

MISP_v1

Un modèle analytique pour estimer l'impact de sources de pollution sur les eaux souterraines

Guide d'Utilisation

Rapport final

BRGM/RP-56152-FR

Février 2008



Géosciences pour une Terre durable

brgm

MISP_v1
Un modèle analytique pour estimer
l'impact de sources de pollution sur
les eaux souterraines
Guide d'utilisation

Rapport final

BRGM/RP-56152-FR
Février 2008

Étude réalisée dans le cadre des projets
de Service public du BRGM 2000 - 00POL320

D. Guyonnet

Vérificateur :
Nom : G. BELLENFANT
Date : 8-02-08
Signature : 

Approbateur :
Nom : H. GABORIAU
Date : 8-02-08
Signature : 

En l'absence de signature, notamment pour les rapports diffusés en version numérique,
l'original signé est disponible aux Archives du BRGM.

Le système de management de la qualité du BRGM est certifié AFAQ ISO 9001:2000.

Mots clés : Modélisation, transport de polluants, eaux souterraines

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

Guyonnet, D. (2008) – MISP_v1. Un modèle analytique pour estimer l'impact de sources de pollution sur les eaux souterraines. Guide d'utilisation. Rapport BRGM RP-56152-FR.

Avertissement

Ni le BRGM, ni aucun autre organisme, n'apportent la moindre garantie quant au fonctionnement du logiciel MISP, et n'assument aucune responsabilité quant à :

- son usage correct ou incorrect,
- l'interprétation exacte ou erronée des résultats calculés,
- d'éventuels dommages occasionnés par son utilisation.

Synthèse

MISP est un modèle analytique, en accès libre, qui calcule l'impact sur les eaux souterraines, d'une source de pollution située au dessus de la nappe phréatique. La principale caractéristique de MISP par rapport à des outils existants analogues, réside dans le fait que ce modèle ne fait pas appel à l'hypothèse d'une "couche de mélange" pour calculer la concentration en polluant dans l'eau souterraine à l'aplomb de la source de pollution. Le modèle combine, par convolution, une solution analytique pour la migration verticale à travers une couche surplombant l'aquifère, avec une solution proposée par Galya (1987), pour la migration tri-dimensionnelle à partir d'une source plane située à la surface de la nappe.

Le présent rapport illustre la théorie sous-jacente à MISP, explique les différentes options proposées par le modèle et comment l'utiliser, et présente un certain nombre d'exemples d'application et de comparaisons avec des modèles indépendants.

Sommaire

1. Introduction	9
1.1. LES OUTILS ANALYTIQUES EN EVALUATION DES RISQUES.....	9
1.2. MOTIVATION POUR DEVELOPPER MISP	9
1.3. STRUCTURE DU RAPPORT	11
2. MISP : aspects théoriques	13
2.1. LE PRINCIPE DE SUPERPOSITION	13
2.2. SOLUTION POUR LA MIGRATION VERTICALE VESR LA NAPPE	14
2.2.1. Comparaison avec la solution de Rowe & Booker (1985)	17
2.2.2. Flux massique à la surface de la nappe	19
2.3. SOLUTION POUR LE TRANSPORT DANS L'AQUIFERE	21
2.3.1. Présentation de la solution	21
2.3.2. Exemple d'application de la solution de Galya	23
2.3.3. Comparaison avec un modèle numérique 3-D	24
3. Les options de MISP	27
3.1. OPTIONS POUR LE TERME SOURCE	27
3.2. OPTIONS POUR LES SORTIES.....	28
3.3. QUELQUES AUTRES POSSIBILITES	29
4. Comment utiliser MISP ?	33
4.1. FICHIER(S) D'ENTREE	33
4.2. FICHIERS DE SORTIE.....	41
4.3. FAIRE TOURNER MISP.....	41
5. Exemples d'application	43
5.1. CAS N° 1	43
5.2. CAS N° 2	50

5.3. CAS N° 3.....	54
5.4. CAS N° 4.....	57
5.5. CAS N° 5.....	60
5.6. CAS N° 6.....	63
6. Conclusions.....	65
7. Remerciements.....	69

Liste des figures

Figure 1 – Modèle conceptuel de certains outils analytiques utilisés pour estimer l'impact sur les eaux souterraines	10
Figure 2 - Le modèle conceptuel de MIS.....	11
Figure 3 - Comparaison entre l'équation (5) et la solution de Rowe et Booker (1985) pour le Cas 1	18
Figure 4 - Comparaison entre l'équation (5) et la solution de Rowe et Booker (1985) pour le Cas 2	19
Figure 5 - Concentration dans la couche limite, pour deux valeurs différentes de l'épaisseur de cette couche (H). Mêmes paramètres que pour le Cas 1	20
Figure 6 - Flux massiques à la surface de la nappe sous la source, pour deux valeurs d'épaisseur de la couche limite. Mêmes paramètres que pour le Cas 1.....	20
Figure 7 - Système de coordonnées utilisé dans MISP	21
Figure 8 - Exemple application de la solution de Galya (1987).....	24
Figure 9 - Comparaison entre la solution de Galya (1987) et le modèle MARTHE (Thiéry, 1993)	25
Figure 10 - Changement du système de coordonnées (vue en plan)	29
Figure 11- Exemple d'un fichier d'entrée MISP	39
Figure 12 - Exemple d'un fichier d'entrée concentration-source	40
Figure 13 - Résultats MISP pour le Cas No 1	43
Figure 14 - Cas N° 1. Influence du choix de la concentration moyenne	44
Figure 15 - Cas N° 1. Courbe de restitution à $x = 100$ m, $y = 0$ m	45
Figure 16 - Cas N° 1. Courbes d'iso-concentration en régime permanent - Courbes dans le plan (à $z = 0$ m)	46

Figure 17 - Cas N° 1. Courbes d'iso-concentration en régime permanent et en coupe (y = 0 m)	47
Figure 18 - Cas N° 1. Illustration de l'option permettant le changement de coordonnées	48
Figure 19 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 1	49
Figure 20 - Cas N° 2. Vérification du calcul des flux massiques à la surface de la nappe.....	50
Figure 21 - Cas N° 2. Profils de concentration à plusieurs temps	51
Figure 22 - Cas N° 2. Effet d'attribuer une épaisseur d'aquifère finie (10 m).....	52
Figure 23 - Cas N° 2. Idem Figure 22 mais avec de la dégradation dans l'aquifère (voir les temps dans la figure 22)	52
Figure 24 - Un fichier MISP pour le Cas N° 2	53
Figure 25 - Cas N° 3. Vérification du calcul des flux massiques à la surface de la nappe.....	54
Figure 26 - Cas N° 3. Profils de concentration	54
Figure 27 - Cas N° 3. Résultat d'une utilisation d'un nombre de points par cycle log trop faible pour le calcul des flux massiques.....	55
Figure 28 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 3	56
Figure 29 - Cas N° 4. Vérification du calcul des flux massiques	58
Figure 30 - Cas N° 4. Profils de concentration à y = z = 0 m.....	58
Figure 31 - Fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 4	59
Figure 32 - Cas N° 5. Concentration source	60
Figure 33 - Cas N° 5. Vérification du calcul des flux massiques	61
Figure 34 - Cas N° 5. Profils de concentrations dans l'aquifère	61
Figure 35 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 5	62
Figure 36 - Cas N° 6. Concentrations dans l'aquifère (axe du panache)	63
Figure 37 - Fichier MISP pour le Cas N° 6.....	64

Liste des annexes

Annexe 1 Références citées	71
----------------------------------	----

1. Introduction

1.1. LES OUTILS ANALYTIQUES EN EVALUATION DES RISQUES

L'impact de sources de pollution sur les eaux souterraines est un problème important pour plusieurs domaines d'activité. Etablir le risque de pollution des eaux souterraines est devenu un aspect essentiel de la gestion des sites et sols potentiellement pollués, ou pour le dimensionnement des sites de stockage de déchets.

Un nombre important de modèles, numériques ou analytiques, ont été développés pour traiter ce problème. Tandis que ce rapport n'a pas pour objectif de fournir une synthèse des outils existants, on pourra néanmoins citer les compilations de solutions analytiques proposées par Cleary et Ungs (1978), Van Genuchten (1982), ou Wexler (1992). Des outils spécialisés, analytiques ou semi-analytiques, ont été mis au point, tels que POLLUTE (Rowe & Booker, 1994), BIOSCREEN (Newell et al., 1996), RBCA (Connor et al., 1995), SoilRisk (Labieniec et al., 1996), etc.

Dans ce rapport, le terme *modèle analytique* désigne un modèle qui ne nécessite pas une discrétisation spatiale du domaine simulé (un maillage), et la résolution d'une matrice d'équations. Par contre, comme il sera montré plus loin, le modèle MISP fait appel à des techniques numériques, notamment à l'inversion numérique de transformations de Laplace, à l'intégration numérique, ou à la convolution.

Par rapport aux modèles numériques, les modèles analytiques sont généralement utiles à un stade amont d'un projet, notamment pour du dimensionnement, lorsque l'information concernant la complexité du milieu naturel est peu disponible. Un des principaux atouts des modèles numériques est leur capacité à prendre en compte cette complexité, et notamment l'hétérogénéité du sous-sol ou des conditions aux limites complexes. Les solutions analytiques, par contre, supposent que la géométrie du domaine simulé est relativement simple. Malgré leurs limites, les modèles analytiques peuvent être très utiles pour des analyses simplifiées, et sont de ce fait très utilisés dans la pratique.

1.2. MOTIVATION POUR DEVELOPPER MISP

Le lecteur pourra se demander : *pourquoi développer un nouveau modèle analytique, puisqu'il en existe déjà qui sont facilement disponibles ?* La réponse à cette question est que MISP a été développé en raison d'une insuffisance conceptuelle des outils existants. Pour expliquer cette insuffisance il est nécessaire d'illustrer le modèle conceptuel de MISP. MISP a été développé pour traiter le cas où une source de pollution est située au dessus de la nappe phréatique. Ce cas est pertinent pour un certain nombre de situations, par exemple pour le cas de l'enfouissement des déchets en surface, ou celui de sols superficiels pollués. Les polluants sont mobilisés par de l'eau météorique qui s'infiltré verticalement, puis transportés vers la nappe. Une fois

qu'ils ont atteint la nappe, ils sont transportés latéralement par l'eau souterraine et subissent un certain nombre de mécanismes d'atténuation.

Les modèles analytiques (ou semi-analytiques) existants qui traitent ce cas, supposent presque tous l'existence d'une hypothétique "couche de mélange", située à l'aplomb de la zone source (voir par exemple RBCA, POLLUTE, SoilRisk, HESP ; Veerkamp et Berge 1995, etc.). Le flux polluant émis par la source est d'abord mélangé de manière homogène et instantanée dans la couche de mélange (Figure 1), pour fournir une concentration à l'aplomb de la source, cette concentration devenant une condition limite pour le transport dans l'aquifère vers l'aval de la source. Le transport dans l'eau souterraine est estimé à l'aide, notamment, de la solution approchée de Domenico et Robbins (1985), ou de la solution plus rigoureuse de Sagar (1982) (voir aussi Wexler, 1992 et Guyonnet et Neville, 2004).

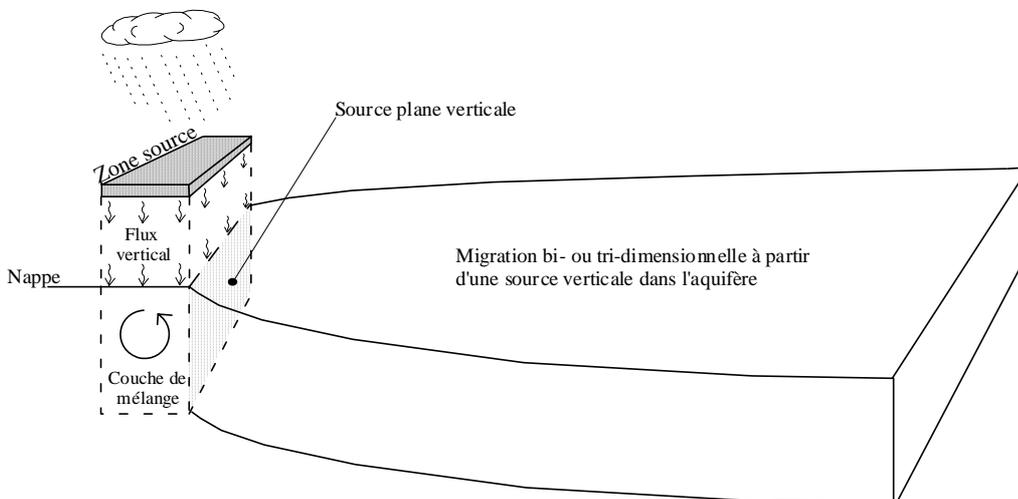


Figure 1 – Modèle conceptuel de certains outils analytiques utilisés pour estimer l'impact sur les eaux souterraines

Le problème avec cette approche réside dans le fait qu'un tel mélange homogène et instantané n'existe pas dans l'eau souterraine. Le mélange est un processus graduel qui résulte de plusieurs phénomènes parmi lesquels la variation spatiale du champ des vitesses, la dispersion latérale, les effets de densité, etc.

Une alternative à cette "couche de mélange" est fournie par une solution proposée par Galya (1987). Cet auteur a utilisé des fonctions de Green pour développer une solution pour le cas de la migration en 3 dimensions de solutés émis par une source horizontale à flux constant, située à la surface de la nappe.

L'idée à l'origine de MISP a été d'utiliser la technique de la convolution (présentée au Chapitre 2), pour combiner cette solution avec une solution pour la migration verticale à partir d'une source située au dessus de la nappe (Figure 2). Ces différentes solutions sont présentées en détail dans le Chapitre 2.

Dans ce rapport, la couche située au dessus de la nappe est appelée simplement "la couche". Il pourrait s'agir d'une couche de protection telle qu'une barrière argileuse, ou tout simplement de la zone non saturée située entre la surface du sol et la nappe.

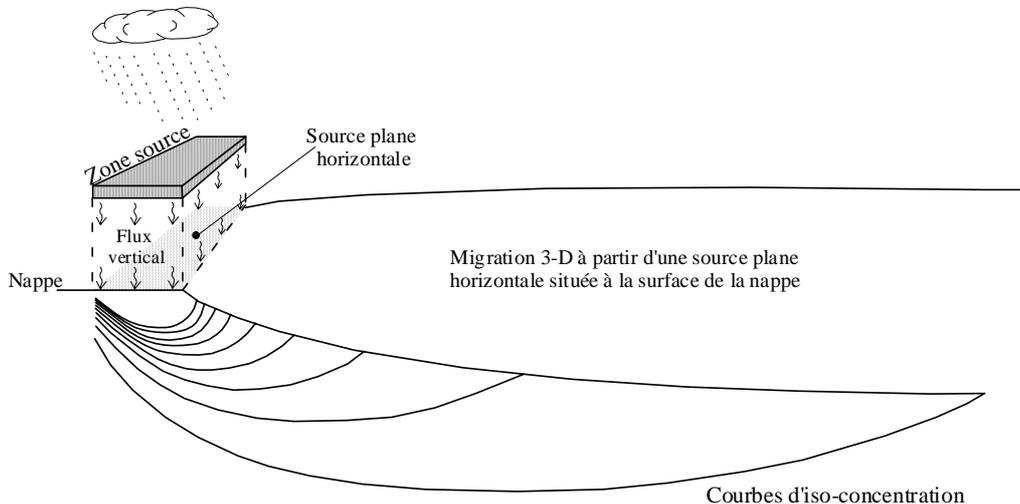


Figure 2 - Le modèle conceptuel de MISP

1.3. STRUCTURE DU RAPPORT

Ce rapport est le guide d'utilisateur du logiciel MISP (qui est en accès libre). Le rapport est divisé en 6 chapitres. Le chapitre 1 a présenté brièvement les raisons pour développer MISP. Le chapitre 2 présente les différentes solutions analytiques utilisées dans MISP et le chapitre 3 présente les principales options offertes par le modèle. Les fichiers d'entrée et de sortie sont décrits dans le chapitre 4, tandis que le chapitre 5 présente plusieurs exemples d'application. Le chapitre 6 souligne les limites de MISP et propose des développements futurs.

A noter qu'il n'est pas fourni de synthèse des fourchettes de valeurs jugées adéquates pour les paramètres qui interviennent dans MISP. Il est supposé que le lecteur a une expérience préalable de la migration des polluants dans les eaux souterraines, et qu'il sera à même de sélectionner les valeurs adaptées à son problème spécifique, sur la base, soit d'informations présentées dans la littérature idoine, ou alors à partir de mesures.

Lors du développement de MISP, l'effort a porté principalement sur l'élaboration d'un outil qui soit adaptable à toute une gamme de problèmes. L'effort n'a pas été dévolu au développement d'un logiciel très convivial avec des menus déroulants etc. Toutefois, comme il sera vu plus loin, l'utilisation de MISP est très aisée, grâce notamment au fait que toutes les informations requises sont contenues dans un fichier unique, qui peut être imprimé sur une seule feuille de papier. Le développement de menus déroulants est prévu pour de futures versions de MISP.

2. MISP : aspects théoriques

2.1. LE PRINCIPE DE SUPERPOSITION

Comme il a été dit précédemment, MISP combine une solution pour la migration verticale, par advection et diffusion-dispersion, à partir d'une source de pollution située au dessus d'une couche surplombant un aquifère, avec une solution qui calcule la migration tri-dimensionnelle dans l'aquifère de polluants émis par une source horizontale située à la surface de la nappe. Cette combinaison est effectuée à l'aide d'une convolution (ou superposition). Cette technique est particulièrement utile pour incorporer des conditions aux limites complexes dans les solutions analytiques. Elle est présentée brièvement ci-dessous.

On considère une solution analytique qui fournit l'évolution de la concentration dans l'aquifère au cours du temps $c(t)$ et qui est de la forme : $c(t) = c_o F(x, y, z, t)$ où c_o est une concentration source constante et $F(x, y, z, t)$ est une fonction des coordonnées spatiales x, y, z et du temps t . Une concentration source variable peut être prise en compte par :

$$c(t) = \sum_{i=1}^n (c_i - c_{i-1}) F(x, y, z, t - t_{i-1}) \quad (1)$$

où n est le nombre de concentrations source.

Par exemple, pour le cas d'une source dont la concentration varie suivant trois paliers :

- c_1 de $t = 0$ à t_1
- c_2 de t_1 à t_2
- c_3 de t_2 à t

il découle de l'Equation (1) que la concentration c au temps t est :

$$c(t) = c_1 F(x, y, z, t) + (c_2 - c_1) F(x, y, z, t - t_1) + (c_3 - c_2) F(x, y, z, t - t_2)$$

Dans MISP, la fonction F serait la solution de Galya (1987) pour le transport dans l'aquifère, tandis que les c_i seraient les flux massiques à la surface de la nappe à l'aplomb de la zone source.

