

Université Laval
Département de Sciences et de Génie
Hiver 2018

Cours GLG-7202

Projet de fin de session

OBJET : Livrable produit par Vincent Taillard, 27 avril 2018

Résumé

Évolution d'un panache d'huile à chauffage dans une zone de pergélisol discontinu : Contexte de villages Nordiques du Nunavik.

Le développement des régions froides de l'Arctique Canadien et l'absence de réseau électrique dans cette région fait des hydrocarbures la source d'énergie principale. Le contexte et les conditions d'utilisation de ces hydrocarbures ont conduit et conduisent encore aujourd'hui à de nombreux déversements spontanés de faible et moyenne quantité en plein cœur des zones habitées. Une des solutions envisagées pour faire face à ce problème consiste à développer une technologie de traitement efficace applicable sur site. Pour envisager un traitement in-situ adapté et efficace, il est utile de pouvoir mieux comprendre l'évolution d'un panache de contaminants dans une région Nordique sujette à la présence de pergélisol et subissant des phénomènes cycliques de gel/dégel de la zone saturée. L'objectif de l'étude consiste à modéliser l'évolution d'un panache de benzène dissout dans une zone de pergélisol discontinu et plus particulièrement au niveau de secteurs résidentiels du village nordique de Kuujuaq. Malgré les nombreuses hypothèses effectuées lors de la sélection des conditions limites et les limitations associées à cette étude, la modélisation a permis de rendre compte de phénomènes intéressants liés à la présence de pergélisol et à la présence de phases de gel-dégel de la zone saturée. En effet, comparativement à un cas dépourvu de pergélisol et ne subissant pas de phases successives de gel-dégel de la zone saturée, les résultats obtenus semblent montrer que :

- La zone d'écoulement libre se concentre en surface dans la partie de la nappe dégelée. Cette zone varie entre 0.5 et 2.5 m de profondeur à partir de la surface au fur et à mesure des années. Le reste du milieu poreux situé au-dessus de la zone de pergélisol reste gelé en permanence;
- Le déplacement du panache est considérablement ralenti par l'écoulement limité à une faible période de temps et à une zone limitée. Le panache a donc tendance à rester en surface lors de sa migration par advection.
- Le phénomène de dispersion est très présent et prend le dessus sur le phénomène d'advection. Même si la dispersion est plus accentuée durant la période estivale, celle-ci est également bien présente durant la période hivernale. Les successions de gel-dégel semblent également favoriser la dispersion du panache.

Il serait intéressant de poursuivre l'étude en prenant soin d'identifier des coefficients de dispersion plus réalistes, de faire varier la recharge en appliquant des taux évolutifs en fonction de la période considérée pour éviter une déformation démesurée de la nappe. Enfin, il serait intéressant d'optimiser les C.L. et les C.I. pour obtenir une zone active simulée plus en accord avec les données de terrain dès l'année 1.

Table des matières

1. Introduction.....	3
Mise en contexte	3
Objectifs.....	3
Développement du modèle conceptuel.....	4
Données disponibles.....	4
Données géographiques.....	4
Données de pergélisol	4
Hydrologie, écoulement	6
Propriétés milieu poreux	6
Données climatiques	8
Propriétés liées au contaminant.....	8
Modèle conceptuel.....	9
Modèle Numérique	12
Conditions aux limites et conditions initiales.....	12
Écoulement.....	13
Transport de masse	13
Transport de chaleur	14
Transport de chaleur et écoulement.....	14
Discretisation.....	15
Paramètres	15
Résultats	15
Calibration, simulation	15
Résultats	16
Limitations	20
Conclusion	21
Bibliographie.....	22
Annexes	23
Annexe 1 : Variation de la température de l'air, de la surface et du taux de recharge en fonction du temps ..	23
Annexe 2 : Variation de la teneur en eau gelée et de la perméabilité relative en fonction de la température.	23
Annexe 3 : discrétisation du modèle.....	24
Annexe 4 : Fichier smoker.data, zone nordique, dispersion faible	26
Annexe 5 : fichier smoker.data, zone sud, dispersion faible	29
Annexe 6: Résultats zone sud, facteur de dispersion faible, t=34 jours	31
Annexe 7. : Résultats zone Sud, facteurs de dispersion faible, t=399 jours.....	32
Annexe 8. : Résultats zone Sud, facteurs de dispersion faible, t=764jours.....	32
Annexe 10 : Zone nordique, facteurs de dispersion élevés, t=34 jrs, t=399 jrs et t=764 jrs respectivement.....	33
Annexe 11 : Zone Sud, facteurs de dispersion élevés, t=34 jrs et t=399 jrs respectivement.....	34

1. Introduction

Mise en contexte

Le développement des régions froides de l'Arctique Canadien autour des activités d'exploration et d'exploitation minières et pétrolifères, des activités militaires et industrielles a conduit à une augmentation du nombre d'habitants et d'infrastructures. De plus, l'absence de réseau électrique dans cette région fait des hydrocarbures la source d'énergie principale (chauffage, production électrique, transports) pour les communautés locales (Sherwood et Cassidy, 2014 ; Yang et al., 2009) et les travailleurs temporaires. Le contexte et les conditions d'utilisation de ces hydrocarbures ont conduit et conduisent encore aujourd'hui à de nombreux déversements spontanés de faible et moyenne quantité en plein cœur des zones habitées. Depuis les années 2000, cette problématique de contamination aux hydrocarbures est bien connue et a été déclarée sérieuse aux yeux des gouvernements du Canada et de la Russie (Yang et al., 2009 ; Chuvillin et al., 2000).

Au Québec, le Gouvernement régional Kativik cherche activement des solutions pour minimiser l'impact environnemental et économique des déversements dans les centres démographiques du Nunavik. En effet, chaque déversement implique des coûts considérables de réhabilitation environnementale basée sur l'excavation et l'enfouissement des sols contaminés dans le sud de la province. Malheureusement, étant donnée le contexte climatique, la biodégradation est très peu efficace. Une des solutions envisagées consiste à développer une technologie de traitement efficace applicable sur site et incluant une étape *ex-situ* (excavation et traitement) sur site lorsque cela ne nuit pas aux infrastructures en place et une étape *in-situ* (traitement sans excavation) pour venir à bout de la contamination située proche ou au-dessous des bâtiments. Pour envisager un traitement in-situ adapté et efficace, il est utile de pouvoir mieux comprendre l'évolution d'un panache de contaminants dans une région Nordique sujette à la présence de pergélisol et subissant des phénomènes cycliques de gel/dégel de la zone saturée.

L'étude se focalise sur le village de Kuujuaq, situé au niveau dans le Nord du Québec à une cinquantaine de kilomètres de la baie d'Ungava. Avec une population de 2700 habitants environ, il est le plus grand village et la capitale administrative et économique du Nunavik et par conséquent sujet à de nombreux déversements. À cette latitude, le village est situé dans une zone de pergélisol discontinu dont la couche active varie entre 2 et 3 m.

Objectifs

L'objectif du présent projet est de modéliser l'évolution d'un panache d'huile à chauffage dissous dans une zone de pergélisol discontinu et plus particulièrement au niveau de secteurs résidentiels du village nordique de

Kuujuaq. L'étude se veut uniquement qualitative et par soucis de comparaison, l'évolution du panache est également modélisée pour un modèle conceptuel et une zone source similaire mais dans une zone où la température de l'air et de la zone saturée est d'environ 8 à 10°C toute l'année.

