

Université du Québec  
INRS-Eau

**MODÉLISATION DU TRANSFERT D'EAU ET DE SOLUTÉ  
DANS LES SOLS NON SATURÉS**

Par  
Geneviève Pomerleau  
Baccalauréat en Génie Géologique

Mémoire présenté  
pour l'obtention  
du grade de Maître ès Sciences (M. Sc.)

Jury d'évaluation

Examineur externe

M. Georges Vachaud  
LTHE, Grenoble

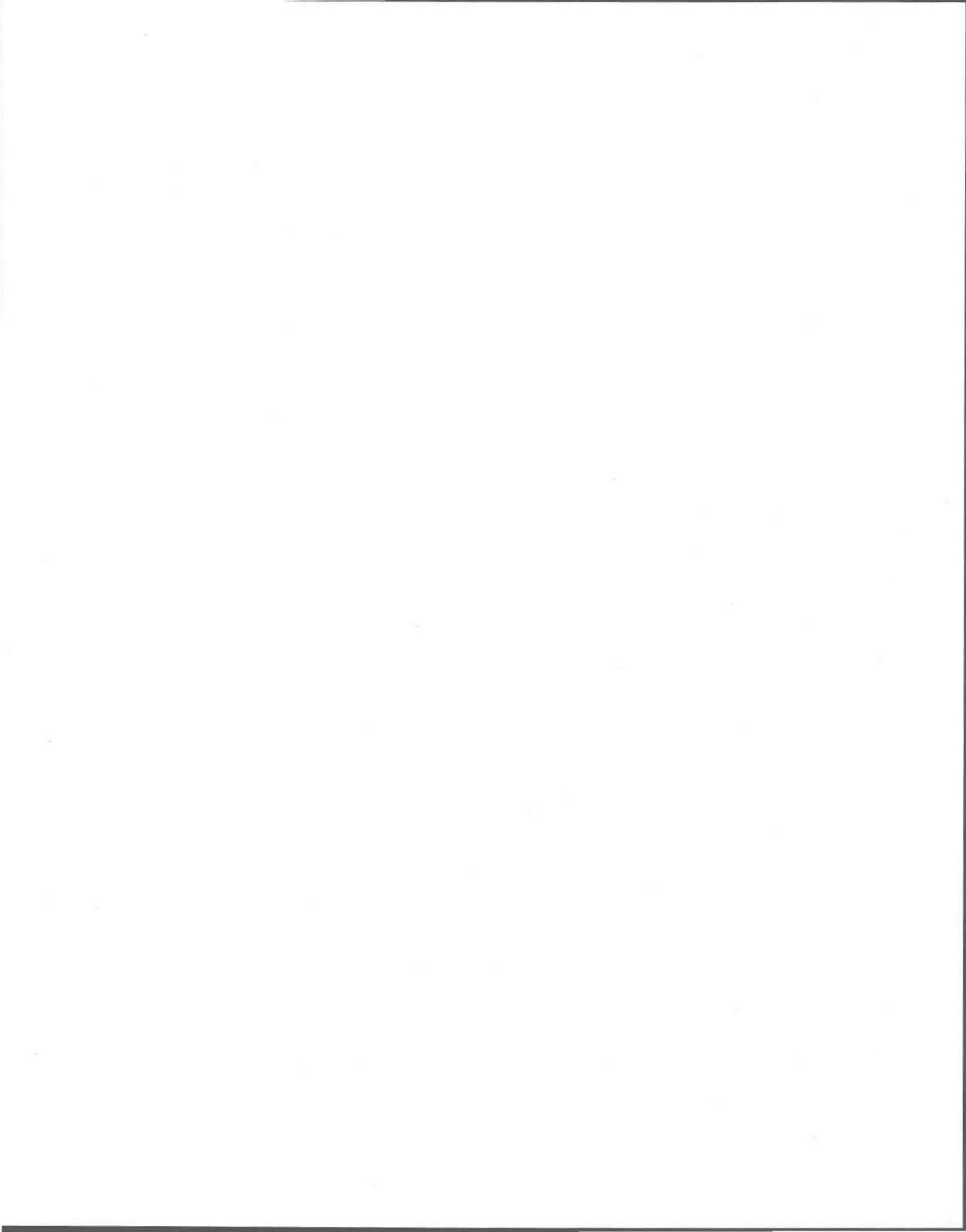
Examineur interne

M. Daniel Cluis  
INRS-Eau

Directeur de recherche

M. Olivier Banton  
INRS-Eau

Le 24 juillet 1997



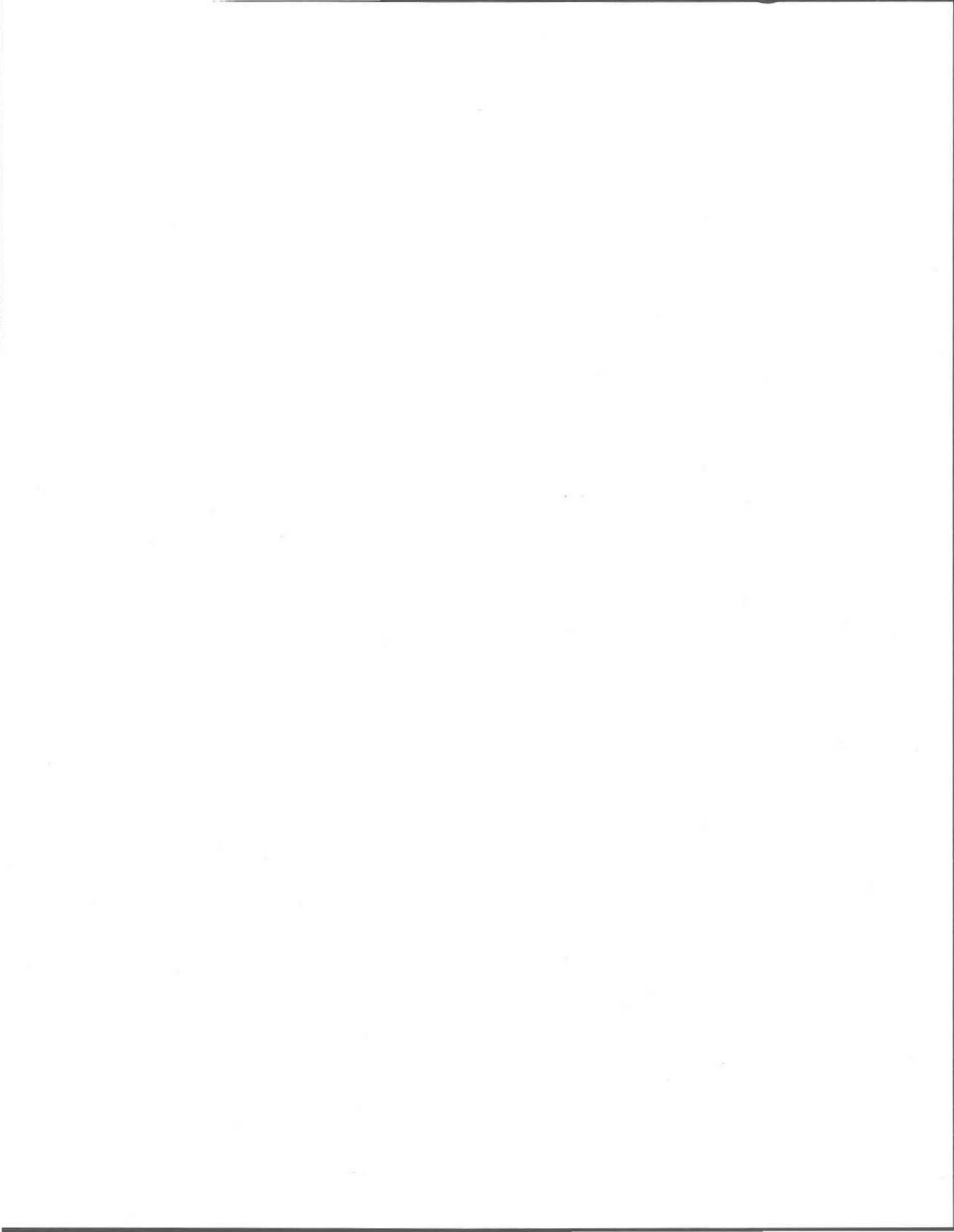
## Résumé

La contamination des sols et des eaux de surface et souterraines par les molécules organiques est fréquente. La restauration des sols contaminés pose un défi technologique considérable alors que les processus de transfert des contaminants dans les sols non saturés sont encore mal connus. La connaissance du régime d'écoulement est primordiale puisque l'hydrodynamisme d'un milieu poreux conditionne la rétention et la dégradation du contaminant.

L'approche utilisée pour étudier le transport des solutés dans la zone non saturée comprend deux volets. Le volet expérimental consiste à caractériser les conditions hydrodynamiques de milieux poreux (sable, tourbe, mélange) impliqués dans l'atténuation *in situ* de pesticides dissous. Le second volet consiste à appliquer un modèle numérique pour simuler l'écoulement et le transport des solutés dans la zone non saturée et d'en évaluer la validité et la représentativité.

Les courbes de fuite expérimentales des différents milieux poreux montrent l'influence de la teneur initiale en eau ( $\theta_i$  décroissante,  $v$  croissante) et du flux d'injection ( $q_{inj}$  croissant,  $v$  croissante) sur la vitesse de transport. L'écoulement est de type piston pour le sable et la tourbe, alors que le transport préférentiel est évident dans le mélange.

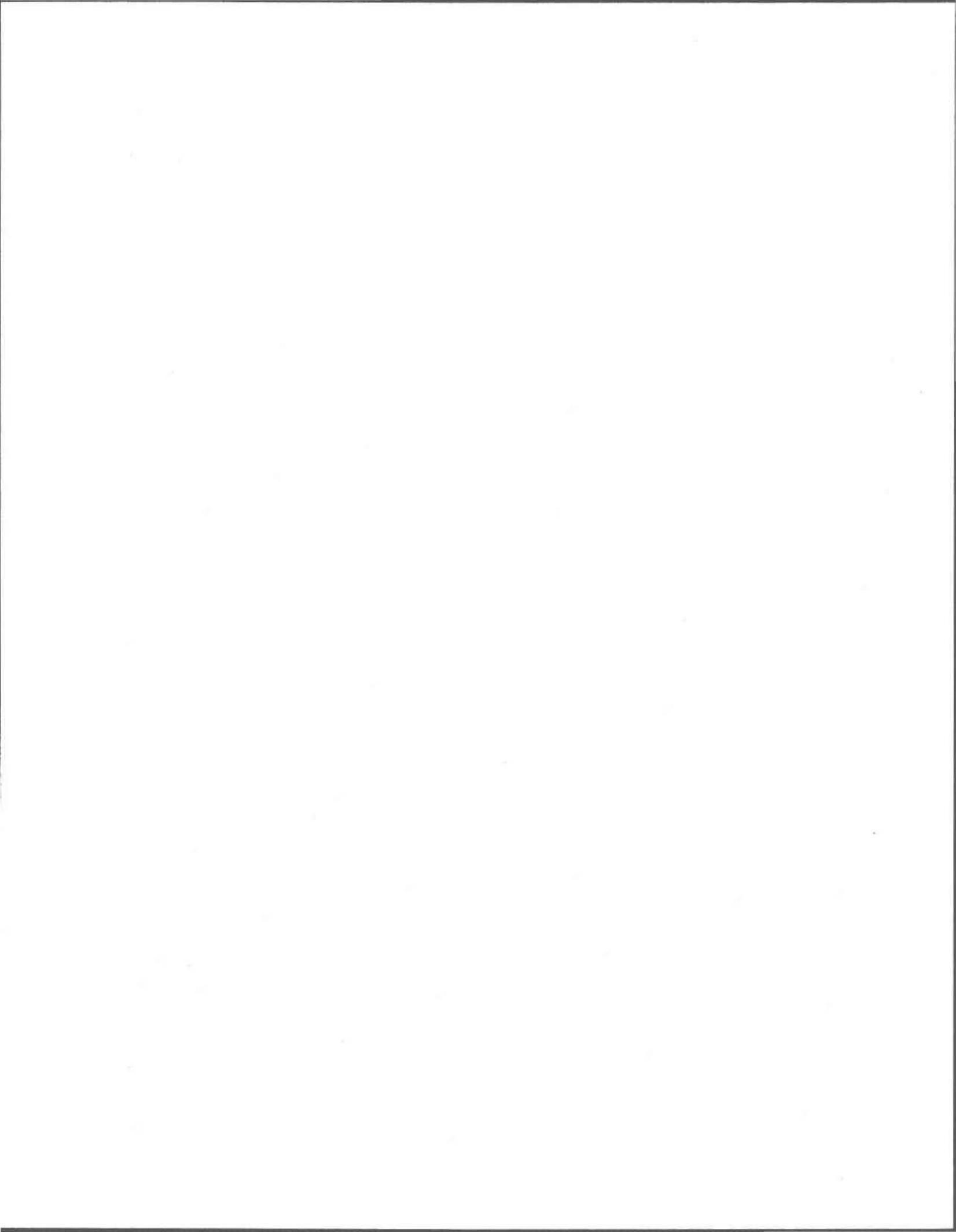
L'écart entre les courbes simulées et expérimentales varie selon les conditions expérimentales initiales. La précision du modèle dépend à la fois de la teneur initiale en eau et du flux d'injection. L'influence de ces facteurs, mise en évidence expérimentalement, sur la vitesse de transport et le type d'écoulement n'apparaît pas dans les résultats de simulation. Il semble donc que l'équation de Richards, utilisée pour représenter le flux d'écoulement en zone non saturée, n'est pas adéquate pour générer les vitesses de transport de soluté même dans un sol homogène. Son utilisation devrait être restreinte à la simulation du flux d'eau pour laquelle le suivi des particules n'est pas requis. Il y a néanmoins une cohérence dans les écarts observés qui permet ici de calculer un facteur de concordance empirique  $F(\theta, q_{inj})$  corrigeant les vitesses générées par la résolution numérique de l'équation de Richards et qui permet, dans le cas de cette étude, une bonne adéquation de la modélisation. La signification physique de ce facteur reste à rechercher.



## Remerciements

En premier lieu, je désire remercier mon directeur de recherche, M. Olivier Banton pour son attention, ses conseils judicieux et sa disponibilité. Je dois également ma reconnaissance à mes collègues de travail, avec qui les discussions scientifiques ont été très enrichissantes. Je les remercie pour l'atmosphère amicale entretenue au sein de l'équipe. Mes remerciements sincères à M. Arnold Ross, Directeur de recherche de la firme Ecosite, pour son intérêt et sa collaboration de même qu'à M. Georges Vachaud, Examineur externe et M. Daniel Cluis, Examineur interne pour leurs commentaires pertinents lors de la correction. Je remercie également les professeurs, les étudiants, les techniciens de laboratoire, le personnel administratif et le centre de documentation de l'INRS-Eau et le laboratoire des sols du MAPAQ qui ont participé directement ou indirectement à ce travail. L'aide financière du Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada a été appréciée.

J'aimerais souligner le soutien moral de mon conjoint David, mes frères et mes amis. Un gros merci pour leur présence, leur support et leurs encouragements. Enfin, je voudrais offrir toute ma gratitude à mes parents qui m'ont transmis la soif du savoir, de même que la discipline nécessaire pour atteindre mes objectifs.



# Table des matières

<b>1. INTRODUCTION .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Qualité des eaux souterraines .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Problématique .....</b>	<b>1</b>
<b>1.3 Objectifs et méthodologie.....</b>	<b>3</b>
<b>2. ASPECTS THÉORIQUES .....</b>	<b>5</b>
<b>2.1 Caractéristiques de la zone non saturée .....</b>	<b>5</b>
<b>2.2 Mécanismes de transfert en milieu poreux.....</b>	<b>7</b>
2.2.1 Processus hydrodynamiques dans la zone non saturée .....	7
2.2.1.1 Loi de Darcy .....	8
2.2.1.2 Équation de Richards.....	9
2.2.1.3 Propriétés hydrodynamiques.....	10
2.2.2 Transport de solutés dans les sols.....	15
2.2.2.1 Loi de conservation de la masse .....	17
2.2.2.2 Dispersion.....	18
2.2.2.3 Écoulements préférentiels.....	20
2.2.2.4 Teneur volumique en eau.....	21
2.2.2.5 Paramètres physico-chimiques .....	23
<b>3. MÉTHODOLOGIE.....</b>	<b>25</b>
<b>3.1 Essais en laboratoire.....</b>	<b>25</b>
3.1.1 Dispositif expérimental.....	25
3.1.2 Caractéristiques des matériaux utilisés.....	26
3.1.2.1 Mesure des paramètres physiques.....	26
3.1.2.2 Milieux poreux .....	28
3.1.2.3 Soluté .....	30
3.1.3 Procédure des essais de traçage .....	31
<b>3.2 Modélisation des mécanismes de transfert en milieu poreux .....</b>	<b>31</b>
3.2.1 Méthode numérique.....	32
3.2.1.1 Discrétisation du domaine .....	32
3.2.1.2 Caractéristiques du programme de calcul.....	33
3.2.2 Modélisation des processus hydrodynamiques.....	34
3.2.2.1 Résolution numérique.....	34
3.2.2.2 Estimation des propriétés hydrodynamiques .....	38
3.2.3 Modélisation du transport des solutés .....	41
3.2.3.1 Résolution numérique.....	41
3.2.3.2 Détermination des paramètres de transport .....	43
3.2.3.3 Comparaison avec la solution analytique .....	46

<b>4. RÉSULTATS ET DISCUSSION .....</b>	<b>47</b>
<b>4.1 Essais en laboratoire .....</b>	<b>47</b>
4.1.1 Sable .....	47
4.1.1.1 Influence de la teneur initiale en eau .....	47
4.1.1.2 Influence du flux d'injection .....	49
4.1.1.3 Type d'écoulement .....	49
4.1.2 Tourbe .....	52
4.1.2.1 Influence de la teneur initiale en eau .....	52
4.1.2.2 Influence du flux d'injection .....	53
4.1.2.3 Type d'écoulement .....	53
4.1.3 Mélange .....	56
4.1.3.1 Influence de la teneur initiale en eau .....	56
4.1.3.2 Influence du flux d'injection .....	56
4.1.3.3 Type d'écoulement .....	58
4.1.4 Discussion .....	59
<b>4.2 Modélisation des mécanismes de transfert en milieux poreux .....</b>	<b>60</b>
4.2.1 Analyse de sensibilité .....	60
4.2.1.1 Relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ .....	61
4.2.1.2 Résultats de l'analyse de sensibilité .....	61
4.2.1.3 Profil de teneur en eau .....	62
4.2.2 Validation du modèle .....	67
4.2.2.1 Courbes de fuite simulées versus expérimentales .....	67
4.2.2.2 Précision du modèle .....	68
4.2.2.3 Facteur de concordance .....	72
<b>5. CONCLUSION .....</b>	<b>75</b>

## Liste des figures

Figure 2.1 Coupe schématique du sol et d'un aquifère .....	6
Figure 2.2 a) Influence de la texture et de la structure sur la relation $h(\theta)$ b) Courbes caractéristiques de l'humidité d'un sol en sorption et désorption.....	12
Figure 2.3 Allure générale de la relation $K(\theta)$ .....	12
Figure 2.4 Courbe de réponse à l'injection d'un soluté dans une colonne.....	16
Figure 2.5 Évolution de la zone de transition avec le temps .....	17
Figure 2.6 Effet de la fraction immobile sur la courbe de fuite d'un traceur .....	22
Figure 3.1 Dispositif expérimental .....	25
Figure 3.2 Courbe granulométrique du sable.....	29
Figure 3.3 Schéma de la discrétisation unidirectionnelle.....	33
Figure 3.4 Différentes relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ retenues dans la littérature .....	40
Figure 3.5 Courbe de fuite représentée par une fonction de distribution normale .....	44
Figure 4.1 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le sable ( $q_{inj} \sim 3 \text{ cm/h}$ ).....	48
Figure 4.2 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans le sable ( $\theta_i \sim 0,27 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement.....	50
Figure 4.3 Mise en évidence d'un écoulement de type piston dans le sable a) pour différentes teneurs initiales en eau ( $q_{inj} \sim 3 \text{ cm/h}$ ) et b) sur les courbes de fuite complètes (pas de traînées).....	51
Figure 4.4 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans la tourbe ( $q_{inj} \sim 7,8 \text{ cm/h}$ ).....	52
Figure 4.5 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans la tourbe ( $\theta_i \sim 0,635 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement.....	54

Figure 4.6 Mise en évidence d'un écoulement de type piston dans la tourbe a) pour différentes teneurs initiales en eau ( $q_{inj} \sim 7,8$ cm/h) et b) sur les courbes de fuite complètes (pas de traînées).....	55
Figure 4.7 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le mélange ( $q_{inj} \sim 6,4$ cm/h) .....	56
Figure 4.8 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans le mélange ( $\theta_i \sim 0,424$ cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement.....	57
Figure 4.9 Mise en évidence d'un écoulement de type LIFO et d'une fraction d'eau immobile sur les courbes de fuite complètes (présence de traînées dans la restitution).....	58
Figure 4.10 Relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ utilisées dans l'analyse de sensibilité.....	64
Figure 4.11 Résultats de l'analyse de sensibilité a) $q_{inj} = 2,89$ cm/h et $\theta_i = 0,115$ cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> b) $q_{inj} = 3,89$ cm/h et $\theta_i = 0,304$ cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> .....	65
Figure 4.12 Variation du profil de teneur en eau en fonction des relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ $\theta_{\text{expérimental}} \sim 0,312$ cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> .....	66
Figure 4.13 Comparaison entre les courbes de fuite expérimentales et simulées à différentes valeurs de teneurs initiales en eau (simulation e).....	68
Figure 4.14 Influence de $\theta_i$ pour a) $q_{inj} \sim 3$ cm/h et b) $q_{inj} \sim 5,6$ cm/h .....	69
Figure 4.15 Influence de $q_{inj}$ pour a) $\theta_i \sim 0,15$ b) $\theta_i \sim 0,27$ et c) $\theta_i \sim 0,36$ cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> .....	70
Figure 4.16 Vitesses simulées corrigées versus vitesses mesurées .....	72
Figure 4.17 Comparaison entre les courbes de fuite expérimentales et simulées corrigées à différentes valeurs de teneurs initiales en eau (simulation e) .....	73

## Liste des tableaux

Tableau 2.1 Résumé de différentes fonctions empiriques.....	14
Tableau 3.1 Caractéristiques physiques des milieux poreux.....	28
Tableau 3.2 Résumé des différentes relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ retenues dans la littérature .....	39
Tableau 4.1 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le sable....	48
Tableau 4.2 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans la tourbe..	53
Tableau 4.3 Relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$ utilisées dans l'analyse de sensibilité.....	63
Tableau 4.4 Description des essais en colonne simulés .....	67



# 1. INTRODUCTION

---

## 1.1 Qualité des eaux souterraines

L'eau souterraine, bien que peu exploitée au Québec, constitue une réserve d'eau douce importante. À l'échelle planétaire, elle représente plus de 93% de l'eau douce disponible. Les activités humaines constituent la menace principale à la qualité de l'eau souterraine et l'industrialisation rapide du 20<sup>e</sup> siècle a engendré la dégradation de plusieurs aquifères. L'exploitation de gisements miniers, l'industrie pétrochimique, l'élevage intensif et l'application de fertilisants et de pesticides en agriculture ont entraîné la dispersion de plusieurs produits organiques dans l'environnement. La percolation de ces contaminants, au travers de la zone non saturée, vers les nappes phréatiques représente un risque environnemental majeur. Le danger le plus significatif pour la qualité de l'eau souterraine est que le temps de résidence de l'eau dans les nappes est très long, soit plusieurs centaines de milliers de fois supérieur à celui des rivières et plusieurs milliers de fois plus important que celui des lacs et des marais [Freeze and Cherry 1979].

## 1.2 Problématique

La protection des aquifères de surface, généralement de sable et gravier, fréquemment utilisés au Québec ainsi que la restauration des sols et des nappes contaminées posent des défis technologiques considérables alors que les processus de transfert des contaminants dans les sols non saturés sont encore mal connus.

Le suivi des contaminants dans la zone non saturée nécessite des connaissances sur le transfert de soluté dans les milieux poreux et sur les propriétés hydrodynamiques, physico-chimiques et biologiques du milieu. L'étude des cinétiques de rétention et de dégradation des molécules organiques nécessite d'abord une bonne connaissance des conditions hydrodynamiques du milieu poreux. L'écoulement de l'eau en milieu non saturé est généralement exprimé par l'équation de Richards:

$$C_c \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(h) \left( \frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (1.1)$$

où  $h$  est la pression effective de l'eau correspondant à une teneur en eau donnée;

$K$  est la conductivité hydraulique qui est fonction de la pression,  $h$ ;

$C_c$  est la capacité capillaire;

$t$  est le temps;

$z$  est la coordonnée spatiale verticale;

le dernier terme unitaire, 1, représente l'effet de la gravité.

Le mouvement de l'eau dans le sol est principalement conditionné par la conductivité hydraulique,  $K$ , du matériel qui dépend elle-même du contenu en eau. En zone saturée, le flux d'eau se calcule facilement car  $K$  est une constante. Par contre, en milieu non saturé,  $K$  varie continuellement en fonction des apports d'eau et le flux adopte un comportement fortement transitoire. Le contenu initial en eau ainsi que la fréquence et l'intensité des précipitations ont donc une influence directe sur le mouvement et le temps de résidence de l'eau dans le sol.

Le concept de temps de résidence de l'eau est particulièrement important en hydrologie du sol puisqu'il gouverne le mouvement des solutés. Les réactions chimiques et biologiques dépendant du temps, le temps de résidence est un élément prépondérant qui affecte directement la nature des réactions entre l'eau et les autres substances du milieu. La composition chimique du soluté se déplaçant rapidement dans le système ne sera que faiblement affectée par l'interaction avec le milieu. Le soluté qui s'écoule lentement atteindra un équilibre chimique avec les autres composantes du milieu (adsorption-désorption) et pourra être biodégradé. La connaissance du régime d'écoulement est donc primordiale puisque l'hydrodynamisme du milieu poreux conditionne la rétention et la dégradation du contaminant.

Le transport des solutés en condition non saturée est généralement décrit par l'équation différentielle de convection-dispersion:

$$\frac{\partial(\rho_d S)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial(q C)}{\partial z} \quad (1.2)$$

- où
- C est la concentration du soluté;
  - S est la concentration adsorbée;
  - $\rho_d$  est la masse volumique sèche du milieu;
  - $\theta$  est la teneur volumique en eau;
  - q représente le flux volumique;
  - D est le coefficient de dispersion.

Dans le cas d'un soluté non réactif (i.e. qui ne s'adsorbe pas), le premier terme de l'équation (1.2) devient nul. Le transport des solutés dans le sol est intimement lié à la teneur volumique en eau et au flux d'eau qui circule dans le sol, qui sont tous deux des termes explicites de l'équation (1.2) pouvant être déterminés par l'équation (1.1). On définit le coefficient de dispersion par une fonction linéaire de la vitesse de pore moyenne. En raison du comportement transitoire de ces paramètres, les solutions analytiques sont généralement non disponibles et cette équation doit être résolue numériquement [Porro and Wierenga 1993].

### 1.3 Objectifs et méthodologie

L'objectif général de ce projet de maîtrise est de modéliser le transfert d'eau et de soluté dans les sols non saturés. Le projet, qui se divise en deux parties, comporte un volet pratique et un volet plus théorique. L'objectif du premier volet est d'étudier les conditions hydrodynamiques de milieux poreux impliqués dans le traitement *in situ* d'un contaminant organique dissous. L'objectif du second est d'appliquer un modèle numérique pour

simuler l'écoulement et le transport des solutés dans la zone non saturée et d'en évaluer la validité et la représentativité.

La première partie du projet consiste à étudier expérimentalement l'influence des conditions d'humidité du sol et de l'intensité des précipitations sur le mouvement vertical de l'eau. Une série d'essais en colonne avec des teneurs initiales en eau et des flux d'injection variables ont été réalisés pour chacun des milieux poreux (sable, tourbe et mélange). L'injection de bromures comme traceur permet de définir des courbes de fuite, d'évaluer l'influence de la teneur initiale en eau et du flux d'injection et de déterminer les différents paramètres de transport.

Dans un deuxième temps, un modèle mathématique est appliqué pour simuler numériquement le transfert des solutés dans un milieu poreux. Ce modèle, résolu par la méthode des différences finies, comporte deux modules: la modélisation des processus hydrodynamiques et la modélisation du transport de solutés. Les résultats des essais en colonne permettent de valider le modèle.