Dans MISP, des convolutions successives sont utilisées, notamment pour combiner des concentrations variables à la source avec la solution pour estimer le transfert dans la couche, puis pour combiner les flux massiques résultants avec la solution de Galya

(1987). Pour cette raison, certaines options de calcul peuvent entraîner des temps de calcul relativement longs. Il est donc recommandé d'augmenter la complexité des problèmes de manière itérative, afin d'éviter de se trouver bloqué par un temps de calcul excessivement long.

2.2. SOLUTION POUR LA MIGRATION VERTICALE VERS LA NAPPE

On suppose que la migration verticale à partir de la source à travers la couche est gouvernée par l'équation de transport uni-dimensionnel par advection et diffusion-dispersion, avec la possibilité d'interaction liquide-solide (retard) et de décroissance de premier ordre (dégradation) :

$$i \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} - \theta D \frac{\partial^2 c(z,t)}{\partial z^2} = -R\theta \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} - R\theta \lambda c(z,t) \quad (2)$$

où :

$c(z,t)$ = concentration à la profondeur z dans la couche et au temps t (M/L^3),

i = infiltration verticale (Darcy) ($L^3/L^2 T^{-1}$),

θ = teneur en eau volumique,

D = coefficient de diffusion-dispersion (L^2/T),

λ = constante de décroissance de premier ordre dans la couche (T^{-1}).

A noter que MISP suppose que la teneur en eau est constante dans la couche. Une analyse de cette hypothèse simplificatrice est proposée dans Guyonnet et al. (2001).

Le coefficient de diffusion-dispersion (D) est :

$$D = \alpha \frac{i}{\theta} + D_o \psi \quad (3)$$

où :

α = dispersivité longitudinale (L),

D_o = coefficient de diffusion dans l'eau pure (L^2/T),

ψ = tortuosité.

La résolution de l'Equation (2) nécessite la définition de conditions aux limites, au sommet et à la base de la couche, ainsi que d'une condition initiale. Pour la condition initiale, MISP fait l'hypothèse d'une concentration nulle : $c(z,0) = 0$.

MISP propose 5 options pour le choix de la condition limite au sommet de la couche :

- Option 1 : en fait il n'y a pas de couche ; un flux massique constant pénètre l'aquifère à la surface de la nappe, sur une surface délimitée. Avec cette option, MISP devient strictement équivalent à la solution de Galya (1987). Elle est prévue à des fins de comparaison.
- Option 2 : une concentration constante, de durée limitée, est présente au sommet de la couche surplombant l'aquifère.
- Option 3 : la concentration située au sommet de la couche surplombant la nappe décroît de manière exponentielle.
- Option 4 : la concentration située au sommet de la couche surplombant l'aquifère est définie par l'émission diffusionnelle de polluants par une couche de déchets stabilisés.
- Option 5 : la concentration située au sommet de la couche surplombant l'aquifère, est arbitraire et lue dans un fichier distinct.

Une des difficultés liées à la résolution de l'Equation (2) réside dans le choix d'une condition limite à la base de la couche (à la surface de la nappe). Idéalement, l'équation (2) serait couplée mathématiquement avec l'équation décrivant le transfert tri-dimensionnel dans l'aquifère, par le biais de la condition limite à la nappe. A notre connaissance, cela n'est malheureusement pas réalisable d'un point de vue mathématique. Une alternative pourrait consister à imposer une concentration nulle à la limite inférieure. Mais ceci ne serait pas satisfaisant, car cela reviendrait à imposer arbitrairement que le flux advectif à la nappe soit nul. Un gradient de concentration nul pourrait être imposé, mais ceci se traduirait par un profil complètement plat en régime permanent (flux dispersif nul).

Afin de définir une condition limite réaliste à la base de la couche, un bilan de masse est effectué sur une mince couche d'aquifère à l'aplomb de la zone source (appelée couche limite). Ce bilan de masse s'écrit :

$$- LH\phi \frac{\partial c^*(t)}{\partial t} = (iL + q_u H)c^*(t) - L \left[ic(e,t) - \theta D \frac{\partial C(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=e} \right] + LH\theta_a \lambda_a c^*(t) \quad (4)$$

où :

$c^*(t)$ = concentration dans l'aquifère sous la zone source, dans une couche limite d'épaisseur H (M/L^3),

L = longueur de la zone source, en direction d'écoulement des eaux souterraines (L),

e = épaisseur de la couche de terrain surplombant l'aquifère (L),

q_u = Flux de Darcy dans l'aquifère, en limite amont de la zone source ($L^3/L^2 T^{-1}$),

ϕ = porosité de l'aquifère,

λ_a = constante de décroissance de premier ordre dans l'aquifère (T^{-1}).

L'Equation (4) suppose un mélange homogène au sein de la couche limite (d'épaisseur H). Ceci peut paraître en contradiction avec l'affirmation initiale que MISP a été développé précisément pour éviter l'hypothèse d'un mélange homogène dans une *couche de mélange*. Néanmoins, l'hypothèse de la couche limite n'est introduite ici que dans le but de définir une condition limite réaliste à la base de la couche de sol, afin d'estimer un flux massique à l'interface entre cette couche et l'aquifère. Pas pour estimer une concentration dans la couche limite. Comme il sera montré plus loin, le flux massique est quasiment insensible à l'épaisseur attribuée à la couche limite. Les flux massiques à la surface de la nappe sous la source sont ensuite combinés avec la solution de Galya pour estimer la concentration dans l'aquifère en aval hydraulique de la zone source.

Les Equations (2) et (4) sont couplées au travers de la condition limite : $c(e,t) = c^*(t)$, qui exprime que la concentration à la base de la couche de sol est égale à la concentration dans la couche limite (continuité). La solution pour la concentration dans la couche limite, exprimée dans le domaine de Laplace est (Guyonnet et al., 1998) :

$$\overline{c^*(p)} = \frac{c_o}{p + \gamma} \cdot \frac{\exp\left[\frac{ie}{2\theta D}\right] \tau}{\left(\frac{\phi H}{D\theta}(p + \lambda_a) + \frac{Hq_u}{L\theta D}\right) \left(\exp\left[\frac{\tau e}{2}\right] - \exp\left[-\frac{\tau e}{2}\right]\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\theta D} + \tau\right) \exp\left[\frac{\tau e}{2}\right] - \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\theta D} - \tau\right) \exp\left[-\frac{\tau e}{2}\right]}$$

$$\text{avec : } \tau = \sqrt{\frac{i^2}{\theta^2 D^2} + \frac{4R(p + \lambda)}{D}} \quad (5)$$

où :

$\overline{c^*(p)}$ = concentration dans la couche limite, exprimée dans le domaine de Laplace,

p = variable de Laplace,

γ = constante de décroissance de premier ordre pour la concentration source.

Cette solution est comparée plus loin à une solution analogue proposée par Rowe et Booker (1985).

Des Equations (4) et (5) il découle que le flux massique à l'interface entre la couche de sol et l'aquifère (la nappe phréatique) peut s'écrire :

$$\overline{F}(p) = \overline{c^*(p)} \left[i + \phi H(p + \lambda_a) + \frac{Hq_u}{L} \right] \quad (6)$$

Dans MISP, l'équation (6) est évaluée dans le domaine temps à l'aide d'une inversion numérique de Laplace, par la méthode décrite par Talbot (1979).

Le théorème de la valeur finale (Churchill, 1958) ; $\lim_{p \rightarrow 0} p \bar{F}(p) = F(t = \infty)$, peut servir à évaluer l'Equation (5) en régime permanent. On obtient :

$$c^* = \frac{c_o}{1 + \frac{q_u H}{iL} \left[1 - \exp\left(-\frac{ie}{\theta D}\right) \right]} \quad (7)$$

Le terme exponentiel dans cette équation tient compte de la composante diffusive-dispersive du flux massique à l'interface entre la couche de sol et l'aquifère. Si on néglige cette composante, l'Equation (7) devient :

$$c^* = \frac{c_o iL}{iL + q_u H} \quad (8)$$

à savoir la simple équation de dilution qui est employée dans plusieurs outils d'évaluation des risques (par exemple HESP ou RBCA).

2.2.1. Comparaison avec la solution de Rowe & Booker (1985)

La solution de Rowe et Booker (1985) est très analogue à l'équation (5). A un égard, toutefois, ces solutions diffèrent. La solution de Rowe et Booker (1985) suppose que la vitesse de l'eau souterraine dans l'aquifère en amont et en aval de la zone source est la même. Les équations (4) à (8), par contre, tiennent compte d'une contribution de la zone source au flux d'eau dans l'aquifère. Cette différence est illustrée ci-dessous par deux cas simples.

Cas 1

On considère une source de longueur $L = 50$ m dans la direction d'écoulement des eaux souterraines, et de concentration unitaire ($c_o = 1$). La couche surplombant l'aquifère est une couche de matériau argileux, de 2 m d'épaisseur, de porosité 0.3, et de conductivité hydraulique 10^{-9} m/s. L'infiltration verticale (i), dans l'hypothèse d'un écoulement gravitaire, est 0.0315 m/an. On suppose une dispersivité longitudinale dans la couche de matériau argileux égale à un dixième de son épaisseur (0.2 m), une tortuosité de 0.3, et un coefficient $D_o = 2 \times 10^{-9}$ m²/s. Le coefficient de diffusion-dispersion dans la couche d'argile (D ; équation 3) est donc : 0.04 m²/an.

L'aquifère sous-jacent a une conductivité hydraulique de 10^{-4} m/s, une épaisseur de 5 m, une porosité de 0.2, et un gradient hydraulique de 0.5%. Le flux de Darcy dans l'aquifère est donc : $q = 15.77$ m/an.

La Figure 3 compare les résultats obtenus à partir de l'Equation (5), à ceux obtenus avec la solution de Rowe et Booker (1985). On constate que la comparaison est

excellente. Le plateau de concentration relative en régime permanent est de 0.02, valeur qui est également celle obtenue à partir des équations (7) ou (8).

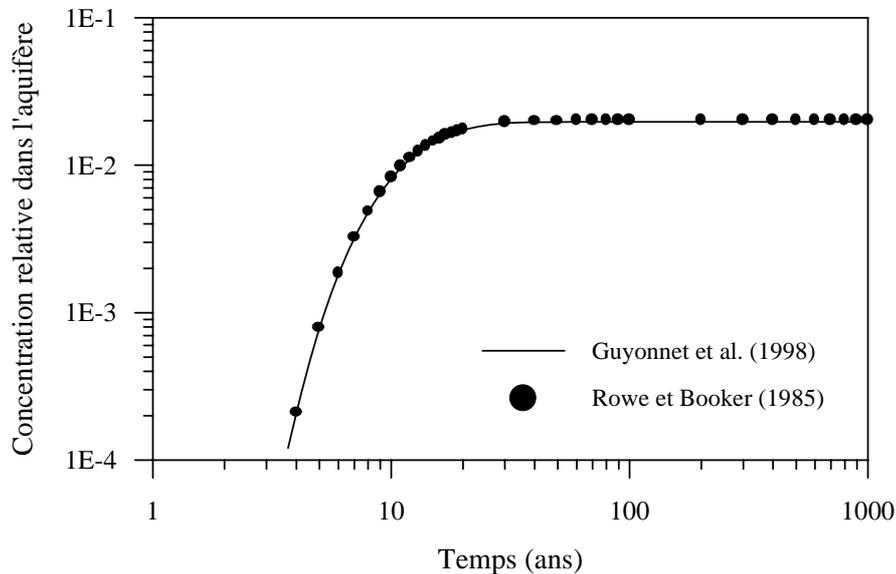


Figure 3 - Comparaison entre l'équation (5) et la solution de Rowe et Booker (1985) pour le Cas 1

Cas 2

Pour ce cas, la conductivité hydraulique de la couche surplombant l'aquifère est augmentée d'un ordre de grandeur par rapport au Cas 1 (10^{-8} m/s). L'infiltration verticale (en écoulement gravitaire) est donc 0.315 m/an (une pluie efficace typique). Par ailleurs, la conductivité hydraulique de l'aquifère est diminuée d'un ordre de grandeur (10^{-5} m/s), tandis que le gradient demeure identique. Le flux de Darcy dans l'aquifère est donc $q = 1.58$ m/an. Le coefficient de diffusion-dispersion augmente en raison de la vitesse d'infiltration supérieure : $D = 0.23$ m²/an.

La comparaison entre les deux solutions en Figure 4 montre que, cette fois, les deux solutions divergent fortement. Tandis que le plateau de concentration relative en régime permanent obtenu à partir de l'équation (5) (et 7 ou 8) est de 0.67, la solution de Rowe et Booker donne une valeur de concentration relative de 2.0 (supérieure à 1). Cette valeur est celle que l'on obtiendrait si on négligeait, dans l'équation (8), la contribution de flux d'eau provenant de la zone source. Elle deviendrait :

$$c^* = \frac{c_o i L}{q_u H} \quad (9)$$

La valeur "correcte" du plateau de concentration serait obtenue avec l'équation (9) (ou la solution de Rowe et Booker) si q_u (flux de Darcy en limite amont de la zone source)

était remplacée par q_d (flux de Darcy en limite aval de la zone source) :

$$q_d = \frac{q_u H + iL}{H}.$$

Ceci suggère que la solution de Rowe et Booker nécessite une vérification préalable de la contribution relative de la zone source à l'écoulement d'eau dans l'aquifère. Une analyse de sensibilité montre que l'influence sera inférieure à 2% si $q_u H > 50 i L$.

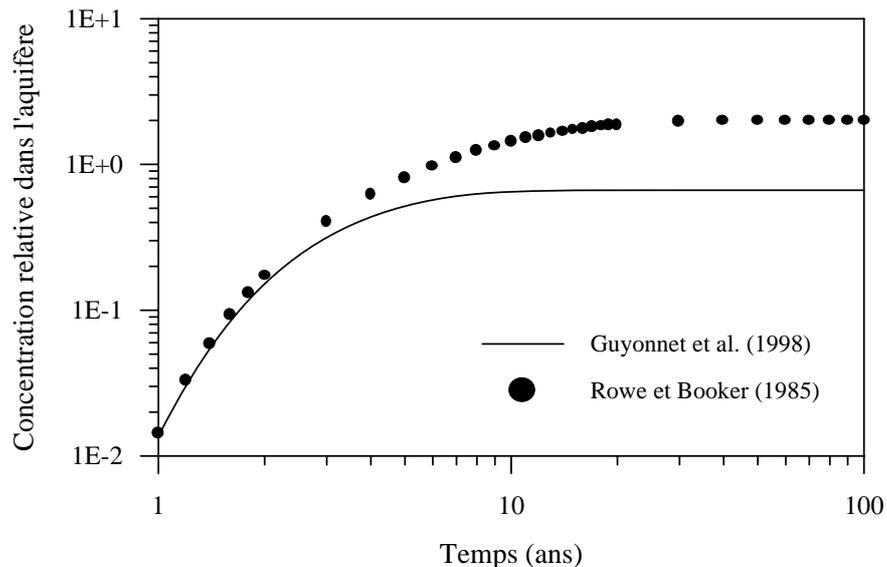


Figure 4 - Comparaison entre l'équation (5) et la solution de Rowe et Booker (1985) pour le Cas 2

2.2.2. Flux massique à la surface de la nappe

Le flux massique à la surface de la nappe est estimé à l'aide de l'équation (6) pour le Cas 1, en supposant une concentration source constante de 1 mg/l, et pour deux valeurs très différentes de l'épaisseur de la couche limite (H) : 20 m et 0.2 m. Tandis que les concentrations dans cette couche limite sont très différentes suivant la valeur de H que l'on choisit, (Figure 5), les flux massiques spécifiques ne sont quasiment pas influencés (Figure 6). Dans MISP, une épaisseur de 0.2 m a été attribuée à la couche limite qui définit une condition limite inférieure pour l'estimation du flux massique au niveau de la nappe sous la zone source.

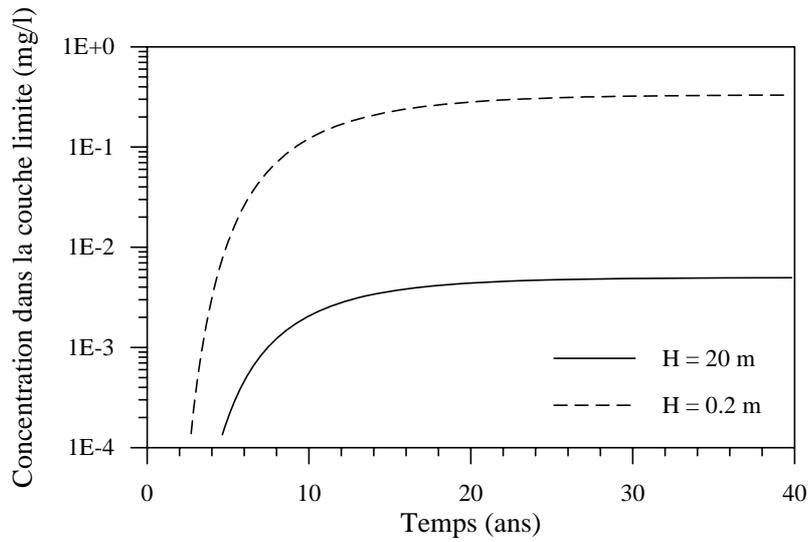


Figure 5 - Concentration dans la couche limite, pour deux valeurs différentes de l'épaisseur de cette couche (H). Mêmes paramètres que pour le Cas 1

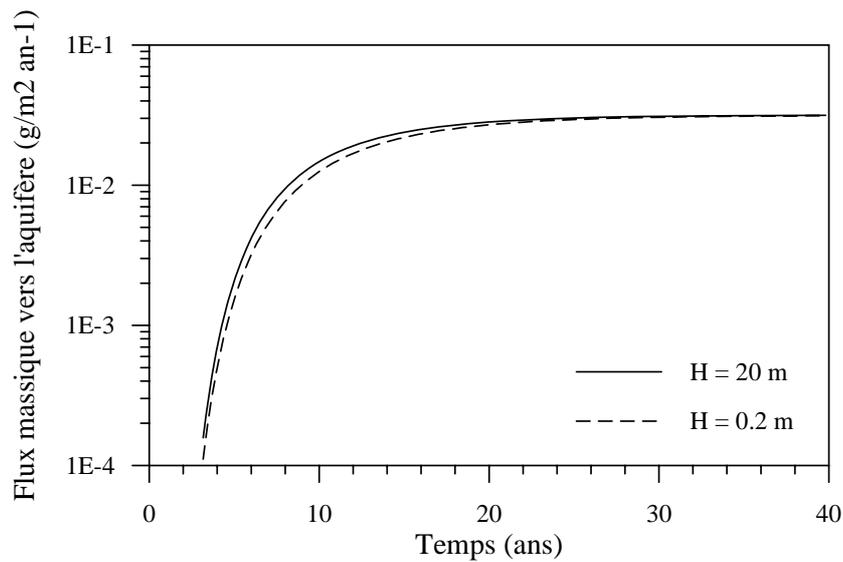


Figure 6 - Flux massiques à la surface de la nappe sous la source, pour deux valeurs d'épaisseur de la couche limite. Mêmes paramètres que pour le Cas 1.