Développement du modèle conceptuel

Le modèle conceptuel retenu pour l'étude a été développé en se basant sur les données de terrain disponibles et en procédant à une simplification du système basée sur de hypothèses raisonnables.

Données disponibles

Des données concernant la géographie, la géologie, le pergélisol, le climat et l'hydrologie ont pu être collectées dans la littérature disponible.

Données géographiques

Le village de Kuujuaq est situé sur la rive Ouest de la rivière Koksoak à une cinquantaine de kilomètres de la Baie d'Ungava (cf. Figure 1). Le relief général est plat parsemé de collines basses et ondulées. La majorité du village est localisé entre 10 et 65 m d'altitude et les sommets locaux ne dépassent pas 120 m et 100m au Sud-Ouest et à l'Est respectivement. Le village s'étend sur environ 285 km² principalement le long de la rivière Koksoak, les pentes au sein du village sont relativement douces (Aubé-Michaud et *al.*, 2017). Un dénivelé de 1 à 2% environ a été considéré pour le modèle conceptuel.

Données de pergélisol

La figure 1 présente la répartition du type de pergélisol dans la région du Nunavik

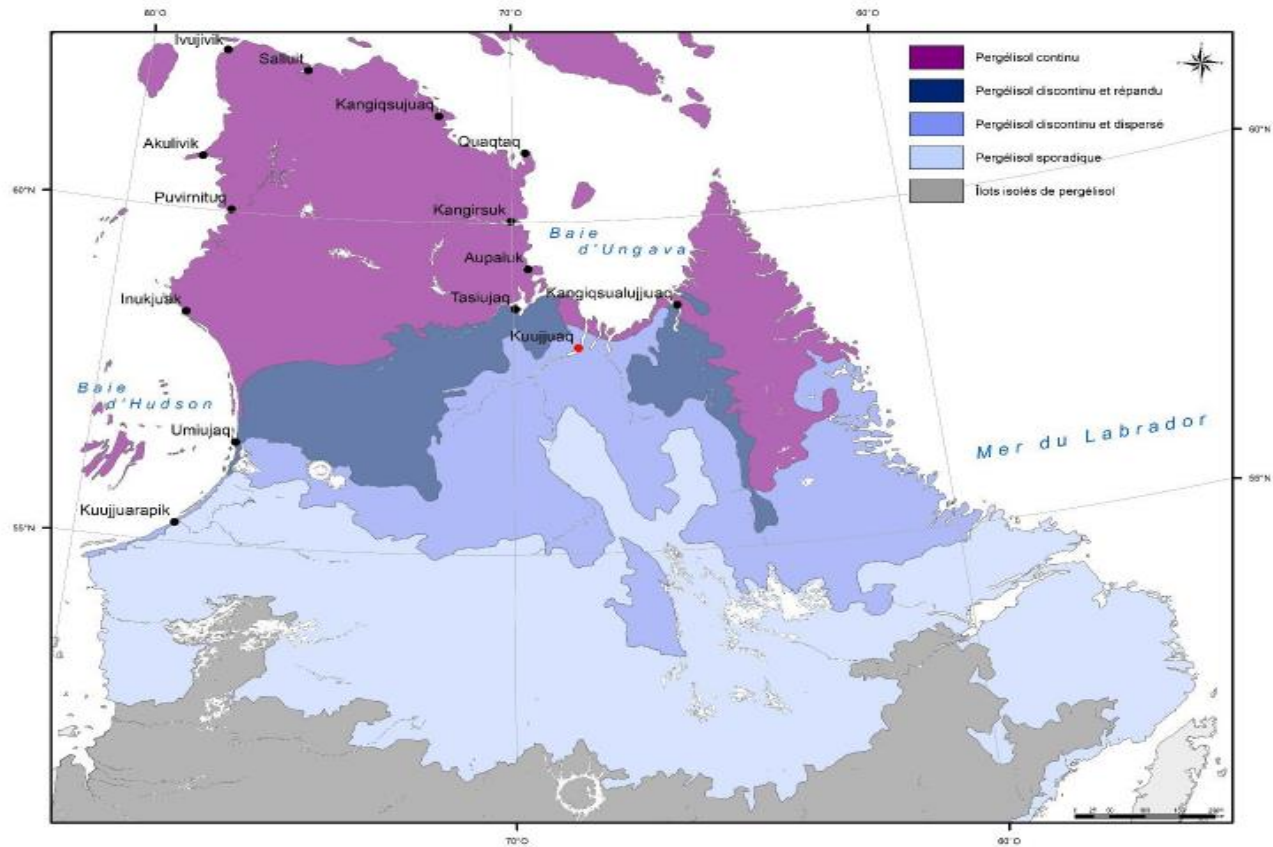


Figure 1 : Localisation de la municipalité de Kuujuaq (point rouge) et des conditions de pergélisol (Allard et al., 2012)

Le village de Kuujuaq est localisé dans une zone de pergélisol discontinu dont l'épaisseur de la couche active dépend de la nature du dépôt. Le front de dégel atteint entre 2 et 4 m selon l'emplacement et la composition du sol (Aubé-Michaud et al., 2017). Le modèle considère une zone active d'environ 2,5 m de profondeur à partir de la surface.

La figure 2 présente des données de température en fonction de la profondeur dans la zone de l'aéroport de Kuujuaq.

Site	Localisation	Dépôt	Profondeur de dégel (m)	T °C moyenne				Période
				1 m	3 m	5 m	7,9 m	
Accotement	Aéroport	Till remanié	-2,57	-1,15	-1,26	-1,01	-0,83	Oct 2006 – sept 2015

Figure 2 : Données de pergélisol, Kuujuaq (Aubé-Michaud et al., 2017)

L'on note que dans cette zone composée principalement de till remanié (graviers silteux, sable silteux avec un peu de gravier, (Allard et al., 2009)) la profondeur de dégel atteint 2.57 m. La température moyenne à 3 m de

profondeur est de -1.26°C , elle descend à -1.01°C à 5 m de fond. Le modèle considère une température constante de -1°C à 6 m de profondeur.

Hydrologie, écoulement

Le village est situé en bordure et dans le bassin versant de la rivière Koksoak, celui-ci représente une superficie de 95 000 km². Celle-ci est longue de 136.5 km et possède, au niveau de Kuujjuak, une largeur comprise entre 1.5 et 2 kms. En raison de la topographie, les eaux de ruissèlement convergent dans les secteurs déprimés situés entre les affleurements rocheux. Ces secteurs sont généralement mal drainés et saturés en eau. Selon quelques sondages réalisés par Carbonneau *et al.* (2015), une nappe d'eau est généralement présente à une profondeur de 40 cm. Il existe de nombreux petits ruisseaux dispersés dans le village, la plupart sont intermittent en été et déversent environ la moitié de leur débit annuel durant la période de crue débutant en juin. Les ruisseaux sont totalement gelés durant la période hivernale (Aubé-Michaud *et al.*, 2017).

- ✓ Par soucis de simplicité, le modèle conceptuel considère un milieu poreux entièrement saturé;
- ✓ Le modèle considère la présence d'un ruisseau;
- ✓ Le modèle considère une nappe libre et la rivière Koksoak comme décharge principale;

Les précipitations moyennes dans la région d'étude sont d'environ 627 mm/an dont 57% sous forme de pluie et 43% sous forme de neige. Le modèle considère des précipitations plus faibles pour des raisons pratiques (*cf.* section "Conditions Limites" et section "Limitations").