## 2. ASPECTS THÉORIQUES

---

### 2.1 Caractéristiques de la zone non saturée

La pollution des eaux souterraines résulte de l'infiltration de solutés qui traversent la zone non saturée en eau avant d'atteindre l'aquifère. En général, le sol est défini comme le produit, remanié et organisé, de l'altération de la croûte terrestre, essentiellement sous l'action d'agents climatiques et biologiques. Les deux dimensions fondamentales de l'étude des sols, à savoir le temps et l'espace, se dégagent de cette définition. Le sol est considéré d'une part comme un milieu complexe, biologiquement actif et siège de nombreux phénomènes transitoires, et de l'autre comme une entité en interaction avec les autres éléments de l'écosystème dans lequel il évolue [Musy 1991].

Il s'agit d'un milieu poreux hétérogène dont la nature physique est régie par l'association de trois phases:

- la **phase solide** constituée d'un ensemble de particules qui varient dans leur composition chimique et minéralogique, leur taille, leur forme et leur orientation. L'agencement de ces particules crée un espace poral qui est occupé par les fluides liquides ou gazeux. La phase solide comprend aussi des substances amorphes, notamment la matière organique, qui liées aux particules minérales forment des agrégats;
- la **phase liquide** constituée de la solution du sol qui inclut de nombreuses substances dissoutes;
- la **phase gazeuse** (absente en milieu saturé) constituée d'un mélange de divers gaz en proportion variable. En raison des processus de production et consommation et de la limitation des échanges, la composition de la phase gazeuse du sol diffère légèrement de celle de l'air atmosphérique avec lequel elle est en contact.

Le sol se distingue par deux (2) zones principales: la zone vadose dont une partie est non saturée et l'autre saturée et la nappe phréatique définie par un milieu saturé (figure 2.1).

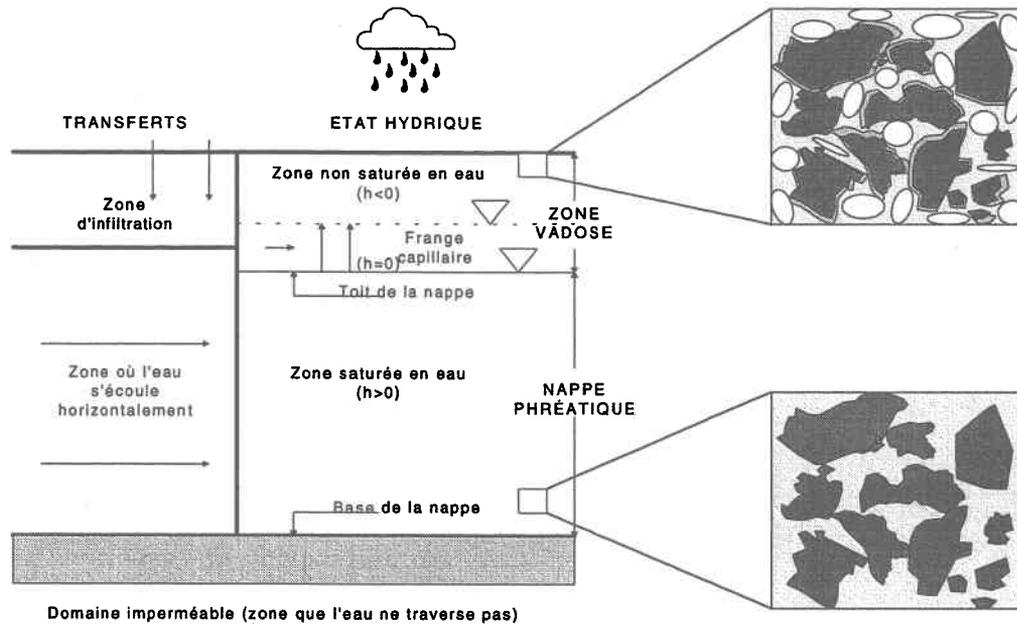


Figure 2.1 Coupe schématique du sol et d'un aquifère

Par formalisme, on considère le sol comme un milieu poreux homogène, incompressible et isotrope. À tout instant, l'état hydrique d'un milieu poreux peut être défini par ses variables d'états:

- sa teneur en eau,  $\theta$  ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ), expression du volume d'eau contenu dans un volume unitaire de sol. Dans la zone saturée, la teneur en eau reflète la porosité du sol alors que dans la zone non saturée, les pores ne sont que partiellement remplis d'eau et la teneur en eau est donc variable. En pratique, on considère que  $\theta$  varie entre une valeur résiduelle,  $\theta_r$ , qui représente la quantité d'eau qui reste liée aux grains à des valeurs de potentiel matriciel qui tendent vers  $-\infty$ , et une valeur maximale de saturation,  $\theta_s$ . La valeur de  $\theta_s$  est généralement inférieure à la porosité à cause des bulles d'air piégées dans le milieu;

• sa **pression ou son énergie,  $h$  (cm)**, expression de la pression capillaire,  $P_c$ , exprimée en terme d'une hauteur d'eau par la relation:

$$h = \frac{P_c}{\rho_{\text{eau}} \times g} \quad (2.1)$$

où  $g$  est l'accélération due à la pesanteur ( $\text{cm/s}^2$ );

$\rho_{\text{eau}}$  est la masse volumique de l'eau ( $\text{g/cm}^3$ ).

La pression capillaire exprimant l'effet des phénomènes capillaires aux interfaces eau-air et des forces de liaison entre l'eau et le milieu est définie comme la différence entre la pression de l'eau du sol et la pression atmosphérique. Ainsi en dessous d'une surface d'eau libre, la solution du sol subit une pression hydrostatique et sa pression excède la pression atmosphérique résultant en un potentiel de pression positif. Inversement, en zone non saturée, la pression de la solution du sol est inférieure à la pression atmosphérique puisqu'elle est soumise à des forces de capillarité ou d'adsorption. Dans ce cas, le potentiel de pression est négatif. Sa valeur dépend des effets capillaires et est donc liée à la teneur en eau du sol.

## 2.2 Mécanismes de transfert en milieu poreux

Dans un milieu poreux, où l'écoulement par les macropores est négligeable, la loi de Darcy est considérée valide. L'équation de Richards pour le transfert de l'eau et l'équation de convection-dispersion pour le transport de soluté sont généralement acceptées comme des modèles mathématiques appropriés [Porro and Wierenga 1993; Vauclin 1994; Zurmühl and Durner 1996].

### 2.2.1 Processus hydrodynamiques dans la zone non saturée

La plupart des processus de transfert d'eau dans les sols se déroulent dans des conditions où la teneur en eau est inférieure à la saturation. La description des écoulements repose alors sur

la généralisation des principes élaborés pour les écoulements saturés, soit la combinaison d'une loi dynamique et d'une loi de continuité. Ce qui distingue le milieu non saturé du milieu saturé est, d'une part, la modification des forces auxquelles sont soumises les particules fluides et, d'autre part, la modification de l'écoulement qui ne correspond plus à l'ensemble de l'espace poral, mais à une fraction variable de celui-ci. La force motrice de l'écoulement en zone non saturée est un gradient de potentiel total, résultant de la somme des potentiels de pression matricielle et de gravité. Puisque l'intensité du potentiel de pression dépend de la teneur en eau qui varie elle-même au cours du processus, la force motrice de l'écoulement varie non seulement d'un point à l'autre du sol, mais également localement au cours du temps.

### 2.2.1.1 Loi de Darcy

La loi de Darcy généralisée à la zone non saturée définit la proportionnalité entre le flux d'eau et le gradient de potentiel:

$$q = -K(\theta) \text{ grad } H(\theta) \quad (2.2)$$

où  $\theta$  est la teneur en eau volumique ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ );

$q$  est le flux volumique d'eau définie comme la quantité d'eau traversant une section unitaire de sol par unité de temps ( $\text{cm}/\text{s}$ ) également appelé vitesse de Darcy,  $v_D$ ;

$K(\theta)$  est la conductivité hydraulique ( $\text{cm}/\text{s}$ );

$H(\theta)$  est la charge hydraulique exprimée en hauteur d'eau (cm) et définie par:

$$H(\theta) = h(\theta) - z \quad (2.3)$$

où  $h(\theta)$  est la pression effective de l'eau correspondant à une teneur en eau donnée;

$z$  est la profondeur, l'axe  $z$  étant positivement orienté vers le bas.

On définit la vitesse de pore ou vitesse interstitielle  $v$  (cm/s) par:

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (2.4)$$

Cette vitesse est celle à laquelle les particules fluides se déplacent réellement dans le sol.

### 2.2.1.2 Équation de Richards

Dans le cas d'un écoulement transitoire,  $q$  peut être calculé à partir de l'équation de continuité. Le principe de continuité s'écrit, en supposant le sol indéformable et l'eau incompressible:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\text{div}(q) \quad (2.5)$$

La combinaison de la loi de Darcy (2.2) et de l'équation de conservation de la masse (2.5) conduit à l'équation générale de l'écoulement:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \text{div}\left(K(\theta) \text{ grad } H(\theta)\right) \quad (2.6)$$

soit en système unidimensionnel vertical:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\theta) \left( \frac{\partial h(\theta)}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (2.7)$$

Puisque la gravité exerce dans la zone non saturée une influence prépondérante par rapport aux gradients d'humidité horizontaux, les composantes horizontales du mouvement deviennent négligeables.

En introduisant la capacité capillaire  $C_c$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) du sol, définie comme la pente de la relation  $\theta(h)$ :

$$C_c = \frac{d\theta}{dh} \quad (2.8)$$

on obtient la formulation suivante de l'équation de Richards:

$$C_c \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(h) \left( \frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (2.9)$$

L'équation (2.9) est non linéaire en raison de la relation  $K(\theta)$  ou  $K(h)$ . Une équation en  $\theta$  peut aussi être utilisée dans le cadre de simulations analytiques ou quasi-analytiques qui utilisent des conditions initiales et limites spécifiques [Parlange 1972] et dans le cadre de simulations numériques. Cependant, il est préférable d'utiliser l'équation en  $h$  (2.9) en raison de son application plus générale. Elle permet d'une part, de tenir compte des phénomènes d'hystérèse dans la fonction  $h(\theta)$  et d'autre part, de permettre le couplage non saturé-saturé [Pikul et al. 1974]. Celia et al. [1990], par contre, critiquent l'équation (2.9) et recommandent l'utilisation de la forme mixte de l'équation de Richards (2.7). D'autres formulations équivalentes de l'équation (2.9) ont été examinées attentivement et critiquées dans leur solution numérique par Haverkamp et al. [1977].

### 2.2.1.3 Propriétés hydrodynamiques

Deux relations apparaissent dans l'équation (2.9):

- la relation  $\mathbf{h}(\theta)$ , pression matricielle versus teneur en eau;
- la relation  $\mathbf{K}(\mathbf{h})$ , conductivité hydraulique versus pression matricielle.

Ces deux relations, essentielles à la description de la dynamique de la phase liquide en régime variable non saturé, compliquent la résolution de l'équation de Richards en raison de la forte

non linéarité de la fonction  $K(h)$  par rapport à la pression matricielle,  $h$ , qui est à son tour une fonction non linéaire de la teneur en eau,  $\theta$ .

La relation  $h(\theta)$  exprime les variations d'intensité des forces de capillarité et d'adsorption en fonction de la teneur en eau. En effet, la diminution de la teneur en eau a pour effet de réduire le rayon de courbure des ménisques, augmentant ainsi les forces capillaires. Les forces d'adsorption remplacent les forces capillaires lorsque la résistance du ménisque est dépassée. Celles-ci augmentent avec une diminution de l'épaisseur de l'enveloppe d'hydratation des particules solides. La teneur en eau correspondant à une succion matricielle donnée dépend essentiellement de l'organisation de l'espace poral du sol, soit de la structure du sol, et de la surface spécifique des particules solides, soit de sa texture. La forme de la relation  $h(\theta)$  constitue donc une caractéristique spécifique à un sol, ou plus généralement à un type de sol (figure 2.2a).

La relation entre potentiel de pression matricielle et teneur en eau n'est pas univoque. Les courbes déterminées par drainage ou désorption diffèrent de celles déterminées par humidification ou sorption. Pour un sol donné et à succion fixe, on obtiendra en général une teneur en eau plus forte en drainage qu'en humidification (figure 2.2b). Ce phénomène d'hystérèse dépend de plusieurs facteurs tels l'hétérogénéité géométrique des pores, l'effet d'angle de contact, la présence d'air piégé dans les pores ou les phénomènes de retrait et de gonflement dans les sols argileux [Kengni 1993].

Le phénomène d'hystérèse complique l'expression mathématique de la relation  $h(\theta)$ . En dépit de l'abondance de modèles théoriques et empiriques et de l'évidence expérimentale de l'hystérèse, le phénomène est la plupart du temps ignoré dans les modèles d'écoulement et de transport [Vauclin and Angulo-Jaramillo 1995].

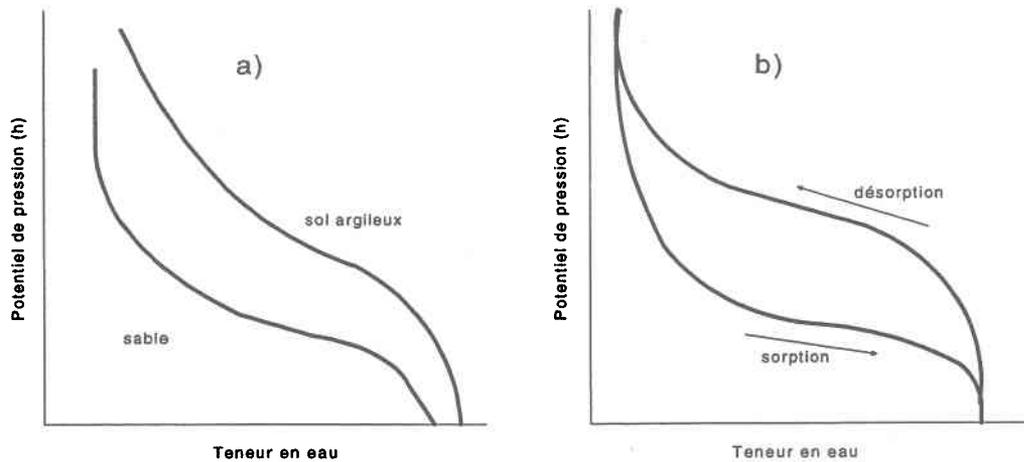


Figure 2.2 a) Influence de la texture et de la structure sur la relation  $h(\theta)$  b) Courbes caractéristiques de l'humidité d'un sol en sorption et désorption

La résistance à l'écoulement, soit la conductivité hydraulique de la loi de Darcy, dépend de la teneur en eau. Les relations reliant la conductivité hydraulique à la charge de pression  $K(h)$  ou à la teneur en eau  $K(\theta)$  sont complexes et dépendent du type de sol considéré, par le biais de ses caractéristiques structurales et texturales (figure 2.3). La diminution de la teneur en eau entraîne en général une baisse rapide de la conductivité hydraulique. La relation  $K(h)$  étant davantage sujette à l'hystérèse, il est préférable de décrire le sol par les relations  $K(\theta)$  et  $h(\theta)$  [Musy 1991].

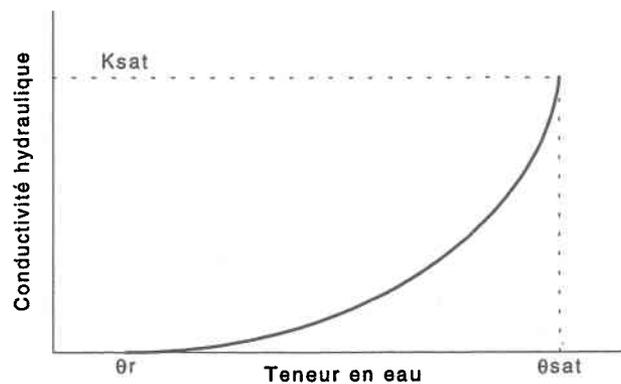


Figure 2.3 Allure générale de la relation  $K(\theta)$

Alors que les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  sont primordiales pour prédire l'écoulement dans la zone non saturée, leur description théorique et leur mesure demeurent encore un défi. Les mesures en laboratoire ou *in situ* donnent des valeurs expérimentales ponctuelles. Puisque la modélisation requiert des fonctions continues, des expressions mathématiques approchées qui reposent sur l'ajustement de valeurs expérimentales sur des lois mathématiques empiriques sont développées. La littérature montre une variété de fonctions empiriques [Mualem 1986]. Fuentes et al. [1992] ont comparé différentes relations et ont montré que la plupart de ces relations ne s'appliquaient pas à toute la gamme des sols rencontrés au champ. Pour les argiles, par exemple, les valeurs des paramètres obtenues par ajustement sont souvent incohérentes avec la théorie d'infiltration. Le tableau 2.1 résume les différentes fonctions empiriques couramment utilisées. La combinaison retenue par Fuentes et al. [1992] est l'équation de van Genuchten [1980] pour  $h(\theta)$  avec la condition de Burdine [1953] ( $m = 1 - 2/n$ ) et l'équation de Brooks et Corey [1964] pour  $K(\theta)$ . Cette combinaison satisfait la condition d'infiltration pour tous les types de sol. D'autres modèles physico-empiriques tentent de prédire la courbe de rétention et de conductivité hydraulique à partir de la distribution de la taille des particules et des données de masse volumique sèche [Arya et al. 1981; Wösten et al. 1988]. Récemment, les travaux de Perrier et al. [1996] ont porté sur l'élaboration d'un modèle général de la courbe de rétention en eau pour les sols ayant une distribution fractale de la taille de pores.

Ces expressions empiriques représentent généralement des milieux poreux avec une distribution unimodale de la taille des pores. Contrairement à ces modèles simples, les sols naturels présentent souvent une distribution porale plus compliquée avec un réseau de pores plus larges qui influence considérablement les propriétés hydrauliques près de la saturation. L'utilisation de fonctions unimodales pour décrire les propriétés hydrauliques de tels sols ne sont pas toujours adéquates. L'utilisation de fonctions bimodales pour décrire le transport de soluté dans un milieu biporeux a conduit à des résultats concluants dans le cadre des travaux de Caron et al. [1995] et de Zurmühl and Durner [1996].

Tableau 2.1 Résumé de différentes fonctions empiriques

Références	Fonctions empiriques	Spécifications
Gardner [1958]	$K(h) = K_s \exp(\alpha h)$	$\alpha > 0$
Brooks and Corey [1964]	$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left( \frac{h_{cr}}{h} \right)^\lambda$ $K(\theta) = K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^\eta$	$\lambda > 0$ $\eta = 2/\lambda + 2 + p$ Burdine model [1953] $p = 1$ Mualem model [1976] $p = 1/2$ Yuster [1951] $\eta = 2$ Irmay [1954] $\eta = 3$ Averyanov [1950] $\eta = 3,5$
Brutsaert [1966]	$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{1 + \left( \frac{h}{h_b} \right)^b}$	$b > 0$
van Genuchten [1980]	$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{\left[ 1 + \left( \frac{h}{h_g} \right)^n \right]^m}$ $\frac{K(\theta)}{K_s} = \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left[ 1 - \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^2 \right\}$	Burdine model [1953] $m = 1 - 2/n, n > 2$ Mualem model [1976] $m = 1 - 1/n, n > 1$
Combinaison van Genuchten [1980]  Brooks and Corey [1964]	$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{\left[ 1 + \left( \frac{h}{h_g} \right)^n \right]^m}$ $K(\theta) = K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^\eta$	$\eta = 2/mn + 2 + p$ Burdine model [1953] $m = 1 - 2/n$ $p \geq -1/m$

L'utilisation de fonctions hydrauliques bi ou multimodales n'est pas toujours justifiée. Dans tous les cas, il importe de décrire le plus précisément possible les propriétés hydrauliques, surtout dans le cadre d'essais en laboratoire ou de validation de modèle. La négligence des déviations entre les données mesurées et la fonction empirique utilisée peut engendrer une conception erronée du problème. Demond et al. [1996] ont montré que l'utilisation de relations de transport estimées engendre des différences significatives dans la prédiction de la migration de composés organiques.

### **2.2.2 Transport de solutés dans les sols**

L'eau du sol est le vecteur principal du transport de soluté. Quand une solution se déplace dans un milieu poreux, plusieurs mécanismes se produisent simultanément: transport par convection, par dispersion hydrodynamique et par diffusion moléculaire, échange de soluté entre la phase solide et liquide et dégradation.

Les composés organiques des produits phytosanitaires se déplacent dans les sols comme tout soluté. Plusieurs paramètres influencent ces mécanismes de transport: la porosité du sol, le régime hydrique, la teneur en eau, les propriétés physico-chimiques des constituants du sol et des composés, plus précisément les propriétés d'adsorption-désorption qui limitent le déplacement des molécules, la présence de matière organique, les interactions biologiques et les pratiques culturales [Novy Quadri 1993].

Supposons que, dans une colonne remplie avec un matériau poreux et soumise à un écoulement d'eau, on injecte une concentration connue d'un soluté. Cette injection engendre une réponse à la sortie de la colonne qui est la conséquence de tous les phénomènes subis par le soluté au cours de son trajet (figure 2.4).

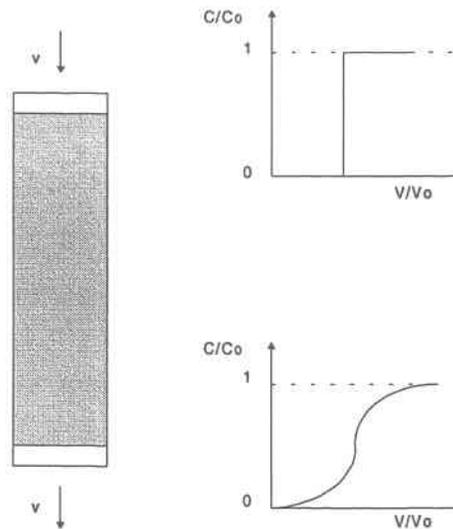


Figure 2.4 Courbe de réponse à l'injection d'un soluté dans une colonne

- où
- $C$  est la concentration du soluté à la sortie de la colonne;
  - $C_0$  est la concentration du soluté injectée;
  - $V$  est le volume de solution injectée;
  - $V_0$  est le volume d'eau présent initialement dans la colonne;
  - $C/C_0$  et  $V/V_0$  sont la concentration et le temps adimensionnalisés.

Au cours d'un écoulement dans un milieu poreux, le traceur s'étale graduellement. Les particules, entraînées par convection, se déplacent suivant une vitesse qui varie autour d'une vitesse moyenne. L'hétérogénéité du champ de vitesses locales et la diffusion moléculaire induisent ces fluctuations responsables de l'étalement. Au départ, le traceur évolue dans le milieu avec une interface nette de séparation entre la solution du sol non marquée et celui-ci. Ce front de séparation s'estompe graduellement et il se crée une zone de transition dans laquelle la concentration relative du traceur varie. Ce phénomène est appelé dispersion hydrodynamique. La figure 2.5 illustre la déformation du profil de concentration au cours du temps pour un écoulement unidirectionnel.

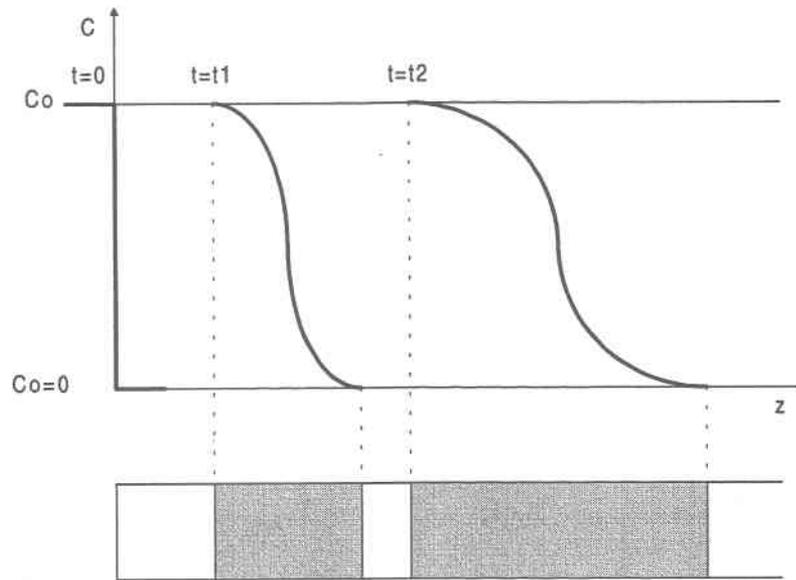


Figure 2.5 Évolution de la zone de transition avec le temps

### 2.2.2.1 Loi de conservation de la masse

La description classique du passage d'un soluté dans une colonne (écoulement unidirectionnel) non saturée est basée sur l'équation de convection-dispersion (ECD) et utilise la forme différentielle de la loi de conservation de la masse:

$$\frac{\partial(\rho_d S_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta C_i)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D_i(\theta, q) \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) - \frac{\partial(q C_i)}{\partial z} + \sum_{j=1}^n \phi_{i,j}(C_i, S_i) \quad (2.10)$$

(a)            (b)            (c)            (d)            (e)

- où
- $C_i$  est la concentration du soluté  $i$  dans la phase liquide ( $\text{g}/\text{cm}^3$ );
  - $S_i$  est la concentration du soluté  $i$  dans la phase solide ( $\text{g soluté}/\text{g solide}$ );
  - $\rho_d$  est la masse volumique sèche du milieu ( $\text{g}/\text{cm}^3$ );
  - $\theta$  est la teneur volumique en eau ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ );
  - $D$  est le coefficient de dispersion hydrodynamique ( $\text{cm}^2/\text{s}$ );
  - $q$  représente le flux volumique ( $\text{cm}/\text{s}$ );
  - $\sum \phi_{i,j}(C_i, S_i)$  représente les termes sources de l'espèce  $i$  ( $\text{g}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s})$ );

t est le temps (s);

z est la coordonnée spatiale (cm).

Chaque terme de l'équation (2.10) est représentatif d'un mécanisme distinct [Vauclin 1994]:

- le terme (a) décrit le taux de passage de l'espèce i de la phase solide à la phase liquide;
- le terme (b) décrit la variation de la concentration du soluté i dans la phase liquide au cours du temps;
- le terme (c) rend compte du transfert dispersif incluant la diffusion moléculaire;
- le terme (d) représente le transport de soluté par convection avec le flux d'eau, q;
- le terme (e) considère les réactions de consommation et de production de l'espèce i.

L'utilisation de ECD pour décrire le transport de solutés à l'échelle macroscopique est tout à fait appropriée. Cependant, l'application de ECD à l'échelle mégascopique ne conduit pas toujours à des résultats concluants en raison de la variabilité spatiale rencontrée sur le terrain [Snow et al. 1994].

#### 2.2.2.2 Dispersion

La dispersion a pour effet d'étendre la masse au-delà de la zone qu'elle occuperait si elle n'était transportée que par convection. La dispersion hydrodynamique de la masse lors du transport résulte de la combinaison de deux processus: la dispersion mécanique et la diffusion moléculaire:

$$D = D' + D_d^* \quad (2.11)$$

où D est le coefficient de dispersion hydrodynamique;

D' est le coefficient de dispersion mécanique;

$D_d^*$  est le coefficient global de diffusion.

La dispersion mécanique, qui est lié au flux convectif, décrit le mélange qui résulte des variations locales de vitesse d'écoulement par rapport à une vitesse moyenne. Les changements de vitesses se produisent dans les pores au niveau microscopique et au niveau macroscopique résultant entre autres des variations de conductivité hydraulique.

La diffusion moléculaire obéit à la loi de Fick qui stipule que pour un soluté  $i$ , le flux de masse par diffusion,  $J_{di}$ , dans une direction est proportionnel au gradient de concentration:

$$J_{di} = -D_d \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad (2.12)$$

où la constante de proportionnalité est le coefficient de diffusion  $D_d$  du soluté dans un fluide. Pour tenir compte de la porosité et de la tortuosité d'un milieu poreux, on remplace  $D_d$  par le coefficient de diffusion effectif,  $D_d^*$ , qui peut être exprimé par une relation de la forme suivante:

$$D_d^* = nD_d \quad (2.13)$$

Dans la majorité des cas, la diffusion moléculaire est négligeable par rapport à dispersion mécanique. En pratique,  $D$  est souvent utilisé comme un paramètre empirique représentant l'effet de tous les mécanismes d'étalement. Le coefficient de dispersion hydrodynamique observé à l'échelle macroscopique intègre et moyenne les fluctuations microscopiques. Pour des systèmes relativement homogènes,  $D$  est généralement bien corrélé à la vitesse de pore:

$$D = \alpha v \quad (2.14)$$

où  $\alpha$  représente la dispersivité qui est une propriété du milieu qui caractérise ses propriétés dispersives mais qui est supposée indépendante de la vitesse d'écoulement et de la teneur en eau. Dans la zone non saturée, le transport est normalement perpendiculaire aux couches.