2.3. SOLUTION POUR LE TRANSPORT DANS L'AQUIFERE

2.3.1. Présentation de la solution

La solution de Galya (1987) considère un flux massique M qui pénètre l'aquifère à la surface de la nappe, sur une aire de longueur L dans la direction d'écoulement des eaux souterraines, et de largeur B dans la direction perpendiculaire.

L'équation de transport est :

$$R_a \phi \frac{\partial C}{\partial t} = -q \frac{\partial C}{\partial x} + \phi D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \phi D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \phi D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - R_a \phi \lambda_a C + M \quad (10)$$

où :

C = concentration dans l'aquifère au point x, y, z et au temps t (M/L^3),

ϕ = porosité de l'aquifère,

D_x = coefficient de diffusion-dispersion longitudinale dans l'aquifère (L^2/T),

D_y = coefficient de diffusion-dispersion horizontale-transverse (L^2/T),

D_z = coefficient de diffusion-dispersion verticale-transverse (L^2/T),

R_a = facteur de retard dans l'aquifère,

λ_a = constante de dégradation de premier ordre dans l'aquifère (T^{-1}),

M = flux massique à la surface de la nappe (sur l'aire $L \times B$) (M/T).

Le système de coordonnées x, y, z est défini dans la Figure 7.

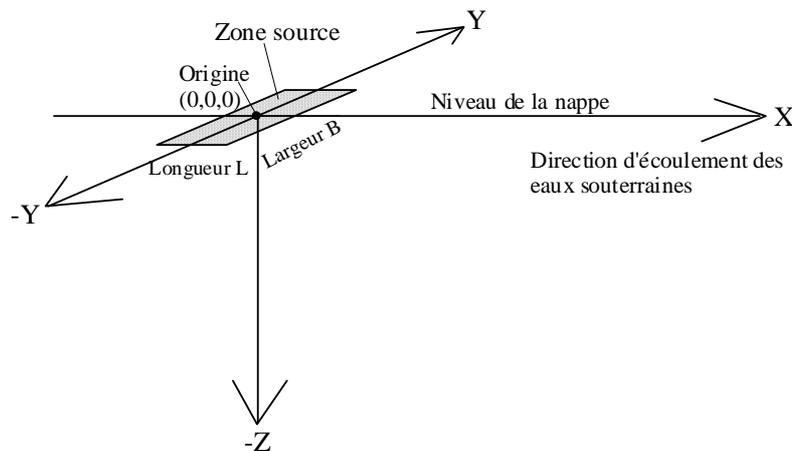


Figure 7 - Système de coordonnées utilisé dans MISP

La condition initiale est celle d'une concentration nulle dans l'aquifère à $t = 0$:

$$C(x, y, z, 0) = 0 \quad (11)$$

Les conditions aux limites sont définies par :

$$C(x, y, z, t) = 0 \quad \text{pour } x = \pm \infty \text{ ou } y = \pm \infty \quad (12)$$

$$\frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } z = 0 \text{ (surface de la nappe)} \quad (13)$$

$$\frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \text{pour } z = H_T \quad (14)$$

où H_T est l'épaisseur totale de l'aquifère.

Une condition limite alternative (où l'aquifère est supposé d'épaisseur semi-infinie) est :

$$C(x, y, z, t) = 0 \quad \text{pour } z = \infty \quad (15)$$

La solution de Galya est exprimée à l'aide de fonctions de Green :

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{\phi R_a} \int_0^t M(\tau) X_o(x, t - \tau) Y_o(y, t - \tau) Z_o(z, t - \tau) T(t - \tau) \delta\tau \quad (16)$$

où :

X_o , Y_o , Z_o sont les fonctions de Green pour le transport dans les directions x , y et z ,

T est une fonction de dégradation,

τ est une variable d'intégration.

Les fonctions de Green sont définies par :

$$X_o = \frac{1}{2L} \left(\operatorname{erf} \left[\frac{L/2 + x - v t/R_a}{\sqrt{4D_x t/R_a}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{L/2 - x + v t/R_a}{\sqrt{4D_x t/R_a}} \right] \right) \quad (17)$$

$$Y_o = \frac{1}{2B} \left(\operatorname{erf} \left[\frac{B/2 + y}{\sqrt{4D_y t/R_a}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{B/2 - y}{\sqrt{4D_y t/R_a}} \right] \right) \quad (18)$$

où erf est la fonction erreur.

Dans le cas où l'aquifère peut être supposé d'épaisseur semi-infinie (cas d'un aquifère très épais), la fonction de Green pour la direction z est :

$$Z_o = \frac{1}{\sqrt{\pi D_z t / R_a}} \exp\left[\frac{-z^2}{4D_z t / R_a}\right] \quad (19)$$

Tandis que si l'aquifère a une épaisseur finie, la fonction s'écrit :

$$Z_o = \frac{1}{H_T} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{n^2 \pi^2 D_z t}{H_T^2 R_a}\right] \cdot \cos(n\pi z / H_T) \right] \quad (20)$$

2.3.2. Exemple d'application de la solution de Galya

Pour cette application, les mêmes valeurs de paramètres sont sélectionnées que celles utilisées par Galya pour générer la Figure 1 de Galya (1987) :

- aquifère supposé d'épaisseur semi-infinie,
- vitesse de l'eau souterraine (v) : 10 m/an,
- porosité de l'aquifère : 0.25
- dispersivité en x (α_x): 2 m,
- dispersivité en y (α_y) et z (α_z) : 0.2 m,
- longueur de la source (L) : 12 m
- largeur de la source (B) : 80 m,
- flux massique : 1000 g/an.

Les concentrations dans l'aquifère en régime permanent (une valeur de temps de 1000 ans a été utilisée), sont calculées le long de l'axe du panache ($y = 0$) et à la surface de la nappe ($z = 0$). Les résultats de la Figure 8 sont identiques à la courbe épaisse de la Figure 1 de Galya (1987).

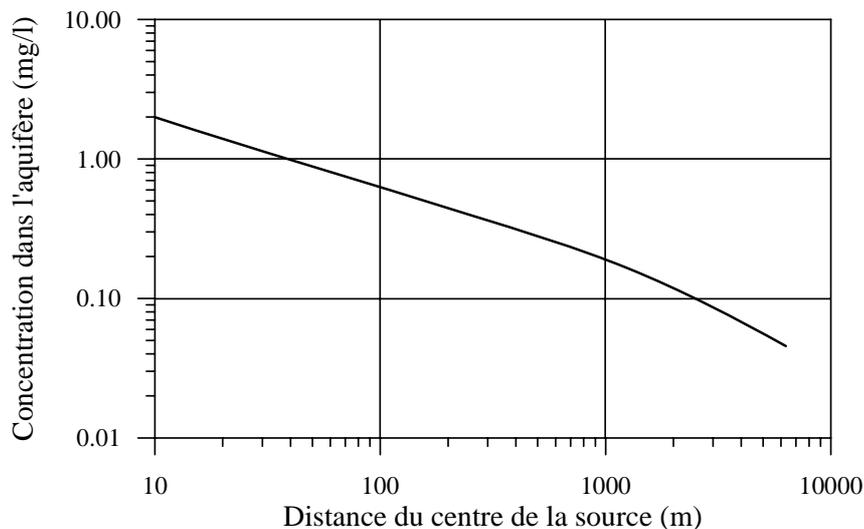


Figure 8 - Exemple application de la solution de Galya (1987)

2.3.3. Comparaison avec un modèle numérique 3-D

Les résultats de la solution de Galya sont comparés à ceux obtenus à l'aide du modèle numérique MARTHE (Thiéry, 1993). MARTHE est un modèle très complet qui permet de traiter :

- les écoulements uni- bi- ou tri-dimensionnels saturés ou non saturés,
- le transfert de polluants réactifs,
- les effets de densité,
- les interactions nappe-rivière,
- la calibration automatique.

Ce modèle peut également être couplé avec des modèles de spéciation chimique, pour prendre en compte, notamment, les réactions de précipitation-dissolution. Le modèle a été vérifié par comparaison avec plusieurs modèles indépendants (voir Thiéry, 1993).

La Figure 9 compare les résultats obtenus à partir de la solution de Galya et ceux de MARTHE, en utilisant les mêmes valeurs de paramètres que pour la Figure 8, si ce n'est que la source a une longueur de 10 m (au lieu de 12 m), et une largeur de 90 m (au lieu de 80 m).

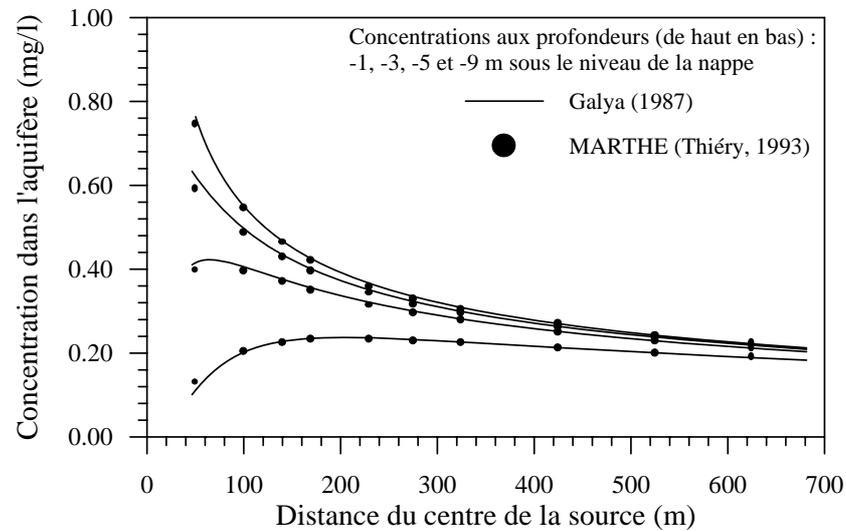


Figure 9 - Comparaison entre la solution de Galya (1987) et le modèle MARTHE (Thiéry, 1993)

Dans la Figure 9, les concentrations ne sont pas représentées dans le voisinage immédiat de la source (premières dizaines de mètres). Dans le cas de solutions qui intègrent un terme source exprimé en flux (comme le fait la solution de Galya), les concentrations calculées dans le voisinage immédiat de la source ont peu de signification, car un flux massique dans un volume très petit se traduit par une concentration très élevée (voir également les solutions de Bear 1972, ou Sauty 1977). Il est nécessaire, par conséquent, de se placer à une distance d'au moins quelques mètres ou dizaines de mètres de la source (suivant ses dimensions) pour que les concentrations calculées soient vraiment significatives.

3. Les options de MISP

Dans ce chapitre, certaines options particulières de MISP sont présentées. La mise en œuvre de ces options sera décrite en détail dans les chapitres 4 et 5.

3.1. OPTIONS POUR LE TERME SOURCE

Comme il a été mentionné précédemment, 5 options sont prévues dans MISP.

a) Option 1

Avec cette option, un flux massique constant est appliqué directement à la surface de la nappe. Par conséquent MISP se limite à la solution de Galya. Cette option est prévue à des fins de comparaison.

b) Option 2

Cette option suppose la présence d'une concentration constante, de durée limitée, au sommet de la couche surplombant l'aquifère (sur l'aire $L \times B$) (voir la Figure 2). Cette durée limitée permet de tenir compte d'une masse mobilisable limitée. La durée de la source n'est pas calculée par MISP (en fonction de la masse mobilisable), mais doit être calculée indépendamment par l'utilisateur et spécifiée dans le fichier d'entrée. A noter que pour imposer une durée illimitée, il suffit de préciser une durée de la source supérieure au temps de simulation.

c) Option 3

Cette option permet une source dont l'intensité décroît de manière exponentielle :

$$c(t) = c_o \exp(-\gamma t) \quad (21)$$

d) Option 4

Cette option traite le cas d'éléments solubles émis, par diffusion, par une couche monolithique de déchet stabilisé (voir également Guyonnet et al., 1998). La masse mobilisable à partir du déchet est (par unité de surface de déchet) :

$$M_\infty = H_s P \rho \quad (22)$$

où :

H_s = épaisseur du déchet (m),

P = proportion (pondérale) de polluants mobilisables dans le déchet (sans unité),

ρ = masse volumique sèche du déchet (kg/m^3).

L'eau d'infiltration vient lécher la surface du déchet, qui émet des polluants par diffusion. Une solution pour estimer la masse émise à un temps t est proposée par Crank (1970). En supposant que la concentration à la surface du déchet demeure nulle (hypothèse très majorante car elle maximise le flux diffusif), la concentration dans le lixiviat suit une évolution décrite par :

$$C_l(t) = \frac{2P\rho}{q_{\text{inf}}} \sqrt{\frac{D^*}{\pi t}} \quad (23)$$

où :

D^* = coefficient de diffusion du polluant à partir de la matrice (m^2/an),

q_{inf} = flux d'eau d'infiltration qui vient lécher la surface de la couche de déchet stabilisé (m/an).

A noter que q_{inf} n'est pas nécessairement égal à i (infiltration à travers la couche située sous la source) : s'il existe une couche de drainage et un système de collecte des lixiviats, alors i peut être très inférieur à q_{inf} .

Dans MISP, l'équation (23) est représentée par :

$$C_l(t) = CA \sqrt{\frac{1}{t}} \quad \text{avec : } CA = \frac{2P\rho}{q_{\text{inf}}} \sqrt{\frac{D^*}{\pi}} \quad (24)$$

Pour l'Option 4, l'utilisateur doit préciser la valeur de CA (avec les unités définies ci-dessus ; voir l'exemple d'application dans le Chapitre 5).

e) Option 5

Cette option permet de spécifier une fonction de concentration source arbitraire. Les concentrations source sont lues dans un fichier distinct. L'option 5, qui augmente le temps de calcul (les concentrations source sont convoluées avec l'équation 6), offre la possibilité de prendre en compte des termes source complexes.

3.2. OPTIONS POUR LES SORTIES

Plusieurs options sont proposées pour le calcul des concentrations dans l'aquifère.

L'utilisateur peut spécifier s'il souhaite calculer des concentrations à des profondeurs ponctuelles, ou alors moyennées sur un intervalle de profondeur. Ce dernier cas peut être utile si l'utilisateur souhaite évaluer la concentration dans un puits qui est crépiné sur une certaine hauteur. Dans ce cas, l'utilisateur indique la limite supérieure et inférieure de l'intervalle, ainsi que le nombre de subdivisions d'intervalle souhaité pour calculer la concentration moyenne (une moyenne arithmétique).

L'utilisateur indique s'il souhaite estimer l'évolution de la concentration en un point (courbe de restitution), ou alors dans l'espace à un temps donné. Si c'est ce dernier cas qui est sélectionné, l'utilisateur doit indiquer s'il souhaite une représentation dans le plan ou alors en coupe.

Enfin, MISP offre la possibilité de changer le système de coordonnées de la Figure 7 (qui est le système utilisé par MISP pour ses calculs) vers un autre système de coordonnées. Cette option est utile lorsque des résultats de simulations MISP doivent être intégrés dans une carte qui utilise un autre système de coordonnées. Ce changement de système de coordonnées est illustré dans la Figure 10.

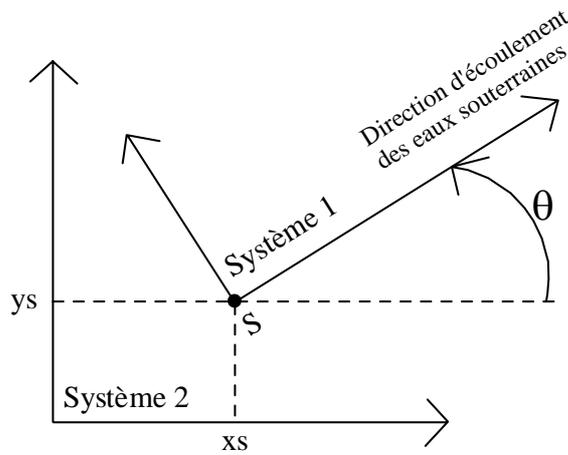


Figure 10 - Changement du système de coordonnées (vue en plan)

Le Système 1 est le système de la Figure 7 : l'axe des x est dans la direction d'écoulement des eaux souterraines, et l'origine est au centre de la source (S dans la Figure 10). Le Système 2 est le système de coordonnées de la carte dans laquelle on veut insérer des résultats de MISP.

L'utilisateur doit indiquer :

Les coordonnées x_s and y_s du centre de la source (S) dans le Système 2,

L'angle (θ dans la Figure 10) entre les axes des x des systèmes 2 et 1.

Cet angle est exprimé en degrés ($^\circ$), et calculé dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. Dans la Figure 10, l'angle θ est égal approximativement à 40° .

3.3. QUELQUES AUTRES POSSIBILITES

L'équation de transport dans la couche surplombant l'aquifère peut être modifiée pour prendre en compte une volatilisation du polluant, en utilisant la formulation proposée par Jury et al. (1983). Cette formulation fait l'hypothèse d'une distribution à l'équilibre du polluant du sol, entre les phases solide (polluant adsorbé), liquide (polluant dissout) et vapeur (polluant volatilisé) qui constituent le sol. Cette distribution à l'équilibre est

définie par des coefficients de distribution (K_d pour la distribution liquide/solide, et K_H pour la distribution liquide/vapeur).

Il convient de noter que l'hypothèse d'une distribution à l'équilibre (utilisée par plusieurs outils d'évaluation des risques ; RBCA, HESP...) n'est valable que dans le cas où le polluant est présent dans le sol à des concentrations relativement faibles. C'est normalement le cas des pesticides, pour lesquels la formulation de Jury et al. (1983) a été initialement développée. Comme elle est conceptuellement simple, elle a été étendue à d'autres polluants organiques, et notamment aux hydrocarbures. Par contre, si de tels polluants sont présents dans le sol en quantités significatives, avec une phase pure piégée dans la porosité du sous-sol, alors l'hypothèse d'une distribution à l'équilibre n'est pas valable. Les concentrations dans l'eau qui s'infiltré doucement dans le sol seront probablement contrôlées par la solubilité du polluant.

Dans le cas où l'hypothèse de Jury et al. est jugée adaptée, l'équation (2) peut s'écrire :

$$i \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} - D_E \frac{\partial^2 c(z,t)}{\partial z^2} = -R_E \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} - R_E \lambda c(z,t) \quad (25)$$

où :

D_E = coefficient de dispersion effectif (L^2/T),

R_E = facteur de retard effectif.