Les propriétés des fluides considérés par l'étude sont présentées dans le tableau 1.

Table 1 : Propriétés des fluides considérés

Paramètre	Nomenclature	Unité	Valeur
Chaleur spécifique fluide (eau)*	cf	J/kg/°C	4187
Densité fluide (eau)*	pf	kg/m ³	1000
Chaleur spécifique glace*	ci	J/kg/°C	2108
Densité glace*	pi	kg/m ³	920
Conductivité thermique eau**	tclw	J/m/s/°C	0.574
Conductivité thermique glace**	tcli	J/m/s/°C	2.1

*Molson & Frind (2018)

**<http://www.hukseflux.com/thermal%20conductivity/thermal.htm>

Propriétés milieu poreux

Dans un premier temps, la carte présentée dans la figure 3 a permis d'obtenir des informations sur la nature du sous-sol au niveau de la zone d'étude.

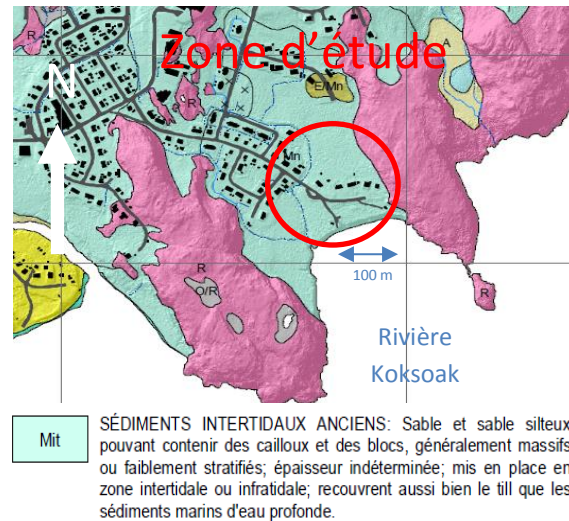


Figure 3 : Dépôts de surface à Kuujuaq (Carbonneau *et al.*, 2015)

Ainsi la zone d'étude est située dans un secteur composé d'alluvions des terrasses fluviales. Les profondeurs d'intérêts pour el projet sont composées de sables, de sable graveleux et de graviers parsemés de cailloux et de blocs rocheux. Par soucis de simplicité, le modèle considère un milieu homogène et isotrope composé principalement de sable grossier. Les propriétés retenues pour sont celles présentées dans le tableau 2.

Table 2 : propriétés du milieu poreux

Paramètre	Nomenclature	Unité	Valeur
Conductivité hydraulique*	Kx, Ky, Kz	m/s	8e-5
Porosité*	porosity		0.35
Conductivité thermique**	thermal K solid	J/m/s/°C	2.7
saturation	sat		1
densité des solides*	ρ_m	kg/m ³	2650
chaleur spécifique des solides*	C _m	J/kg/°C	800

*Lefebvre et Martel (2018)

**Molson & Frind (2018)

Les paramètres de dispersion rassemblés dans le tableau 3 ont été retenus. Ils ont été déterminés à partir des travaux de Bear et Cheng (2010) et des recommandations de Molson (2018) pour un modèle de longueur inférieur ou égal à 100 m. L'étude considère deux types de dispersion : dispersion élevée et dispersion faible, ceci par soucis de comparaison.

Table 3 : Paramètres de dispersion

Paramètre	Nomenclature	Unité	Valeur
Dispersion élevée			
dispersion longitudinale	ALh=Alv	m	10
disp. Transversale horizontale	ALth	m	0.1
disp. Transversale verticale	ALtv	m	0.01
Dispersion faible			
dispersion longitudinale	ALh=Alv	m	1
disp. Transversale horizontale	ALth	m	0.1
disp. Transversale verticale	ALtv	m	0.01

Données climatiques

Les données climatiques de la région de Kuujuaq sont résumées dans le tableau 4 et ont été obtenues à partir des travaux de Aubé-Michaud *et al.* (2017) et sur le site web : <https://fr.weatherspark.com/>.

Table 4 : Données climatiques

Paramètre	Unité	Valeur
Température moyenne hivernale	° C	-16 +/- 0.9
Température minimumale moyenne hivernale	° C	-24 +/- 4
Température moyenne estivale	° C	6 +/- 0.7
Température maximale moyenne estivale	° C	13.5 +/- 4.5
Début de la saison de gel	date	4 octobre +/- 1 jour
Début de la saison de dégel	date	4 juin +/- 1 jour
Nombre de jour de dégel	jours	120 +/- 4 jours

Propriétés liées au contaminant

Le contaminant suivi dans le cadre de l'étude est le benzène puisqu'on le retrouve dans le fuel lourd et le diesel utilisé communément dans les fournaies et les génératrices (Montgomery, 2007). C'est par ailleurs un des composés les plus toxiques. La solubilité du benzène est de 1750 mg/L à 20 °C et la norme de concentration dans l'eau potable est de 0.5 µg/L. Le modèle considère une zone source de benzène dont la concentration C/C_0 est égale à sa limite de solubilité en considérant la température moyenne interne. Le modèle ne considère pas de dégradation microbienne ($\lambda=0$), l'ampleur de l'évolution du panache sera donc surestimée. En effet, le modèle ne permettait pas de faire varier le taux de dégradation avec le temps et, étant donnée la faible activité microbienne à la latitude et aux températures considérées, il a été décidé de fixer le taux de dégradation à 0. Puisque l'étude se veut comparative. Enfin, le modèle considère un facteur de retard de 1.5 ($R=1.5$) basé sur les recommandations du cours GLG7202;

Le coefficient de diffusion a été déterminé en se basant sur les travaux de Gustafson and Dickhut (1994) qui ont déterminé la valeur de DD pour le benzène dans l'eau à différentes températures. Un facteur de tortuosité de 0.5 jugé représentatif du milieu poreux a été ensuite appliqué. Les paramètres d'intérêt sont résumés dans les tableaux 5 et 6 pour un contexte nordique et un contexte du Sud.

Table 5 : Paramètres associés au contaminant, zone nordique

Paramètre	Nomenclature	Unité	Valeur
Coefficient de diffusion (à 2.5°C)*	DD*	m ² /s	0.32.10 ⁻⁹
Facteur de retard	R		1.5
Dégradation	λ	h ⁻¹	0
Limite de solubilité (à 2.5°C)**	ND	mg/L	1550

*Lefebvre et Martel (2018)

**Par John H. Montgomery (2007)

Table 6 : Paramètres associés au contaminant, zone sud

Paramètre	Nomenclature	Unité	Valeur
Coefficient de diffusion (à 8°C)*	DD	m ² /s	0.38.10 ⁻⁹
Facteur de retard	retard		1.5
Dégradation	decay	h ⁻¹	0
Limite de solubilité (à 8°C)**	ND	mg/L	1626

*Lefebvre et Martel (2018)

**Par John H. Montgomery (2007)

Modèle conceptuel

Le modèle conceptuel considéré est présenté dans la figure 5. Il a été développé en se basant sur les données réelles de la zone d'étude tel que présenté dans la figure 4.