L'instabilité du front d'humidité résultant de la superposition de couches engendre l'augmentation apparente de  $\alpha$  avec la distance.

### 2.2.2.3 Écoulements préférentiels

Le transport des solutés ne peut pas toujours être décrit adéquatement par l'équation classique de convection-dispersion qui ne considère pas les écoulements préférentiels.

Gamble et al. [1990] décrivent deux types de transport. L'eau qui s'infiltré à la surface du sol et se déplace verticalement dans le profil du sol selon un mouvement piston représente un déplacement de type FIFO (First In First Out). Lorsque l'eau chemine dans le profil par des écoulements préférentiels et qu'elle dépasse l'eau retenue dans la matrice du sol, l'écoulement est de type LIFO (Last In First Out). La connaissance du type d'écoulement permet de mieux estimer le temps de résidence d'un élément fluide dans un système. Les temps de résidence sont plus faibles pour des écoulements LIFO que pour des écoulements FIFO. Le contenu en eau du sol avant une précipitation n'affecte pas le temps de résidence de l'eau qui suit un comportement LIFO.

Bowman and Rice [1986] ont étudié le transport de différents traceurs dans le profil du sol lors d'irrigations de surface intermittentes. Les vitesses de pore moyennes mesurées expérimentalement étaient 60-70% supérieures à celles calculées à partir du flux moyen d'injection et du profil moyen de teneur en eau. Ces résultats indiquent qu'une portion significative de l'eau appliquée peut se déplacer par des chemins préférentiels en condition de non saturation. De même, le traceur appliqué sur une parcelle de culture maraîchère dans une expérience réalisée par Roth et al. [1991] a présenté un front principal de déplacement lent et une série de fronts rapides s'écoulant préférentiellement. van Ommen et al. [1989] expliquent les divergences entre la courbe de fuite observée et celle prédite par la présence d'écoulements préférentiels.

Les travaux de Glass et al. [1989] ont montré que l'instabilité du front d'humidité influence le transport de soluté dans un système multicouches composé d'un sable fin superposé à un sable grossier. L'instabilité entraîne la formation d'une digitation suite au premier cycle d'infiltration. La persistance de cette digitation favorise la sortie rapide du soluté. L'interaction entre les chemins préférentiels et les franges augmente la dispersion apparente du système et est responsable de la longue traînée de la courbe de fuite.

Ces processus (écoulements préférentiels, digitation, échange de soluté...), même dans un milieu poreux homogène, témoignent de la présence d'une fraction d'eau plus ou moins immobile et montre la difficulté rencontrée lors de la modélisation du transport de soluté dans une perspective de prédiction.

#### 2.2.2.4 Teneur volumique en eau

Une manière de tenir compte du transport préférentiel et de l'eau immobile est de partitionner la phase liquide en deux régions, mobile et immobile. Effectivement, une partie de l'eau présente dans le milieu peut rester immobile et ne pas participer au transport. C'est le cas de l'eau liée aux grains et de l'eau présente dans les pores en cul-de-sac ou emprisonnée par des bulles d'air. On définit alors:

$$\theta = \theta_m + \theta_{im} \quad (2.15)$$

où  $\theta_m$  et  $\theta_{im}$  sont les teneurs volumiques en eau mobile et immobile respectivement.

Clothier et al. [1992] proposent une méthode simple de terrain qui mesure la fraction d'eau mobile,  $\theta_m$ , à l'aide d'un perméamètre à disque. Ils ont évalué la fraction mobile d'un sable fin loameux à  $\theta_m = 0,2003 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ . Une étude récente de Magesan et al. [1995] évaluait à 15% la fraction d'eau immobile d'un sable fin loameux faiblement structuré alors que toute l'eau participait au transport dans le loam silteux bien structuré. La fraction d'eau mobile peut être évaluée à partir des mesures de concentrations résiduelles de soluté des colonnes

directement en-dessous du perméamètre à disque. Utilisant le même sable fin loameux et la même technique de mesure, Clothier et al. [1995] suggèrent que 35% de l'eau était immobile. L'expérience montre également moins d'écoulement préférentiel et de dispersion lorsque le potentiel matriciel est plus élevé.

La courbe de réponse suite à l'injection d'un traceur idéal passe par le point  $(0,5 C/C_0, 1 V/V_0)$  lorsque toute l'eau participe au mouvement. Lorsqu'une partie de l'eau est immobile, la courbe de fuite peut être légèrement déformée avec un décalage vers la gauche (figure 2.6). En présence d'une fraction d'eau immobile, la solution injectée peut dépasser l'eau déjà présente dans le milieu engendrant une arrivée précoce du soluté à la sortie de la colonne. L'échange de soluté à la surface de contact entre l'eau mobile et l'eau immobile provoque l'apparition d'une traînée.

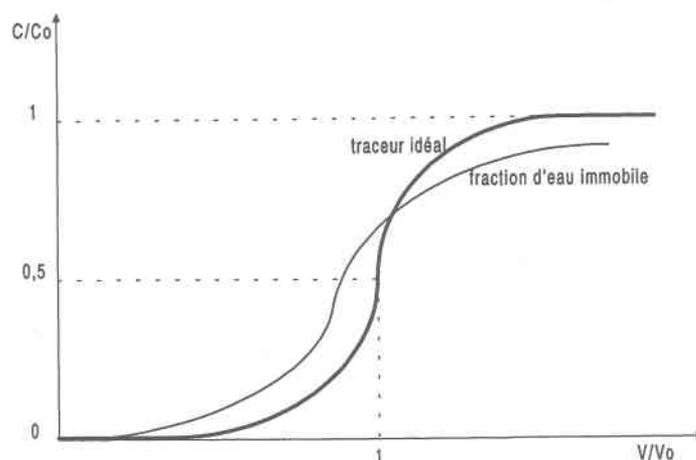


Figure 2.6 Effet de la fraction immobile sur la courbe de fuite d'un traceur

Ces observations nous amènent à reconsidérer la description et la modélisation du transport de soluté [Nielsen et al. 1986; Russo et al. 1989; Wierenga and van Genuchten 1989; Clothier 1992]. L'équation simplifiée de convection-dispersion est réécrite en incluant les deux fractions d'eau:

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \theta_m D \frac{\partial^2 C_m}{\partial z^2} - q \frac{\partial C_m}{\partial z} \quad (2.16)$$

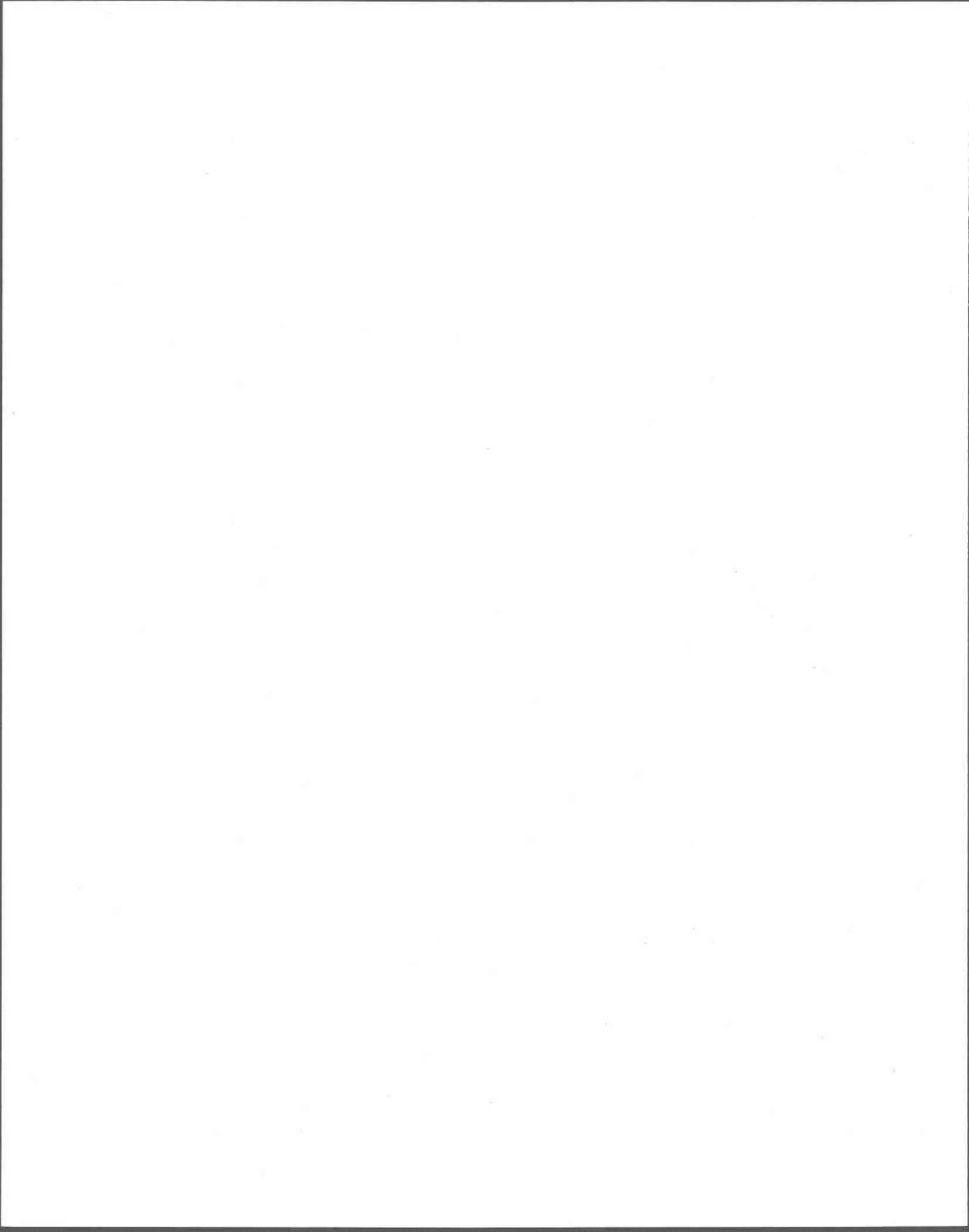
La convection et la dispersion se limitent à la fraction mobile seulement. La diffusion est responsable de l'échange de soluté entre les régions mobiles et immobiles. La concentration du soluté dans la fraction immobile,  $C_{im}$ , est liée à la concentration dans la fraction mobile,  $C_m$ , par:

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \lambda (C_m - C_{im}) \quad (2.17)$$

où  $\lambda$  représente un coefficient de cinétique ( $s^{-1}$ ). La prise en compte d'une fraction d'eau immobile dans l'équation de transport génère une vitesse de transport plus rapide résultant d'un volume de transport effectif plus faible que le volume total d'eau dans les pores. Trois approches peuvent être considérées pour le traitement d'une fraction d'eau immobile: la valeur de  $\theta_{im}$  est constante, le rapport  $\theta_m/\theta$  est constant ou  $\theta_m$  est traité comme une variable dynamique. Zurmühl and Durmer [1996] ont modélisé le transport d'un soluté dans un sol à double porosité. Les simulations montrent que seule l'utilisation des fonctions bimodales pour les propriétés hydrauliques combinée à un traitement dynamique de la fraction d'eau mobile conduit à des résultats qui concordent avec les observations expérimentales de transport préférentiel dans les sols structurés. Gerke and van Genuchten [1993] ont également utilisé un modèle à double porosité.

#### 2.2.2.5 Paramètres physico-chimiques

Le traceur utilisé en laboratoire pour étudier l'hydrodynamisme des milieux poreux est un soluté non adsorbant, ce qui supprime les phénomènes de sorption et de dégradation dans le milieu.



## 3. MÉTHODOLOGIE

### 3.1 Essais en laboratoire

#### 3.1.1 Dispositif expérimental

Des colonnes en PVC, 10 cm de diamètre et 41 cm de hauteur, ont été utilisées pour les essais. Deux épaisseurs de géotextile et de grillage fixées à la base de chaque colonne retiennent le matériel à l'intérieur de la colonne sans toutefois influencer l'écoulement de l'eau. Un trop-plein permet de mesurer la conductivité hydraulique à saturation. Une autre section de tube en PVC de même diamètre et d'une hauteur de 16 cm sert de dispositif d'injection. Cette section est bouchée à la base et des trous de petits diamètres (0,40 mm) permet une alimentation simulant une pluie. Un système de trop-plein permet de maintenir une hauteur d'eau constante. Le dispositif expérimental est illustré à la figure 3.1.

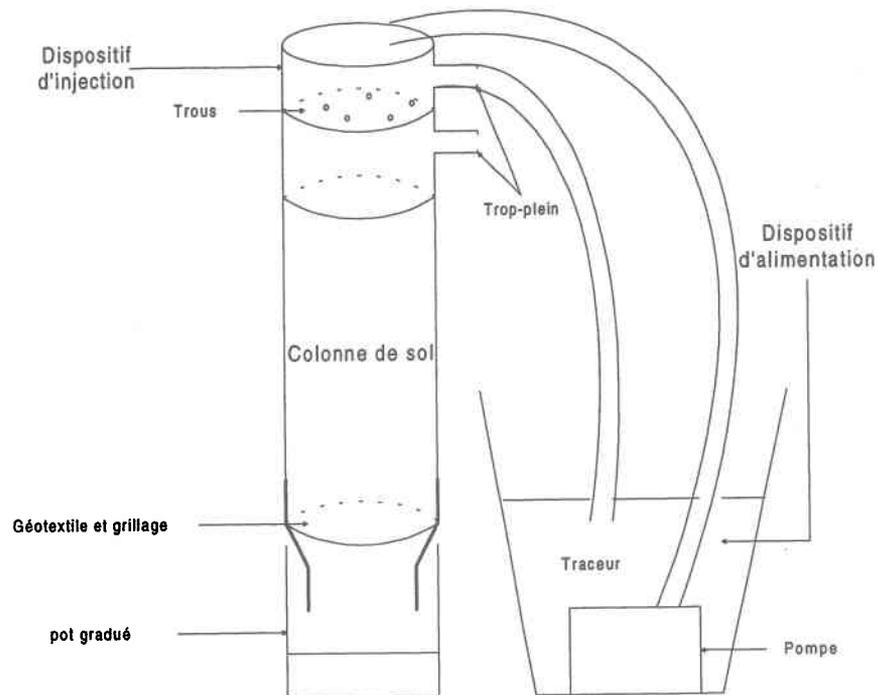


Figure 3.1 Dispositif expérimental

Trois colonnes identiques permettent de réaliser chaque essai en triplicat. Les colonnes sont positionnées verticalement dans un support. Le dispositif d'alimentation est indépendant pour chaque colonne ce qui permet de connaître le volume exact injecté au cours d'un essai et ainsi évaluer les débits d'injection moyens de chaque colonne. Une petite pompe submersible placée dans un bassin alimente chaque colonne. L'effluent est collecté dans des pots gradués de 100 ml.

### 3.1.2 Caractéristiques des matériaux utilisés

#### 3.1.2.1 Mesure des paramètres physiques

L'hydrodynamisme des milieux poreux a été étudié en colonne. Les principales caractéristiques physiques de chaque type de sol sont préalablement déterminées et sont présentées au tableau 3.1. Un milieu poreux est caractérisé par:

- une **masse volumique apparente sèche**  $\rho_d$  ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ), définie comme:

$$\rho_d = \frac{m}{V_T} \quad (3.1)$$

où  $m$  est la masse du milieu poreux contenu dans la colonne (g);  
 $V_T$  est le volume total du milieu poreux ( $\text{cm}^3$ ).

- une **porosité**  $n$  ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ), définie comme:

$$n = \frac{V_p}{V_T} \quad (3.2)$$

où  $V_p$  est le volume des vides ou volume poral ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ).

- une **porosité de drainage ou porosité efficace**  $n_d$  ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ), définie comme le rapport au volume total de l'espace des vides contenant de l'eau pouvant s'écouler librement sous l'effet de la gravité seule:

$$n_d = \frac{m_{\text{sat}} - m_d}{V_T \times \rho_{\text{eau}}} \quad (3.3)$$

- où  $m_{\text{sat}}$  est la masse de la colonne à saturation (g);  
 $m_d$  est la masse de la colonne après drainage (g);  
 $\rho_{\text{eau}}$  est la masse volumique de l'eau ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ).

- une **capacité au champ ou rétention spécifique**  $\theta_c$  ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ), définie comme le rapport du volume d'eau que le sol peut retenir contre la gravité au volume total:

$$\theta_c = \frac{m_d - m_s}{V_T \times \rho_{\text{eau}}} \quad (3.4)$$

- où  $m_s$  est la masse de la colonne sèche (g).

- une **teneur volumique en eau**  $\theta$  ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ ), définie comme:

$$\theta = \frac{V_o}{V_T} = \frac{m_{\text{eau}}}{\rho_{\text{eau}} V_T} \quad (3.5)$$

- où  $V_o$  est le volume d'eau contenu dans la colonne ( $\text{cm}^3$ ).

La teneur en eau initiale est obtenue par la différence de poids entre la colonne au début de l'essai et son poids à l'état sec. La masse volumique de l'eau pure,  $\rho_{\text{eau}}$ , est considérée égale à  $1 \text{ g}/\text{cm}^3$  à  $20^\circ\text{C}$ .

- une **conductivité hydraulique à saturation  $K_{sat}$  (cm/s)**, définie comme la capacité d'un sol à laisser s'écouler l'eau. La conductivité est déterminée par la loi de Darcy:

$$K_{sat} = \frac{V_T \cdot L}{A \cdot t \cdot \Delta H} \quad (3.6)$$

où  $L$  est la hauteur de sol (cm);

$A$  est la section de la colonne (cm<sup>2</sup>);

$\Delta H$  est la différence de charge hydraulique (cm d'eau).

La valeur de la conductivité hydraulique a été mesurée en laboratoire par la technique du perméamètre à charge constante. Cette technique consiste à maintenir une différence de charge constante entre l'entrée et la sortie et à mesurer le volume d'eau qui s'écoule à travers la colonne dans un intervalle de temps.

Les méthodes de mesure des propriétés physiques sont présentées à l'annexe I.

Tableau 3.1 Caractéristiques physiques des milieux poreux

sol	$\rho_a$ (g/cm <sup>3</sup> )	$n$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$\theta_c$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$n_d$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$K_{sat}$ (cm/s)
sable	1.590	0.386	0.371	0.015	5.10E-03
tourbe	0.088	0.805	0.547	0.258	8.51E-02
mélange	0.793	0.568	0.448	0.186	4.43E-03

### 3.1.2.2 Milieux poreux

L'hydrodynamisme des milieux poreux est étudié avec des teneurs initiales en eau et des débits d'injection variables. Un total de 72 essais en colonne a été réalisé. La description sommaire des essais est présentée à l'annexe II.

### Sable

Le sable étudié est un sable silteux (à la limite d'un sable fin) avec une granulométrie étroite principalement comprise entre 50  $\mu\text{m}$  et 500  $\mu\text{m}$ . La courbe granulométrique résultant d'une étude granulométrique par tamisage et sédimentométrie est présentée à la figure 3.2. Les propriétés hydrodynamiques de ce sable sont évaluées à partir de trois séries de colonnes de 30 cm de hauteur remplies uniformément. Le sable est compacté légèrement pour obtenir une masse volumique apparente sèche moyenne de 1,59  $\text{g}/\text{cm}^3$ . De trois à cinq essais étaient pratiqués avec la même colonne avec des conditions d'humidité variant de sèches à saturées ( $\theta = 0$ , comprise entre  $0-\theta_c$ ,  $\theta_c$ ,  $\theta_{\text{sat}}$ ). Les débits d'injection variaient pour chaque essai. Chaque essai était réalisée en triplicat pour un total de 48 essais.

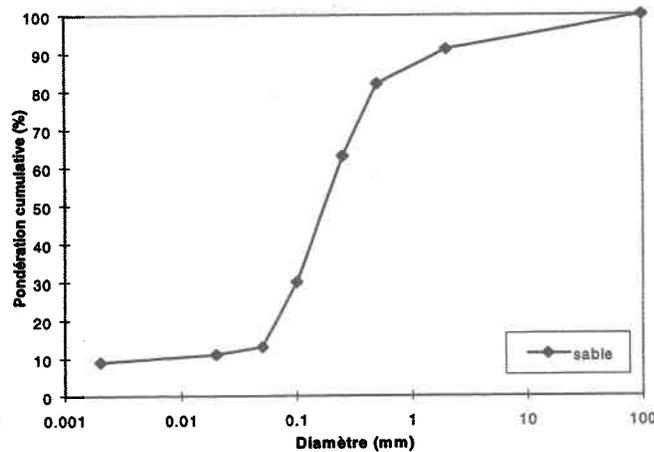


Figure 3.2 Courbe granulométrique du sable

### Tourbe

La tourbe de St-Ludger de Milot (Tourbière Fafar) testée est une tourbe blonde propre. La tourbe possède des caractéristiques de capillarité très particulières ce qui rend difficile la saturation homogène du milieu. Douze essais avec des colonnes de 15 cm de hauteur ont permis d'évaluer les paramètres de transport. Deux séries de colonnes, en triplicat, ont été étudiées avec deux teneurs en eau ( $\theta_c$  et  $\theta_{\text{sat}}$ ) pour un total de douze essais.

### Mélange

Un mélange de sable silteux (90%) et de composantes végétales (10%) (bran de scie, paille et tourbe) a été testé. Les propriétés hydrodynamiques de ce mélange sont évaluées à partir de douze essais réalisés avec des colonnes de 30 cm remplies uniformément avec ce mélange et compactées légèrement donnant une masse volumique sèche moyenne de  $0,94 \text{ g/cm}^3$ . Trois des douze essais ont été réalisés avec des colonnes de 15 cm avec une masse volumique sèche moyenne de  $0,55 \text{ g/cm}^3$ . Les conditions d'humidité des essais variaient de sèches à saturées ( $\theta = 0$ , comprise entre  $0-\theta_c$ ,  $\theta_c$ ,  $\theta_{\text{sat}}$ ). Les débits d'injection variaient pour chaque essai. Les faibles valeurs de conductivité hydraulique par rapport au débit d'injection engendraient une accumulation d'eau à la surface des colonnes dans certains cas, devenant problématique pour la continuité des essais.

#### 3.1.2.3 Soluté

L'ion bromure est un traceur abondamment utilisé dans les études de transport en zone saturée ou non saturée [Bowman and Rice 1986; Butters et al. 1989; van Ommen et al. 1989; Porro and Wierenga 1993; Caron et al. 1995]. Il est très soluble, ne précipite pas, ne s'adsorbe pas, ne se dégrade pas (conservatif) et n'est pas toxique. De plus, il est peu coûteux et facile à doser. Une électrode spécifique est utilisée pour le dosage de l'ion  $\text{Br}^-$  (ORION, Model 94-35 Bromide Electrode, Model 90-02 Double Junction Reference Electrode). L'électrode est construite avec une petite bulle sensible à son extrémité qui contient un mélange de  $\text{Ag-AgBr}$  ou  $\text{AgBr-Ag}_2\text{Br}$ . Lorsque l'électrode est placée dans la solution à doser, la réaction suivante s'équilibre:



Le voltage mesuré dépend de l'activité de  $\text{Ag}^+$ . Une concentration élevée en  $\text{Br}^-$  déplacera la réaction vers la gauche, abaissant l'activité de  $\text{Ag}^+$  et le voltage mesuré sera plus faible.

L'ion bromure est considéré comme un bon traceur, il permet la détermination des caractéristiques hydrodynamiques des milieux poreux.

### 3.1.3 Procédure des essais de traçage

La procédure générale d'un essai en colonne est d'injecter de l'eau avec une concentration connue,  $C_0$ , d'un traceur dans une colonne de sol saturée ou non saturée, puis de mesurer la concentration de l'effluent recueilli à la base. L'évolution de la concentration du traceur dans l'effluent permet de suivre le mouvement de l'eau dans la colonne et de déterminer les paramètres de transport.

La teneur initiale en eau des colonnes est mesurée avant chaque essai. L'eau présente dans les colonnes est déminéralisée. La concentration de la solution injectée,  $C_0$ , dans les colonnes est de 100 ppm de NaBr. Les échantillons de 100 ml recueillis à la base de la colonne sont dosés. L'essai se poursuit jusqu'à ce que  $C/C_0 = 1$ . Le contenu en eau des colonnes est évalué après l'essai. Entre chaque essai d'une même série, les colonnes sont lessivées avec de l'eau distillée pour éliminer complètement les bromures. Les concentrations normalisées de bromures mesurées dans l'effluent sont présentées en courbe de fuite ( $C/C_0$  vs temps,  $V/V_{sat}$  ou  $V/V_0$ ). La vitesse de transport se calcule à partir des courbes de fuite. La vitesse est obtenue en divisant la hauteur de sol dans la colonne par le temps nécessaire pour obtenir la concentration  $C_0/2$  qui représente le centre de masse du front de propagation.

## 3.2 Modélisation des mécanismes de transfert en milieu poreux

La modélisation mathématique des transferts en milieu poreux repose sur la résolution des équations différentielles assorties de conditions initiales et de conditions aux limites. Puisque l'obtention et l'utilisation d'une solution analytique s'avère impossible, la résolution numérique constitue la seule alternative. En plus de gagner en souplesse, les méthodes

numériques permettent d'introduire des termes sources et de modifier les conditions aux limites et la représentation des échanges.

### **3.2.1 Méthode numérique**

La méthode des différences finies a été retenue pour résoudre numériquement l'équation de Richards (2.9) et l'équation de convection-dispersion (2.10). La méthode par éléments finis a également été envisagée. Cette dernière conduit à des solutions plus stables et plus précises permettant l'utilisation de plus grands pas de temps et d'espace et donc un temps de simulation minimisé [Nielsen et al. 1986]. En revanche, la programmation et la représentation sont plus complexes.

#### **3.2.1.1 Discrétisation du domaine**

La méthode des différences finies consiste à décomposer le domaine continu d'écoulement en un domaine discret composé de  $n$  mailles qui contiennent les noeuds de calcul. L'approximation en différences finies des dérivées spatiales et temporelles sont obtenues par des développements limités en série de Taylor. L'objectif de la méthode est de formuler des équations de transfert linéaires.

Le domaine spatial est divisé en mailles cubiques de dimension  $dx$ ,  $dy$  et  $dz$ . Dans le cas d'un écoulement unidimensionnel, seule la direction  $z$  est considérée et le système peut être représenté par une suite de mailles de longueur  $dz$ . Le principe du schéma centré est utilisé pour résoudre le système. La figure 3.3 illustre les mailles de calcul.

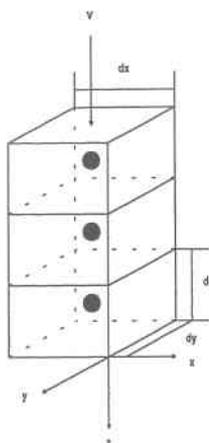


Figure 3.3 Schéma de la discrétisation unidirectionnelle

### 3.2.1.2 Caractéristiques du programme de calcul

La simulation des mécanismes de transfert en milieu poreux est programmée sur EXCEL. Le programme comprend deux modules: un module d'écoulement et un module de transport. Le premier module résout l'équation de Richards. La variable de calcul,  $h$ , est définie pour chaque maille. À la fin de la simulation, on obtient une valeur de potentiel de pression,  $h$ , pour chaque maille de la colonne et à chaque pas de temps. De ceci, on génère un champ de vitesses. La vitesse de chaque maille est estimée à partir des flux d'entrée et de sortie de la maille. Le second module solutionne l'équation de transport à partir du champ des vitesses généré par le module d'écoulement. Il permet de suivre la concentration d'un soluté dans l'espace et le temps.

L'utilisation d'EXCEL comme outil de modélisation présente plusieurs avantages. Le code en différences finies est facile à programmer. La visualisation du domaine discrétisé et de l'évolution des simulations permet de mieux cerner les erreurs de programmation, de conditionnement et/ou de calculs, notamment l'apparition d'instabilités numériques ou la non convergence des calculs. La gestion des fichiers et des résultats est facilitée. Les résultats sont immédiatement présentés sous forme de courbe de fuite et comparés aux données expérimentales sans manipulation et sans importation. En revanche, le temps d'exécution de

l'ensemble de la simulation est relativement long. Le temps de calcul à chaque étape est très variable puisqu'il dépend des conditions imposées.