Le facteur de retard effectif peut s'écrire :

$$R_E = \theta + \rho_b K_d + a K_H \quad (26)$$

où :

θ = teneur en eau volumique du sol,

ρ_b = masse volumique sèche du sol (M/L^3),

a = teneur en air volumique du sol,

K_d = coefficient de distribution solide-liquide (L^3/M),

K_H = constante de Henry adimensionnelle.

Dans MISP, la valeur obtenue à partir de l'équation (26) serait entrée en ligne 32 du fichier d'entrée (voir la Figure 11 ; Chapitre suivant).

Le coefficient de dispersion effectif peut s'écrire (Jury et al., 1983) :

$$D_E = K_H D_G + D_L \quad (27)$$

où :

D_G = coefficient de diffusion dans l'air du sol (L^2/T),

D_L = coefficient de diffusion dans l'eau du sol (L^2/T).

Le lecteur se référera à Jury et al . (1983) pour obtenir des expressions pour ces deux paramètres. Dans MISP, les valeurs obtenues seront spécifiées en modifiant les lignes 13 (coefficient de diffusion dans l'eau) et 18 (tortuosité).

D'autres cas peuvent être traités avec MISP. Par exemple, certains chercheurs préconisent l'utilisation de fonctions exponentielles, pour représenter la mobilisation de polluants à partir de déchets lors de leur lessivage. Ceci peut être traité à l'aide de l'option 3 pour le terme source.

4. Comment utiliser MISP ?

4.1. FICHIER(S) D'ENTREE

MISP demande à l'utilisateur d'indiquer le nom d'un fichier d'entrée contenant les informations relatives au problème traité. Un tel fichier est représenté dans la Figure 11 (les numéros de lignes ont été ajoutés pour en faciliter la description). **Les formats des valeurs des paramètres doivent être respectés et aucune ligne ne doit être effacée.** Respecter les formats signifie :

- Garder le même nombre de chiffres après la virgule pour chaque valeur de paramètre,
- Respecter le format réel ou entier,
- Conserver la valeur à la même place.

Les fichiers entrée peuvent être édités en utilisant les outils standard de Microsoft, ou dans une fenêtre DOS avec l'éditeur DOS. Si on utilise des éditeurs de textes, **il faut éviter d'insérer du formatage : le fichier doit être sauvé en tant que fichier texte** (pas en tant que fichier .doc par exemple).

Chaque ligne du fichier d'entrée est décrite ci-dessous.

Lignes 1 – 5 : Ce sont des lignes de commentaires. L'utilisateur peut modifier ces lignes pour inclure des informations relatives au problème traité (en gardant le même nombre de lignes).

Ligne 6 : OPTION_S : Option pour la source. C'est un nombre entier compris entre 1 et 5 (voir le chapitre 3 pour les différentes options).

Si OPTION_S est égal à 5, alors MISP demande à l'utilisateur de fournir le nom du fichier des concentrations source. Ce fichier doit commencer par une ligne de commentaires (voir la Figure 12) suivie par deux colonnes de valeurs ; une colonne de temps (années) et une colonne de concentrations (mg/l). Le nombre de couples temps/concentrations ne doit pas dépasser 600 (ou un message d'erreur sera affiché). Si le premier temps du fichier n'est pas nul, alors MISP supposera que la première concentration indiquée s'applique à la période entre l'instant zéro et le premier temps du fichier. Si le temps de simulation est supérieur au dernier temps indiqué dans le fichier, MISP supposera que la dernière concentration indiquée dure jusqu'à la fin de la simulation.

Ligne 7 : Longueur de la zone source dans la direction d'écoulement des eaux souterraines (L dans la Figure 7).

Ligne 8 : Largeur de la zone source dans la direction perpendiculaire à la direction d'écoulement des eaux souterraines (B dans la Figure 7).

Ligne 9 : Concentration source constante (mg/l). Cette information est utilisée si $OPTIONS_S = 1, 2$ ou 3 (dans ce dernier cas, la valeur est la concentration initiale c_0 de l'équation 21).

A noter que les concentrations source sont indiquées en mg/l. Les concentrations dans l'aquifère sont en mg/l et les flux massiques à la surface de la nappe (voir le sous-chapitre 4.2) sont en $g/m^2 an^{-1}$. Une autre unité de concentration source pourrait être utilisée ; les concentrations dans l'aquifère auraient alors cette même unité, et les flux massiques changeraient d'unité en conséquence. Par exemple, si la concentration source est fournie en g/l, alors les flux massiques sont en $kg/m^2 an^{-1}$ (bien qu'indiqués en $g/m^2 an^{-1}$). Afin d'éviter d'éventuelles confusions, il est recommandé de conserver le système d'unités proposé dans le fichier d'entrée.

Ligne 10 : Durée de la concentration source constante (années). Cette information n'est utilisée que si $OPTION_S = 2$. Lorsque le temps de simulation dépasse cette durée, la concentration source devient nulle.

Ligne 11 : Constante de décroissance pour la source (an^{-1}). Cette information n'est utilisée que si $OPTION_S = 3$.

Ligne 12 : Paramètre CA pour une émission diffusive à partir d'une matrice de déchet stabilisé. Voir le chapitre 3 pour le calcul de CA , et le chapitre 5 pour un exemple d'application.

Ligne 13 : Coefficient de diffusion du polluant dans l'eau, en m^2/s (D_0 dans l'équation 3).

Ligne 14 : Commentaire : PARAMETRES DE LA COUCHE.

Ligne 15 : Infiltration verticale (m/s). C'est une vitesse d'infiltration au sens de Darcy (pas une vitesse de l'eau dans les pores).

A noter que les valeurs de paramètres suivantes ne sont pas prises en compte si $OPTION_S = 1$ (flux directement à la surface de la nappe).

Ligne 16 : Epaisseur de la couche surplombant l'aquifère (m).

MISP ne permet qu'une seule couche au-dessus de l'aquifère. A noter toutefois que dans le cas d'une couche de matériau faiblement perméable (une couche de matériau argileux) située au dessus d'une couche de matériau plus perméable (sableux), une bonne approximation des temps de transfert et des concentrations est obtenue en attribuant les propriétés de la couche peu perméable à toute la colonne de sol. En effet, le flux advectif est contrôlé par cette couche peu perméable, tandis que le flux diffusif-dispersif (et le gradient de concentration) est contrôlé principalement par l'épaisseur de la colonne de sol.

- Ligne 17 :** Teneur en eau (volumique) : volume d'eau par unité de volume de milieu poreux. Il est supposé que la teneur en eau est constante au travers de la couche.
- Ligne 18 :** Tortuosité (sans unité) (voir l'équation 3).
- Ligne 19 :** Dispersivité longitudinale (m) (voir l'équation 3)
- Ligne 20 :** Facteur de retard (R).
- Ligne 21 :** Constante de décroissance pour la migration dans la couche (1/an).
- Ligne 22 :** Commentaire.
- Ligne 23 :** Flux de Darcy (m/s) dans l'aquifère en limite amont de la zone source. MISP fait une distinction entre l'écoulement à l'amont et à l'aval de la zone source, pour le cas où cette zone serait très longue et contribuerait de manière significative à l'écoulement dans l'aquifère. Si l'utilisateur ne dispose pas de cette information, ou s'il pense que l'influence est mineure, alors les valeurs des lignes 23 et 24 sont les mêmes.
- Ligne 24 :** Flux de Darcy (m/s) dans l'aquifère en limite aval de la zone source.
- Ligne 25 :** Porosité de l'aquifère.
- Ligne 26 :** Epaisseur de l'aquifère (m). Comme il a été dit dans le chapitre 2, deux expressions sont possibles pour la fonction de Green dans la direction z , suivant que l'on considère un aquifère très épais (semi-infini) ou d'épaisseur finie. MISP prendra la fonction pour un aquifère semi-infini si l'épaisseur indiquée est supérieure ou égale à 1000.00 m. A noter que les calculs pour un aquifère semi-infini sont plus rapides que pour un aquifère fini (voir la somme dans l'équation 20). Par conséquent, pour des simulations demandant de longs temps de calcul (par exemple des profils multiples dans le plan ou en coupe), il est recommandé de tester au préalable si les deux options donnent des résultats différents ou non.
- Ligne 27 :** Dispersivité en x (m).
- Ligne 28 :** Dispersivité en y (m).
- Ligne 29 :** Dispersivité en z (m).
- Ligne 30 :** Tortuosité de l'aquifère. Ce paramètre n'aura une influence que dans le cas d'un aquifère de relativement faible perméabilité. Pour des valeurs de perméabilité (ou transmissivité) classiques pour des aquifères productifs, c'est la composante mécanique (dispersivité) qui contrôle la dispersion.

- Ligne 31 :** Constante de décroissance dans l'aquifère (an^{-1}).
- Ligne 32 :** Facteur de retard dans l'aquifère.
- Ligne 33 :** Commentaire.
- Ligne 34 :** Commentaire : paramètres pour la sortie des flux. MISP calcule les flux massiques à la surface de la nappe juste sous la zone source (avec l'équation 6), et envoie ces flux dans un fichier sortie distinct.
- Ligne 35 :** Premier temps de calcul du flux (an).

Un message d'erreur fréquent dans MISP (*floating-point error : overflow*) survient généralement parce qu'une valeur trop faible a été attribuée à ce premier temps de calcul. Si ce temps est trop faible, l'algorithme de calcul ne parvient pas à obtenir de résultat car il tente de calculer des flux ou des concentrations infinitésimales.

- Ligne 36 :** Nombre de temps par cycle log. Par exemple, si le premier temps de calcul est 1 an, et 3 cycles log sont demandés, alors MISP génère des flux sur la période de 1 à 1000 ans. Bien entendu, si une concentration dans l'aquifère est souhaitée à un certain temps t , alors le nombre de cycles log temps pour le calcul du flux devrait couvrir ce temps t .
- Ligne 37 :** Nombre de points par cycle log. MISP générera "Nombre de points" temps de calcul par cycle log, qui sont uniformément espacés sur une échelle logarithmique.
- Ligne 38 :** Commentaire.
- Ligne 39 :** OPTION_A pour le type de concentration à calculer. Si OPTION_A = 1, alors des concentrations à des profondeurs ponctuelles sont calculées. Si OPTION_A = 2, alors ce sont des concentrations moyennées sur un certain intervalle de profondeur.
- Lignes 40-41 :** Commentaires.
- Ligne 42 :** Limite supérieure de l'intervalle. Cette information (et celles des lignes 43 et 44) n'est utilisée que si OPTION_A = 2. Il s'agit de la profondeur par rapport à la nappe, de la limite supérieure de l'intervalle (m). La profondeur peut être indiquée en valeur soit négative soit positive (auquel cas elle sera changée en valeur négative dans MISP).
- Ligne 43 :** Profondeur par rapport à la nappe de la limite inférieure de l'intervalle (m).
- Ligne 44 :** Nombre de subdivisions de l'intervalle. Par exemple, si la limite supérieure est -2 m, la limite inférieure est -10 m, et le nombre

d'intervalles est 4, alors MISP calculera des concentrations aux profondeurs -2, -4, -6, -8, -10 m, et prendra la moyenne de ces 5 valeurs (nombre de subdivisions + 1).

- Ligne 45 :** OPTION_B pour le type de sortie (OPTION_B = 1 : distribution spatiale, ou OPTION_B = 2 : courbe de restitution).
- Ligne 46 :** Commentaire. Information si OPTION_B = 1
- Ligne 47 :** Temps de calcul (années). Si un calcul en régime permanent est souhaité, une valeur très grande sera attribuée à ce paramètre.
- Ligne 48 :** Première valeur de x pour les profils de concentration (m). Si une distribution spatiale a été sélectionnée, MISP génère des profils de concentration en x pour différentes valeurs, soit de y (représentation en plan), soit de z (représentation en coupe). A noter que si on choisit de calculer la concentration à la surface de la nappe (z = 0 m), alors la première valeur de x devrait être supérieure à L/2 (pour sortir de la zone source).
- Ligne 49 :** Nombre de cycles log en x.
- Ligne 50 :** Nombre de points par cycle log.
- Ligne 51 :** Commentaire. Information utilisée si OPTION_B = 2 (courbe de restitution).
- Ligne 52 :** Coordonnée x du point de calcul (m).
- Ligne 53 :** Coordonnée y du point de calcul (m).
- Ligne 54 :** Profondeur du point de calcul (si OPTION_A = 1). Si OPTION_A = 2 (concentrations moyennes), cette information est ignorée et MISP balaie sur l'intervalle spécifié pour calculer des concentrations moyennes.
- Ligne 55 :** Premier temps de calcul pour la courbe de restitution (ans).
- Ligne 56 :** Nombre de cycles log.
- Ligne 57 :** Nombre de points par cycle log.
- Ligne 58 :** Commentaire. OPTION_C pour le type de distribution spatiale souhaité (en plan ou en coupe). Cette information est utilisée si OPTION_B = 1
- Ligne 59 :** Commentaire. Information pour une distribution en plan.
- Ligne 60 :** Valeur maximale de y (m).

- Ligne 61 :** Incrément en y (m). MISP générera des profils en x de $y = 0$ m à $y = y_{\max}$ par pas de "incrément en y ". En raison de la symétrie par rapport à l'axe des x , MISP sort également des valeurs pour les coordonnées $-y$. Si on souhaite seulement une valeur de y (un seul profil en x), une valeur nulle est attribuée à l'incrément et le profil en x ne sera calculé que pour $y = y_{\max}$.
- Ligne 62 :** Profondeur des profils (si $\text{OPTION_A} = 1$). Si $\text{OPTION_A} = 2$, cette information est ignorée et MISP balaie sur l'intervalle spécifié pour estimer les concentrations moyennes. Si de nombreux profils sont souhaités (incrément en y faible), ceci peut entraîner des temps de calcul très longs. Il est donc conseillé d'effectuer un "run" avec seulement un ou deux profils, pour obtenir une estimation du temps de calcul total.
- Ligne 63 :** Commentaire. Information pour une distribution spatiale en coupe.
- Ligne 64 :** Valeur de profondeur maximum (m).
- Ligne 65 :** Incrément de profondeur (m). Cette valeur sera nulle si on souhaite un profil en x à une seule profondeur. A noter que l' $\text{OPTION_A} = 2$ (concentrations moyennes) ne fonctionnera pas si une représentation en coupe a été sélectionnée.
- Ligne 66 :** Valeur de y pour la représentation en coupe (m)
- Ligne 67 :** OPTION_D pour un changement de système de coordonnées (1 : Non, 2 : Oui).
- Ligne 68 :** Coordonnée x_s (m) du centre de la source (origine du système de coordonnées 1) dans le système 2. (voir la Figure 10).
- Ligne 69 :** Coordonnée y_s (m) du centre de la source (origine du système de coordonnées 1) dans le système 2. (voir la Figure 10).
- Ligne 70 :** Angle (en degrés) entre les axes des x des systèmes de coordonnées 2 et 1 (en tournant dans le sens inverse des aiguilles d'une montre ; voir la Figure 10).
- Lignes 71-72 :** Commentaires.

```

ligne 1 *****
ligne 2 ***** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 *****
ligne 3 ***** Cas : Exemple de Galya (1987) *****
ligne 4 *****
ligne 5 ***** PARAMETRES DE LA SOURCE *****
ligne 6      1          OPTION_S pour le type de terme source
ligne 7      12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
ligne 8      80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
ligne 9      3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
ligne 10     0.00      Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
ligne 11     0.00E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
ligne 12     0.00      Parametre CA (kg/m3 an^0.5) (OPTION_S = 4)
ligne 13     2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
ligne 14 ***** PARAMETRES DE LA COUCHE *****
ligne 15     9.51E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
ligne 16     1.00      Epaisseur (m)
ligne 17     0.20      Teneur en eau ( )
ligne 18     0.30      Tortuosite ( )
ligne 19     1.00E-01  Dispersivite (m)
ligne 20     1.00      Coefficient de retard ( )
ligne 21     0.00E+00  Constante de degradation (1/an)
ligne 22 ***** PARAMETRES DE L'AQUIFERE *****
ligne 23     7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
ligne 24     7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
ligne 25     0.25      Porosite ( )
ligne 26     1000.00   Epaisseur (m)
ligne 27     2.00E+00  Dispersivite en X (m)
ligne 28     2.00E-01  Dispersivite en Y (m)
ligne 29     2.00E-01  Dispersivite en Z (m)
ligne 30     0.67      Tortuosite ( )
ligne 31     0.00E-00  Cnte de degradation (1/an)
ligne 32     1.00      Facteur Retard ( )
ligne 33 ***** PARAMETRES DE RESTITUTION *****
ligne 34     *** PARAMETRES pour la sortie des flux
ligne 35     0.10      Premier temps de calcul du flux (an)
ligne 36     4          Nombre de cycles log temps
ligne 37     10         Nombre de points par cycle log
ligne 38     *** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
ligne 39     1          *** OPTION_A pour le type de concentration
ligne 40     (1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
ligne 41     (2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
ligne 42     0.00      Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
ligne 43     -10.00    Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
ligne 44     5          Nombre de subdivisions de l'intervalle
ligne 45     1          *** OPTION_B pour le type de restitution
ligne 46     (1 : Repartition spatiale a temps fixe)
ligne 47     1000.00   Temps (an) pour le calcul
ligne 48     10.00     Premier point X des profils de concentration (m)
ligne 49     3          Nombre de cycle log
ligne 50     30         Nombre de points par cycle log
ligne 51     (2 : Evolution dans le temps a point fixe)
ligne 52     100.00    Coordonnee X (m) du point
ligne 53     0.00      Coordonnee Y (m) du point
ligne 54     0.00      Coordonnee Z (m) du point
ligne 55     1.00      Premier temps de calcul (an)
ligne 56     3          Nombre de cycles log
ligne 57     30         Nombre de points par cycle log
ligne 58     1          *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
ligne 59     (1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
ligne 60     0.00      Valeur max de Y (m)
ligne 61     0.00      Increment de Y (m)
ligne 62     0.00      Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
ligne 63     (2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
ligne 64     -20.00    Profondeur max (m)
ligne 65     -1.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
ligne 66     0.00      Valeur de Y (m)
ligne 67     1          *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
ligne 68     0.00      Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
ligne 69     0.00      Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
ligne 70     0.00      Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
ligne 71     (rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
ligne 72 *****

```

Figure 11- Exemple d'un fichier d'entrée MISP

Temps (ans)	Concentration (mg/l)
1.00E+00	1.99E-05
1.08E+00	4.70E-05
1.17E+00	1.05E-04
1.26E+00	2.22E-04
1.36E+00	4.46E-04
1.47E+00	8.56E-04
1.58E+00	1.57E-03
1.71E+00	2.77E-03
1.85E+00	4.71E-03
2.00E+00	7.71E-03
2.15E+00	1.22E-02
2.33E+00	1.87E-02
2.51E+00	2.79E-02
2.71E+00	4.04E-02
2.93E+00	5.70E-02
3.16E+00	7.85E-02
3.41E+00	1.05E-01
3.69E+00	1.38E-01
3.98E+00	1.78E-01
4.30E+00	2.24E-01
4.64E+00	2.76E-01
5.01E+00	3.35E-01
5.41E+00	3.98E-01
5.84E+00	4.65E-01
6.31E+00	5.34E-01
6.81E+00	6.04E-01
7.36E+00	6.72E-01
7.94E+00	7.37E-01
8.58E+00	7.96E-01
9.26E+00	8.49E-01
1.00E+01	8.92E-01
1.08E+01	9.26E-01
1.17E+01	9.50E-01
1.26E+01	9.63E-01
1.36E+01	9.66E-01
1.47E+01	9.59E-01
1.58E+01	9.42E-01
1.71E+01	9.17E-01
1.85E+01	8.84E-01
2.00E+01	8.46E-01
2.15E+01	8.03E-01
2.33E+01	7.55E-01
2.51E+01	7.06E-01
2.71E+01	6.54E-01
2.93E+01	6.01E-01
3.16E+01	5.49E-01
3.41E+01	4.97E-01
3.69E+01	4.46E-01
3.98E+01	3.96E-01
4.30E+01	3.49E-01
4.64E+01	3.04E-01
5.01E+01	2.63E-01
5.41E+01	2.24E-01
5.84E+01	1.88E-01
6.31E+01	1.56E-01
6.81E+01	1.28E-01
7.36E+01	1.03E-01
7.94E+01	8.13E-02
8.58E+01	6.31E-02
9.26E+01	4.80E-02
1.00E+02	3.57E-02
1.08E+02	2.59E-02
1.17E+02	1.84E-02

Figure 12 - Exemple d'un fichier d'entrée concentration-source

4.2. FICHIERS DE SORTIE

MISP génère deux fichiers de sortie :

- un fichier contenant les flux à l'interface couche-nappe sous la zone source,
- un fichier contenant les concentrations dans l'aquifère en aval de la zone source.