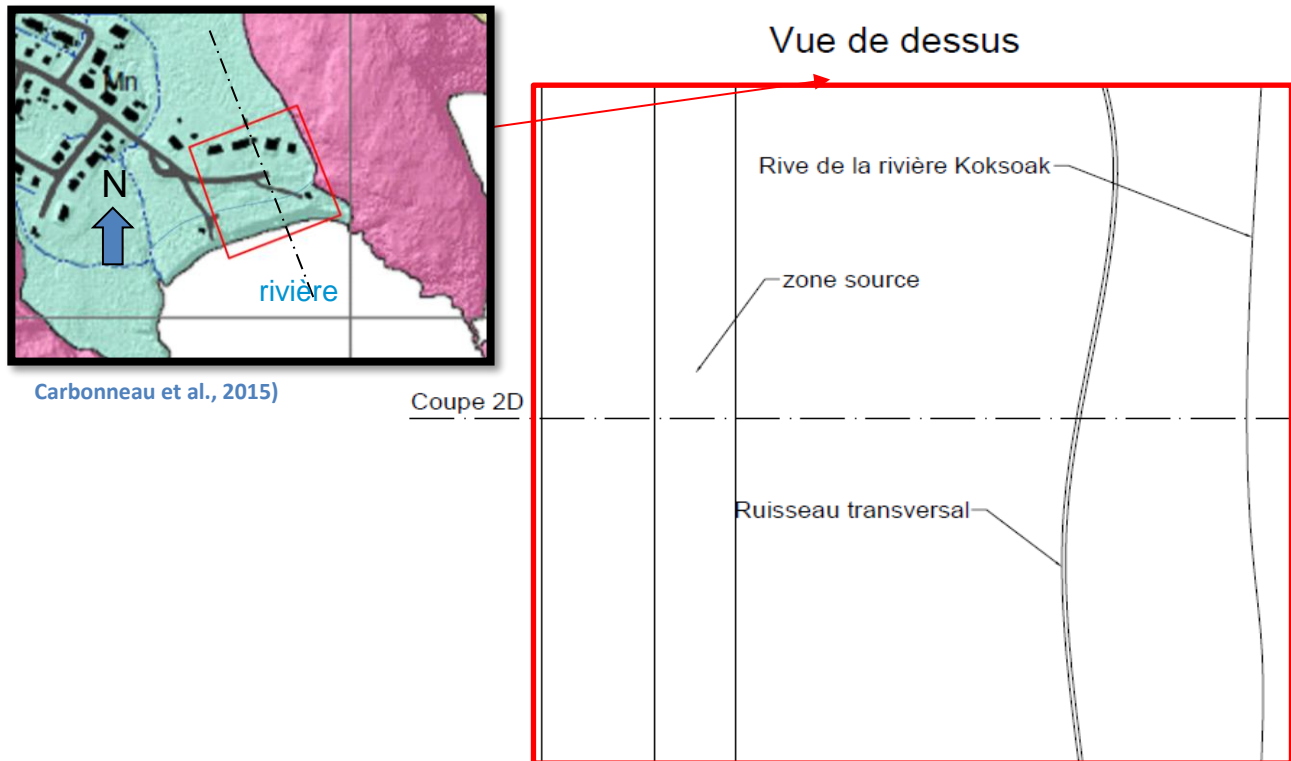


Figure 4 : Modèle conceptuel, origine et vue de dessus

Comme le montre la figure 4, on considère une coupe 2D située au centre de la zone d'étude et dans le sens de l'écoulement de la nappe.

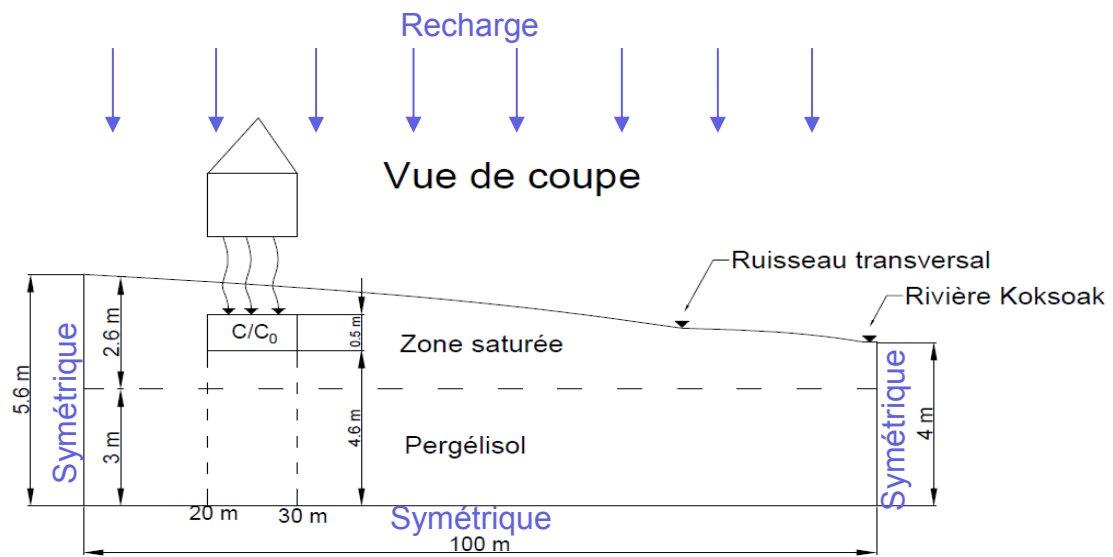


Figure 5 : Modèle conceptuel général, vue de coupe

Dans le modèle conceptuel général retenu pour l'étude (cf. figure 5) on retrouve ainsi :

- ✓ Une frontière symétrique en amont : Dans la réalité, une recharge latérale est existante. Elle n'est pas considérée dans le modèle pour des raisons pratiques. En effet, le modèle ne permet pas de faire varier la recharge latérale en fonction de la température et cela poserait donc des problèmes lorsque la nappe est gelée en hiver;
- ✓ Une frontière symétrique en aval : La rivière Koksoak est suffisamment large et profonde pour que cette hypothèse soit raisonnable;
- ✓ Une recharge de surface répartie uniformément sur l'ensemble de la surface;
- ✓ Une topographie de nappe avec une élévation de 4.5m au niveau du ruisseau en $x=75\text{m}$ et une élévation de 4 m au niveau de la rivière en $x=100\text{m}$. Ces hauteurs varient dans le cas de la zone sud (cf. Conditions Initiales);
- ✓ Un fond imperméable : la présence de pergélisol toute l'année à cette profondeur rend cette hypothèse raisonnable. Dans le cas de la zone sud, on considère la présence d'un massif rocheux à la base;
- ✓ Une limite de pergélisol à 3m de la surface. On considère une couche de faible conductivité (1.10^{-20} m/s) dans le cas de la zone sud;
- ✓ Un volume de benzène dilué à une concentration égale à sa limite de solubilité. Le volume affecté se situe entre 20 et 30 m et à une profondeur d'environ 0.2 m. La zone source a été positionnée à une distance raisonnable des limites supérieures et gauche pour éviter toute interférence avec les conditions limites définies. On considère ici du benzène dilué à une certaine profondeur pour les raisons suivantes :
 - Car on a choisi de ne pas considérer de zone non saturée, donc il n'était pas possible de modéliser la migration du contaminant de la source réelle vers la nappe;
 - Car le modèle ne permet pas de considérer une phase libre de contaminant, donc on considère une phase diluée;

Le milieu poreux est considéré comme hétérogène :

- Dans le cas de la zone Nordique :
 - On retrouve une couche de pergélisol sur une épaisseur de 3 m à partir du fond, la perméabilité est très faible dans cette zone homogène et isotrope;
 - La couche située au-dessus du pergélisol est considérée homogène et isotrope;
- Dans le cas de la zone Sud :
 - On retrouve une couche de faible conductivité hydraulique sur une épaisseur de 3 m à partir du fond, la perméabilité est très faible dans cette zone homogène et isotrope;
 - La couche située au-dessus de la couche de faible conductivité est considéré homogène et isotrope;

Pour la zone Nordique, les systèmes d'écoulement, de transport de masse et de chaleur sont en régime transitoire. Pour ce qui est de la zone Sud, seul le système de transport de masse est en régime transitoire, l'écoulement et le transport de chaleur sont en régime permanent.