### 3.2.2 Modélisation des processus hydrodynamiques

#### 3.2.2.1 Résolution numérique

##### Discrétisation et schéma utilisés

Le schéma centré est couramment utilisé pour résoudre numériquement les équations de l'écoulement dans la zone non saturée [Freeze 1969; Pikul et al. 1974; Haverkamp et al. 1977; Guinot 1995]. La variable de calcul,  $h$ , est définie aux points de calcul  $(z, t)$ ,  $z$  étant la position du point dans l'espace et  $t$ , le niveau temporel de la résolution. Les flux, qui font intervenir la dérivée spatiale de premier ordre de  $h$ , sont estimés aux interfaces entre deux points de calcul adjacents. Les dérivées temporelles sont estimées entre deux niveaux temporels successifs, aux points de calculs.

La discrétisation en différences finies de l'équation de Richards est faite à partir de l'estimation des flux aux interfaces:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C_c \frac{\partial h}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} \quad (3.8)$$

$$C_{c_z} \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = - \frac{(q_{z+\Delta z/2} - q_{z-\Delta z/2})}{\Delta z} \quad (3.9)$$

où

$$\begin{aligned} q_{z+\Delta z/2} &= -K_{z+\Delta z/2} \left( \frac{h_{z+\Delta z} - h_z}{\Delta z} - 1 \right) \\ q_{z-\Delta z/2} &= -K_{z-\Delta z/2} \left( \frac{h_z - h_{z-\Delta z}}{\Delta z} - 1 \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

L'équation (3.9) devient alors:

$$C_c^t \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[ K_{z+\Delta z/2}^t \left( \frac{h_{z+\Delta z}^{t*} - h_z^{t*}}{\Delta z} - 1 \right) - K_{z-\Delta z/2}^t \left( \frac{h_z^{t*} - h_{z-\Delta z}^{t*}}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (3.11)$$

On peut résoudre l'équation (3.11) de façon explicite ( $t^* = t$ , pas de temps précédent). Pour des raisons de stabilité, le pas de temps doit être ajusté pour respecter les critères de stabilité et conduit souvent à de petites valeurs de  $\Delta t$ , ce qui augmente considérablement le temps de simulation. Ce type de modèle est cependant plus facile à programmer. L'équation (3.11) peut également être résolue implicitement ( $t^* = t + \Delta t$ ). Les méthodes implicites utilisent généralement des pas de temps plus grands que les méthodes explicites mais les conditions de stabilité doivent être déterminées par «essais et erreurs» en fonction du degré de non linéarité des équations. La programmation est également plus compliquée. Haverkamp et al. [1977] ont comparé différents modèles numériques de simulation de l'écoulement unidirectionnel. D'après leur étude, le schéma implicite avec une évaluation explicite ou implicite des fonctions  $K(h)$  et  $C_c(h)$  semble avoir le plus grand champ d'application pour prédire l'écoulement en zone saturée et non saturée et constitue le meilleur compromis entre stabilité, convergence et temps de calcul.

Les principaux avantages des méthodes implicites sont leur stabilité, même à des pas de temps relativement grands, et leur flexibilité pour résoudre des problèmes d'écoulement impliquant des zones non saturée et saturée simultanément. Pour ces raisons, le schéma numérique implicite combiné à une linéarisation explicite (pas de temps précédent) de  $K(h)$  et  $C_c(h)$  sera retenu dans le cadre de cette maîtrise.

Les valeurs de  $K(h)$  à l'interface des mailles sont estimées arbitrairement puisqu'il n'y a pas de règle exacte pour les calculer. Haverkamp and Vauclin [1979] ont réalisé une étude comparative des trois méthodes principales d'estimation de  $K(h)$  aux interfaces soient la moyenne arithmétique, la moyenne harmonique et la moyenne géométrique. Ils ont montré que l'utilisation de la moyenne géométrique des conductivités de couches adjacentes

conduisait au meilleur résultat. Richter et al. [1990] montrent que l'utilisation de la moyenne arithmétique ou géométrique donne le même résultat si l'épaisseur des mailles,  $dz$ , est suffisamment petite. La moyenne arithmétique, plus simple à calculer, sera utilisée dans la programmation:

$$K_{z+\Delta z/2} = \frac{1}{2}(K_{z+\Delta z} + K_z) \quad (3.12)$$

L'ensemble de ces considérations nous permettent de poser l'équation en différences finies à insérer dans les mailles ( $z = 2$  à  $n-1$ ) de chaque colonne:

$$h^{t+\Delta t} = h^t + \frac{\Delta t}{Cc_z^t \Delta z} \left[ \left( \frac{K_{z+\Delta z}^t + K_z^t}{2} \right) \left( \frac{h_{z+\Delta z}^{t*} - h_z^{t*}}{\Delta z} - 1 \right) - \left( \frac{K_z^t + K_{z-\Delta z}^t}{2} \right) \left( \frac{h_z^{t*} - h_{z-\Delta z}^{t*}}{\Delta z} - 1 \right) \right] \quad (3.13)$$

### Conditions initiales

$$h = h_i \quad \forall z, t = 0 \quad (3.14)$$

### Conditions limites

Limite supérieure: Débit d'injection constant - Condition de Neumann

$$q = q_{inj} \quad z = 0, \forall t \quad (3.15)$$

Pour déterminer l'équation à imposer dans la maille supérieure, on pose un flux d'injection constant,  $q_{inj}$ , dans l'équation (3.9):

$$Cc_z^t \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = - \frac{(q_{z+\Delta z/2} - q_{inj})}{\Delta z} \quad (3.16)$$

$$Cc_z^t \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta Z} \left[ K_{z+\Delta z/2}^t \left( \frac{h_{z+\Delta z}^{t*} - h_z^{t*}}{\Delta Z} - 1 \right) + q_{inj} \right] \quad (3.17)$$

$$h^{t+\Delta t} = h^t + \frac{\Delta t}{Cc_z^t \Delta Z} \left[ \left( \frac{K_{z+\Delta z}^t + K_z^t}{2} \right) \left( \frac{h_{z+\Delta z}^{t*} - h_z^{t*}}{\Delta Z} - 1 \right) + q_{inj} \right] \quad (3.18)$$

Limite inférieure: Gradient nul - Condition de Neumann

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 0 \quad z = n, \forall t \quad (3.19)$$

Puisqu'il n'y avait pas de conditions maintenues à la base des colonnes (pression matricielle constante) lors des essais en laboratoire et que  $h$  variait au cours de l'essai, il est impossible de poser un  $h$  fixe dans la dernière maille. On considère alors que ce qui traverse la dernière maille est identique à ce qui sort de la colonne résultant en un gradient nul. En incluant le gradient nul dans l'équation (3.11):

$$Cc_z^t \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta Z} \left[ K_{z+\Delta z/2}^t (0 - 1) - K_{z-\Delta z/2}^t \left( \frac{h_z^{t*} - h_{z-\Delta z}^{t*}}{\Delta Z} - 1 \right) \right] \quad (3.20)$$

$$Cc_z^t \frac{h^{t+\Delta t} - h^t}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta Z} \left[ - \left( \frac{K_{z+\Delta z}^t + K_z^t}{2} \right) - \left( \frac{K_z^t + K_{z-\Delta z}^t}{2} \right) \left( \frac{h_z^{t*} - h_{z-\Delta z}^{t*}}{\Delta Z} - 1 \right) \right] \quad (3.21)$$

Puisque  $h_{z+\Delta z} = h_z$ ,  $K_{z+\Delta z} = K_z$ . L'équation finale à programmer dans la dernière maille est la suivante:

$$h^{t+\Delta t} = h^t + \frac{\Delta t}{Cc_z^t \Delta Z} \left[ -K_z^t - \left( \frac{K_z^t + K_{z-\Delta z}^t}{2} \right) \left( \frac{h_z^{t*} - h_{z-\Delta z}^{t*}}{\Delta Z} - 1 \right) \right] \quad (3.22)$$

### Critères de stabilité

Dans le cas des méthodes explicites, le critère à respecter est le suivant:

$$\Delta t < \frac{r \Delta z^2}{D_{\max}} \quad (3.23)$$

où  $r$  est un coefficient arbitraire.

Dans le cas des méthodes implicites appliquées au non saturé, de plus grands pas de temps peuvent être utilisés ( $\Delta t = 5$  sec. au lieu de  $\Delta t = 0,4$  sec. (explicite), [Haverkamp et al. 1977]).

Il n'y a pas de critère préétabli, les conditions de stabilité sont déterminées par «essais et erreurs» puisqu'elles dépendent du degré de non linéarité des équations. Les pas d'espace et de temps varient d'un essai à l'autre en fonction des conditions initiales imposées. Les pas d'espace et de temps maximaux qui conduisent à une résolution sans instabilité numérique sont:  $\Delta z = 3$  cm et  $\Delta t = 15$  sec. Les conditions extrêmes nécessitaient un  $\Delta t = 1,5$  sec.

#### 3.2.2.2 Estimation des propriétés hydrodynamiques

Les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  interviennent dans la résolution de l'équation de Richards (3.13), (3.18) et (3.22). Ces relations, qui diffèrent pour chaque sol, sont représentées par des expressions analytiques qui forment des fonctions continues pouvant être insérées dans le modèle. Les paramètres empiriques de ces expressions sont habituellement déterminés par ajustement avec les données expérimentales.

#### Sable

Au départ, en l'absence de mesures expérimentales de  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$ , les expressions analytiques décrivant ces deux relations ont été cherchées dans la littérature. Une brève revue de littérature a permis de cibler les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  décrivant différentes catégories de sable et pouvant être utilisées dans les simulations. Le tableau 3.1 fait une synthèse de ces différentes relations illustrées à la figure 3.4. Suite à la détermination de courbes de

désorption expérimentales, une relation  $h(\theta)$  a été déterminée par ajustement avec les valeurs expérimentales et la relation  $K(\theta)$  estimée à partir de cette dernière.

Tableau 3.2 Résumé des différentes relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  retenues dans la littérature

Références	Description du sol	$\theta_{sat}$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$K_{sat}$ (cm/h)	Relation $\theta(h)$	Relation $K(\theta)$
Haverkamp [1977]	sable	0,287	34,0	$\theta = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha +  h ^b} + \theta_r$	$K = K_s \frac{A}{A +  h ^\beta}$
Fuentes [1992]	sable de Grenoble (0,02-2 mm) 50% <0,3 mm	0,312	15,37	van Genuchten [1980]	Brooks and Corey [1964]
Wösten and van Genuchten [1988]	sable grossier sable siliceux (M50 = 140 $\mu$ m) $\rho = 1,52$ g/cm <sup>3</sup>	0,39	4,17	van Genuchten [1980]	van Genuchten [1980]
Mualem [1976]	sable (150-300 $\mu$ m) [Kastanek, 1971]	0,372	40,68	Brooks and Corey [1964]	Brooks and Corey [1964]
Mualem [1976]	sable de Molonglo River 80% (0,5-2 mm) 20% (0,1-0,5 mm) [Talsma, 1970]	0,277	4,8	Brooks and Corey [1964]	Brooks and Corey [1964]
Martins [1993]	sable de Fontainebleau sable siliceux (150-210 $\mu$ m) $\rho = 1,75$ g/cm <sup>3</sup>	0,32	27,74	van Genuchten [1980]	Brooks and Corey [1964]
Campbell [1974]	sable (Botany)	0,35	67,2	$\Psi = \Psi_c (\theta / \theta_s)^{-b}$	$K = K_s (\theta / \theta_s)^{2b+2}$
Campbell [1974]	silt sableux (Cecil Ap)	0,40	7,2	$\Psi = \Psi_c (\theta / \theta_s)^{-b}$	$K = K_s (\theta / \theta_s)^{2b+2}$

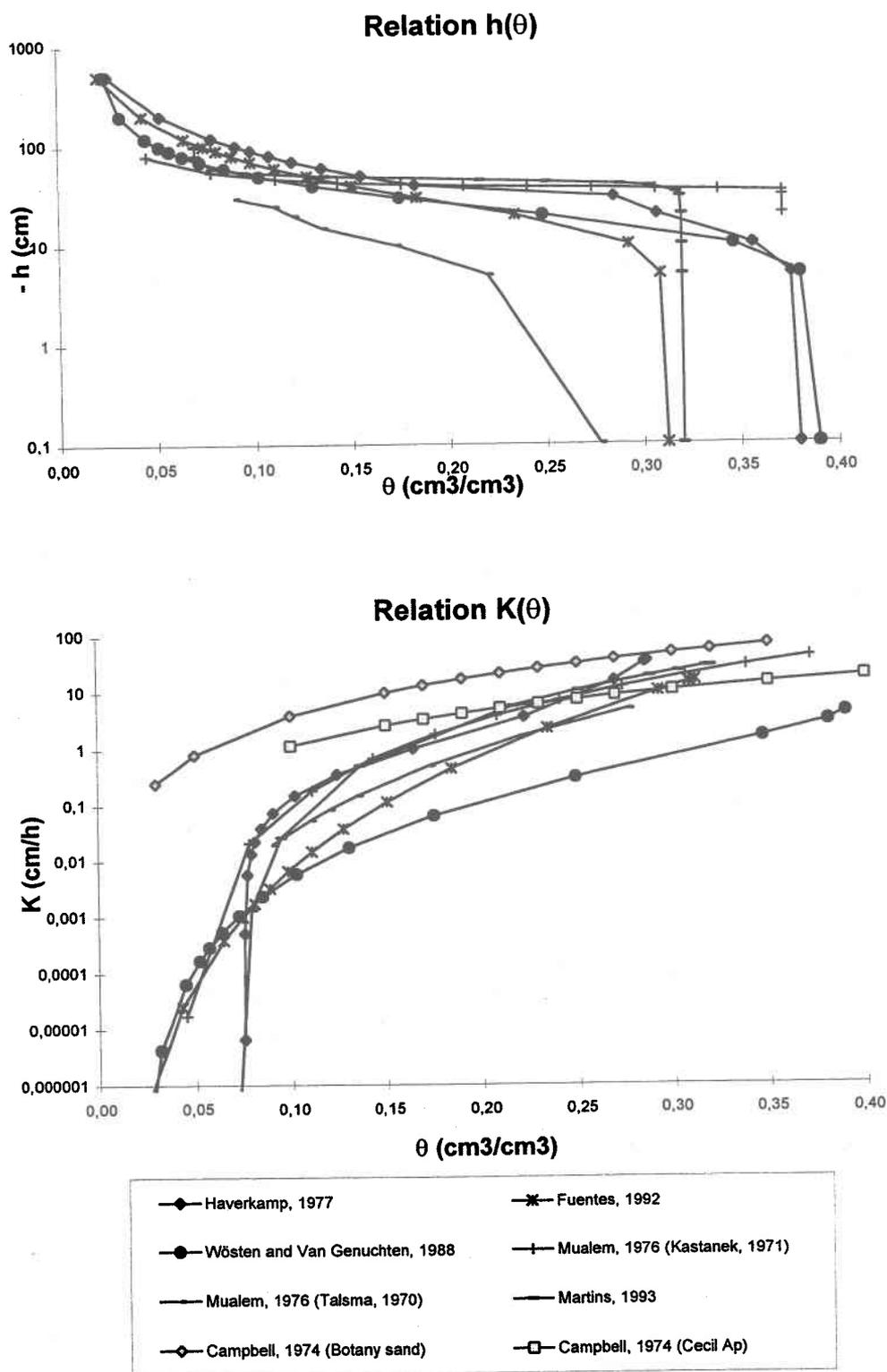


Figure 3.4 Différentes relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  retenues dans la littérature

### 3.2.3 Modélisation du transport des solutés

L'équation classique qui décrit le transport d'un soluté conservatif et non-adsorbant est la suivante:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (v \theta C)}{\partial z} \quad (3.24)$$

En régime transitoire, l'équation est décomposée en dérivées partielles:

$$\underbrace{\theta \frac{\partial C}{\partial t}}_a + \underbrace{C \frac{\partial \theta}{\partial t}}_b = \theta \underbrace{D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}}_c + \theta \underbrace{\frac{\partial D}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z}}_d + \underbrace{D \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z}}_e - \underbrace{v \theta \frac{\partial C}{\partial z}}_f - \underbrace{v C \frac{\partial \theta}{\partial z}}_g - \underbrace{\theta C \frac{\partial v}{\partial z}}_h \quad (3.25)$$

Les termes (b), (d), (e), (g) et (h) sont considérés négligeables devant les autres puisque les variations de concentration dans le temps et l'espace prédominent sur les variations de teneur en eau, de vitesse et de dispersion lorsque  $\Delta z$  est suffisamment petit. L'équation (3.25) se simplifie ainsi sous la forme suivante:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \theta D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \theta v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z}$$

#### 3.2.3.1 Résolution numérique

##### Discrétisation et schéma utilisés

Le schéma centré est également utilisé pour résoudre numériquement l'équation de transport.

La variable de calcul, C, est définie aux points de calcul (z, t). L'équation (3.26) convertie en différences finies avec un schéma centré se présente sous la forme suivante:

$$C_z^{t+\Delta t} = C_z^t + \frac{D\Delta t}{\Delta z^2} (C_{z+\Delta z}^{t*} - 2C_z^{t*} + C_{z-\Delta z}^{t*}) - \frac{v\Delta t}{\Delta z} \frac{(C_{z+\Delta z}^{t*} - C_{z-\Delta z}^{t*})}{2} \quad (3.27)$$

L'équation est résolue implicitement.

### Conditions initiales

$$C = C_i = 0 \quad z > 0, t = 0 \quad (3.28)$$

### Conditions limites

Limite supérieure: Concentration imposée - Condition de Dirichlet

$$C = C_0 \quad z = 0, \forall t \quad (3.29)$$

Limite inférieure: Flux dispersif nul - Condition de Cauchy

$$D \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad z = n, \forall t \quad (3.30)$$

L'équation de la maille inférieure est la suivante:

$$C_n^{t+\Delta t} = C_n^t + \frac{D\Delta t}{\Delta z^2} (C_{n-\Delta z}^{t*} - C_n^{t*}) - \frac{v\Delta t}{\Delta z} (C_n^{t*} - C_{n-\Delta z}^{t*}) \quad (3.31)$$

### Critères de stabilité

Le critère de stabilité pour la méthode implicite corrigée est le suivant [U.S. Geol. Survey 1970 dans Richter 1990]:

$$\frac{D}{v(\Delta z + v\Delta t)} \geq 0,5 \quad (3.32)$$

Pour déterminer les pas de temps et d'espace, il faut cibler la vitesse la plus élevée parmi l'ensemble des vitesses obtenues de l'équation de Richards. À partir de cette vitesse, on détermine les pas de temps et d'espace qui satisfont le critère de stabilité de l'équation de transport.

### 3.2.3.2 Détermination des paramètres de transport

En régime permanent, la vitesse et le coefficient de dispersion sont constants et l'équation de transport peut être résolue directement. Ce n'est pas le cas dans la zone non saturée où le régime est transitoire et où la vitesse varie dans le temps et dans l'espace en fonction de la teneur en eau. Porro and Wierenga [1993] ont montré dans leurs travaux que les paramètres de transport,  $D$  et  $R$ , déterminés en régime permanent décrivent de façon satisfaisante le transport en régime transitoire. Seule la vitesse change au cours du temps et dans l'espace au sein d'une même simulation.

#### Vitesse

Suite à la résolution numérique de l'équation de Richards, on peut déterminer le flux entre chaque maille à partir de la loi de Darcy et ainsi déterminer la vitesse de transport comme moyenne des flux aux frontières:

$$v = \frac{q_{z-\Delta z/2} + q_{z+\Delta z/2}}{2\theta} \quad (3.33)$$

l'équation (3.26) devient:

$$C_z^{t+\Delta t} = C_z^t + \frac{D\Delta t}{\Delta z^2} (C_{z+\Delta z}^{t*} - 2C_z^{t*} + C_{z-\Delta z}^{t*}) - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( \frac{q_{z-\Delta z/2} + q_{z+\Delta z/2}}{2\theta} \right) \frac{(C_{z+\Delta z}^{t*} - C_{z-\Delta z}^{t*})}{2} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \text{où} \quad q_{z+\Delta z/2} &= -\left( \frac{K_{z+\Delta z} + K_z}{2} \right) \left( \frac{h_{z+\Delta z} - h_z}{\Delta z} - 1 \right) \\ q_{z-\Delta z/2} &= -\left( \frac{K_{z-\Delta z} + K_z}{2} \right) \left( \frac{h_z - h_{z-\Delta z}}{\Delta z} - 1 \right) \end{aligned} \quad (3.35)$$

À la limite inférieure:

$$q_{n+\Delta z/2} = q_{n-\Delta z/2}, \quad \text{donc} \quad v = \frac{q_{n-\Delta z/2}}{\theta} \quad (3.36)$$

et l'équation (3.31) devient:

$$C_n^{t+\Delta t} = C_n^t + \frac{D\Delta t}{\Delta z^2} (C_{n-\Delta z}^{t^*} - C_n^{t^*}) - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( \frac{q_{n-\Delta z/2}}{\theta} \right) (C_n^{t^*} - C_{n-\Delta z}^{t^*}) \quad (3.37)$$

### Dispersion

Le coefficient de dispersion utilisé dans l'équation de transport est constant à l'intérieur d'une même simulation. Il est déterminé à partir de la courbe de fuite expérimentale par la méthode des moments statistiques [Fried and Combarous 1971]. La courbe de fuite à un temps donné peut être représentée par une fonction de distribution normale. Cette propriété est utilisée pour calculer l'écart-type,  $\sigma$ , de la courbe de fuite ( $C/C_0$  vs  $x$ ) et la largeur de la zone de transition qui est définie par la différence entre  $x$  à  $C/C_0 = 0,16$  et  $x$  à  $C/C_0 = 0,84$  (figure 3.5).

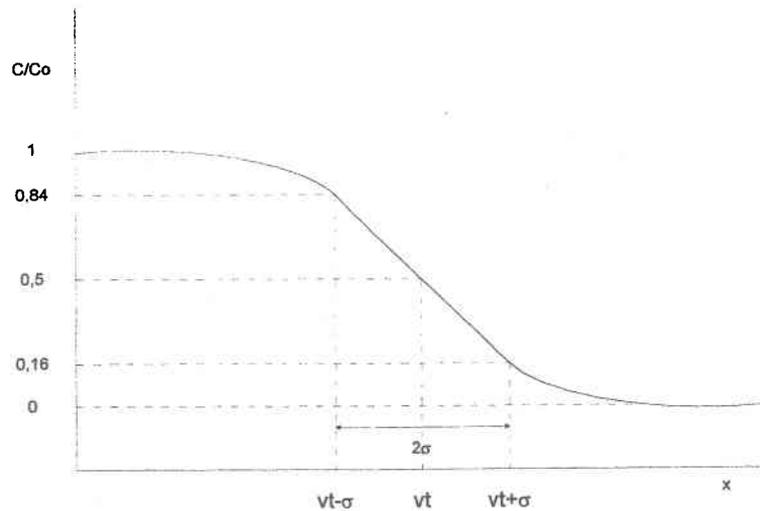


Figure 3.5 Courbe de fuite représentée par une fonction de distribution normale

La largeur de la zone de transition permet de déterminer D:

$$\begin{aligned} e &= 2\sigma = x_{0,16} - x_{0,84} = 2(2Dt)^{1/2} \\ D &= (x_{0,16} - x_{0,84})^2 / 8t \end{aligned} \quad (3.39)$$

Lorsque les mesures se font à une distance donnée, à la base de la colonne dans notre cas, le suivi des concentrations se fait dans le temps. Le même raisonnement basé sur la représentation de la fonction permet de formuler l'équation suivante pour déterminer D:

$$D = \frac{1}{8} \left[ \left( x - vt_{0,16} \right) / t_{0,16}^{1/2} - \left( x - vt_{0,84} \right) / t_{0,84}^{1/2} \right]^2 \quad (3.40)$$

Le coefficient de dispersion, D, a été ainsi déterminé pour chaque essai en colonne.

Les deux termes négligés dans le développement en série de Taylor lors du passage de l'équation différentielle en différences finies engendre une erreur numérique que l'on nomme dispersion numérique. Une correction correspondant à la somme de ces deux termes négligés est apportée au terme de dispersion hydrodynamique qui prend la forme suivante:

$$D^* = D - \beta \frac{v\Delta x}{2} - \frac{v^2 \Delta t}{2} \quad (3.41)$$

où  $\beta$  est un facteur signe prenant les valeurs de 1 pour un schéma aval, 0 pour un schéma centré et -1 pour un schéma amont.

Puisque la vitesse varie dans le domaine, la dispersion numérique doit être corrigée dans chaque maille. Il y a donc une vitesse et une dispersion spécifiques par cellule de calcul.

### 3.2.3.3 Comparaison avec la solution analytique

La solution analytique d'une injection continue est obtenue par l'intégration de la solution d'une injection instantanée. Trois solutions analytiques différentes sont obtenues en fonction de la condition imposée à la limite amont. Bond [1986] rapporte que l'équation de Ogata and Banks [1961], recommandée par van Genuchten and Parker [1984] est la plus appropriée pour analyser la concentration à l'effluent de colonnes de longueur finie. La solution de Ogata and Banks [1961] correspondant à la condition de Dirichlet (concentration imposée) est:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left( \frac{vx}{D} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x + vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (3.42)$$

où  $\operatorname{erfc}$  est la fonction erreur complémentaire

Les courbes de fuite obtenues par simulation numérique ont été comparées à cette solution analytique calculée avec une vitesse constante correspondant à la vitesse finale calculée numériquement.

## 4. RÉSULTATS ET DISCUSSION

---

### 4.1 Essais en laboratoire

Des essais de traçage ont été réalisés sur les trois milieux poreux. Les courbes de fuite résultantes permettent de mettre en évidence l'influence de la teneur initiale en eau ( $\theta$ ) et du flux d'injection ( $q_{inj}$ ) sur la vitesse de transport, de même que préciser le type d'écoulement. Les courbes de fuite sont exprimées en fonction du temps, de  $V/V_{sat}$  (volume d'eau injecté divisé par le volume d'eau contenu dans la colonne à saturation) ou de  $V/V_0$  (volume d'eau injecté divisé par le volume d'eau contenu initialement dans la colonne). La représentation en  $V/V_{sat}$  élimine l'influence du flux d'injection variable et permet de présenter les courbes de fuite en fonction de leur vitesse relative. La représentation en  $V/V_0$  permet de préciser le type d'écoulement en vérifiant si toute l'eau initialement présente dans la colonne a été expulsée avant la sortie du traceur. Dans ce cas lorsque  $C/C_0=0,5$ ,  $V/V_0 \geq 1$ . Les courbes de fuite se terminent lorsque  $C/C_0=1$ . Expérimentalement, la concentration d'injection ( $C_0$ ) diminuait légèrement avec le temps dû à la condensation dans les bassins d'alimentation. Selon le moment de la mesure expérimentale de  $C_0$ ,  $C/C_0$  finale pouvait être égale ou légèrement inférieure ou supérieure à 1.

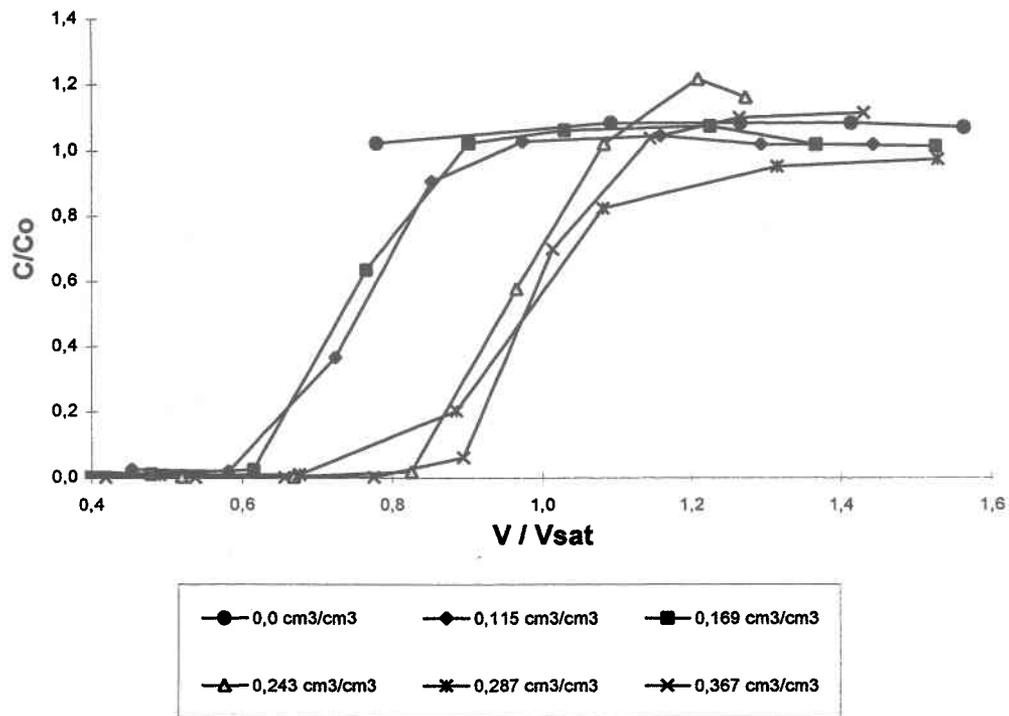
#### 4.1.1 Sable

##### 4.1.1.1 Influence de la teneur initiale en eau

Pour un flux d'injection du même ordre de grandeur, l'apparition du traceur est plus rapide lorsque les teneurs initiales en eau sont plus faibles (figure 4.1). Ceci peut s'expliquer par la plus faible quantité d'eau à expulser avant la sortie du traceur. Les vitesses de transport diminuent avec une augmentation de  $\theta$  (tableau 4.1).