4.3. FAIRE TOURNER MISP

On peut faire tourner MISP, soit en ouvrant une fenêtre DOS et en tapant : `misp_v1f` suivi de "return", soit en double-cliquant sur l'exécutable sous Windows explorer par exemple.

MISP demande le nom du fichier d'entrée (voir le sous-chapitre précédent). Ce nom doit être fourni avec son extension (par exemple `cas1.inp`). MISP demande ensuite le nom du fichier pour la sortie des flux massiques (par exemple `flux1.out`), et celui pour la sortie des concentrations dans l'aquifère (par exemple `conc1.out`). Si l'option source 5 a été sélectionnée, MISP demande le nom d'un fichier contenant les concentrations source (par exemple `source1.inp`).

A noter que les noms de ces différents fichiers doivent avoir un format compatible avec MS DOS : pas plus de 8 caractères, et 3 caractères pour l'extension.

Une fois que les calculs sont effectués, les fichiers de sortie peuvent être examinés à l'aide de l'éditeur DOS, ou avec des éditeurs de texte.

5. Exemples d'application

5.1. CAS N° 1

Ceci est un test de l'Option Source 1, qui reprend le cas traité pour générer la Figure 8. Un exemple de fichier d'entrée est présenté dans la Figure 19 pour le calcul en régime permanent (temps = 1000 ans). La solution est évaluée aux temps 0.3, 1, 10, 100 ans et en régime permanent (1000 ans), en modifiant la ligne 47 du fichier d'entrée pour chaque calcul.

Il est rappelé que suivant quelles options source ou de sortie ont été sélectionnées, certaines informations du fichier entrée ne seront pas prises en compte. Il n'est par conséquent pas obligatoire de mettre des valeurs nulles pour ces paramètres (sauf éventuellement pour des questions de clarté du fichier entrée). A noter qu'attribuer une valeur nulle à la porosité ou au facteur de retard se traduira par un message d'erreur (*division by zero*).

Les résultats du calcul sont présentés dans la Figure 13.

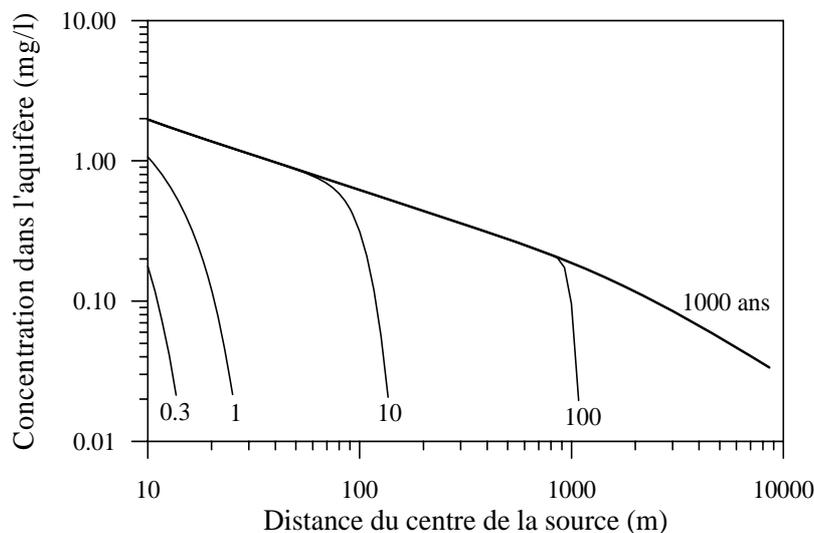


Figure 13 - Résultats MISP pour le Cas No 1

Dans le fichier d'entrée (Figure 19), un flux massique de 1000 g/an a été spécifié en attribuant les valeurs suivantes :

Concentration source (ligne 9) = 3.47 mg/l

Infiltration verticale (ligne 15) = 9.51×10^{-9} m/s.

Compte tenu de la surface de la source (12 m x 80 m), ces valeurs se traduisent effectivement par un flux massique de 1000 g/an.

La Figure 14 est basée sur les mêmes paramètres que précédemment, si ce n'est qu'au lieu de calculer des concentrations à une profondeur unique ($z = 0$ m ; c'est à dire à la surface de la nappe), les concentrations sont calculées sur un intervalle de 0 à -10 m et moyennées. Pour spécifier cet intervalle dans MISP, OPTION_A est changé de 1 à 2 en ligne 39, tandis que les lignes 42 et 43 sont modifiées comme suit :

0.00	Limite supérieure de l'intervalle (m)
-10.00	Limite inférieure de l'intervalle (m)
5	Nombre de subdivisions de l'intervalle

MISP calcule des concentrations aux profondeurs : 0, -2, -4, -6, -8, -10 m et prend la moyenne arithmétique.

La Figure 14 montre que le fait de prendre la moyenne a un effet significatif près de la source, mais que cet effet se dissipe au fur et à mesure que l'on s'en éloigne.

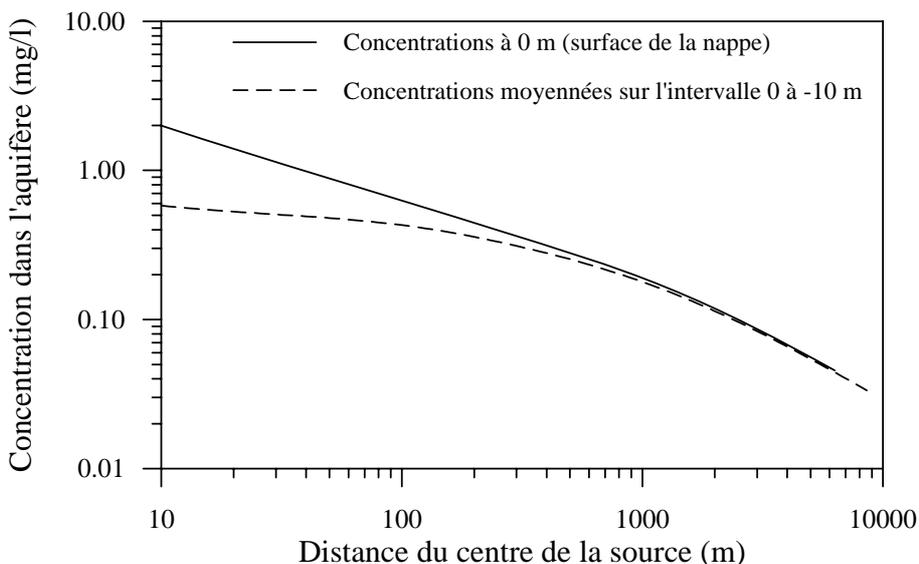


Figure 14 - Cas N° 1. Influence du choix de la concentration moyenne

Le même effet est illustré en utilisant l'option "courbe de restitution" de MISP. Pour utiliser cette option, une valeur de 2 est attribuée à OPTION_B (ligne 45), des coordonnées du point de calcul sont attribuées en lignes 52 à 54, et des paramètres temps sont fixés en lignes 55 à 57. Pour générer la Figure 15, on a utilisé les valeurs suivantes :

100.00	Coordonnée X du point de calcul (m)
0.00	Coordonnée Y du point de calcul (m)
0.00	Profondeur du point (m)
1.00	Premier temps de calcul (ans)
3	Nombre de cycles log temps
30	Nombre de points par cycle log

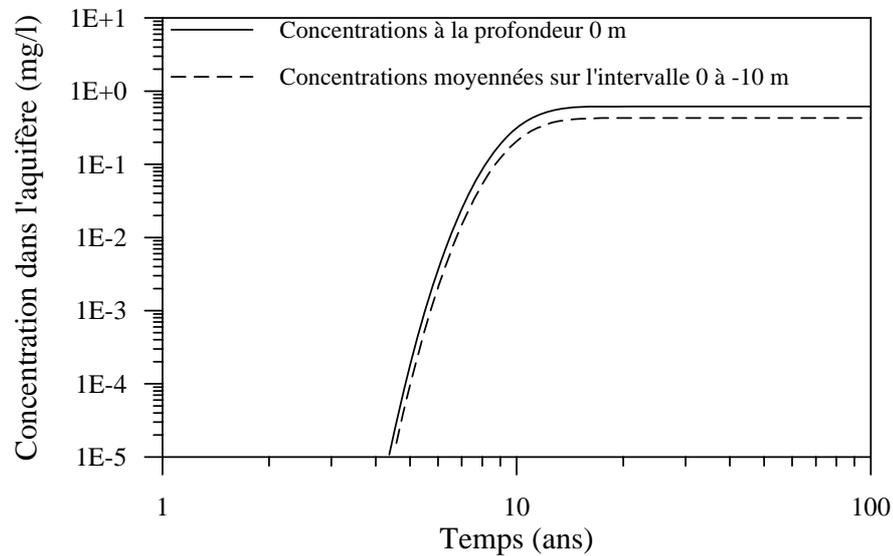


Figure 15 - Cas N° 1. Courbe de restitution à $x = 100$ m, $y = 0$ m

La Figure 16 présente les concentrations en régime permanent dans le plan à la profondeur $z = 0$ m (surface de la nappe). Pour générer ces valeurs, on a imposé `OPTION_B = 1` (ligne 45), `OPTION_C = 1` (ligne 58), et des valeurs ont été entrées en lignes 60 à 62. Afin de diminuer la durée de la simulation, celle-ci a été effectuée en deux temps. On a généré tout d'abord des profils jusqu'à $y = 20$ m tous les 2 m, puis des profils jusqu'à $y = 100$ m tous les 5 m. Pour le premier calcul, par exemple, les valeurs suivantes ont été attribuées aux lignes 60 à 62 :

20.00	Valeur maximale de Y (m)
2.00	Incrément en Y (m)
0.00	Profondeur des profils (m)

Les deux fichiers sortie ont été assemblés, puis une interpolation a été effectuée avec Surfer® de Golden Software. L'option "linear interpolation with triangulation" a été utilisée (cette option respecte toutes les valeurs).

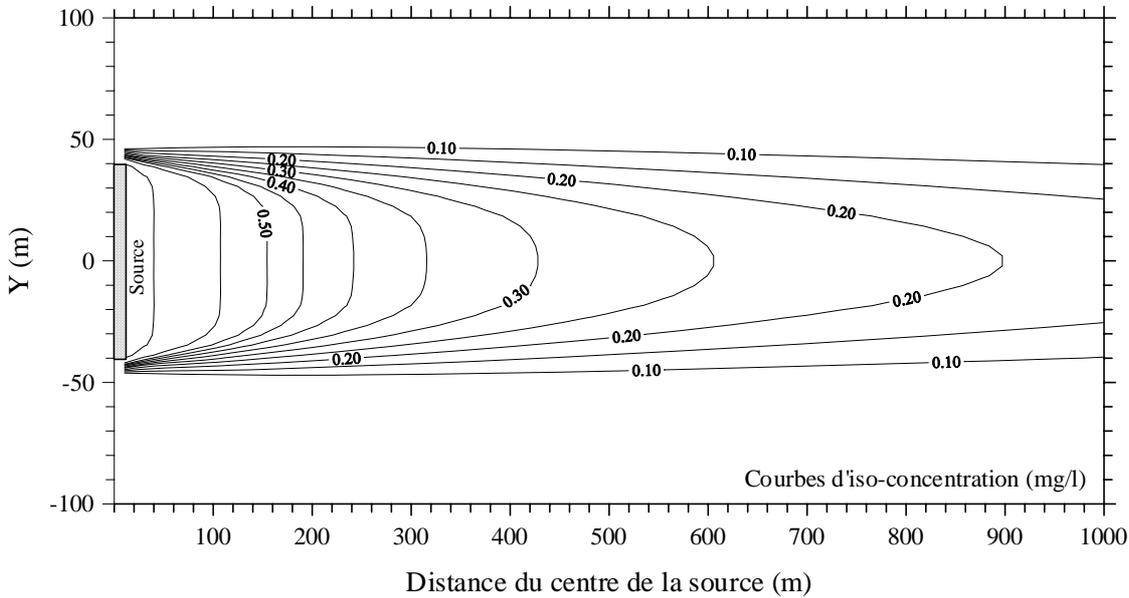


Figure 16 - Cas N° 1. Courbes d'iso-concentration en régime permanent - Courbes dans le plan (à $z = 0$ m)

La Figure 17 présente les concentrations en coupe pour le même problème, et à $y = 0$ m (axe du panache). Pour générer ces valeurs, on fixe OPTION_C (ligne 58) à 2, et les lignes 64 à 66 sont modifiées comme suit :

- 20.00 Profondeur max (m)
- 1.00 Incrément de profondeur (m)
- 0.00 Valeur de Y (m)

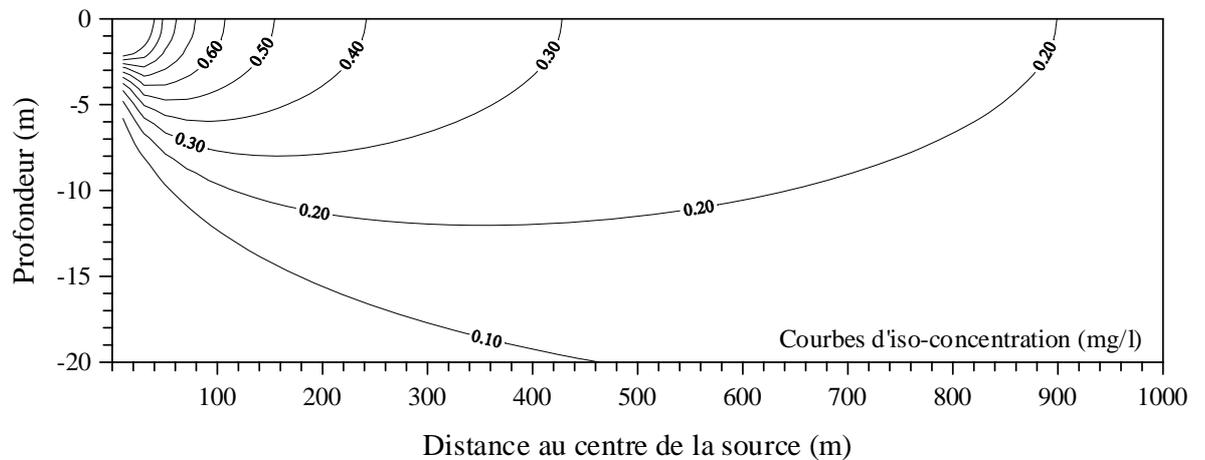


Figure 17 - Cas N° 1. Courbes d'iso-concentration en régime permanent et en coupe ($y = 0$ m)

La Figure 18 illustre l'utilisation de l'option permettant de changer le système de coordonnées. Les valeurs des paramètres sont les mêmes que précédemment, sauf que la dispersivité longitudinale dans l'aquifère (α_x) est de 10 m, et la dispersivité horizontale transverse (α_y) est de 2 m. Le changement de coordonnées a été effectué en modifiant les lignes 67 à 70 comme suit :

2	OPTION_D pour un changement de coordonnées (1 : Non, 2 : Oui)
1465.00	Coordonnée Xs de l'origine du système 1 dans le système 2
1513.00	Coordonnée Ys de l'origine du système 1 dans le système 2
257.78	Angle (en degrés) entre les axes des X des systèmes 2 et 1

Il est rappelé que le système de coordonnées 1 est le système utilisé par MISP pour les calculs : l'axe des x est dans la direction d'écoulement des eaux souterraines, et l'origine est au centre de la source. Le système 2 est le système dans lequel on souhaite intégrer les résultats des calculs.