Modèle Numérique

Le modèle utilisé pour l'étude est le modèle Heatflow smoker (Molson & Frind, 2018). Ce modèle couplé permet de simuler les systèmes d'écoulement, de transport de chaleur et de transport de masse. Un modèle couplé étant indispensable dans notre cas puisque l'ensemble des systèmes sont en régime transitoire dans le cas de la zone Nordique et que les transports de masse et de chaleur dépendent du système d'écoulement.

Le modèle procède à des simulations par éléments finis permettant une grande précision dans les calculs et une déformation du maillage. Les éléments sont des parallélépipèdes rectangles avec nœuds à chaque extrémité des arêtes. Heatflow permet également de simuler des modèles 1D, 2D et 3D : dans notre cas, un modèle 2D était suffisant pour obtenir des résultats intéressants. L'absence de données de terrain et les nombreuses hypothèses liées au modèle conceptuel ne permettait pas d'effectuer une simulation 3D d'intérêt.

Le modèle a également l'avantage de considérer une variation de la recharge de surface en fonction de la température. Enfin, il permet de faire varier la teneur en eau gelée et non gelée et la perméabilité relative associée aux deux phases en fonction de la température.

Conditions aux limites et conditions initiales

Les conditions limites et les conditions initiales retenues sont présentées par la suite. La figure 6 présente la localisation des différentes faces sur le modèle général.

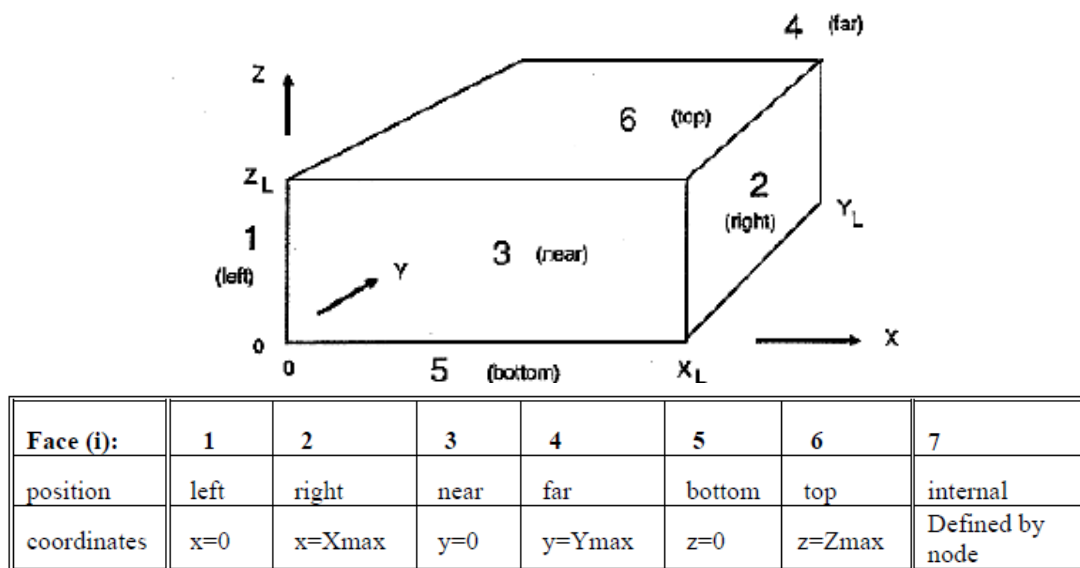


Figure 6 : Localisation des différentes faces (Molson & Frind, 2015)

Écoulement

Les conditions limites associées à l'écoulement sont présentées dans le tableau 7.

Table 7 : Conditions limites pour la simulation d'écoulement

Face	Conditions limites	Remarques
1	flux nul	On considère un flux nul pour des raisons pratiques liées à la présence de pergélisol
2	flux nul	On considère un flux nul en raison de la présence de la rivière
3	flux nul	On choisit une coupe 2D dans le sens de l'écoulement, on considère que les flux latéraux sont nuls
4	flux nul	On considère un fond imperméable en raison de la présence de pergélisol
5	flux nul	La recharge de surface dépend de la température extérieure : si $T < 0$, le taux de recharge = 0, si $T > 0$, le taux de recharge = 1 (cf. C.L. Transport de chaleur).
6	$q = 2.10^{-8}$ m/s	
7	Charge fixée ($H(x)$): $H(75)=4.5\text{m}$, $H(100)=4\text{m}$	La hauteur de la nappe est fixée en fonction de la topographie évaluée. Dans le cas de la zone sud $H(75)=4.1\text{m}$, $H(100)=3.7\text{m}$.

- Une charge de 4m dans l'ensemble de la zone d'étude été prise en compte comme condition initiale.

Transport de masse

Les conditions limites associées au transport de masse sont présentées dans le tableau 8.

Table 8 : Conditions limites pour le modèle de transport de masse

Face	Conditions limites	Remarques
1	flux nul	On aurait pu également choisir un type 1 avec une concentration nulle étant donné le sens de l'écoulement
2	flux nul	On choisit de considérer un phénomène de dispersion nul à travers cette limite
3	flux nul	On choisit une coupe 2D, on considère que les flux latéraux sont nuls
4	flux nul	On considère un gradient nul à travers cette limite imperméable
5	flux nul	On considère une concentration nulle en surface, sauf au niveau de la rivière et du ruisseau pour permettre au contaminant de circuler
6	Concentration nulle (ou presque)	

- La condition initiale consiste à imposer une concentration de Benzène au niveau de la zone source identifiée dans la figure 5. Cette concentration correspond à la limite de solubilité du benzène en fonction de la température de la zone considérée (Montgomery, 2007). Par défaut, le reste du milieu possède une concentration nulle.

Transport de chaleur

Les conditions limites associées au transport de chaleur sont présentées dans le tableau 9.

Table 9 : : Conditions limites pour le transport de chaleur

Face	Conditions limites	Remarques
1	flux nul	On néglige les apports ou les pertes de chaleur à travers cette limite
2	flux nul	On néglige les apports ou les pertes de chaleur à travers cette limite
3	flux nul	On considère un modèle 2D et on néglige donc les apports et pertes de chaleur à travers ces deux limites
4	flux nul	
5	T=-1°C	À cette profondeur, le pergélisol a une température constante de -1°C. Dans le cas de la zone Sud, la température est fixée à 8°C
6	T imposée variable	La variation de température est définie par la suite. Dans le cas de la zone Sud, cette température est fixée à 8°C

- La condition initiale consiste à imposer température de -1°C dans la zone de pergélisol et une température variant entre -1°C et 10°C entre la zone de pergélisol et la surface.
- Dans le cas de la zone Sud, cette température est fixée à 8°C.