Tableau 4.1 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le sable

$\theta$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/h)	v (cm/h)
0,0	3,44	12,86
0,115	2,89	10,26
0,169	3,16	11,20
0,243	3,02	8,58
0,287	3,26	8,57
0,367	2,63	7,33

Figure 4.1 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le sable ( $q_{inj} \sim 3 \text{ cm/h}$ )

#### 4.1.1.2 Influence du flux d'injection

Pour une teneur initiale en eau similaire, la vitesse de transport augmente avec le flux d'injection. La figure 4.2a qui présente les courbes de fuite exprimées en temps montre l'influence du flux d'injection sur la vitesse apparente de transport lorsque  $\theta_i \sim 0,27 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ . La figure 4.2b présente les courbes de fuite ( $\theta_i \sim 0,27 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) exprimées en volume de renouvellement. Lorsque les flux d'injection sont élevées, le volume de renouvellement requis pour l'apparition du traceur est plus faible. Les vitesses de transport relatives sont donc plus élevées. L'influence du flux d'injection est la même lorsque  $\theta_i \sim 0,15$  et  $0,36 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ .

#### 4.1.1.3 Type d'écoulement

La figure 4.3a qui présente les courbes de fuite d'essais à différentes teneurs initiales en eau en fonction de  $V/V_0$  montre un écoulement de type piston (FIFO). La courbe de fuite de l'essai à saturation ( $\theta_i = 0,367 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) passe par le point ( $C/C_0 = 0,5$ ,  $V/V_0 = 1$ ), ce qui indique que toute l'eau contenue dans la colonne saturée est expulsée avant la sortie du traceur. L'écoulement est également de type piston pour les autres essais avec de plus faibles  $\theta_i$  puisqu'à  $C/C_0 = 0,5$ ,  $V/V_0 > 1$  ce qui indique qu'il y a eu emmagasinement d'une partie de l'eau dans la colonne avant qu'un écoulement ait lieu à la sortie de la colonne. L'expulsion de l'eau initiale de la colonne est complétée avant la sortie du traceur. La figure 4.3b montre trois essais complétés avec  $\theta_i \sim \theta_c$ . Après avoir atteint  $C/C_0 = 1$ , le traceur a été supprimé de l'eau injectée et les essais se sont prolongés jusqu'à  $C/C_0 = 0$ . Il ne semble pas y avoir de fraction immobile, ni de diffusion lente puisqu'aucune traînée n'est observée. Ceci est habituel pour un sable uniforme.

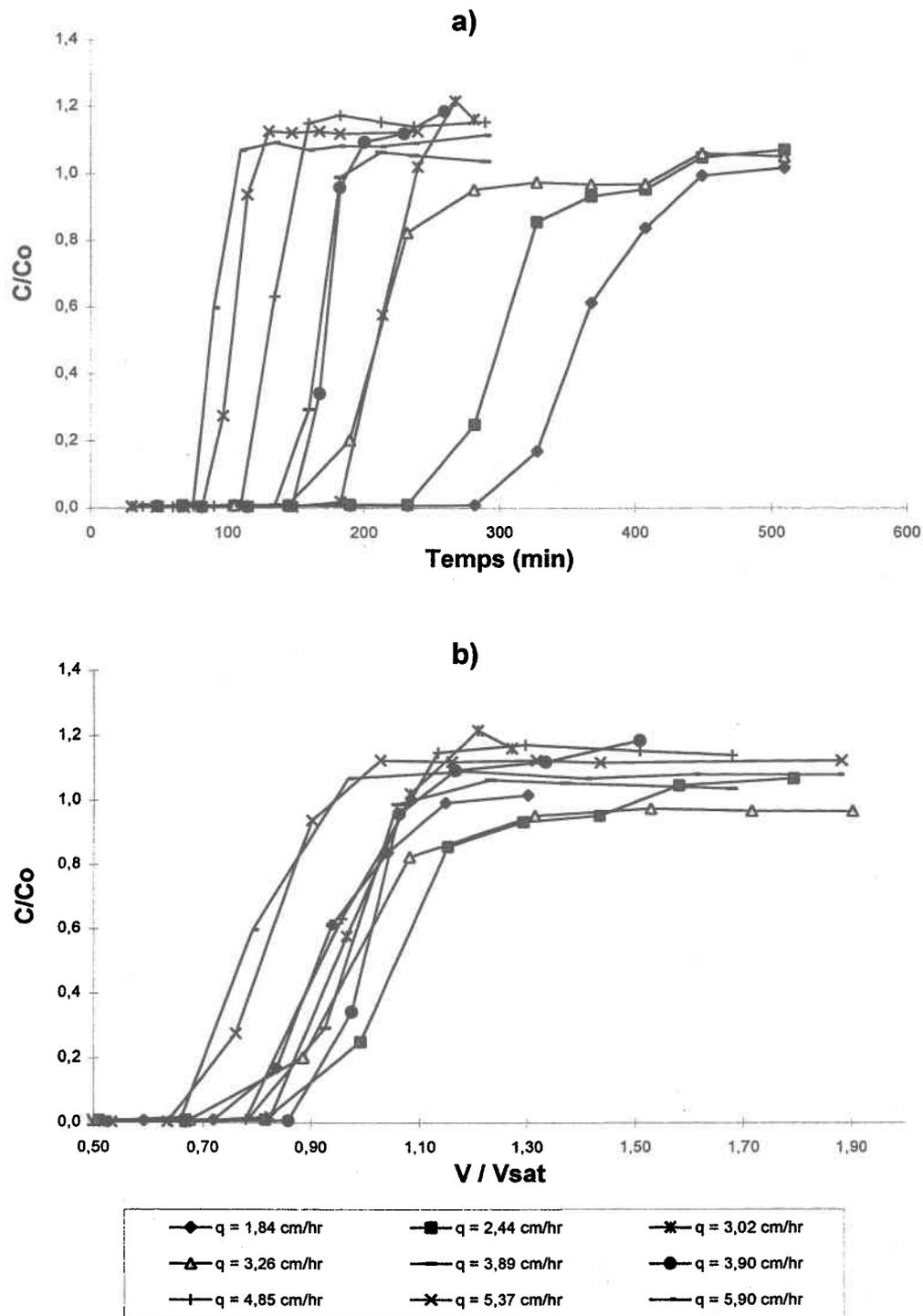


Figure 4.2 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans le sable ( $\theta_i \sim 0,27 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement

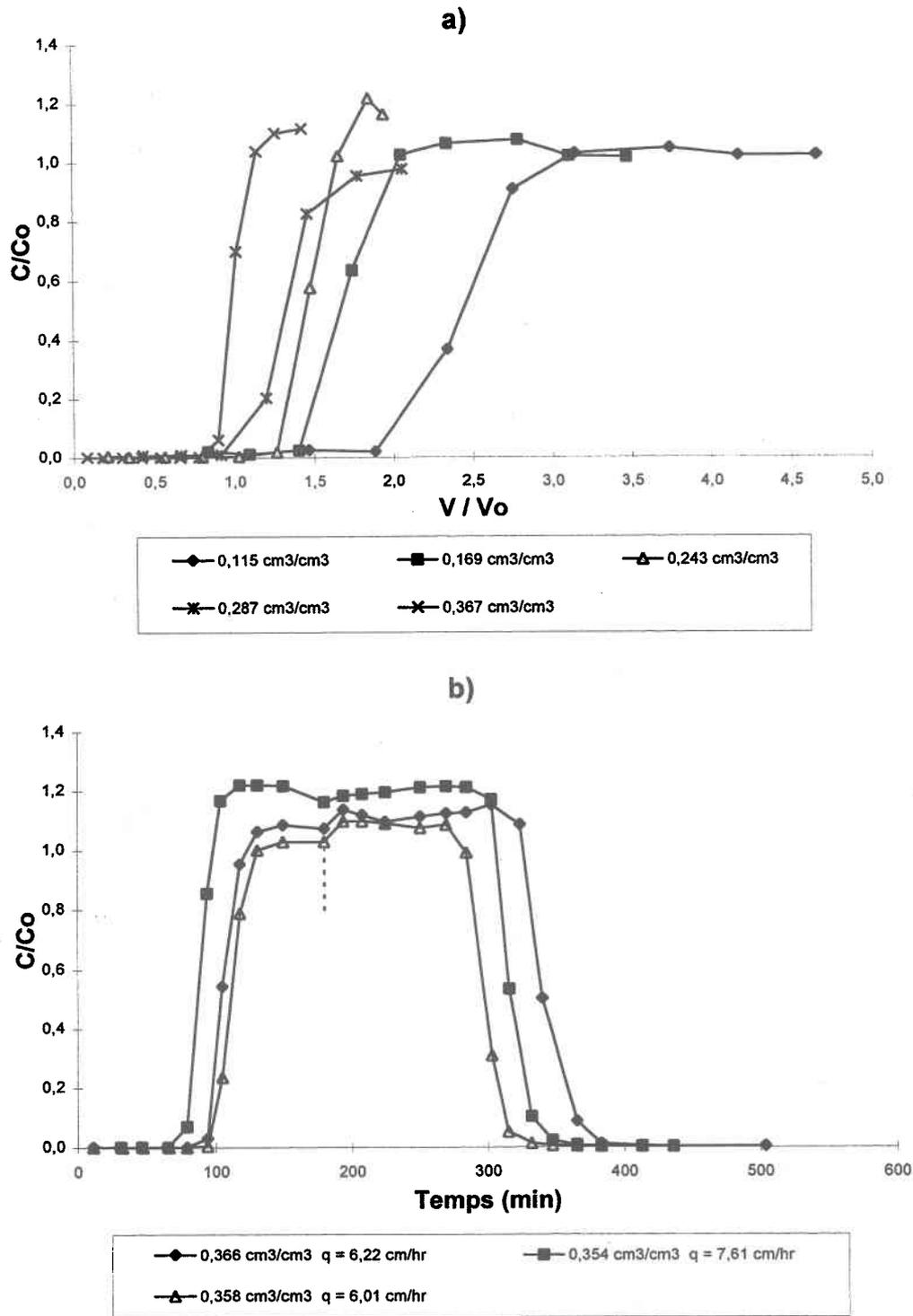


Figure 4.3 Mise en évidence d'un écoulement de type piston dans le sable a) pour différentes teneurs initiales en eau ( $q_{inj} \sim 3 \text{ cm/h}$ ) et b) sur les courbes de fuite complètes (pas de traînées)

## 4.1.2 Tourbe

### 4.1.2.1 Influence de la teneur initiale en eau

La figure 4.4 indique une vitesse de transport plus grande pour des  $\theta_i$  plus faibles. L'ordre de grandeur des vitesses apparaît au tableau 4.2. La vitesse de transport dans la tourbe est moins rapide que dans le sable malgré une conductivité hydraulique à saturation plus élevée dans la tourbe ( $K_{sat}(\text{tourbe}) = 8,5 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$  vs  $K_{sat}(\text{sable}) = 5,1 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$ ). La porosité cinématique ( $n_c$ ) de la tourbe qui est à peu près le double de celle du sable et les relations  $K(\theta)$  très différentes expliquent cet écoulement plus lent.

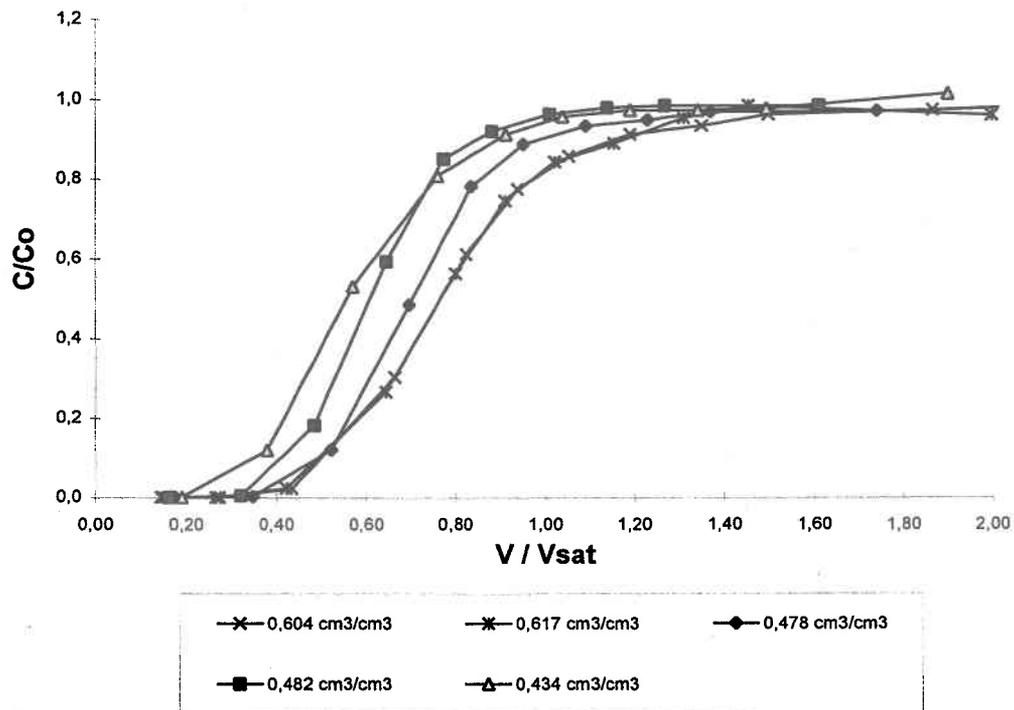


Figure 4.4 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans la tourbe ( $q_{inj} \sim 7,8 \text{ cm/h}$ )

Tableau 4.2 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans la tourbe

$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$q_{inj}$ (cm/h)	$v$ (cm/h)
0,434	7,89	19,13
0,478	8,04	13,86
0,482	7,40	14,81
0,604	7,93	12,56
0,617	7,65	12,17

#### 4.1.2.2 Influence du flux d'injection

Le flux d'injection a une influence sur la vitesse apparente de transport comme l'illustre la figure 4.5a. L'augmentation du flux d'injection entraîne une apparition plus rapide du traceur à la base de la colonne. Le flux d'injection a également une influence sur la vitesse relative de transport (figure 4.5b). La courbe de fuite résultant du flux d'injection le plus faible se démarque de l'ensemble des essais avec une apparition tardive du traceur. Ce comportement est similaire à celui observé sur le sable.

#### 4.1.2.3 Type d'écoulement

L'écoulement dans la tourbe est également de type piston (FIFO) puisqu'à  $C/C_0=0,5$ ,  $V/V_0 \approx 1$  (figure 4.6a). Les essais réalisés avec la tourbe ont une teneur initiale minimale de l'ordre de la capacité au champ. Il n'y avait donc pas d'emménagement avant le début de l'écoulement. La courbe de fuite a été complétée pour trois essais avec  $\theta_i \sim \theta_c$  (figure 4.6b). Tout comme le sable, il n'y a pas de traînée, donc pas d'évidence d'une fraction d'eau immobile ou d'une diffusion lente entre deux systèmes de pores.

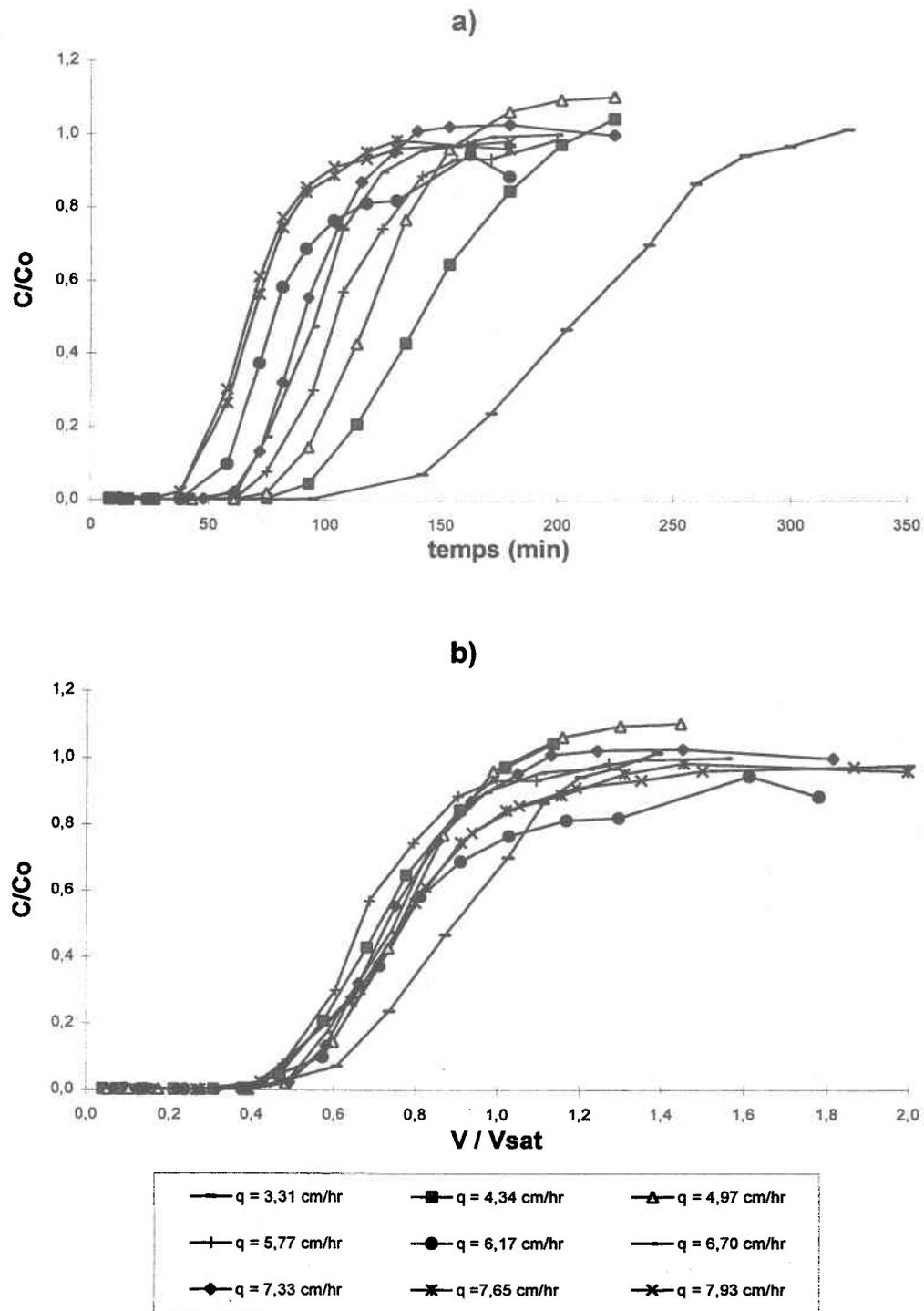


Figure 4.5 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans la tourbe ( $\theta_i \sim 0,635 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement

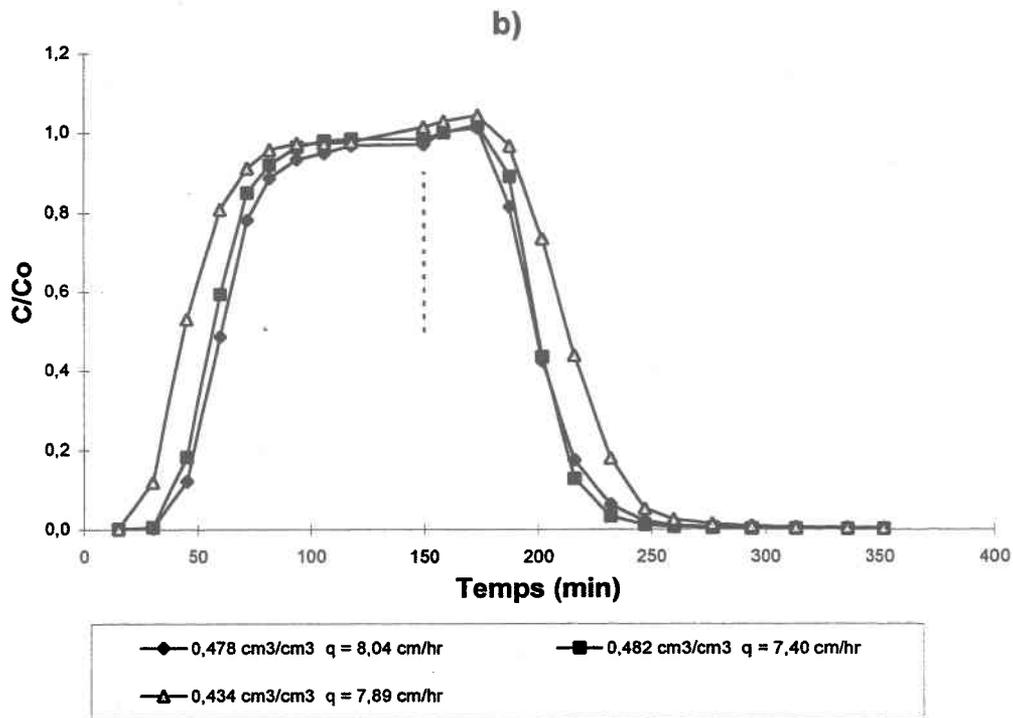
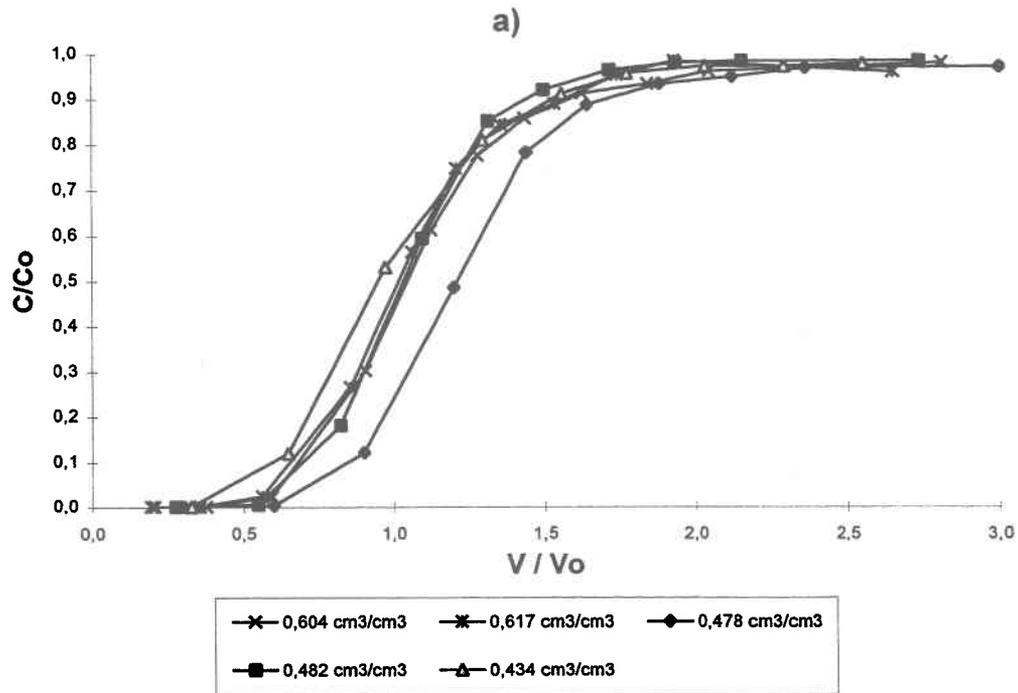


Figure 4.6 Mise en évidence d'un écoulement de type piston dans la tourbe a) pour différentes teneurs initiales en eau ( $q_{inj} \sim 7,8$  cm/h) et b) sur les courbes de fuite complètes (pas de traînées)

### 4.1.3 Mélange

#### 4.1.3.1 Influence de la teneur initiale en eau

La teneur initiale en eau a une influence sur la courbe de fuite (figure 4.7). La sortie du traceur est plus rapide lorsque  $\theta_i$  est faible.

#### 4.1.3.2 Influence du flux d'injection

Le flux d'injection influence le temps de sortie du traceur. Une injection plus rapide entraîne également une sortie plus rapide du traceur comme l'illustre la figure 4.8a. Contrairement au sable et à la tourbe, le flux d'injection ne semble pas avoir d'influence sur la vitesse relative de transport (figure 4.8b).

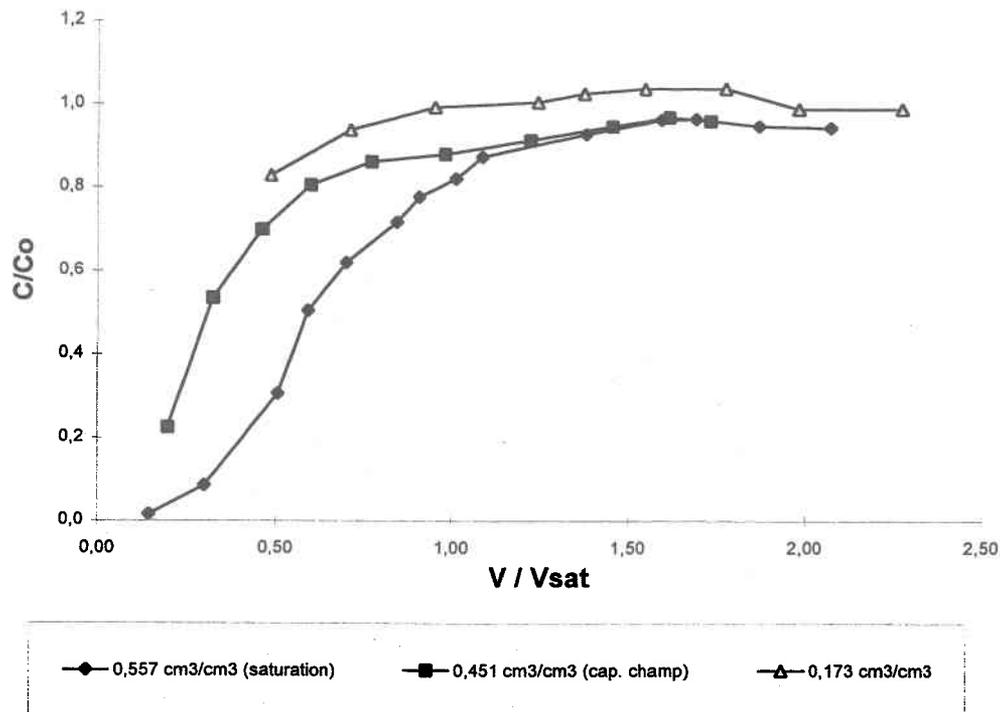


Figure 4.7 Influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse de transport dans le mélange ( $q_{inj} \sim 6,4$  cm/h)

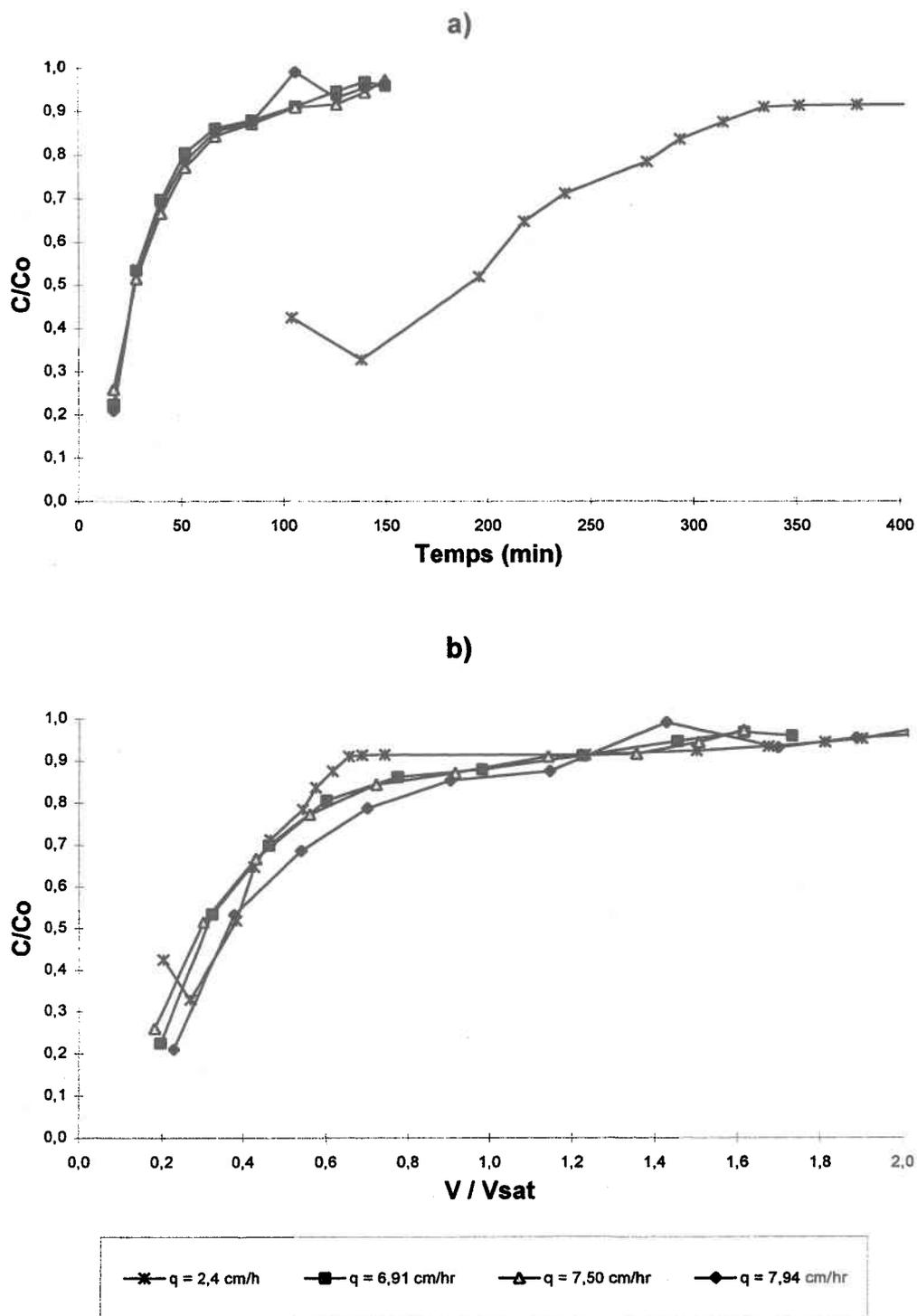


Figure 4.8 Influence du flux d'injection sur la vitesse de transport dans le mélange ( $\theta_i \sim 0,424 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ) a) vitesses apparentes exprimées en temps et b) vitesses relatives exprimées en volume de renouvellement

#### 4.1.3.3 Type d'écoulement

Les courbes de fuite de la figure 4.7 sont typiques d'un écoulement de type LIFO et laissent supposer un écoulement préférentiel et une fraction d'eau plus ou moins immobile. À  $C/C_0=0,5$ , la courbe de fuite à saturation, de même que les deux autres courbes, montrent un  $V/V_{sat}<1$  signifiant qu'une partie du traceur est apparue à la base de la colonne avant que toute l'eau initialement présente dans la colonne soit expulsée. Le premier échantillon mesuré contient déjà une proportion non négligeable du traceur qui est d'autant plus importante que la teneur initiale en eau est faible. Les courbes de fuite à saturation et à capacité au champ n'atteignent pas rapidement  $C/C_0=1$ . De même, les courbes de fuite complètes illustrées à la figure 4.9 n'atteignent pas rapidement  $C/C_0=1$  lors de l'injection du traceur, ni  $C/C_0=0$  lors de l'injection de l'eau. Cette longue traînée observée est représentative d'une diffusion réversible d'une phase immobile vers une phase mobile. Ce processus de rediffusion est lent en partie à cause de la diminution du gradient de concentration entre les phases mobiles et immobiles [Zurmühl and Durner 1996].