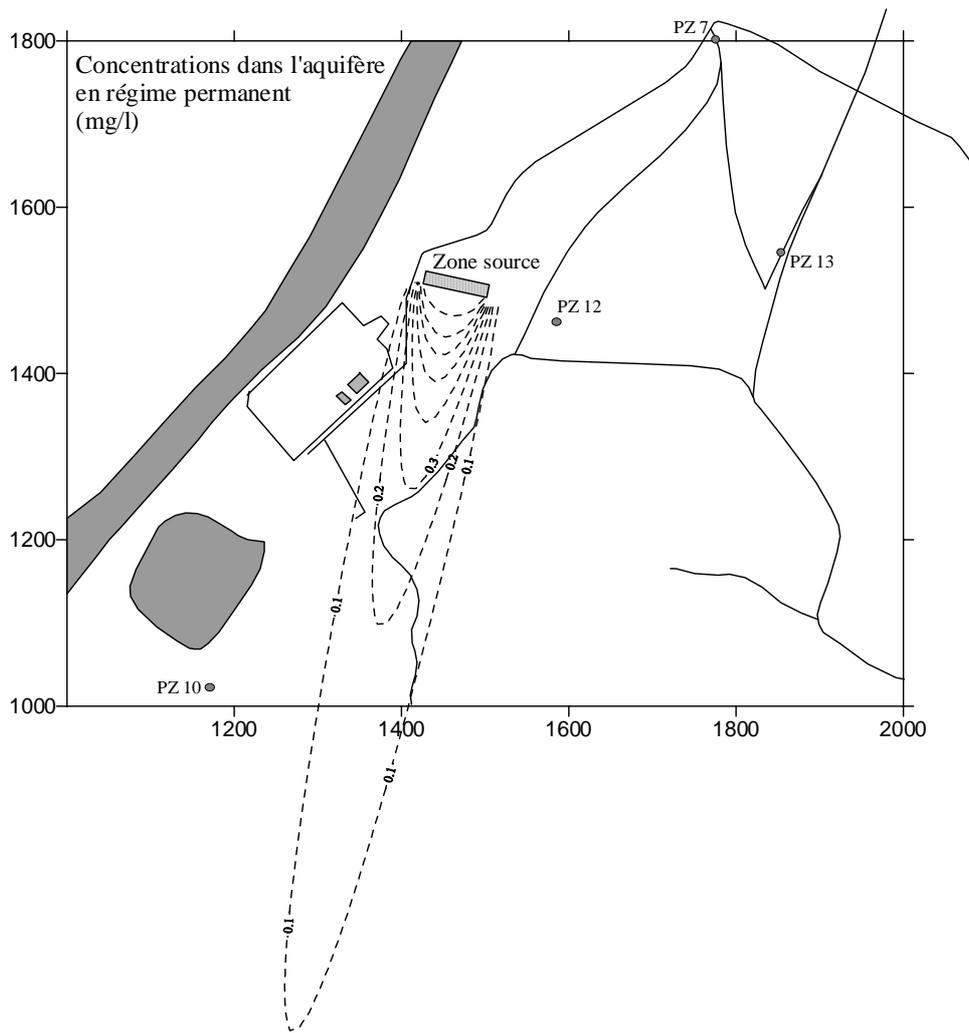


Figure 18 - Cas N° 1. Illustration de l'option permettant le changement de coordonnées

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 ****
**** Cas : Cas No 1 ****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE ****
1          OPTION_S pour le type de terme source
12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
0.00     Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
0.00E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
0.00     Parametre CA (kg/m3 an .5) (OPTION_S = 4)
2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE ****
9.51E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
1.00     Epaisseur (m) (ignore pour ce cas)
0.20     Teneur en eau ( ) (idem)
0.30     Tortuosite ( ) (idem)
1.00E-01  Dispersivite (m) (idem)
1.00     Coefficient de retard ( ) (idem)
0.00E+00  Constante de degradation (1/an) (idem)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE ****
7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
0.25     Porosite ( )
1000.00  Epaisseur (m)
2.00E+00  Dispersivite en X (m)
2.00E-01  Dispersivite en Y (m)
2.00E-01  Dispersivite en Z (m)
0.67     Tortuosite ( )
0.00E-00  Cnte de degradation (1/an)
1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION ****
*** PARAMETRES pour la sortie des flux
0.10     Premier temps de calcul du flux (an)
4        Nombre de cycles log temps
10       Nombre de points par cycle log
*** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
*** OPTION_A pour le type de concentration
(1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
(2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
0        Nombre de subdivisions de l'intervalle
*** OPTION_B pour le type de restitution
(1 : Repartition spatiale a temps fixe)
100.00   Temps (an) pour le calcul
10.00    Premier point X des profils de concentration (m)
3        Nombre de cycle log
30       Nombre de points par cycle log
(2 : Evolution dans le temps a point fixe)
0.00     Coordonnee X (m) du point
0.00     Coordonnee Y (m) du point
0.00     Coordonnee Z (m) du point
0.00     Premier temps de calcul (an)
0        Nombre de cycles log
0        Nombre de points par cycle log
1        *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
(1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
0.00     Valeur max de Y (m)
0.00     Increment de Y (m)
0.00     Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
(2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
0.00     Profondeur max (m)
0.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
0.00     Valeur de Y (m)
1        *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
0.00     Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Angle (degrees) entre les axes des X des reperes 2 et 1
(rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 19 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 1

5.2. CAS N° 2

Ce cas est un test de l'Option Source 2 (concentration constante de durée limitée située au sommet de la couche surplombant l'aquifère). Un fichier d'entrée est présenté dans la Figure 24. A noter que le flux massique en régime permanent est le même que celui du Cas N° 1 : 1000 g/an. La durée de la concentration source est fixée à 100 ans (ligne 10). Pour toute autre option source que l'option 2, cette ligne est ignorée.

Les flux massiques calculés par MISP à la surface de la nappe, sous la zone source, sont comparés à ceux obtenus avec un modèle numérique qui résout les équations présentées dans le sous-chapitre 2.2 par la méthode des différences finies. Les résultats de la Figure 20 sont exprimés en flux massiques spécifiques (on obtient les flux massiques totaux en multipliant par la surface de la source).

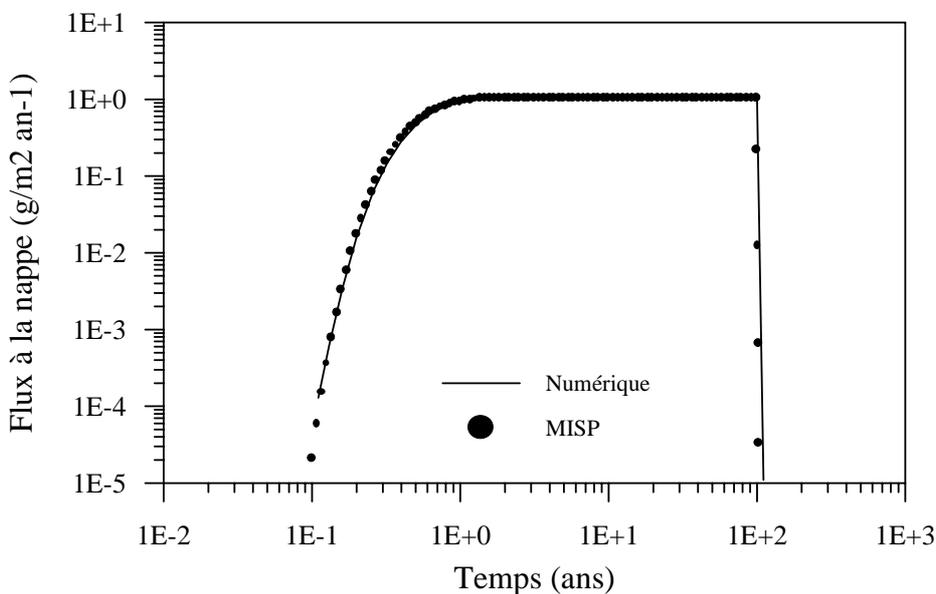


Figure 20 - Cas N° 2. Vérification du calcul des flux massiques à la surface de la nappe

La Figure 20 montre que la diminution du flux après 100 ans est rapide (la source est une fonction "chapeau"). Afin de "capturer" cette diminution de manière précise, une fois qu'elle est dépassée MISP augmente le nombre de points par cycle log temps de calcul, puis retourne dans le temps pour recalculer les flux.

Les concentrations dans l'aquifère sont calculées aux temps 100, 150, et 200 ans, et comparés aux profils en régime permanent pour une source constante. A 100 ans, la source n'a pas encore disparu, et par conséquent le profil ne montre pas encore de diminution de la concentration proche de la source. A 150 et 200 ans par contre, cette diminution est bien apparente (en régime permanent, la concentration dans l'aquifère pour le cas d'une source de durée limitée serait nulle).

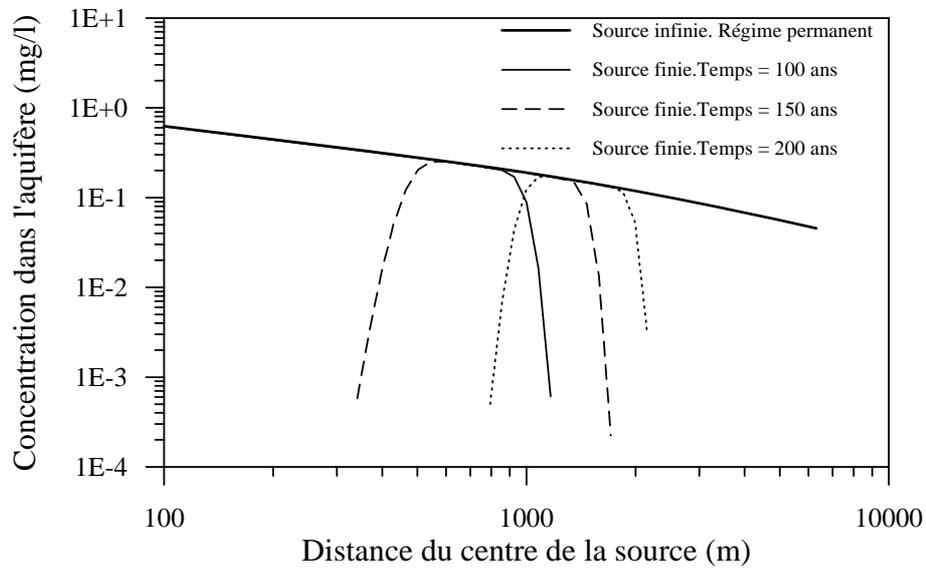


Figure 21 - Cas N° 2. Profils de concentration à plusieurs temps

La Figure 22 illustre le même cas que pour la Figure 21, mais pour un aquifère d'épaisseur limitée (10 m ; ligne 26). On peut voir qu'à proximité de la source ($x < 100$ m), les deux options donnent des résultats très comparables, car la dispersion verticale n'a pas encore pu suffisamment contribuer au mélange vertical pour que les concentrations soient influencées par la présence de la limite inférieure. A des distances importantes, par contre, les effets sont clairement visibles.

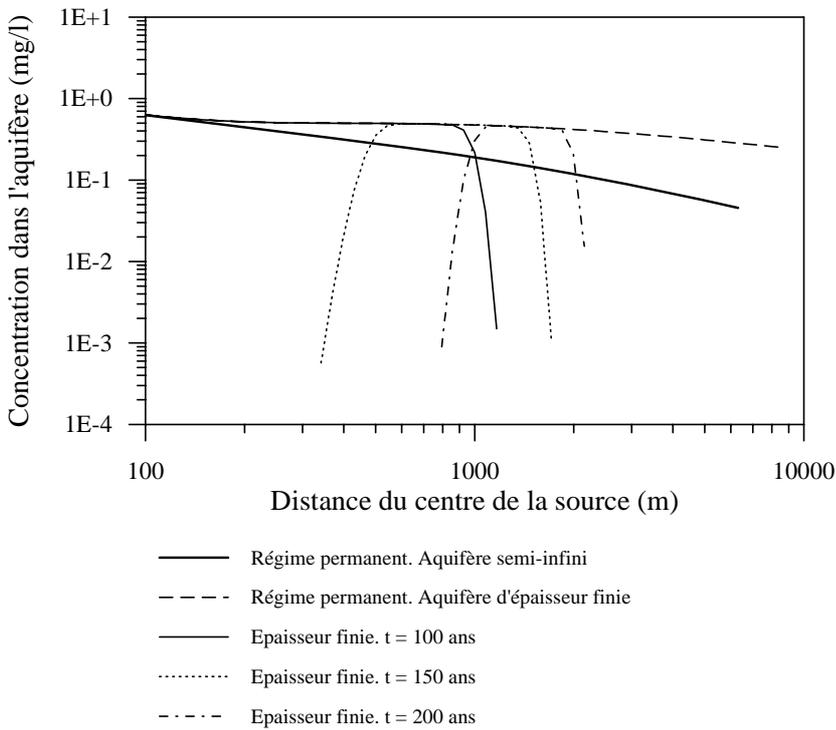


Figure 22 - Cas N° 2. Effet d'attribuer une épaisseur d'aquifère finie (10 m)

Dans la Figure 23, on a le même cas que précédemment, sauf qu'on a supposé une dégradation dans l'aquifère (ligne 31 : 0.01 an^{-1}). (On notera par rapport à la figure précédente qu'on n'a pas représenté la concentration en régime permanent pour un aquifère semi-infini, et que la courbe en trait-tiré est calculée pour une source infinie).

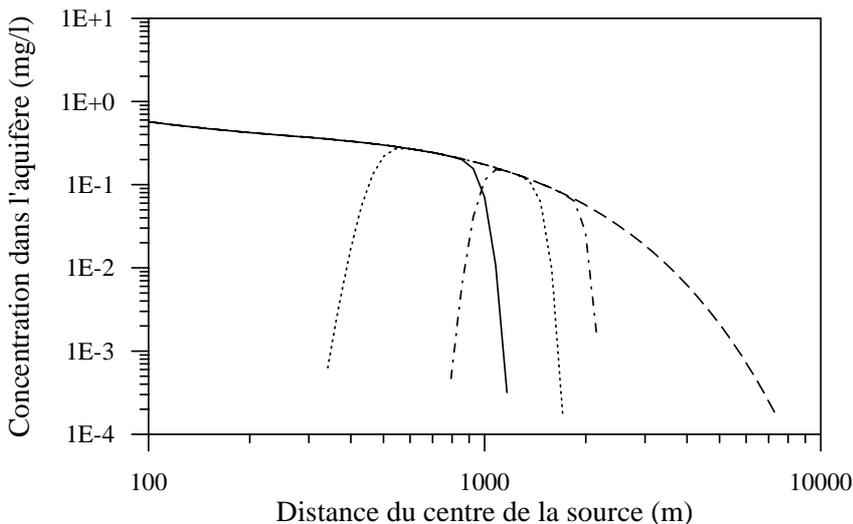


Figure 23 - Cas N° 2. Idem Figure 22 mais avec de la dégradation dans l'aquifère (voir les temps dans la figure 22)

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 *****
**** Cas : Cas No 2 *****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE *****
2          OPTION_S pour le type de terme source
12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
100.00    Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
0.00E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
0.00      Parametre CA (kg/m3 an^0.5) (OPTION_S = 4)
2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE *****
9.51E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
1.00      Epaisseur (m)
0.20     Teneur en eau ( )
0.30     Tortuosite ( )
1.00E-01 Dispersivite (m)
1.00     Coefficient de retard ( )
0.00E+00 Constante de degradation (1/an)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE *****
7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
0.25     Porosite ( )
1000.00  Epaisseur (m)
2.00E+00 Dispersivite en X (m)
2.00E-01 Dispersivite en Y (m)
2.00E-01 Dispersivite en Z (m)
0.67     Tortuosite ( )
0.00E-00 Cnte de degradation (1/an)
1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION *****
*** PARAMETRES pour la sortie des flux
0.10     Premier temps de calcul du flux (an)
4        Nombre de cycles log temps
10       Nombre de points par cycle log
*** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
1        *** OPTION_A pour le type de concentration
         (1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
         (2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
0        Nombre de subdivisions de l'intervalle
1        *** OPTION_B pour le type de restitution
         (1 : Repartition spatiale a temps fixe)
100.00   Temps (an) pour le calcul
10.00    Premier point X des profils de concentration (m)
3        Nombre de cycle log
30       Nombre de points par cycle log
         (2 : Evolution dans le temps a point fixe)
0.00     Coordonnee X (m) du point
0.00     Coordonnee Y (m) du point
0.00     Coordonnee Z (m) du point
0.00     Premier temps de calcul (an)
0        Nombre de cycles log
0        Nombre de points par cycle log
1        *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
         (1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
0.00     Valeur max de Y (m)
0.00     Increment de Y (m)
0.00     Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
         (2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
0.00     Profondeur max (m)
0.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
0.00     Valeur de Y (m)
1        *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
0.00     Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
         (rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 24 - Un fichier MISP pour le Cas N° 2

5.3. CAS N° 3

Ce cas est un test de l'Option Source N° 3. Les mêmes valeurs de paramètres sont utilisées que pour le Cas 2, mais il est supposé que la source décroît de manière exponentielle avec une constante de décroissance de 0.04 an^{-1} (ligne 10 dans la Figure 28).

La Figure 25 compare les flux à la surface de la nappe calculés par MISP et par un modèle numérique. La Figure 26 montre les profils de concentration pour ce Cas.

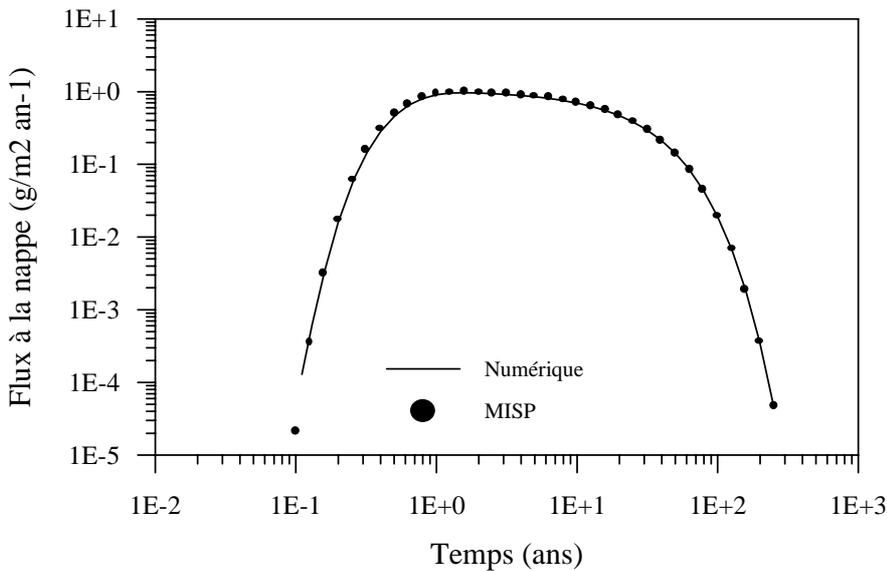


Figure 25 - Cas N° 3. Vérification du calcul des flux massiques à la surface de la nappe

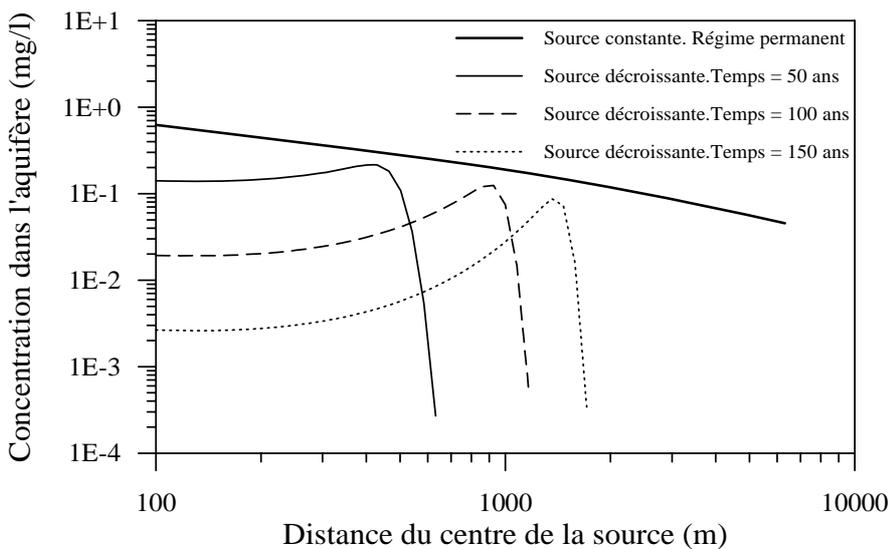


Figure 26 - Cas N° 3. Profils de concentration

Pour obtenir des courbes bien définies, il a été nécessaire d'utiliser un nombre relativement élevé de temps de calcul pour le calcul des flux (lignes 35 à 37 du fichier d'entrée). Pour la courbe à 100 ans, on a utilisé 20 points par cycle log temps, tandis que pour les courbes à 150 et 200 ans, ce nombre était respectivement de 40 et 60 points par cycle log temps. La Figure 27 montre les résultats à 200 ans si seulement 10 points par cycle log temps sont utilisés : on voit apparaître des oscillations, car la courbe des flux n'est pas suffisamment bien définie (la convolution génère des oscillations).