Dans le cas de la zone nordique, la variation de température en fonction du temps en surface a été imposée suivant l'équation suivante :

$$surf_{at}(t) = amp + surf_{min} + amp * \sin(2 * \frac{3.1415926}{period} * (t + phase))$$

Les paramètres retenus sont les suivants : surfmin=-23 ; amp = 16.5 ; phase=0. Ce qui permet de faire varier la température de l'air entre +10°C et -23°C. La température de surface varie elle entre 10°C et -5°C. La température minimale a été fixée en considérant un couvert de neige isolant à la surface du sol et limitant la température minimale à -5°C (cf. annexe 1).

Transport de chaleur et écoulement

Dans le cas où les températures en surface sont négatives (zone nordique uniquement), la recharge de surface ne peut pas s'appliquer. La recharge de surface est donc cyclique en fonction de la température : si T>0 la recharge s'applique, si T<0, la recharge est nulle. Une figure présente la variation de température de l'air, la variation de la température du sol et la variation du taux de recharge en fonction du temps en annexe 1.

Par ailleurs, la variation de la température dans la zone saturée implique des phénomènes de gel et dégel et donc des teneurs en eau gelées et non gelées qui varient. Ce qui implique également des perméabilités relatives variant en fonction de l'importance d'un état par rapport à l'autre (liquide-solide).

L'annexe 2 présente les deux modèles et paramètres pris en compte par le modèle pour la teneur en eau gelée et non gelée et l'évolution de la perméabilité relative en fonction de la température.

Discrétisation

Les démarches effectuées pour discrétiser le modèle sont rassemblées dans l'annexe 3.

Paramètres

Les paramètres principaux sélectionnés pour le modèle ont été définis dans la section "modèle conceptuel". L'intégralité des paramètres sont présentés dans les fichiers smoker.data, associés au modèle nordique et au modèle du Sud dans le cas de dispersion faible, dans les annexes 4 et 5 respectivement.

Résultats

Calibration, simulation

L'aspect qualitatif de l'étude et le manque de données de terrain n'ont pas permis d'effectuer une calibration de la nappe pour le système d'écoulement.

En revanche, dans le cas nordique, la hauteur de la nappe a été fixée au niveau du ruisseau et de la rivière en se basant sur la topographie. Ensuite, la valeur de k a été évaluée en se basant sur la littérature puis adaptée par essais-erreurs pour permettre d'avoir une pente de la nappe satisfaisante (environ 1 à 2%). Malheureusement, il n'a pas été possible d'appliquer la recharge réelle dans le secteur pour les raisons soulevées dans la section "données climatiques". La recharge a donc été fixée à $2 \cdot 10^{-8}$ m/s, celle-ci ne s'appliquant que lorsque les températures sont positives. Dans le cas de la zone Sud, la recharge, les valeurs de k et la pente générale de la nappe ont été conservées. En revanche, les hauteurs fixes au niveau du ruisseau et de la rivière ont été adaptées pour permettre un schéma d'écoulement considéré acceptable.

Pour le modèle de transport de chaleur, l'évolution des températures de surface ont été calibrées en fonction des données météorologiques disponibles dans cette région. Les valeurs observées et les valeurs simulées par le modèle sont présentées dans le tableau 10.

Table 10 : Données climatiques observées et simulées

Paramètre	Unités	Simulé	Observé*
moyenne annuelle	° C	-6,5	-4,9 +/-0.4
moyenne estivale	° C	6,5	6 +/-0.7
moyenne hivernale	° C	-14,2	-16 +/-0.9
jour dégel	jours	136	120
max estivale	° C	10,0	13,5 +/-4.5
minimum hivernale	° C	-23,0	-24 +/-4

*Aubé-Michaud *et al.*, 2017

L'on note certaines différences notamment au niveau de la température annuelle moyenne et du nombre de jours de dégel. Malgré les efforts déployés, il n'a pas été possible de se rapprocher plus des données observées.

Résultats

Cette section présente les résultats obtenus dans le cas de la zone nordique pour des facteurs de dispersion faibles. Les résultats concernant la zone Sud pour des facteurs de dispersion faibles sont présentés en annexe 6, 7 et 8. Les résultats sont présentés pour t=34 jours, t=399 jours et t=764 jours, soit durant la période estivale après 102 jours de dégel (sur 136 jours) pour l'année 1, l'année 2 et l'année 3.

Une vidéo de la simulation complète pour le cas zone nordique est disponible en annexe 9 pour le transport de masse.

La figure 7 présente les résultats concernant la zone nordique pour des coefficients de dispersion faible à t= 34 jours. Les streamtraces sont également présentés, les marqueurs ne sont pas indiqués par soucis de lisibilité.