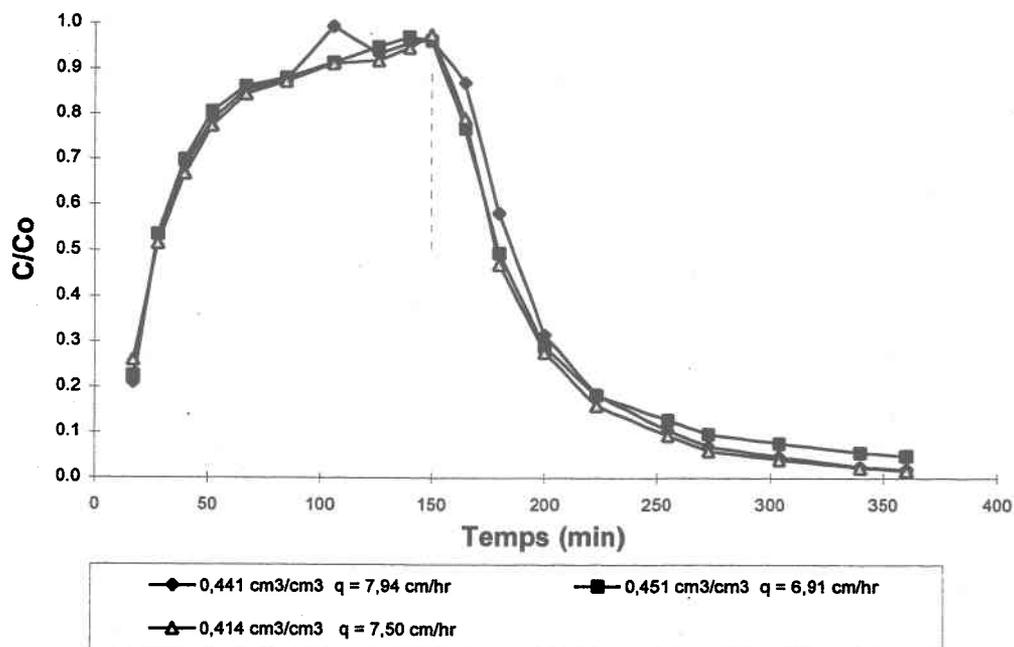


Figure 4.9 Mise en évidence d'un écoulement de type LIFO et d'une fraction d'eau immobile sur les courbes de fuite complètes (présence de traînées dans la restitution)

#### 4.1.4 Discussion

Les courbes de fuite expérimentales des différents milieux poreux montrent l'influence de la teneur initiale en eau sur la vitesse d'écoulement ( $\theta$  décroissante,  $v$  croissante). Freeze [1969] mentionne que de tous les paramètres contrôlant l'infiltration, la teneur initiale en eau est sans aucun doute le plus important. De toute évidence, le flux d'injection influence la vitesse apparente de transport ( $q_{inj}$  croissant,  $v$  croissante), de même que la vitesse relative de transport dans le cas du sable et de la tourbe. Le transport dans le milieu poreux est plus rapide à partir d'un certain débit d'injection. Roth et al. [1991] ont de même remarqué dans leur étude que lorsque l'intensité des précipitations atteignait un certain seuil, un écoulement plus rapide s'activait dans le milieu. Pour de faibles taux d'infiltration, la matrice du sol n'est pas saturée et les caractéristiques de transport dépendent faiblement du flux d'infiltration. Lorsque le taux d'infiltration excède un certain seuil, dépendant aussi du contenu en eau initial, la matrice se sature en certains points du profil et l'eau peut alors s'écouler préférentiellement dans le profil. De même, Zurmühl and Durner [1996] ont observé que lorsqu'un flux d'infiltration relativement élevé était appliqué à un sol humide, un écoulement rapide en résultait. Ce patron disparaissait si la quantité totale d'eau appliquée était faible.

Expérimentalement, les milieux poreux étudiés étaient homogènes dans la colonne et ne présentaient pas de stratification. Glass et al. [1989], dans leurs travaux sur les milieux stratifiés, ont mis en évidence un transport préférentiel de soluté causé par l'instabilité du front d'écoulement à l'interface texturale de milieux contrastés (sable fin superposé à un sable grossier). Le développement d'une digitation est plus probable dans le cas où le sol est initialement sec ou humide de façon non uniforme. Dans le cas où le sol est uniformément humide, il peut se former des vagues mais le développement d'une digitation importante est alors moins probable.

Les résultats expérimentaux soulignent l'influence de la teneur initiale en eau et du flux d'injection, de même que l'absence d'écoulement préférentiel dans le sable et la tourbe. Un flux d'injection élevé peut cependant engendrer un écoulement rapide dans ces milieux.

L'intensité de la pluie ne peut être contrôlée, mais une humidité uniforme pourrait tentativement être maintenue dans un contexte réel pour minimiser la vitesse de transport et le développement d'une digitation avec écoulement préférentiel.

L'influence de la teneur initiale en eau et du flux d'injection sur la vitesse de transport s'ajoute au problème d'écoulement préférentiel dans le mélange. Le sable silteux et les composantes végétales du mélange forment un milieu hétérogène avec un système de pores non homogène propice à la présence d'une fraction d'eau immobile et d'une macroporosité. L'importante quantité de résidu végétal grossier qui compose le mélange est sans doute à l'origine de l'écoulement préférentiel opérant dans le milieu. Malgré la faible valeur de conductivité hydraulique à saturation, les conditions d'écoulement semblent favoriser la sortie hâtive du traceur et donc d'un contaminant potentiel.

## **4.2 Modélisation des mécanismes de transfert en milieux poreux**

L'ensemble de ces processus complexes, même dans un milieu poreux homogène, montre la difficulté rencontrée dans un processus de modélisation et de suivi de contaminants dans la zone non saturée. Les résultats de la modélisation de l'écoulement et du transport des bromures dans le sable sont présentés dans cette section. Les courbes de fuite simulées sont confrontées aux courbes de fuite expérimentales.

### **4.2.1 Analyse de sensibilité**

Un profil d'écoulement différent est généré en fonction du type de sol. Les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  qui apparaissent dans l'équation de Richards caractérisent le sol. Une analyse de sensibilité sur les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  a été réalisée pour évaluer l'impact du choix de ces relations sur la validité du modèle.

#### 4.2.1.1 Relations $h(\theta)$ et $K(\theta)$

L'examen du tableau 3.1 et de la figure 3.4 a permis de cibler trois relations empiriques tirées de la littérature. Au besoin, certains paramètres tels  $K_{sat}$ ,  $\theta_s$  et  $\theta_r$  étaient modifiés pour mieux décrire le sable utilisé expérimentalement pour finalement donner cinq relations empiriques distinctes auxquelles s'ajoute la relation empirique  $h(\theta)$  optimisée à partir des valeurs expérimentales de la courbe de désorption et la relation  $K(\theta)$  correspondante évaluée par la relation de van Genuchten [1980]. Le tableau 4.3 et la figure 4.10 présentent les six relations empiriques étudiées dans l'analyse de sensibilité.

#### 4.2.1.2 Résultats de l'analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité a été réalisée pour deux essais types. Les conditions initiales du premier essai en colonne simulé sont  $\theta_i=0,115 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$  et  $q_{inj}=2,89 \text{ cm/h}$  alors que celles du second sont  $\theta_i=0,304 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$  et  $q_{inj}=3,89 \text{ cm/h}$ . Les six simulations réalisées pour chaque essai sont présentées à la figure 4.11.

Globalement, les relations empiriques de la simulation e semblent les plus appropriées pour décrire l'écoulement et le transport des bromures dans ce sable. Les faibles différences entre les courbes caractéristiques  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  engendrent des écarts non négligeables entre les courbes de fuite. Il est surprenant de constater que la simulation basée sur les relations optimisées à partir de la courbe de désorption expérimentale ne conduit pas à des résultats concluants puisque dans les deux cas la vitesse de transport est largement surestimée. L'allure générale de la relation  $K(\theta)$  des simulations e et op sont similaires, seul l'ordre de grandeur varie puisque  $K_{sat}$  de la simulation e a été ajustée à la baisse pour mieux décrire les essais expérimentaux. Une diminution du  $K_{sat}$  dans la simulation op entraînerait une courbe  $K(\theta)$  similaire et donc des résultats similaires aux résultats de la simulation e. Il en ressort que l'estimation de la relation  $K(\theta)$  basée sur la connaissance de  $K_{sat}$  et de la courbe de désorption peut conduire à de mauvais résultats et que la mesure expérimentale de la courbe caractéristique  $K(\theta)$  demeure la solution la plus fiable. Différentes méthodes de mesure

expérimentale sont présentées dans Vauclin and Angulo-Jaramillo [1995]. Ces méthodes sont continuellement améliorées.

La relation empirique optimisée à partir de la courbe de désorption expérimentale est une fonction unimodale. Les points de la courbe de désorption indiquent une dépendance importante du potentiel de pression à la teneur en eau près de la saturation, caractéristique qui ne se reflète pas par une fonction unimodale (figure 4.10). Zurmühl and Durner [1996] note que le choix de certains modèles fonctionnels pour les propriétés hydrauliques entraîne des différences considérables dans la simulation de l'écoulement de l'eau et que la simulation du transport basée sur un modèle hydraulique bimodal reflète bien l'écoulement rapide engendré par un flux d'infiltration rapide.

#### 4.2.1.3 Profil de teneur en eau

Le choix des relations empiriques influence le profil de teneur en eau qui se développe suite à une infiltration. Les vitesses de transport calculées à partir de ce profil affectent directement les courbes de fuite. La figure 4.12 montre l'effet des différentes relations empiriques retenues sur le profil de teneur en eau pour  $\theta = 0,115 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$  et  $q_{inj} = 2,89 \text{ cm/h}$ . En comparant la teneur finale en eau ( $\theta$ ) simulée avec la valeur expérimentale ( $\theta$  expérimentale =  $0,312 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ), on s'aperçoit que les profils simulés qui reflètent le mieux le profil expérimental conduisent également aux courbes de fuite les plus proches de la courbe mesurée (figure 4.11).

Tableau 4.3 Relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  utilisées dans l'analyse de sensibilité

Références	Description du sol	Relation $\theta(h)$	Relation $K(\theta)$
Fuentes [1992]  <u>simulation a</u>	sable de Grenoble (0,02-2 mm) 50% <0,3 mm	van Genuchten [1980]  $\theta_s=0,38, \theta_r=0, hg=16,39$ $n=2,7925, p=2,2046$	Brooks and Corey [1964]  $m=1-2/n, \eta=2/mn + 2 + p$ $K_s(\text{cm/h})=18,4$
Wösten and van Genuchten [1988]  <u>simulation b</u>  <u>simulation c</u>	sable grossier sable siliceux (M50=140 $\mu\text{m}$ ) $\rho = 1,52 \text{ g/cm}^3$	van Genuchten [1980]  $\theta_s=0,39, \theta_r=0,02$ $n=2,43, \alpha=0,0551$  $\theta_s=0,39, \theta_r=0,02$ $n=2,43, \alpha=0,0551$	van Genuchten [1980]  $m=1-1/n, l=0,31$ $K_s(\text{cm/h})=4,17$  $m=1-1/n, l=0,31$ $K_s(\text{cm/h})=11,285$
Martins [1993]  <u>simulation d</u>  <u>simulation e</u>	sable de Fontainebleau sable siliceux (150-210 $\mu\text{m}$ ) $\rho = 1,75 \text{ g/cm}^3$	van Genuchten [1980]  $\theta_s=0,38, \theta_r=0,0698,$ $hg=45,4735, n=13,81215$  $\theta_s=0,38, \theta_r=0,03,$ $hg=45,4735, n=13,81215$	Brooks and Corey [1964]  $m=1-2/n, \eta=3,0212$ $K_s(\text{cm/h})=7$  $m=1-2/n, \eta=3,0212$ $K_s(\text{cm/h})=7$
Optimisation  <u>simulation op</u>	sable expérimental (50-500 $\mu\text{m}$ ) $\rho = 1,59 \text{ g/cm}^3$	van Genuchten [1980]  $\theta_s=0,4, \theta_r=0,$ $n=5,500496, \alpha=0,011275$	van Genuchten [1980]  $m=1-1/n, l=0,5$ $K_s(\text{cm/h})=18,4$

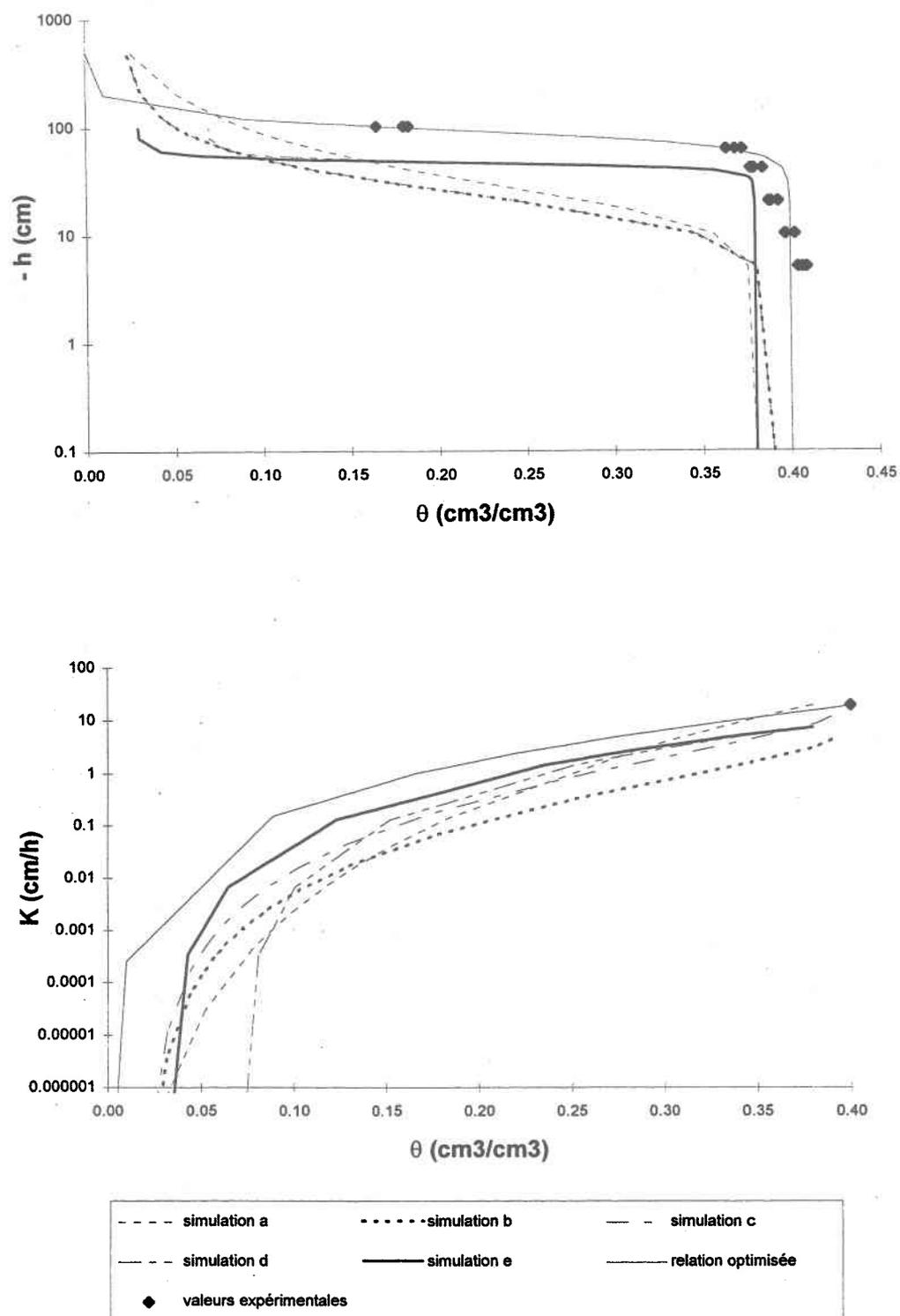


Figure 4.10 Relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  utilisées dans l'analyse de sensibilité

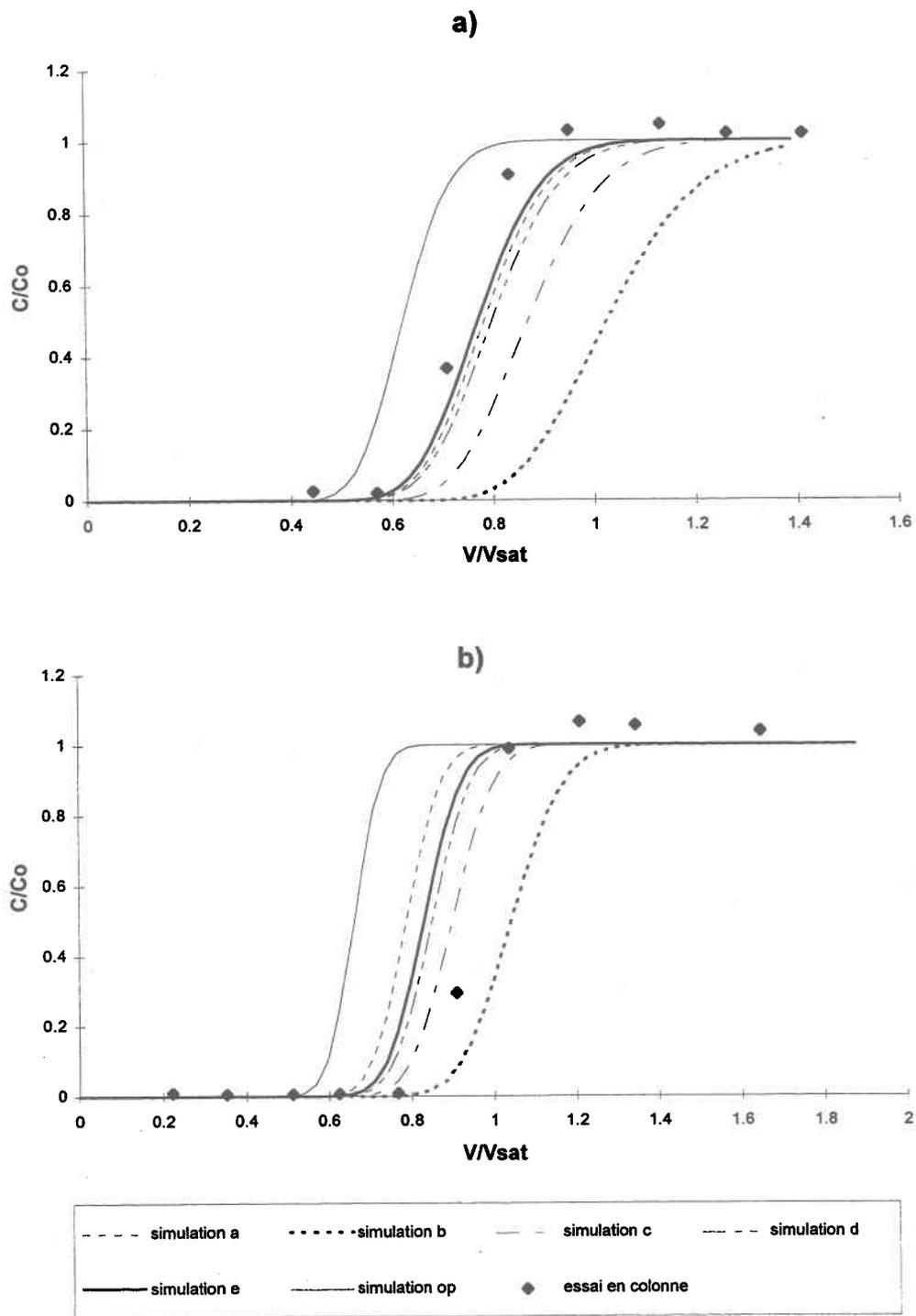


Figure 4.11 Résultats de l'analyse de sensibilité a)  $q_{inj}=2,89\text{cm/h}$  et  $\theta_i=0,115\text{cm}^3/\text{cm}^3$   
 b)  $q_{inj}=3,89\text{cm/h}$  et  $\theta_i=0,304\text{cm}^3/\text{cm}^3$

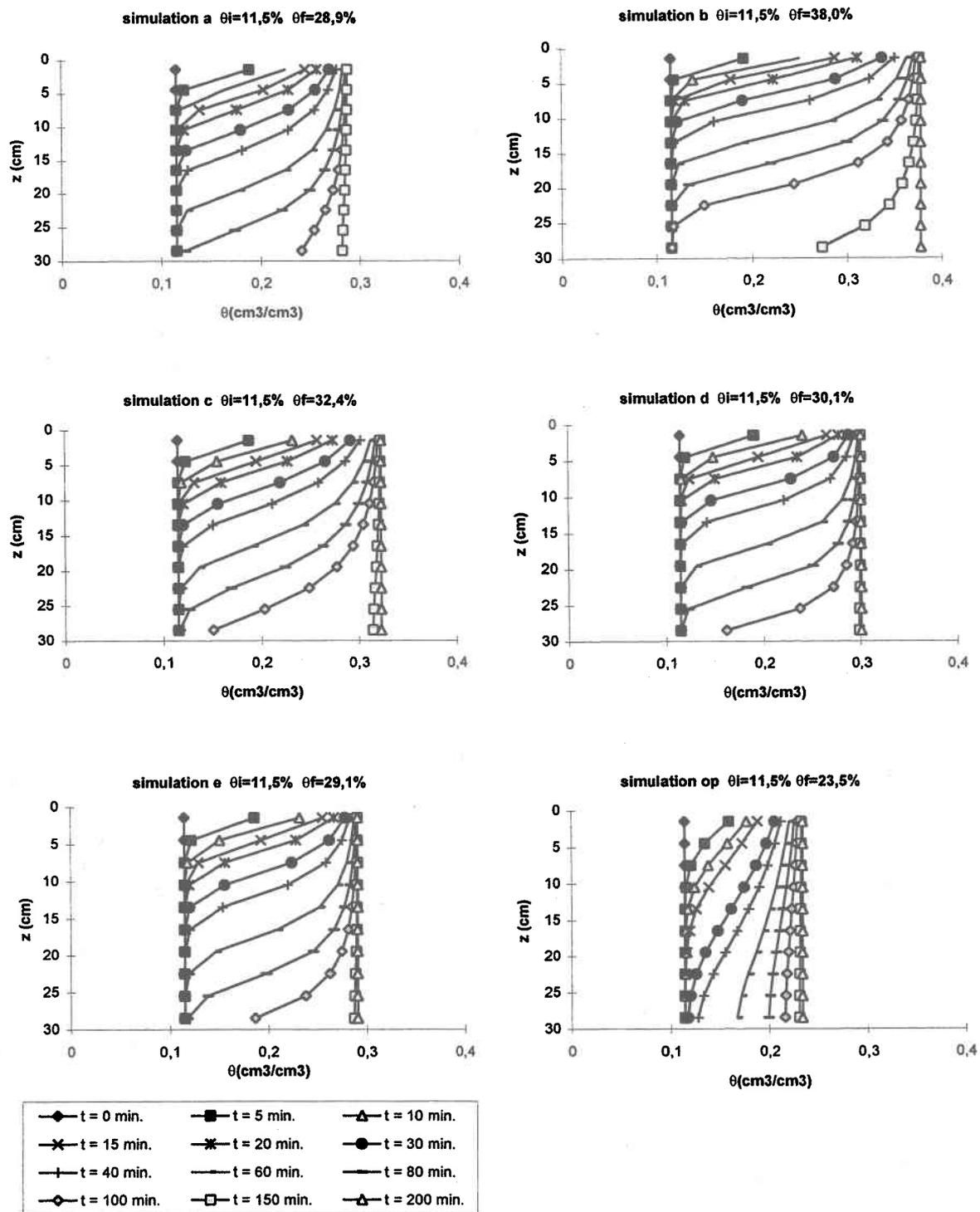


Figure 4.12 Variation du profil de teneur en eau en fonction des relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$   
 $\theta_{\text{expérimental}} \sim 0,312 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$

## 4.2.2 Validation du modèle

### 4.2.2.1 Courbes de fuite simulées versus expérimentales

Seize essais en colonne ayant des conditions initiales variables ont été simulés numériquement (tableau 4.4). Pour certaines conditions initiales, les courbes de fuite simulées coïncident très bien avec les essais en colonne alors que la concordance est moins bonne dans certains autres cas. Cette tendance est illustrée à la figure 4.13 où les résultats expérimentaux et simulés de six essais sont présentés.