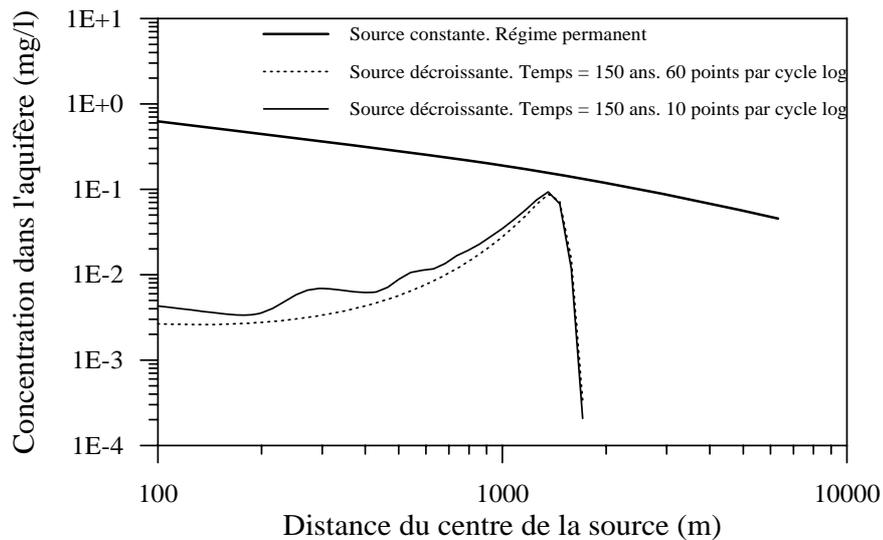


Figure 27 - Cas N° 3. Résultat d'une utilisation d'un nombre de points par cycle log trop faible pour le calcul des flux massiques

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 ****
**** Cas : Cas No 3 ****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE ****
3          OPTION_S pour le type de terme source
12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
0.00     Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
0.04E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
0.00     Parametre CA (kg/m3 an^0.5) (OPTION_S = 4)
2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE ****
9.51E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
1.00     Epaisseur (m)
0.20     Teneur en eau ( )
0.30     Tortuosite ( )
1.00E-01  Dispersivite (m)
1.00     Coefficient de retard ( )
0.00E+00  Constante de degradation (1/an)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE ****
7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
0.25     Porosite ( )
1000.00  Epaisseur (m)
2.00E+00  Dispersivite en X (m)
2.00E-01  Dispersivite en Y (m)
2.00E-01  Dispersivite en Z (m)
0.67     Tortuosite ( )
0.00E-00  Cnte de degradation (1/an)
1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION ****
*** PARAMETRES pour la sortie des flux
0.10     Premier temps de calcul du flux (an)
4        Nombre de cycles log temps
20       Nombre de points par cycle log
*** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
1        *** OPTION_A pour le type de concentration
(1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
(2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
0        Nombre de subdivisions de l'intervalle
1        *** OPTION_B pour le type de restitution
(1 : Repartition spatiale a temps fixe)
100.00   Temps (an) pour le calcul
10.00    Premier point X des profils de concentration (m)
3        Nombre de cycle log
30       Nombre de points par cycle log
(2 : Evolution dans le temps a point fixe
0.00     Coordonnee X (m) du point
0.00     Coordonnee Y (m) du point
0.00     Coordonnee Z (m) du point
0.00     Premier temps de calcul (an)
0        Nombre de cycles log
0        Nombre de points par cycle log
1        *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
(1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
0.00     Valeur max de Y (m)
0.00     Increment de Y (m)
0.00     Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
(2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
0.00     Profondeur max (m)
0.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
0.00     Valeur de Y (m)
1        *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
0.00     Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
(rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 28 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 3

5.4. CAS N° 4

Ce cas est un test de l'Option Source N° 4 : émission diffusive de polluants par une couche de déchet stabilisé. Les valeurs des paramètres sont les suivantes (cf. figure 31) :

Masse volumique sèche du déchet : 2000 kg/m^3 ,

Proportion pondérale de polluants dans le déchet : 5%,

Coefficient de diffusion des polluants à partir de la matrice de déchet ($D^* = 1 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s} = 3.15 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{an}$),

Infiltration venant en contact avec le déchet : $300 \text{ l/m}^2 \text{ an}^{-1} = 0.3 \text{ m/an}$.

Sur la base de l'équation (24), le paramètre CA (ligne 12 du fichier d'entrée) est : $2.11 \text{ kg/m}^3 \text{ an}^{0.5}$ pour ce cas.

Le déchet est séparé de l'aquifère par une couche de matériau argileux de 5 d'épaisseur, et le flux de Darcy vertical à travers cette couche est supposé égal à 10^{-9} m/s . On suppose que la différence entre ce flux et celui qui vient en contact avec le déchet est collecté par un système de collecte de lixiviats. Les paramètres de l'aquifère sont les mêmes que ceux des cas précédents. On notera dans la Figure 31 (le fichier d'entrée) que le premier temps de calcul du flux est pris égal à 10 ans (au lieu de 0.1 ans comme précédemment). Avec 0.1 ans comme premier temps de calcul, MISP donnerait un message d'erreur (*floating-point error : overflow*). Compte tenu de la présence d'une épaisse couche d'argile, cela prend beaucoup plus longtemps pour que les polluants atteignent l'aquifère. Avec 0.1 ans comme temps de début de calcul, MISP tente de calculer des valeurs infinitésimales et échoue.

La Figure 29 présente les flux massiques à la surface de la nappe sous la zone source, tandis que la Figure 30 montre les profils de concentration le long de l'axe du panache et à la surface de la nappe ($z = 0 \text{ m}$).

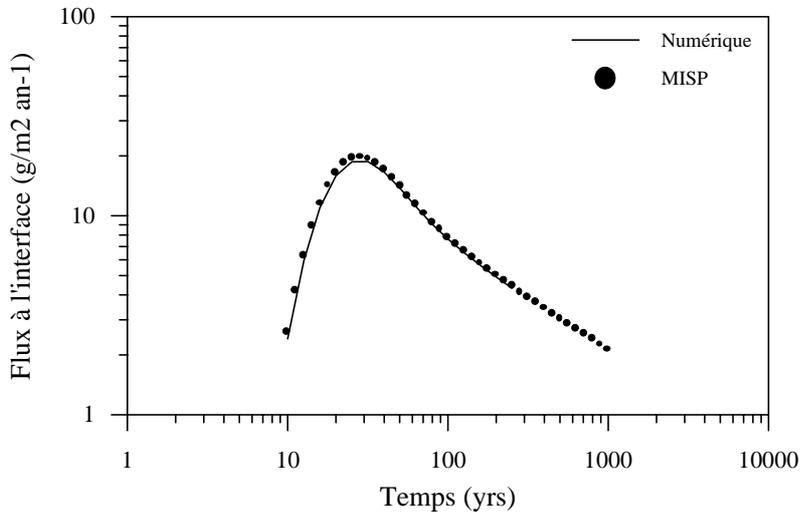


Figure 29 - Cas N° 4. Vérification du calcul des flux massiques

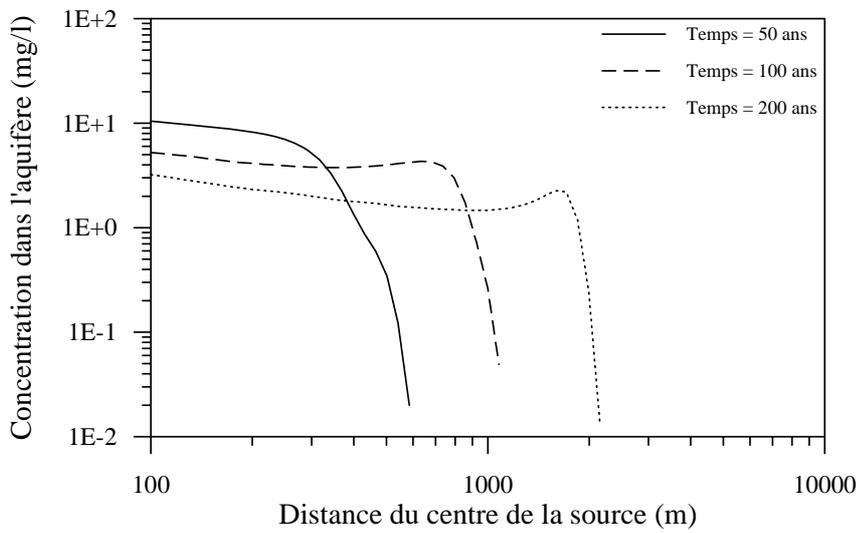


Figure 30 - Cas N° 4. Profils de concentration à $y = z = 0$ m

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 ****
**** Cas : Cas No 4 ****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE ****
4          OPTION_S pour le type de terme source
12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
0.00     Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
0.00E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
2.11     Parametre CA (kg/m3 an .5) (OPTION_S = 4)
2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE ****
1.00E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
5.00     Epaisseur (m)
0.20     Teneur en eau ( )
0.30     Tortuosite ( )
5.00E-01  Dispersivite (m)
1.00     Coefficient de retard ( )
0.00E+00  Constante de degradation (1/an)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE ****
7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
0.25     Porosite ( )
1000.00  Epaisseur (m)
2.00E+00  Dispersivite en X (m)
2.00E-01  Dispersivite en Y (m)
2.00E-01  Dispersivite en Z (m)
0.67     Tortuosite ( )
0.00E-00  Cnte de degradation (1/an)
1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION ****
*** PARAMETRES pour la sortie des flux
10.00    Premier temps de calcul du flux (an)
4        Nombre de cycles log temps
30       Nombre de points par cycle log
*** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
1        *** OPTION_A pour le type de concentration
         (1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
         (2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
0.00    Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
0.00    Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
0        Nombre de subdivisions de l'intervalle
1        *** OPTION_B pour le type de restitution
         (1 : Repartition spatiale a temps fixe)
100.00  Temps (an) pour le calcul
10.00   Premier point X des profils de concentration (m)
3        Nombre de cycle log
30       Nombre de points par cycle log
         (2 : Evolution dans le temps a point fixe)
0.00    Coordonnee X (m) du point
0.00    Coordonnee Y (m) du point
0.00    Coordonnee Z (m) du point
0.00    Premier temps de calcul (an)
0        Nombre de cycles log
0        Nombre de points par cycle log
1        *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
         (1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
0.00    Valeur max de Y (m)
0.00    Increment de Y (m)
0.00    Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
         (2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
0.00    Profondeur max (m)
0.00    Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
0.00    Valeur de Y (m)
1        *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
0.00    Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00    Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00    Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
         (rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 31 - Fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 4

5.5. CAS N° 5

Ce cas est un test de l'Option Source N° 5 (source de concentration arbitraire). La concentration source est fournie dans un fichier distinct semblable à celui de la Figure 12. A noter que les valeurs sont lues par MISP en format libre. Il est simplement requis que :

- les colonnes de valeurs soient précédées d'une ligne de commentaire – cf. figure 35 (comme dans la Figure 12),
- la première colonne soit la colonne des temps (en années),
- la seconde colonne soit celle des concentrations (en mg/l),
- le nombre de lignes de valeurs ne dépasse pas 600.

Les temps et les concentrations peuvent être indiqués en format réel ou exponentiel.

La concentration source utilisée pour le Cas 5 est représentée dans la Figure 32. La vérification des flux massiques est présentée dans la Figure 33, tandis que la Figure 34 montre les profils de concentrations.

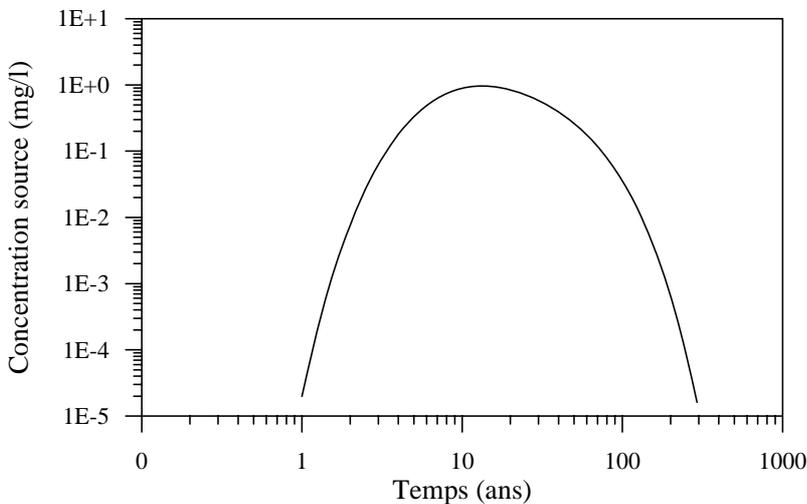


Figure 32 - Cas N° 5. Concentration source

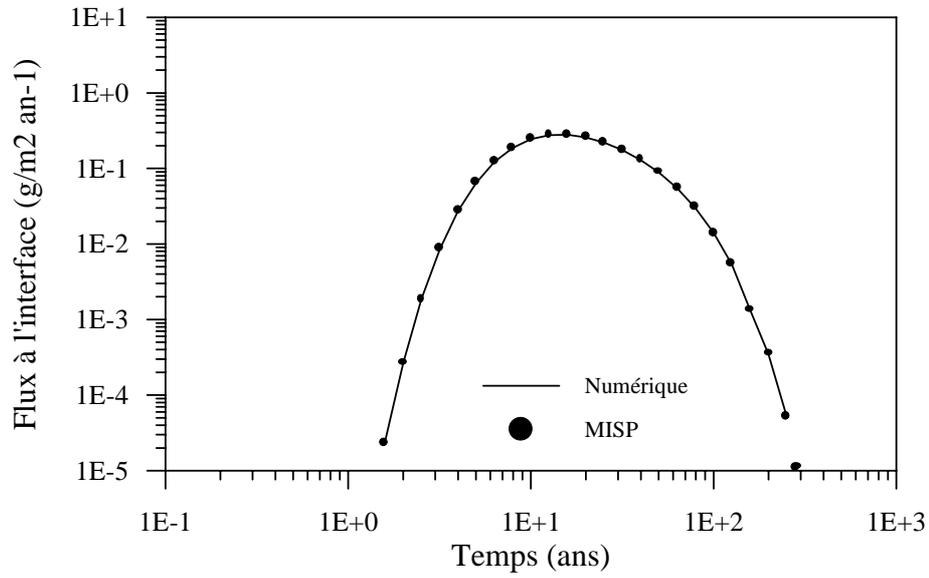


Figure 33 - Cas N° 5. Vérification du calcul des flux massiques

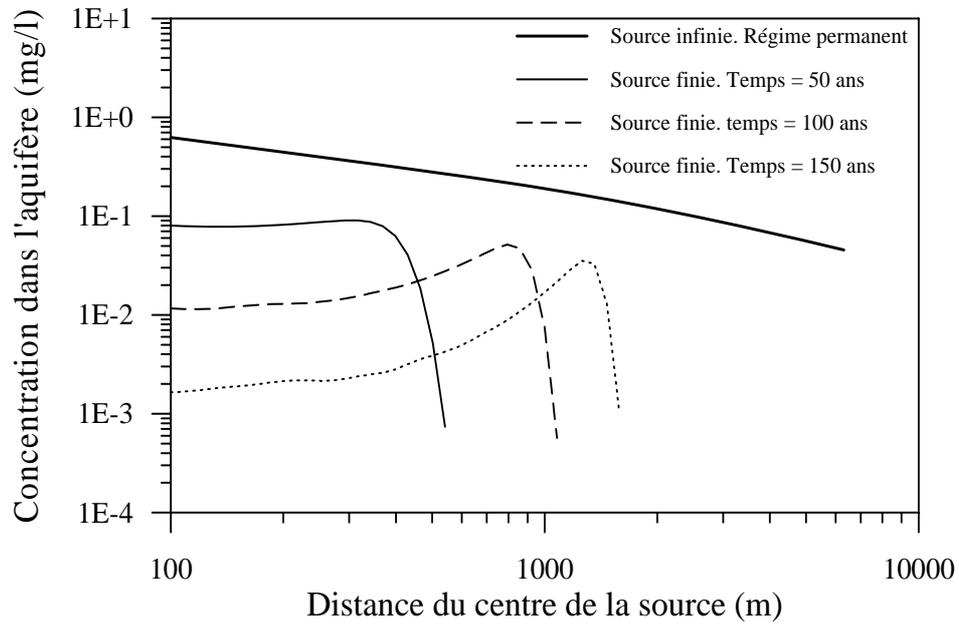


Figure 34 - Cas N° 5. Profils de concentrations dans l'aquifère

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 *****
**** Cas : Cas No 5 *****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE *****
5          OPTION_S pour le type de terme source
12.00     Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
80.00     Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
3.47E+00  Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
0.00     Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
0.00E-00  Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
0.00     Parametre CA (kg/m3 an .5) (OPTION_S = 4)
2.00E-09  Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE *****
9.51E-09  Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
1.00     Epaisseur (m)
0.20     Teneur en eau ( )
0.30     Tortuosite ( )
1.00E-01  Dispersivite (m)
1.00     Coefficient de retard ( )
0.00E+00  Constante de degradation (1/an)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE *****
7.93E-08  Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
7.93E-08  Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
0.25     Porosite ( )
1000.00  Epaisseur (m)
2.00E+00  Dispersivite en X (m)
2.00E-01  Dispersivite en Y (m)
2.00E-01  Dispersivite en Z (m)
0.67     Tortuosite ( )
0.00E-00  Cnte de degradation (1/an)
1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION *****
*** PARAMETRES pour la sortie des flux
0.10     Premier temps de calcul du flux (an)
4        Nombre de cycles log temps
20       Nombre de points par cycle log
*** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
1        *** OPTION_A pour le type de concentration
(1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
(2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
0        Nombre de subdivisions de l'intervalle
1        *** OPTION_B pour le type de restitution
(1 : Repartition spatiale a temps fixe)
100.00   Temps (an) pour le calcul
10.00    Premier point X des profils de concentration (m)
3        Nombre de cycle log
30       Nombre de points par cycle log
(2 : Evolution dans le temps a point fixe)
0.00     Coordonnee X (m) du point
0.00     Coordonnee Y (m) du point
0.00     Coordonnee Z (m) du point
0.00     Premier temps de calcul (an)
0        Nombre de cycles log
0        Nombre de points par cycle log
1        *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
(1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
0.00     Valeur max de Y (m)
0.00     Increment de Y (m)
0.00     Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
(2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
0.00     Profondeur max (m)
0.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
0.00     Valeur de Y (m)
1        *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
0.00     Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
0.00     Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
(rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 35 - Un fichier d'entrée MISP pour le Cas N° 5

5.6. CAS N° 6

Ce cas fournit une illustration de l'erreur que l'on commet en supposant l'existence d'une "couche de mélange" pour calculer les concentrations dans l'aquifère. Le modèle qui fait appel à cette hypothèse (appelé ci-après "modèle 2"), est semblable au modèle MISP, sauf que l'équation (5) est utilisée pour estimer une concentration dans une couche de mélange sous la zone source (au lieu de calculer des flux avec l'équation 6) et ce calcul définit la condition limite pour la migration vers l'aval de la zone source. Cette migration est évaluée à l'aide de la solution de Sagar (1982). Cette solution est une solution "exacte" pour le problème d'une migration tridimensionnelle à partir d'une source plane verticale dans l'aquifère à concentration constante. Elle est supérieure à la solution proposée par Domenico & Robbins (1985), qui est une solution approchée (voir Guyonnet et Neville, 2004).