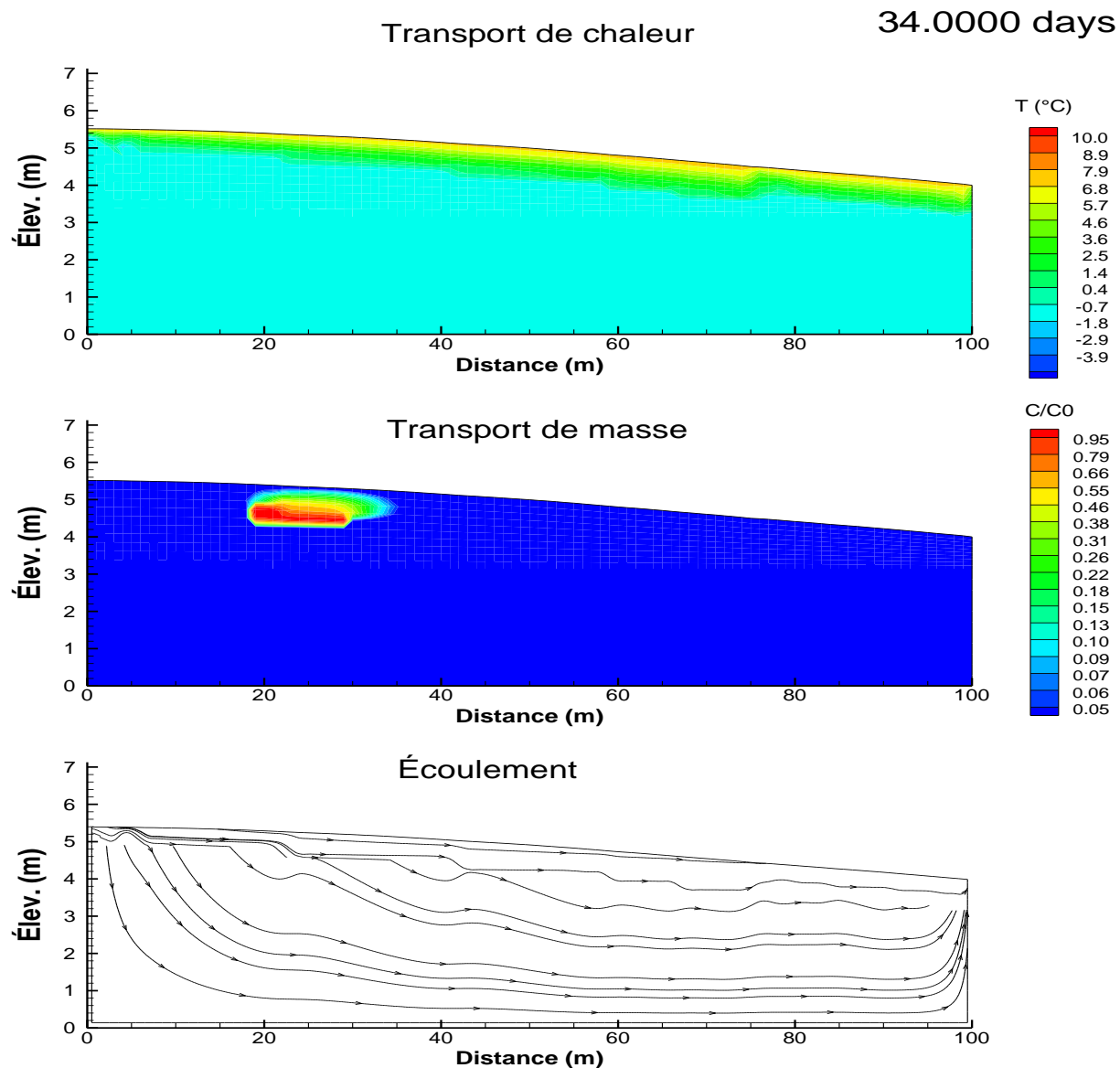


Figure 7 : Zone Nordique, coefficients de dispersion faible, $t=34$ jours

L'on note que malgré la période estivale avancée, le modèle simule un milieu poreux encore largement gelé et au sein duquel l'écoulement est limité en surface. Les températures >0 se concentrent dans un horizon de 0.5 à 1m à partir de la surface. Le contaminant est donc entraîné par advection en surface. La nappe est relativement élevée et atteint 5.5m au amont. En effet, la présence eau gelée empêche la recharge de s'écouler en profondeur, tout l'écoulement s'effectue en surface et vient gonfler la hauteur de la nappe.

En comparaison, pour la même période dans le cas de la zone Sud (cf. annexe 6), l'on note un déplacement du panache par advection relativement similaire. En revanche le phénomène de dispersion est beaucoup plus

important et les concentrations ont considérablement diminuées au sein du panache. La hauteur de la nappe est plus faible est atteint seulement 4.6 m en amont, en effet la recharge est libre de s'écouler dans l'ensemble de la zone de conductivité élevée.

La figure 10 présente les résultats obtenus dans le cas de la zone nordique après $t=399$ jours.

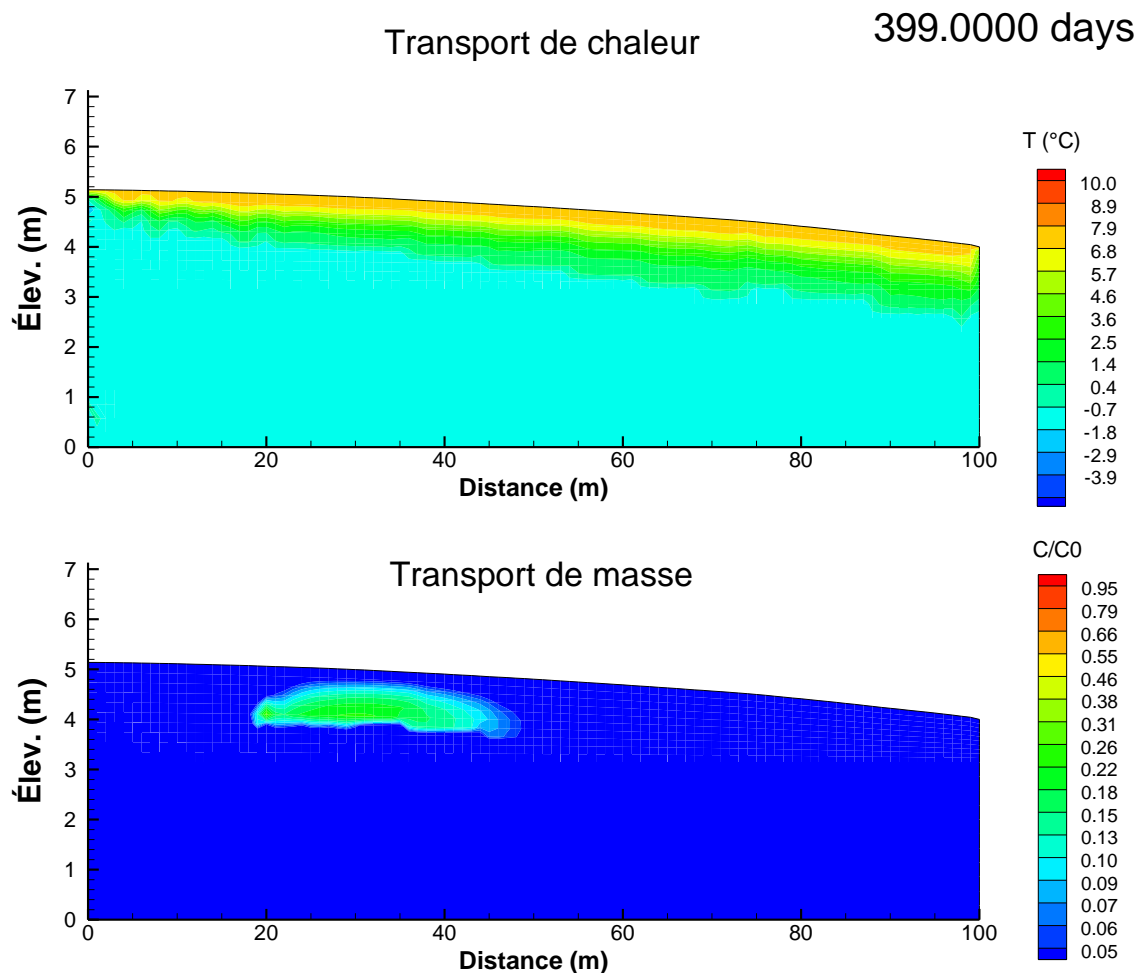


Figure 8 : Zone Nordique, coefficients de dispersion faible, $t=399$ jours

Après 399 jours, l'on remarque que la zone active est plus étendue : les températures sont positives dans un horizon de surface dont l'épaisseur atteint environ 1.7 m en aval. Le déplacement du panache par advection se concentre donc dans cette zone au sein de laquelle l'écoulement est permis. L'on note également une dispersion importante du panache et une concentration résiduelle ne dépassant pas la valeur de $C/C_0=0.38$. Ce phénomène de dispersion a lieu pendant les périodes estivales et hivernales comme le montre l'annexe 1.

En comparaison, dans la zone Sud (cf. annexe 7), le panache a été largement translaté par advection, le front atteint la distance de 70 m contre 50 m dans la zone nordique. On note également une dispersion plus importante et une concentration résiduelle ne dépassant pas 0.1 C/C_0 . Enfin, sans surprise, le panache reste au-dessus de la zone de faible conductivité.