Tableau 4.4 Description des essais en colonne simulés

Essais #	$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	$\theta_f$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/hr)	v (cm/hr)	D (cm <sup>2</sup> /hr)	durée (min.)
15	0,000	0,334	3,44	12,86	0,000	405
23	0,115	0,312	2,89	10,26	2,811	335
22	0,140	0,329	4,22	14,60	3,200	200
24	0,169	0,324	3,16	11,20	2,753	335
41	0,243	0,331	3,02	8,58	1,089	282
40	0,253	0,34	5,37	17,46	3,155	148
38	0,276	0,345	5,90	20,57	4,544	160
37	0,288	0,353	4,85	13,88	2,610	200
39	0,304	0,351	3,89	10,79	1,356	290
10	0,334	0,376	1,84	5,03	0,983	510
19	0,355	0,359	1,26	3,15	0,266	700
36	0,355	0,373	5,76	15,99	0,743	162
45	0,358	0,381	6,01	16,18	1,921	180
16	0,367	0,355	2,63	7,33	0,680	360
32	0,372	0,349	5,32	15,67	2,417	160
33	0,373	0,354	4,69	12,15	1,470	210

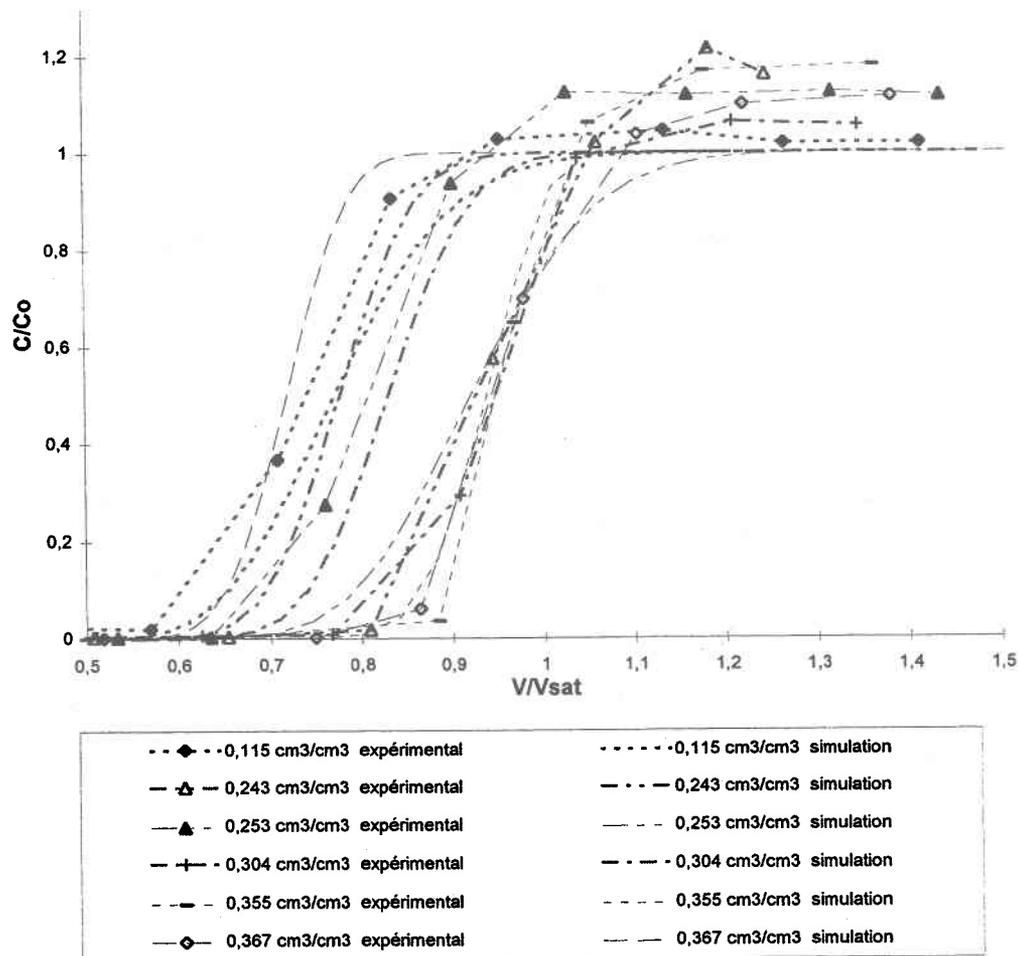


Figure 4.13 Comparaison entre les courbes de fuite expérimentales et simulées à différentes valeurs de teneurs initiales en eau (simulation e)

#### 4.2.2.2 Précision du modèle

Les figures 4.14 et 4.15 présentent les résultats en comparant les concentrations normalisées ( $C/C_0$ ) simulées et expérimentales pour un même temps. Les résultats exprimés sous cette forme permettent de mettre en évidence l'influence de la teneur initiale en eau et du flux d'injection et d'expliquer en partie la source de divergence des résultats.

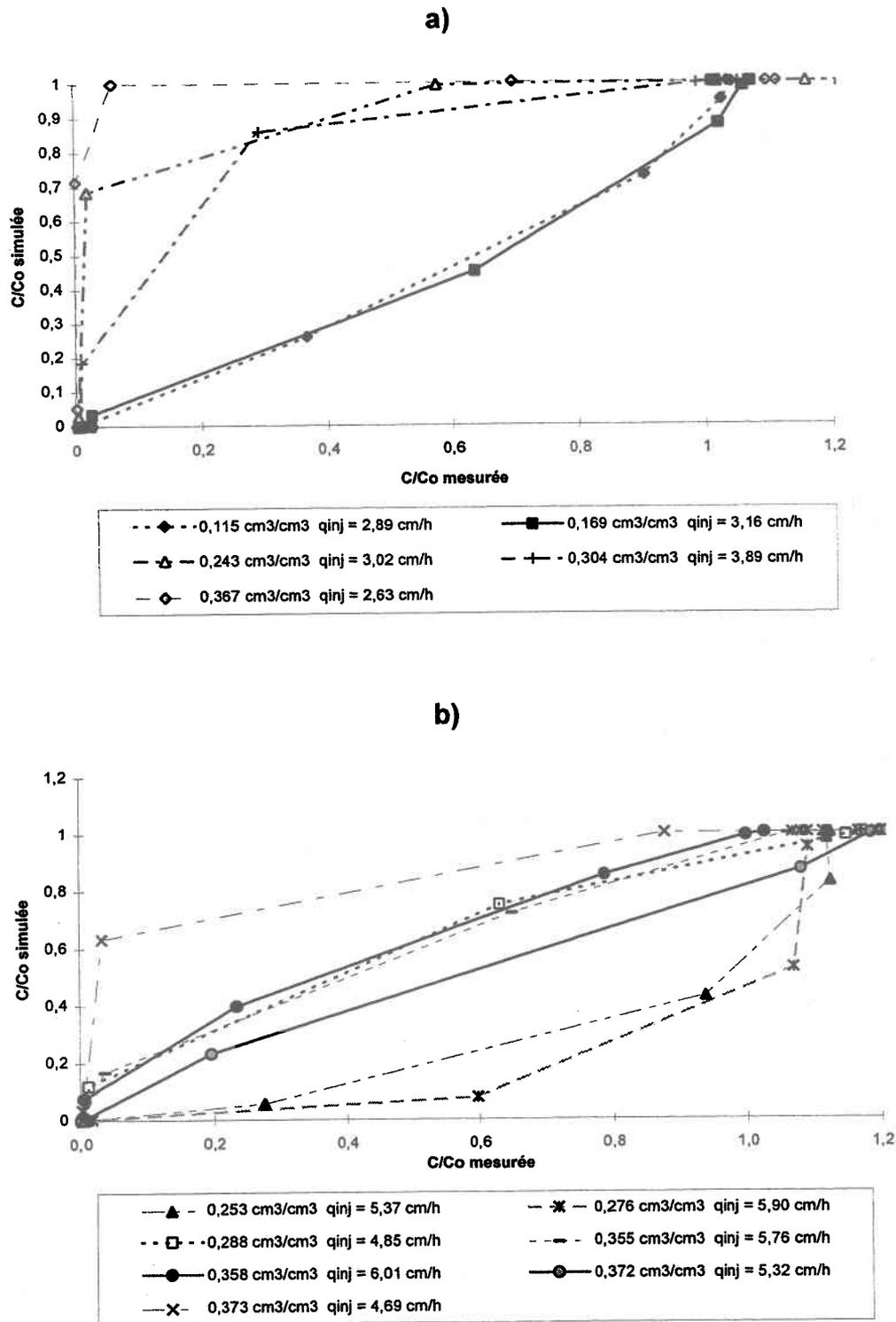


Figure 4.14 Influence de  $\theta_i$  pour a)  $q_{inj} \sim 3$  cm/h et b)  $q_{inj} \sim 5,6$  cm/h

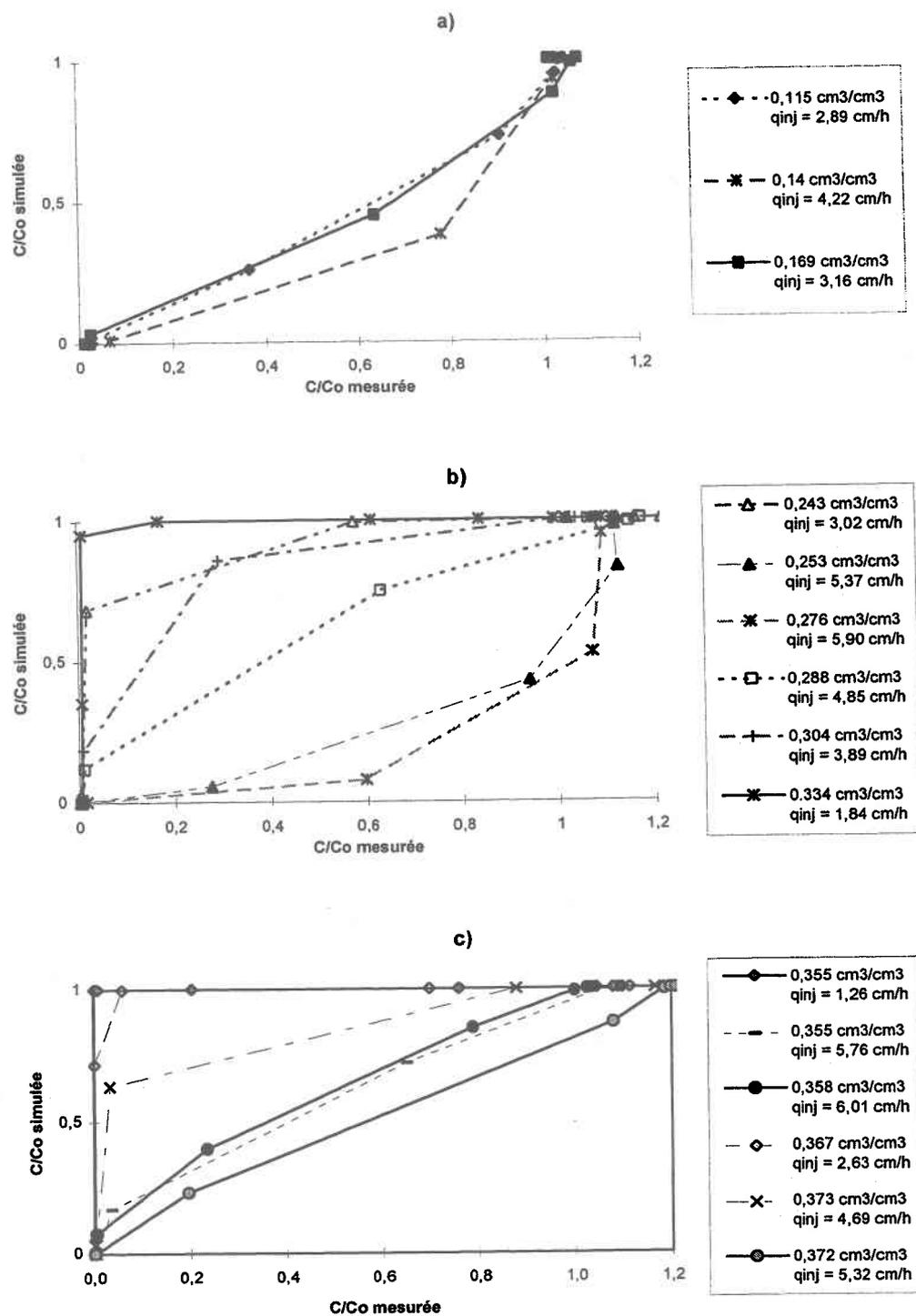


Figure 4.15 Influence de  $q_{inj}$  pour a)  $\theta_i \sim 0,15$  b)  $\theta_i \sim 0,27$  et c)  $\theta_i \sim 0,36$  cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>

La figure 4.14 montre que pour un même flux d'injection, le rapport des  $C/C_0$  simulées aux  $C/C_0$  mesurées passe de valeurs inférieures à 1 à des valeurs supérieures à 1 avec l'augmentation de la teneur initiale en eau. Pour un  $q_{inj} \sim 3$  cm/h, les simulations avec des teneurs initiales en eau de l'ordre de  $0,15$  cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup> coïncident le mieux avec la courbe expérimentale (pente voisine de 1). Les simulations avec des teneurs initiales en eau près de la capacité au champ montre une bonne concordance lorsque  $q_{inj} \sim 5,6$  cm/h. La figure 4.15 illustre l'influence du flux d'injection lorsque  $\theta_i \sim 0,15, 0,27$  et  $0,36$  cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>. Le rapport des  $C/C_0$  simulées aux  $C/C_0$  mesurées passe de valeurs inférieures à 1 à des valeurs supérieures à 1 avec la diminution du flux d'injection.

Ces observations montrent que les effets de la teneur initiale en eau et du flux d'injection sur la vitesse de transport observés expérimentalement ne sont pas complètement reproduits par la modélisation numérique. L'adéquation du modèle semble dépendre des conditions initiales imposées.

L'équation de Richards utilisée pour simuler l'écoulement dans un milieu non saturé ne considère pas la modification des mécanismes de mouillabilité, d'écoulement et de diffusion pouvant résulter des conditions initiales. Des études ont soulevé l'inadéquation de l'équation de Richards couplé à l'équation classique de convection-dispersion à simuler l'écoulement et le transport dans un sol structuré dans lequel la macroporosité ou la double porosité favorise une fraction d'eau immobile et un écoulement préférentiel [Bélanger 1993; Gerke and van Genuchten 1993; Zurmühl and Durner 1996]. L'incorporation d'une fraction d'eau immobile dans le modèle classique de transport est d'usage pour remédier à cette situation. Les résultats de la présente étude indiquent que cette inadéquation s'applique aussi aux milieux relativement homogènes en l'absence d'une macroporosité, d'une fraction d'eau immobile et d'écoulements préférentiels. Il en résulte que l'utilisation de l'équation de Richards devrait être restreinte à la simulation du flux d'eau pour laquelle le suivi des particules n'est pas requis.

#### 4.2.2.3 Facteur de concordance

La cohérence observée dans la divergence des résultats simulés versus observés suscite le calcul d'un facteur de concordance empirique. Ce facteur de concordance, dans ce cas, est fonction de la teneur initiale en eau et du flux d'injection. Il peut prendre la forme générale:

$$F(\theta, q_{inj}) = a q_{inj}^n + b \theta^m + c \quad (4.1)$$

$F(\theta, q_{inj})$  est calculée par le rapport des vitesses simulée et mesurée à  $C/Co=0,5$ :

$$F(\theta, q_{inj}) = \frac{v_{simulée}(C / Co = 0,5)}{v_{mesurée}(C / Co = 0,5)} \quad (4.2)$$

Les paramètres empiriques  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $n$  et  $m$  sont optimisés en minimisant la somme des moindres carrés. La fonction empirique résultante est:

$$F(\theta, q_{inj}) = 1,92 q_{inj}^{-0,39} + 2,98 \theta^{2,16} - 0,30 \quad (4.3)$$

Les vitesses corrigées avec ce facteur de concordance sont comparées aux vitesses mesurées à la figure 4.16. Le coefficient de détermination de la régression,  $r^2$ , est de 0,97.

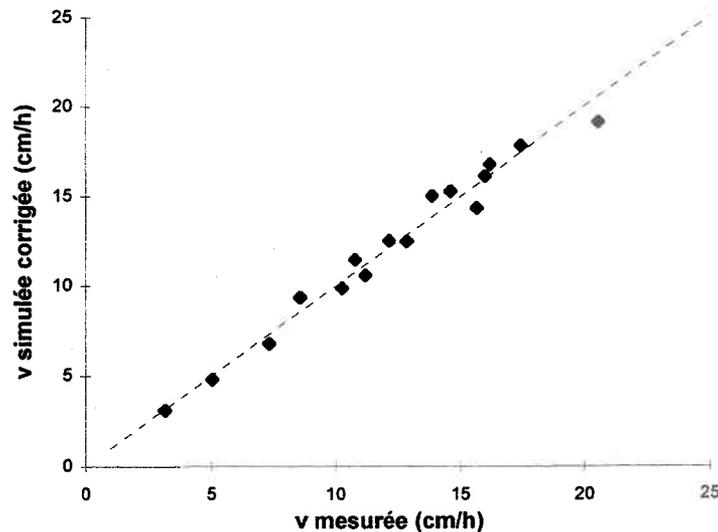


Figure 4.16 Vitesses simulées corrigées versus vitesses mesurées

La qualité de cette régression montre qu'il est nécessaire d'intégrer ces deux conditions dans le représentation du transport de soluté en non saturé.

Le transport du traceur dans le milieu poreux a été simulé à nouveau en utilisant cette fois des vitesses ainsi corrigées. Les résultats simulés avec les vitesses corrigées de six essais sont comparés aux résultats expérimentaux à la figure 4.17. La concordance entre les essais simulés et les essais expérimentaux est nettement améliorée. Cette correction semble permettre dans le cas de cette étude une bonne adéquation de la modélisation. Il reste bien entendu à trouver les processus mis en cause et leur représentation mathématique à intégrer dans la modélisation.

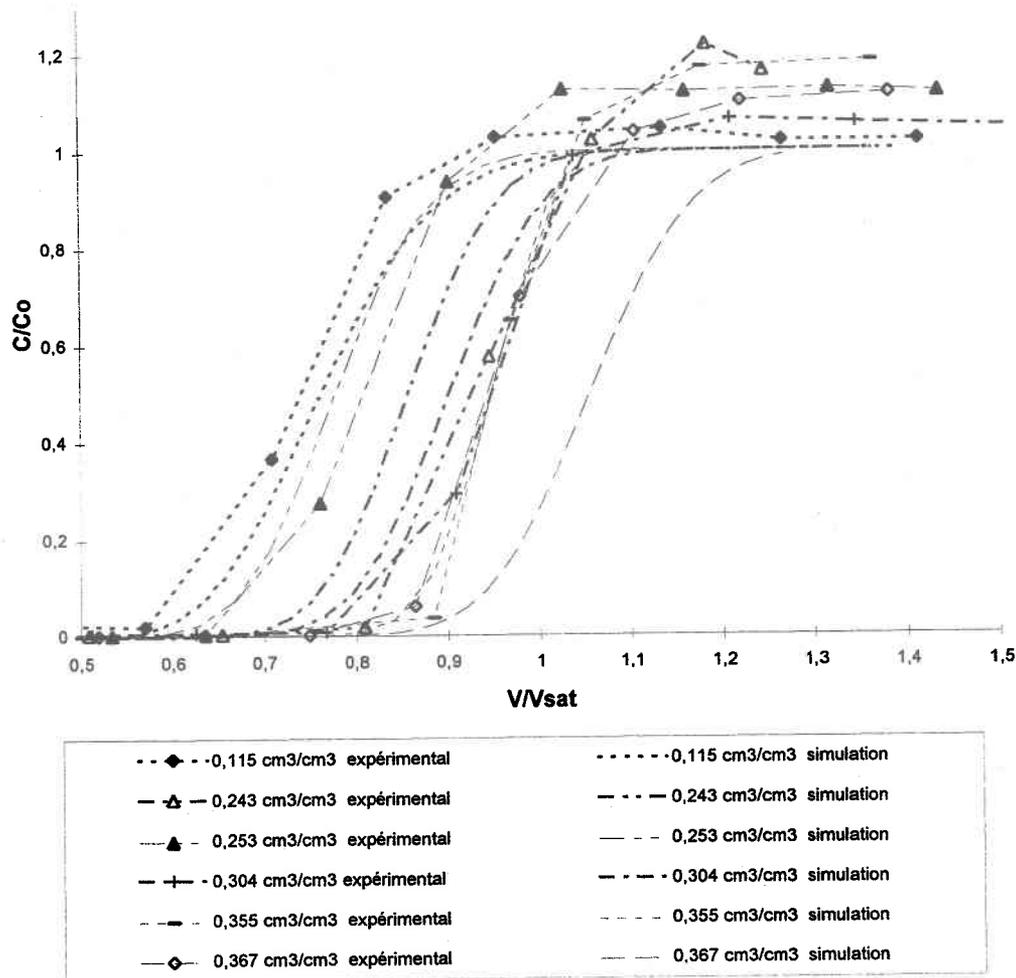
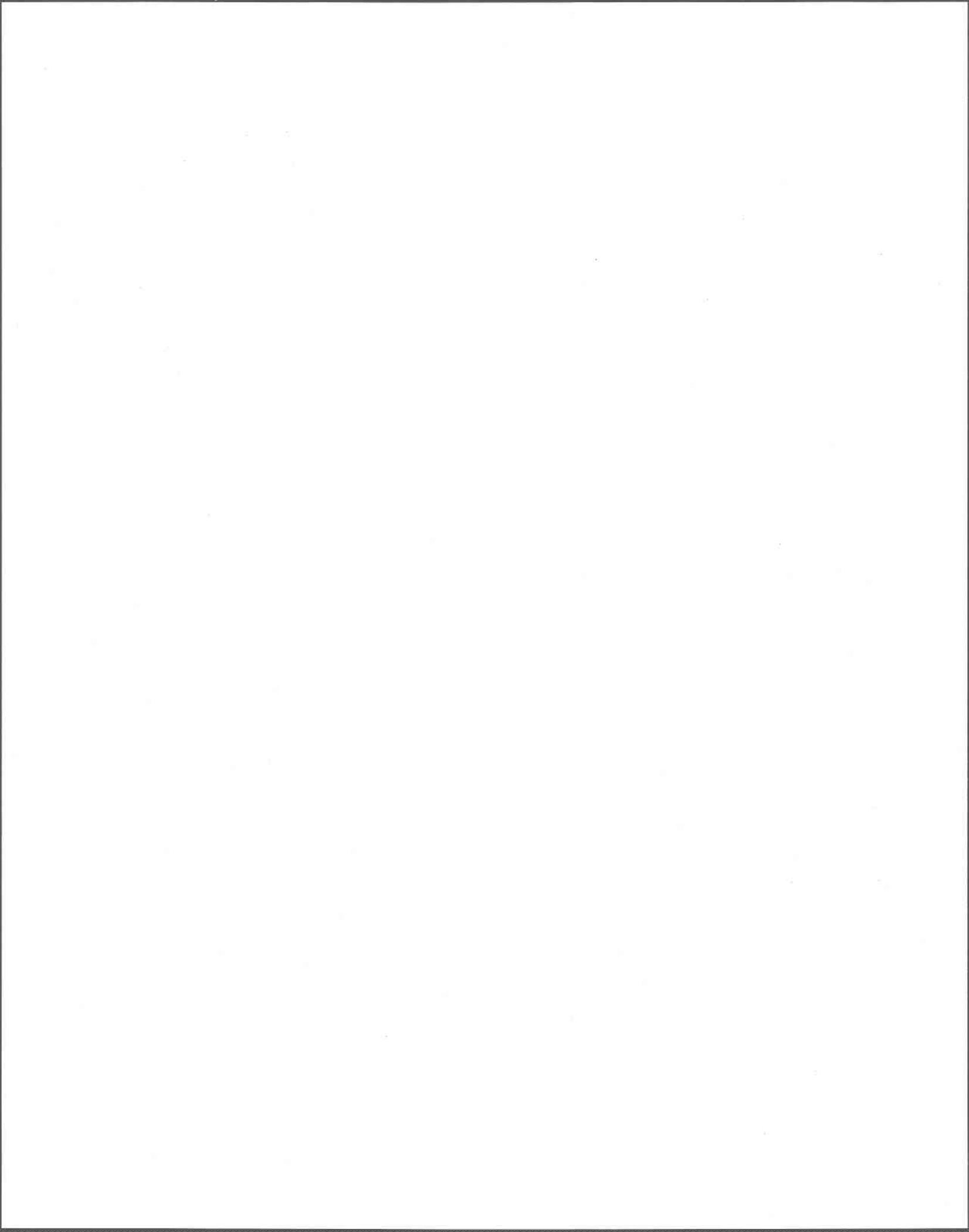


Figure 4.17 Comparaison entre les courbes de fuite expérimentales et simulées corrigées à différentes valeurs de teneurs initiales en eau (simulation e)



## 5. CONCLUSION

---

Cette étude portant sur le transfert d'eau et de soluté dans la zone non saturée a été abordée par des expériences en laboratoire et une modélisation numérique des processus.

La partie expérimentale consistait à caractériser les conditions hydrodynamiques de trois milieux poreux impliqués dans le traitement *in situ* de pesticides dissous. Les courbes de fuite expérimentales des différents milieux poreux montrent une augmentation de la vitesse de transport avec une diminution de la teneur initiale en eau et une augmentation du flux d'injection. L'écoulement est de type piston pour le sable et la tourbe alors que le transport avec écoulement préférentiel est évident dans le mélange.

La simulation du transport avec le modèle classique de convection-dispersion est indépendante de la structure microscopique du sol qui doit plutôt être caractérisée par les relations  $h(\theta)$  et  $K(\theta)$  incluses dans l'équation de Richards. Le choix de ces relations est primordial pour décrire l'écoulement de l'eau et le transport des contaminants. L'analyse de sensibilité indique qu'une faible variation entre ces courbes caractéristiques génère une différence importante du régime d'écoulement. La dépendance du potentiel de pression à la teneur en eau près de la saturation dans la courbe expérimentale de désorption n'est pas adéquatement représentée par un modèle hydraulique unimodal (figure 4.10). La cassure de la courbe des modèles unimodaux est généralement plus abrupte près de la saturation. L'utilisation d'une fonction bimodale pourrait être plus appropriée.

En fonction des conditions initiales expérimentales, la modélisation de l'écoulement par l'équation de Richards et du transport par l'équation de convection-dispersion simule plus ou moins bien le transport du traceur dans le milieu poreux. La courbe de fuite simulée est similaire à la courbe expérimentale dans certains cas, alors qu'elle la devance ou la suit dans d'autres cas. La représentation graphique des  $C/C_0$  simulées en fonction des  $C/C_0$  mesurées fait ressortir l'adéquation du modèle qui semble dépendre de la teneur initiale en eau et du flux d'injection. L'influence de la teneur initiale en eau et du flux d'injection sur la vitesse de

transport et le type d'écoulement n'apparaissent pas dans les résultats de simulations comme dans ceux expérimentaux. Les vitesses obtenues de l'équation de Richards ne sont pas adéquates pour simuler le transport de soluté. L'équation de Richards utilisée pour modéliser l'écoulement de l'eau en zone non saturée ne semble pas apte à simuler le transport convectif même dans un milieu poreux relativement homogène.

Cette étude ouvre la voie à d'autres travaux et à de nouvelles perspectives de recherche. Il importe de reconsidérer l'applicabilité de l'équation de Richards pour la simulation du transport convectif et d'étudier d'autres avenues permettant de pallier aux problèmes de représentativité et validité du modèle. La considération d'une fraction d'eau immobile pour décrire le transport avec écoulement préférentiel a été abordée dans plusieurs études impliquant des milieux hétérogènes. Il faudrait cependant préciser davantage les processus mis en cause dans le transport de soluté, spécialement dans les milieux homogènes, et élaborer la représentation mathématique de ces processus à intégrer dans la modélisation.