Le fichier d'entrée de MISP est présenté dans la Figure 37. Une concentration unitaire est fixée au sommet d'une couche de matériau argileux d'un mètre d'épaisseur, qui surplombe l'aquifère. La vitesse d'infiltration verticale est 10^{-9} m/s. Pour le modèle 2, l'épaisseur de la couche de mélange a été fixée à 10 m. Afin de fournir une comparaison significative avec MISP, l'option de MISP qui permet d'estimer des concentrations moyennes a été utilisée. Un intervalle de profondeur de 0 à -10 m a été défini, avec 5 subdivisions (Figure 37).

Les concentrations relatives en fonction de la distance de la source sont présentées dans la Figure 36. On constate que les résultats du modèle 2 sont systématiquement en dessous des résultats de MISP. Ceci s'explique par le fait que l'hypothèse d'un mélange parfait sous la zone source conduit à une sous-estimation de la concentration (on surestime la dilution). Cette concentration devient la condition limite pour la migration vers l'aval dans l'aquifère.

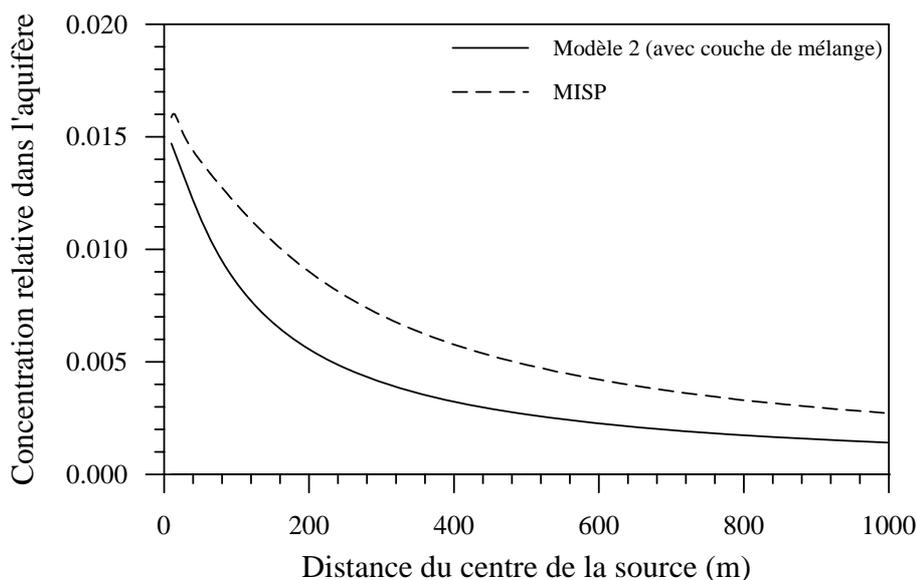


Figure 36 - Cas N° 6. Concentrations dans l'aquifère (axe du panache)

```

*****
**** MISP_v1, Dominique Guyonnet, BRGM, Juin 2001 *****
**** Cas : Cas No 6 *****
*****
**** PARAMETRES DE LA SOURCE *****
      2      OPTION_S pour le type de terme source
      12.00   Longueur de la source dans la direction d'ecoulement des eaux (m)
      80.00   Largeur de la source dans la direction perpendiculaire (m)
      1.00E+00 Concentration source (mg/l) pour OPTION_S = 1, 2 ou 3
      1000.00 Duree de la concentration constante (an) (OPTION_S = 2)
      0.00E-00 Constante de degradation de la source (1/an) (OPTION_S = 3)
      0.00     Parametre CA (kg/m3 an .5) (OPTION_S = 4)
      2.00E-09 Coefficient de diffusion du solute dans l'eau pure (m2/s)
**** PARAMETRES DE LA COUCHE *****
      1.00E-09 Vitesse d'infiltration (Darcy) verticale (m/s)
      1.00     Epaisseur (m)
      0.20     Teneur en eau ( )
      0.30     Tortuosite ( )
      1.00E-01 Dispersivite (m)
      1.00     Coefficient de retard ( )
      0.00E+00 Constante de degradation (1/an)
**** PARAMETRES DE L'AQUIFERE *****
      7.93E-08 Flux de Darcy en limite amont de la zone source (m/s)
      7.93E-08 Flux de Darcy en limite aval de la zone source (m/s)
      0.25     Porosite ( )
      1000.00 Epaisseur (m)
      1.00E+01 Dispersivite en X (m)
      2.00E-00 Dispersivite en Y (m)
      2.00E-01 Dispersivite en Z (m)
      0.67     Tortuosite ( )
      0.00E-00 Cnte de degradation (1/an)
      1.00     Facteur Retard ( )
**** PARAMETRES DE RESTITUTION *****
      *** PARAMETRES pour la sortie des flux
      0.10     Premier temps de calcul du flux (an)
      4       Nombre de cycles log temps
      20     Nombre de points par cycle log
      *** PARAMETRES pour les concentrations dans la nappe
      2       *** OPTION_A pour le type de concentration
              (1 : Concentrations a profondeur(s) ponctuelle(s))
              (2 : Concentrations moyennes sur un intervalle de profondeur)
      0.00     Prof. par rapport a la nappe de la limite sup de l'intervalle (m)
      -10.00   Prof. par rapport a la nappe de la limite inf de l'intervalle (m)
      5       Nombre de subdivisions de l'intervalle
      1       *** OPTION_B pour le type de restitution
              (1 : Repartition spatiale a temps fixe)
      1000.00 Temps (an) pour le calcul
      10.00   Premier point X des profils de concentration (m)
      3       Nombre de cycle log
      30     Nombre de points par cycle log
              (2 : Evolution dans le temps a point fixe)
      0.00     Coordonnee X (m) du point
      0.00     Coordonnee Y (m) du point
      0.00     Coordonnee Z (m) du point
      0.00     Premier temps de calcul (an)
      0       Nombre de cycles log
      0       Nombre de points par cycle log
      1       *** OPTION_C pour la representation spatiale (si OPTION_B = 1)
              (1 : repartition spatiale en plan: profils en X a differents Y)
      0.00     Valeur max de Y (m)
      0.00     Increment de Y (m)
      0.00     Valeur de Z (m) si OPTION_A = 1
              (2 : repartition spatiale en coupe: profils en X a differents Z)
      0.00     Profondeur max (m)
      0.00     Increment de profondeur (m) (zero si profondeur unique)
      0.00     Valeur de Y (m)
      1       *** OPTION_D pour un changement de repere (1: NON, 2: OUI)
      0.00     Coordonnee X0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
      0.00     Coordonnee Y0 de l'origine du repere 1 dans le repere 2
      0.00     Angle (degres) entre les axes des X des reperes 2 et 1
              (rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre)
*****

```

Figure 37 - Fichier MISP pour le Cas N° 6

6. Conclusions

Ce rapport a décrit un modèle analytique qui présente quelques avantages conceptuels par rapport aux outils existants. Il convient de rappeler, toutefois, que le modèle MISP comporte également d'importantes limites. Comme il a été dit dans le chapitre 1, MISP suppose que le milieu géologique de la couche et de l'aquifère, sont parfaitement homogènes. Une autre hypothèse importante est que le champ d'écoulement dans l'aquifère est uniforme. Par conséquent, MISP ne s'applique pas par exemple au cas où des puits de pompage génèrent des variations significatives du champ d'écoulement.

Cette dernière hypothèse a une autre conséquence importante : MISP ne peut pas prendre en compte l'effet de la recharge en aval hydraulique de la zone source. Dans le cas d'aquifères de relativement faible transmissivité, la recharge (la pluie efficace) peut réduire les concentrations en polluants de manière significative. A notre connaissance, le seul moyen de traiter ce problème de manière adéquate, consiste à utiliser un modèle numérique pour calculer d'abord le champ d'écoulement, et ensuite le transport. A noter que Kool et al. (1994) ont utilisé une approche semi-analytique (la technique de la transformation de Laplace Galerkin ; LTG) pour calculer le champ d'écoulement, puis ont superposé le transport sur ce champ. Mais cette technique complexe requiert une discrétisation spatiale du domaine simulé.

En ce qui concerne les développements futurs, les principaux développements envisagés à moyen terme sont :

- de fournir la possibilité de simuler plusieurs zones source,
- de permettre une concentration initiale dans l'aquifère non nulle,
- de fournir une solution approchée, mais sécuritaire, pour prendre en compte les effets de la recharge en aval hydraulique de la zone source.

Pour finir, quelques erreurs typiques pouvant apparaître lors de l'utilisation de MISP sont résumées ci-dessous :

Problème : Quand je lance MISP, un message d'erreur s'affiche : *floating point error : overflow*.

Solution (probable) : Un temps trop faible a été spécifié à la ligne 35 ou à la ligne 55. Augmenter ce temps.

Problème : Les concentrations calculées par MISP montrent des fluctuations erratiques à des valeurs de x faibles.

Solution (probable) : L'utilisateur calcule des concentrations sous la zone source ($x < L/2$), au toit de la nappe (la concentration y est théoriquement infinie). Augmenter le x de départ (ligne 48) ou augmenter z (calcul à une certaine profondeur sous le toit de la nappe).

Problème : Les profils de concentrations calculées par MISP montrent des fluctuations pour toute valeur de x .

Solution (probable) : Un nombre trop faible de temps par cycle log a été sélectionné pour le calcul du flux à l'interface couche-aquifère (ligne 37). Augmenter ce nombre.

Problème : Lorsque je change la constante de décroissance de la source (ligne 11) cela ne change rien au résultat.

Solution (probable) : Pour que MISP prenne cette constante en compte, il faut que la bonne option de source (ligne 1) ait été sélectionnée (en l'occurrence `OPTION_S = 3`).

Problème : J'ai lancé le Cas 1 en augmentant la valeur de la vitesse d'infiltration (ligne 15). A partir d'une certaine valeur, la concentration calculée dans l'aquifère devient supérieure à la concentration source C_0 . Comment traiter cette difficulté ?

Solution : Cette question nécessite une réponse un peu plus longue.

Tout d'abord il est rappelé que dans MISP, la concentration source (C_0) n'est pas imposée ; c'est le flux massique qui est imposé. Si on veut un flux massique de disons 1000 g/an sur une surface de 1 m², on peut l'obtenir en spécifiant par exemple un C_0 de 1 g/m³ et une infiltration de 1000 m³/m²/an, ou alors un C_0 de 10 g/m³ et une infiltration de 100 m³/m²/an. Pour MISP, ces deux cas sont équivalents pour ce qui concerne le flux massique à la surface de la nappe.

Ensuite, MISP est une solution analytique qui suppose que la vitesse dans la nappe est uniforme : MISP ne tient pas compte des variations du champ de vitesse aux abords de la source causés par le flux d'eau provenant de la zone source. Il n'y a qu'un modèle numérique qui puisse vraiment le faire. Ou alors on fait l'hypothèse du mélange parfait entre les flux d'eau (source et aquifère) mais, comme il est montré dans ce manuel, on prend le risque d'introduire une dilution exagérée.

Donc avec MISP, si on fait entrer un flux trop important dans un volume trop petit (aquifère de débit faible et d'épaisseur faible) on obtient des concentrations trop élevées parce que MISP ne tient pas compte du fait que ce gros débit entrant va " se faire sa place " dans l'écoulement de l'aquifère. La solution idéale serait d'établir, à l'aide d'un modèle numérique, à partir de quelle distance de la source on n'observe plus d'influence hydraulique de la source, et de ne " faire confiance " aux résultats MISP qu'à partir de cette distance. Dans la pratique, il faut éviter de calculer notamment à la surface de la nappe à juste quelques mètres de la source. D'habitude, si le rapport entre le flux de Darcy dans l'aquifère et l'infiltration verticale provenant de la zone source est au moins d'un facteur 10, il ne devrait pas y avoir trop de problème. Mais cela dépend aussi des dimensions de la source...

Pour terminer, il est rappelé qu'un outil analytique n'est qu'une représentation idéalisée de la réalité ; il fait forcément appel à des hypothèses simplificatrices. Le tout est de savoir si ces simplifications sont acceptables pour le problème qui nous intéresse...

7. Remerciements

Je tiens à remercier Donald Galya, de ENSR Westford (USA), pour avoir aimablement répondu à mes courriers concernant sa solution analytique.

Merci aussi à Chris Neville, de SS Papadopoulos & Associates Inc. (Waterloo, Ontario Canada), pour de nombreuses discussions techniques, et pour avoir clarifié certains aspects relatifs au développement de la solution de Galya.

Les résultats MARTHE de la Figure 9 ont été aimablement fournis par Jean-Jacques Seguin (BRGM).

MISP n'aurait probablement pas été développé sans le cours sur les solutions analytiques ESC656 d'Ed Sudicky à l'Université de Waterloo (Ontario, Canada).

Ce travail a été financé par le Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement dans le cadre des opérations de Service Public du BRGM.

Annexe 1

Références citées

- Bear, J. (1972) - Dynamics of Fluids in Porous Media. *American Elsevier Publishing Co.*, New-York.
- Churchill, R. (1958) - Operational Mathematics. *McGraw-Hill (Eds)*.
- Cleary, R.W., Unga, M.J. (1978) - Analytical models for groundwater pollution and hydrology. *Princeton University, Water Resources Program Report 78-WR-15*, 165 pp.
- Connor, J., Nevin, J., Malander, M., Stanley, C. et DeVauil., G. (1995) - RBCA (Risk Based Corrective Action). Tier 2 Guidance manual. *Groundwater Services, Inc.* Houston, Texas, U.S.A.
- Crank, J. (1970) - The mathematics of diffusion (5^{ème} édition). *Clarendon Press (Eds)*, Oxford, G.B.
- Domenico, P., Robbins, G. (1985) - A new method of contaminant plume analysis. *Ground Water*, v.23, no.4, pp.476-485.
- Galya, D (1987) – A horizontal plane source model for groundwater transport. *Ground Water*, v.25, no.6, pp.733-739.
- Guyonnet, D., Neville, (2004) – Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. *Journal of Contaminant Hydrology*, 75, pp. 141-153.
- Guyonnet, D., Perrochet, P., Côme, B., Seguin, J.-J., Parriaux, A. (2001) – On the hydro-dispersive equivalence between multi-layered mineral barriers. *Journal of Contaminant Hydrology*, 51/3-4, pp. 215-231.
- Guyonnet, D., Seguin, J.-J., Côme, B. and Perrochet, P. (1998) - Type curves for estimating the potential impact of stabilized-waste disposal sites on groundwater. *Waste Management & Research*, 16(5), 467-475.
- Jury, W., Spencer, W., Farmer, W (1983) – Behaviour assessment model for trace organics in soil : I. Model description. *J. Environ. Qual.*, v.12, no.4, pp.558-564.
- Kool, J., Huyakorn, P., Sudicky, E., Saleem, Z. (1994) – A composite modeling approach for subsurface transport of degrading contaminants from land-disposal sites. *Journal of Contaminant Hydrology*, v.17, pp.69-90.
- Labieniec, P., Dzombak, D., Siegrist, R. (1996) - SoilRisk : a risk assessment model for organic contaminants in soil. *Journal of Environmental Engineering*, v.122, no.5, pp.388-398.
- Newell, C., McLeod, Gonzales, J. (1996) – BIOSCREEN. Natural Attenuation Decision Support System. User 's manual. *National Risk Management Research Laboratory Office*. US Environmental Protection Agency. EPA/600/R-96/087.
- Rowe, R.K., Booker, J.R. (1994) - POLLUTE-v6. A program for modelling pollutant migration through soil. *Numerical methods for transient and coupled systems, Ch.2*, pp.13-42. John Wiley & Sons Ltd., New York.

- Rowe, R.K., Booker, J.R. (1985) - 1-D pollutant migration in soil of finite depth. *Journal of Geotechnical Engineering*, 111, no.4, 479-499.
- Sagar, B. (1982) - Dispersion in three dimensions : approximate analytical solutions. ASCE, *Journal of Hydraulics Division*, 108, no. HY1., 47-62.
- Sauty, J.-P. (1977) – Contribution à l'indentification des paramètres de dispersion dans les aquifères par interprétation des expériences de traçage. *Contribution to the identification of dispersion parameters in aquifers through the interpretation of tracer experiments*. Thèse de l'université scientifique et médicale et institut polytechnique de Grenoble, 157 pp.
- Talbot, A. (1979) - The accurate numerical integration of Laplace Transforms. *Journal Inst. Maths. Applics.*, 23, 97-120.
- Thiéry, D. (1993) - Modélisation des aquifères complexes. Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. *Modelling of complex aquifers with unsaturated zone and salinity. Calculation of confidence limits*. *Hydrogéologie*, no.4, 325-336.
- Van Genuchten, T. (1982). Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. *United States Department of Agriculture. Technical Bulletin no.1661*.
- Veerkamp, W., Berge, W. (1995) - *The concepts of HESP. Reference Manual. Human Exposure to Soil Pollutants*. Version 2.10b. SHELL Internationale Petroleum Maatschappij B.V., The Hague.
- Wexler, E. (1992) - Analytical solutions for one-, two, and three-dimensional solute transport in groundwater systems with uniform flow. *Techniques of Water Resources Investigations of the United States Geological Survey*, Chapter B-7, Book 3, Applications of Hydraulics.



Centre scientifique et technique
Service Environnement et Procédés
3, avenue Claude-Guillemin

BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34