelling, measuring and prediction*, Comp.Mechanics Publ., Elsevier, pp. 43-57.
- BIVER, P., 1993. Etude phénoménologique et numérique de la propagation de polluants miscibles dans un milieu à porosité multiple (application au transport des nitrates dans l'aquifère crayeux du Crétacé de Hesbaye), Ph.D. Thesis, Applied Sciences Faculty of the University of Liege, Belgium.
- BIVER, P. & DASSARGUES A., 1993. Contribution to the simulation of nitrates transport in a double-porosity aquifer, *Proc. of Int. Conf. on Groundwater Quality Management*, Tallinn, IAHS publication, September 1993 (to press).
- BROOKS, R.H. & COREY, A.T., 1964. *Hydraulic Properties of Porous Media*, *Hydrology papers*, Colorado State University, Fort Collins, CO.
- BRUTSAERT, W., 1966. Probability laws for pore size distributions, *Soil Science*, 101, pp. 85-192.
- CELIA, M.A., RAJARAN, H. and FERRAND, L.A., 1993. A multi-scale computational model for multiphase flow in porous media, *Advances in Water Resources*, 16, pp.81-92.
- DE MARSILY, G., 1986. *Quantitative Hydrogeology, Groundwater Hydrology for Engineers*, Academic Press, New-York, 440p.
- GELHAR, L.W., WELTY, C., and REHFELDT, K.R., 1992. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers, *Water Resources Research*, 28, pp. 1955-1974.

MUSY, A. & SOUTTER, M. , 1991. Physique du sol, Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, 335p.

SCHEIDEGGER, A.E., 1961. General theory of dispersion in porous media, *J. Geophys. Res.*, 66, pp. 3273-3278.

VAN GENUCHTEN, M.TH., 1980. Models for describing water and solute movement through soils with large pores, *Agronomy Abstract, Amer. Soc. of Agronomy*.

VAUCLIN, M. , HAVERKAMP, R. et VACHAUD, G., 1979. Résolution numérique d'une Equation de Diffusion Non Linéaire, Presses Universitaires de Grenoble, Grenoble, France.

YEH, G.T., 1993. Application of hybrid Lagrangian-Eulerian finite element approach to contaminant transport, *in: Modelling of flow and contaminants in the subsoil, IGWMC-IHE Delft*, 24p.

*Manuscrit reçu le 23/10/1994; accepté le 15/12/1994.*