## BIBLIOGRAPHIE

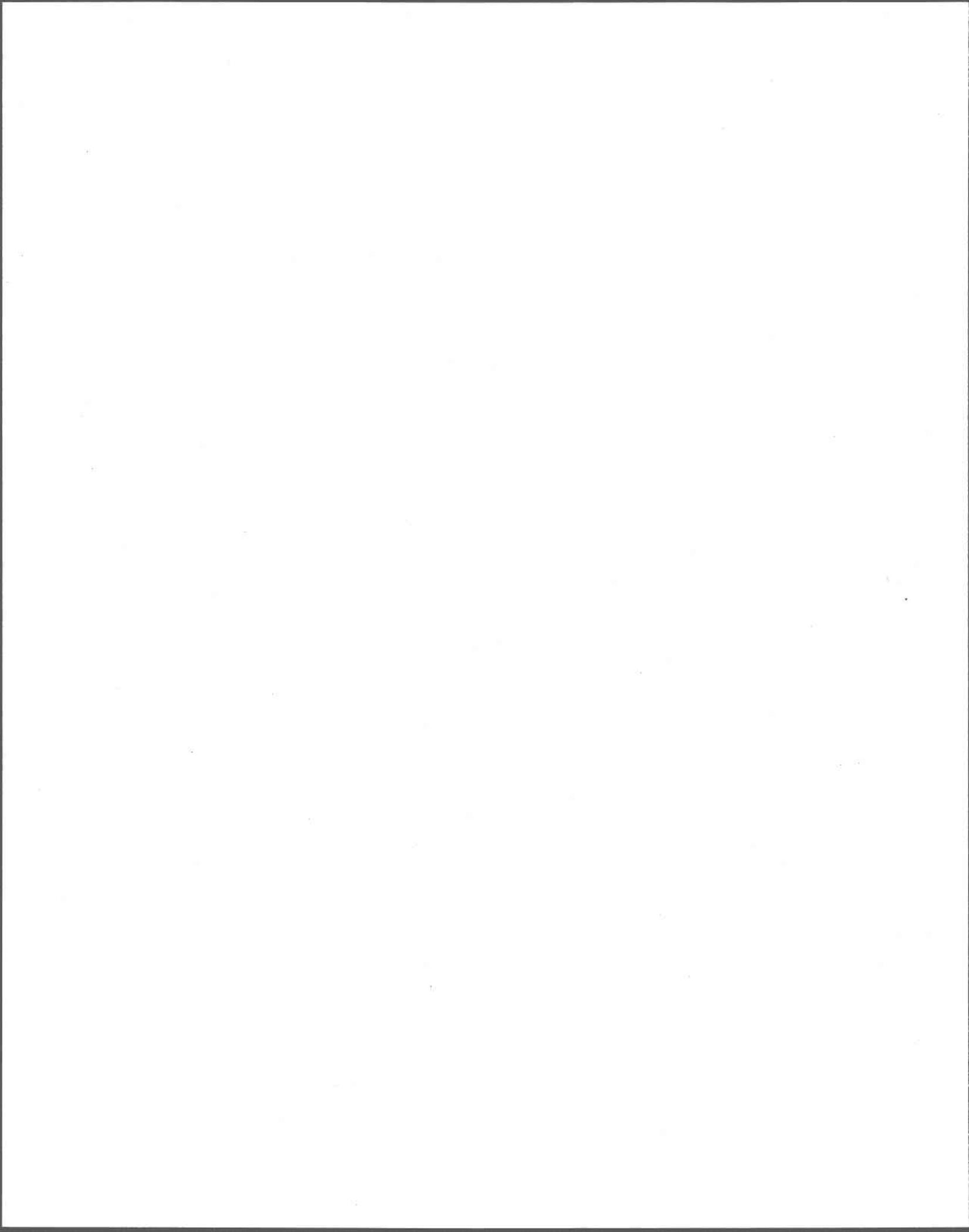
- Arya, L. M. and J. F. Paris (1981). A Physicoempirical Model to Predict the Soil Moisture Characteristic from Particle-Size Distribution and Bulk Density Data. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45: 1023-30.
- Averyanov, S.F. (1950). About permeability of subsurface soils in case of incomplete saturation. Engineering Collection, VII, as quoted by P. Ya. Polubarinova Kochina, The theory of ground water movement. Princeton University, Princeton, New Jersey.
- Bélanger, S. (1993). Modélisation du mouvement vertical de l'eau en milieu non saturé. Mémoire de maîtrise. I.N.R.S. Eau.
- Bond, W. J. (1986). Velocity-Dependant Hydrodynamic Dispersion during Unsteady, Unsaturated Soil Water Flow : Experiments. *Water Resour. Res.*, 22(13): 1881-89.
- Bowman, R. S. and R. C. Rice (1986). Transport of Conservative Tracers in the Field Under Intermittent Flood Irrigation. *Water Resour. Res.*, 22(11): 1531-36.
- Brooks, R.H. and C.T. Corey (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrol. Paper* 3. Colorado State University, Fort Collins.
- Brutsaert, W. (1966). Probability laws for pore-size distributions. *Soil Sci.*, 101: 85-92.
- Burdine, N.T. (1953). Relative permeability calculation from size distributions data. *Trans AIME*, 198: 71-78.
- Butters, G. L., W. A. Jury and F. F. Ernst (1989). Field Scale Transport of Bromide in an Unsaturated Soil 1. Experimental Methodology and Results. *Water Resour. Res.*, 25(7): 1575-81.
- Campbell, G. S (1974). A Simple Method for Determining Unsaturated Conductivity from Moisture Retention Data. *Soil Sci.*, 117(6): 311-14.
- Caron, J., O. Banton, D.A. Angers and J.P. Villeneuve (1995). Preferential bromide transport through a clay loam under alfafa and corn. *Geoderma*, 69: 175-191.
- Celia, M.A., E.T. Bouloutas and R.L. Zarba (1990). A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.* 26: 1483-1496.
- Clothier, B. E., L. Heng, G. N. Magesan and I. Vogeler (1995). The Measured Mobile-Water Content of an Unsaturated Soil as a Function of Hydraulic Regime. *Austr. J. Soil Res.*, 33: 397-414.

- Clothier, B. E., M. B. Kirkham and McLean J. E (1992). In Situ Measurement of the Effective Transport Volume for Solute Moving Through Soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 56: 733-36.
- Demond, A. H., K. Rathfelder and L. M. Abriola (1996). Simulation of Organic Liquid Flow in Porous Media Using Estimated and Measured Transport Properties. *J. Cont. Hydrol.*, 22: 223-39.
- Freeze, R. A. (1969). The Mechanism of Natural Ground-Water Recharge and Discharge 1. One-Dimensional, Vertical, Unsteady, Unsaturated Flow above a Recharging or Discharging Ground-Water Flow System. *Water Resour. Res.*, 5(1): 153-71.
- Freeze, R. A. and J. A. Cherry (1979). *Groundwater*. Englewood Cliffs (N.J.), Prentice-Hall, 590 p.
- Fried, J. J. and M. A. Combarous (1971). Dispersion in Porous Media. *Advan. Hydrosoci.*, 7: 169-282.
- Fuentes, C., R. Haverkamp and J.-Y. Parlange (1992). Parameter Constraints on Closed-Form Soilwater Relationships. *J. Hydrol.*, 134: 117-42.
- Gamble, B. F., Y. Eckstein and W. M. Edwards (1990). Principles of Evaluation of Soil Water Residence Time Using Queueing Disciplines With Water Budget Data (Theoretical Background-I). *J. Hydrol.*, 113: 1-25.
- Gardner, W.R. (1958). Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. *Soil Sci.*, 85: 228-232.
- Gerke, H.H. and M.Th. van Genuchten (1993). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resour. Res.* 29: 305-319.
- Glass, R. J., G. H. Oosting and T. S. Steenhuis (1989). Preferential Solute Transport in Layered Homogeneous Sands as a Consequence of Wetting Instability. *J. Hydrol.*, 110: 87-105.
- Guinot, V. (1995). Modélisation mécaniste du devenir des produits phytosanitaires dans l'environnement souterrain. Application à la protection des captages en aquifère. Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier - Grenoble 1.
- Haverkamp, R. and M. Vauclin (1979). A Note on Estimating Finite Difference Interblock Hydraulic Conductivity Values for Transient Unsaturated Flow Problems. *Water Resour. Res.*, 15(1): 181-87.

- Haverkamp, R., M. Vauclin, J. Touma, P. J. Wierenga and G. Vachaud (1977). A Comparison of Numerical Simulation Models for One-Dimensional Infiltration. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 41: 285-94.
- Irmay, S. (1954). On the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Eos, Trans. Am. Geophys. Union*, 35: 463-467.
- Kastanek, F. (1971). Numerical Simulation Technique for Vertical Drainage from a Soil Column. *J. Hydrol.*, 14: 213-32.
- Kengni, L. (1993). Mesure in-situ des pertes d'eau et d'azote sous culture de maïs irriguée. Application à la Plaine de Bièvre (Isère). Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier - Grenoble 1.
- Magesan, G. N., I. Vogeler, D. R. Scotter, B. E. Clothier and R. W. Tilman (1995). Solute Movement Through Two Unsaturated Soils. *Austr. J. Soil Res.*, 33(4): 585-96.
- Martins, J. (1993). Les aspects hydrodynamiques, physico-chimiques et biologiques du devenir des pesticides dans les sols. Application au transfert du pentachlorophénol en colonnes. Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier - Grenoble 1.
- Mualem, Y. (1976). A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resour. Res.*, 12(3): 513-22.
- Mualem, Y. (1986). Hydraulic conductivity of unsaturated soil : Prediction and formulas. p. 799-823. In A. Klute (ed.) *Methods of soil analysis, Part 1. Physical and mineralogical methods*. Agronomy monograph no.9 (2<sup>nd</sup> edition). ASA-SSSA Publ., Madison, WI.
- Musy, A. and M. Soutter (1991). *Physique du sol*. Lausanne (Suisse), Presses polytechniques et universitaires romandes, 335 p.
- Nielsen, D. R., M. Th. van Genuchten and J. W. Biggar (1986). Water Flow and Solute Transport Processes in the Unsaturated Zone. *Water Resour. Res.*, 22(9): 89S-108S.
- Novy Quadri, M. G. (1993). Transferts de solutés dans les sols saturés et non saturés. Application au pentachlorophénol. Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier - Grenoble 1.
- Ogata, A. and R.B. Banks (1961). A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. *United States Geological Survey, Professional Paper* Nr. 411-A.
- Parlange, J.-Y. (1972). Theory of Water Movement in Soils. 8: One-Dimensional Infiltration with Constant Flux at the Surface. *Soil Sci.*, 114(1): 1-4.

- Perrier, E., M. Rieu, G. Sposito and G. de Marsily (1996). Models of the Water Retention Curve for Soils with a Fractal Pore Size Distribution. *Water Resour. Res.*, 32(10): 3025-31.
- Pikul, M. F., R. L. Street and I. Remson (1974). A Numerical Model Based on Coupled One-Dimensional Richards and Boussinesq Equations. *Water Resour. Res.*, 10(2): 295-302.
- Porro, I. and P. J. Wierenga (1993). Transient and Steady-State Solute Transport through a Large Unsaturated Soil Column. *Ground Water*, 31(2): 193-200.
- Richter, J. (1990). *Models for Processes in the Soil (Programs and Exercices)*. W. Germany, Catena verlag, 227 p.
- Roth, K., W. A. Jury, H. Flühler and W. Attinger (1991). Transport of Chloride Through an Unsaturated Field Soil. *Water Resour. Res.*, 27(10): 2533-41.
- Russo, D., W.A. Jury and G.L. Butters (1989). Numerical analysis of solute transport during transient irrigation. 2. The effect of immobile water. *Water Resour. Res.* 25: 2119-2127.
- Snow, V. O., B. E. Clothier, D. R. Scotter and R. E. White (1994). Solute Transport in a Layered Field Soil: Experiments and Modelling using the Convection-Dispersion Approach. *J. Cont. Hydrol.*, 16: 339-58.
- Talsma, T. (1970). Hysteresis in Two Sands and the Independant Domain Model. *Water Resour. Res.*, 6(3): 964-70.
- van Genuchten, M. Th. (1980). A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44: 892-898.
- van Genuchten, M. Th. and J.C. Parker (1984). Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory columns. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 48: 703-708.
- van Ommen, H. C., M. Th. van Genuchten, W. H. van Der Molen, R. Dijkma and J. Hulshof (1989). Experimental and Theoretical Analysis of Solute Transport from a Diffuse Source of Pollution. *J. Hydrol.*, 105: 225-51.
- Vauclin, M. (1994). Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. Revue et état de l'art. *Rev. Sci. Et Tech. De L'Eau*, 7: 81-102.
- Vauclin, M. and R. Angulo-Jaramillo (1995). Water and Solute Transport Processes in Unsaturated Soils: some Hydrological and Geotechnical Aspects. Dans *1st Int. Conf. on Unsaturated Soils*, Paris.

- 
- Wierenga, P. J. and M. Th. van Genuchten (1989). Solute Transport Through Small and Large Unsaturated Soil Columns. *Ground Water*, 27(1): 35-42.
- Wösten, J.H.M. and M. Th. van Genuchten (1988). Using Texture and Other Soil Properties to Predict the Unsaturated Soil Hydraulic Functions. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 52: 1762-70.
- Yuster, S.T. (1951). Theoretical considerations of multiphase flow in idealized capillary systems. *Proc. 3<sup>rd</sup>. World Petrol Congr.*, 2: 437-445.
- Zurmühl, T. and W. Durner (1996). Modeling Transient Water and Solute Transport in a Biporous Soil. *Water Resour. Res.*, 32(4): 819-29.



# ANNEXE I: Protocoles de laboratoire

## POROSITÉ, POROSITÉ de DRAINAGE, CAPACITÉ au CHAMP et MASSE VOLUMIQUE APPARENTE

### Matériel requis:

- échantillons de sol
- balance
- assiettes d'aluminium
- étuve

### Procédure:

- 1- Peser les colonnes vides.
- 2- Remplir les colonnes de sol sec (préalablement séché à l'étuve à 105°C) et peser.
- 3- Immerger doucement les colonnes dans l'eau pour permettre au sol de se saturer. Le niveau d'eau doit arriver presque à la hauteur du sol dans les colonnes pour être sûr d'obtenir saturation. Les bulles d'air piégées dans le matériel reflète la présence d'air en milieu naturel. Après un délai de 15 heures, on assume que la saturation est complétée.
- 4- Peser des assiettes d'aluminium. Rapidement, transférer les colonnes saturées dans les assiettes d'aluminium préalablement pesées. Peser les colonnes saturées ainsi que l'eau qui a ressuyé dans les assiettes d'aluminium.
- 5- Déposer les colonnes sur un grillage pour laisser l'eau gravitaire s'écouler. Il est préférable de couvrir les colonnes pour éviter qu'il y ait évaporation. Après une période d'environ 15 heures, peser les colonnes ressuyées.

**Calculs:**

$$\text{Porosité totale } (n) \text{ (cm}^3 \text{ / cm}^3\text{)} = \frac{\text{poids saturé (g)} - \text{poids sec (g)}}{\text{volume de sol dans la colonne (cm}^3\text{)}}$$

$$\text{Capacité au champ } (\theta_c) \text{ (cm}^3 \text{ / cm}^3\text{)} = \frac{\text{poids ressuyé (g)} - \text{poids sec (g)}}{\text{volume de sol dans la colonne (cm}^3\text{)}}$$

$$\text{Porosité de drainage } (n_d) \text{ (cm}^3 \text{ / cm}^3\text{)} = \frac{\text{poids saturé (g)} - \text{poids ressuyé (g)}}{\text{volume de sol dans la colonne (cm}^3\text{)}}$$

$$\text{Masse volumique apparente sèche } (\rho) \text{ (g / cm}^3\text{)} = \frac{\text{poids sec (g)}}{\text{volume de sol dans la colonne (cm}^3\text{)}}$$

note: --> Il est important de corriger les poids pour le poids des assiettes d'aluminium

## CONDUCTIVITÉ HYDRAULIQUE À SATURATION

### Matériel requis:

- montage
- bouteilles de plastique de 1l
- cylindre gradué
- balance
- bac de plastique
- chronomètre (montre)

### Procédure:

- 1- Mettre les colonnes à tremper dans un bac de plastique rempli d'eau jusqu'à saturation. Le niveau d'eau doit arriver presque à la hauteur du sol dans les colonnes pour être sûr d'obtenir saturation.
- 2- Mesurer la hauteur de sol dans les colonnes.
- 3- Placer les colonnes sur le montage en prenant soin de bien sceller les tubes qui évacuent les trop plein.
- 4- Pour chaque colonne, évaluer la hauteur d'eau ( $\Delta H$ ) de l'écoulement (distance entre la surface de l'eau et le trop plein de la colonne).
- 6- Placer une bouteille de plastique pour récolter l'eau qui s'écoule à la base des colonnes.
- 7- Partir l'eau doucement afin de ne pas compacter l'échantillon.
- 8- Régler le débit afin que le niveau de l'eau dans la colonne ne monte pas plus haut que le niveau du trop plein.
- 9- Laisser les débits sortants se régulariser avant de commencer les mesures afin de bien saturer les échantillons.
- 10- Lorsque les échantillons sont saturés, partir l'expérience. Noter le temps nécessaire à l'écoulement d'un volume donné d'eau (ce volume peut aller de quelques mL pour un sol argileux à 1 L pour un sol plutôt sableux). Mesurer à l'aide du cylindre gradué le volume exact écoulé.
- 11- Mesurer et noter à nouveau la hauteur de sol dans la colonne afin de vérifier s'il y a tassement. Le calcul de  $K_{sat}$  se fera avec la hauteur de sol dans la colonne après tassement.

**Calculs:**

$$K_{sat} = \frac{Vol}{\Delta t} \times \frac{\Delta L}{\Delta H} \times \frac{1}{A}$$

$K_{sat}$  = conductivité hydraulique saturée (cm/s)

$Vol$  = volume d'eau écoulé(ml)

$\Delta t$  = temps nécessaire à l'écoulement de  $Vol$  (s)

$\Delta L$  = hauteur de sol dans la colonne après tassement (cm)

$\Delta H$  = hauteur d'eau (charge) totale (cm)

$A$  = surface de la colonne = 81,07 cm<sup>2</sup>

## ANALYSE DES BROMURES

### Matériel requis:

- électrode sélective aux bromures
- électrode de référence
- pH-mètre
- agitateur magnétique
- aimant
- support pour électrodes
- fioles jaugées (100 ml et 500 ml)
- pipettes (1 ml, 2 ml et 10 ml)
- béchers ou pots de plastiques (150 ml)
- NaBr
- ISA (ajustateur ionique)  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

### Procédure:

1- Remplir les électrodes selon les instructions du fabricant.

2- Préparer les standards:

a) Préparation de la solution-mère:

(pour préparer toutes les solutions, mettre de l'eau distillée dans le fond de la fiole jaugée, ajouter le sel et remplir jusqu'à la jauge à l'aide d'une pipette)

0,645 g NaBr (102,894 g/mol) dans 0,5 l d'eau donne une solution à 1000 ppm de  $\text{Br}^-$ .

b) Préparation des standards:

100 ml  $\text{H}_2\text{O}$  + 2 ml ISA ==> 0 ppm (blanc)

10 ml  $\text{Br}^-$  (1000 ppm), compléter à 100 ml avec  $\text{H}_2\text{O}$  distillée + 2 ml ISA ==> 100 ppm

1 ml  $\text{Br}^-$  (1000 ppm), compléter B 100 ml avec  $\text{H}_2\text{O}$  distillée + 2 ml ISA ==> 10 ppm

5 ml  $\text{Br}^-$  (100 ppm), compléter B 100 ml avec  $\text{H}_2\text{O}$  distillée + 2 ml ISA ==> 5 ppm

1 ml  $\text{Br}^-$  (100 ppm), compléter B 100 ml avec  $\text{H}_2\text{O}$  distillée + 2 ml ISA ==> 1 ppm

1 ml  $\text{Br}^-$  (10 ppm), compléter B 100 ml avec  $\text{H}_2\text{O}$  distillée + 2 ml ISA ==> 0,1 ppm

c) Préparation de la solution tampon  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  - 2M (ISA) :

(cette solution est nécessaire pour assurer une quantité minimale d'ions en solution et ainsi des conditions ioniques similaires pour tous les échantillons)

264 g  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  dans 1 litre d'eau donne une solution B 2M.

Ajouter 2 ml de la solution ISA pour chaque échantillon de 100 ml.

Remarques:

- Identifier dans quelle gamme de concentrations les échantillons se trouvent. Préparer les standards en fonction de celle-ci. Si la gamme est trop large, faire 2 courbes standards.
- La linéarité des courbes standard doit être vérifiée (régression linéaire  $\log [ ] = \text{fct}$  (potentiel)). On cherche à obtenir un  $r^2 > = 0.99$ .
- Les standards étant faits à partir d'eau distillée, il est important d'avoir une quantité suffisante d'eau distillée à la température de la pièce ou de laisser les standards atteindre la température de la pièce avant de prendre les mesures. Les électrodes sont très sensibles aux variations de température.
- Les échantillons à mesurer doivent aussi être à la température de la pièce.
- Il est recommandé de vérifier la courbe standard à l'occasion (mesurer à nouveau un standard se situant au milieu de la courbe). Si la nouvelle mesure diffère sensiblement de l'ancienne, faire une nouvelle courbe standard. Toujours faire une nouvelle courbe standard à chaque jour.

3- Courbe de calibration:

(Cette procédure mesure la pente de l'électrode. La pente est définie par le changement observé en millivolt pour chaque changement d'un facteur de 10 de la concentration. La vérification de la pente est le meilleur moyen de s'assurer du bon fonctionnement de l'électrode.)

a) Étapes de mesure:

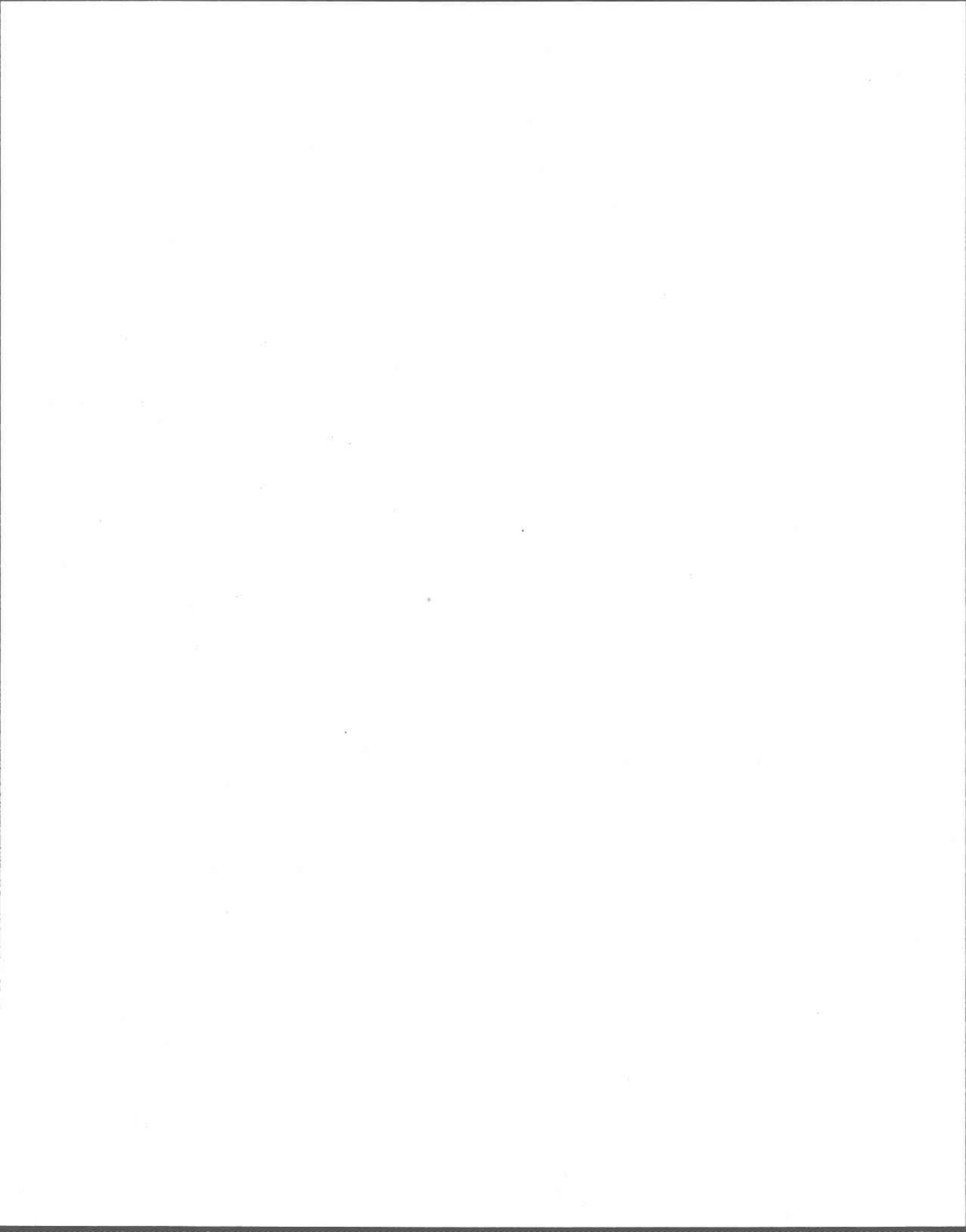
- Installer les 2 électrodes au-dessus du pH-mètre.
- Mettre le pH-mètre en marche (bouton power).
- Mettre le pH-mètre à millivolts (bouton mode).
- Placer chaque échantillon sur l'agitateur magnétique.

- Mettre l'aimant dans le bécher.
  - Abaisser les électrodes dans la solution de bromures.
  - Agiter durant 3 minutes (temps nécessaire à la stabilisation de la lecture).
  - Noter la lecture au pH-mètre.
  - Rincer les électrodes et l'aimant dans l'eau distillée entre chaque échantillon.
- b) Commencer par mesurer la solution standard la plus diluée.
  - c) La différence entre 2 lectures de potentiel dont la concentration diffère d'un facteur de 10 est définie comme la pente de l'électrode. Cette valeur doit être comprise entre -54 et -60 mv/décade à 25°C. Si la valeur n'est pas comprise dans l'intervalle, polir le bout de l'électrode avec les bandes de papier à polir.
  - d) Préparer une courbe de calibration en portant les valeurs de potentiel à l'axe linéaire et les concentrations des standards à l'axe logarithmique d'un papier semi-logarithmique.

#### 4- Mesure des échantillons :

- a) Lorsque la courbe standard est faite, mesurer le potentiel dans tous les échantillons en suivant les mêmes étapes de mesure.
- b) En utilisant la courbe de calibration préparée en 3, déterminer la concentration inconnue.

5- Entreposer et vider les électrodes selon les instructions du fabricant.



# ANNEXE II: Résumé des essais

Sable	Teneur en eau initiale	Flux d'injection	vitesse mesurée
Essais #	$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/hr)	v (cm/hr)
1	0.400	2.26	5.68
2	0.386	2.27	5.77
3	0.388	2.52	6.95
4	0.380	1.73	3.18
5	0.367	1.22	2.26
6	0.375	0.97	2.12
7	0.368	2.52	8.11
8	0.354	2.15	7.41
9	0.358	1.48	3.69
10	0.334	1.84	5.03
11	0.296	2.44	5.98
12	0.287	3.26	8.57
13	0.000	3.00	8.57
14	0.000	2.45	9.00
15	0.000	3.44	12.86
16	0.367	2.63	7.33
17	0.372	3.33	8.35
18	0.385	3.36	8.66
19	0.355	1.26	3.15
20	0.362	1.91	7.13
21	0.369	2.10	8.61
22	0.140	4.22	14.6
23	0.115	2.89	10.26
24	0.169	3.16	11.2

Sable	Teneur en eau initiale	Flux d'injection	vitesse mesurée
Essais #	$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/hr)	v (cm/hr)
25	0.259	2.10	4.85
26	0.272	1.87	4.20
27	0.286	2.96	5.6
28	0.000	5.90	21.18
29	0.000	3.58	18.95
30	0.000	5.08	17.14
31	0.380	4.32	11.24
32	0.372	5.32	15.67
33	0.373	4.69	12.15
34	0.361	7.49	18.42
35	0.349	5.85	16.53
36	0.355	5.76	15.99
37	0.288	4.85	13.88
38	0.276	5.90	20.57
39	0.304	3.89	10.79
40	0.253	5.37	17.46
41	0.243	3.02	8.58
42	0.253	3.90	10.48
43	0.366	6.22	17.31
44	0.354	7.61	20.64
45	0.358	6.01	16.22
46	0.199	2.48	7.82
47	0.171	2.97	12.71
48	0.159	3.40	14.2

**Tourbe**    Teneur en    Flux    vitesse  
eau initiale    d'injection    mesurée

Essais #	$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/hr)	v (cm/hr)
1	0.667	7.33	11.95
2	0.690	4.34	7.22
3	0.630	4.97	8.61
4	0.635	5.77	10.33
5	0.654	6.70	10.60
6	0.600	3.31	4.88
7	0.478	8.04	13.86
8	0.482	7.40	14.81
9	0.434	7.89	19.13
10	0.604	7.93	12.56
11	0.617	7.65	12.17
12	0.618	6.17	10.77

**Mélange**    Teneur en    Flux    vitesse  
eau initiale    d'injection    mesurée

Essais #	$\theta_i$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )	q inj (cm/hr)	v (cm/hr)
1	0.000	2.06	5.54
3	0.000	1.83	6.79
4	0.173	6.38	20.00
5	0.166	6.17	13.64
6	0.155	6.13	20.00
7	0.441	7.94	33.46
8	0.451	6.91	33.62
9	0.414	7.50	32.92
11	0.388	2.40	9.46
12	0.557	5.77	17.54