La figure 11 présente les résultats obtenus dans le cas de la zone nordique après $t=764$ jours

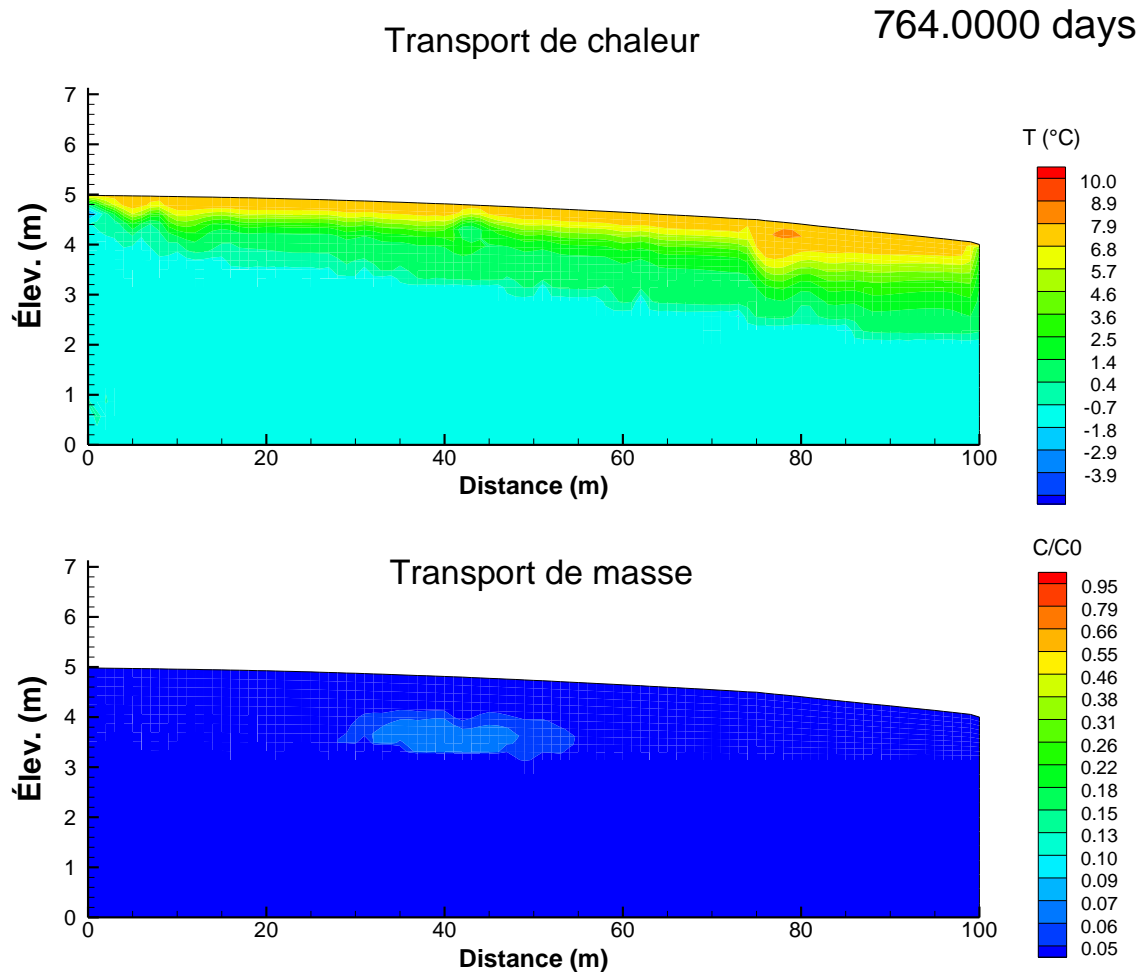


Figure 9 : Zone Nordique, coefficients de dispersion faible, $t=764$ jours

L'on note tout d'abord que la zone active atteint une profondeur de 2.5 m en aval, ce qui correspond aux données de terrain. On remarque également un point chaud au niveau du ruisseau. La zone d'écoulement libre est plus importante que dans les cas précédents et le front du panache atteint désormais 55 m. Le phénomène de dispersion hivernal et estival a réduit considérablement les concentrations au sein du panache, celle-ci ne dépassent plus 0.1 C/C_0 .

En comparaison, pour ce qui est de la zone Sud (cf. annexe 8), le panache s'est complètement dispersé dans la nappe et l'on n'en retrouve plus de trace.

À titre indicatif, les résultats concernant le transport de masse dans le cas de facteurs de dispersion élevés sont présentés en annexe 10 pour la zone Nordique et en annexe 11 pour la zone Sud. Seuls les temps $t=34$ jrs, $t=399$ jrs et $t=764$ jrs sont présentés.

Limitations

Les principales limitations liées à cette étude sont présentées par la suite :

- La zone sud a été créée uniquement par soucis de comparaison et pour mieux comprendre les phénomènes liés à la présence de pergélisol et aux phénomènes de gel-dégel. La comparaison avec la zone nord est uniquement qualitative et à prendre avec recul;
- La recharge sélectionnée est trop faible pour être représentative : 2.10^{-8} m/s considérée par le modèle à la place de $5.33.10^{-8}$ m/s observé sur site. En effet, il n'était pas possible d'appliquer la recharge réelle sans déformer démesurément la nappe, ceci en raison de la faible perméabilité relative du milieu poreux saturé au début de la période estivale;
- La différence de température entre les précipitations et l'air ambiant a été fixée à 0. Dans les faits, les précipitations sont toujours plus froides que l'air ambiant. Il serait utile d'obtenir des données de température des précipitations pénétrant la surface en fonction du temps. En effet, la température des eaux pénétrant la nappe a un impact important sur le dégel de la zone active et donc sur le système d'écoulement global;
- Le Milieu poreux est supposé homogène et isotrope. Il serait utile d'obtenir des données de terrain précises pour améliorer la représentativité du milieu poreux;
- Le modèle conceptuel ne considère pas de recharge latérale. Ce n'est pas le cas en réalité, cette condition a été retenue pour simplifier le cas d'étude. Il serait intéressant d'appliquer une recharge latérale adaptée au contexte et pouvant également varier en fonction du temps avec un taux de recharge évolutif;
- La zone source est supposée très longue et l'étude considère uniquement le benzène dissout. Il serait intéressant de modéliser un déversement réel incluant une phase libre, une migration dans le milieu poreux et un transfert de phase de la phase libre au milieu aqueux;
- On suit le benzène dissout à une certaine profondeur alors celui-ci devrait se maintenir au-dessus de la surface. Mais comme le modèle ne supporte pas une condition limite de type 3, et une condition limite de type 1 avec $C=0$ a été fixée en surface. Par conséquent, la zone source se situe au-dessous de la surface;
- Les conditions initiales de température sont très importantes et ont un gros impact sur les résultats de la simulation : il serait important de connaître plus précisément les températures du sous-sol en fonction de la période de l'année et d'optimiser les conditions initiales en conséquence;
- Les facteurs de dispersion ont un gros impact sur la modélisation, il serait utile de déterminer avec plus de précisions ces facteurs pour améliorer la réponse du modèle;

Conclusion

Ainsi, malgré les nombreuses hypothèses effectuées lors de la sélection des conditions limites et des limitations associées à cette étude, la modélisation a permis de rendre compte de phénomènes intéressants liés à la présence de pergélisol et à la présence de phases de gel-dégel de la zone saturée.

En effet, comparativement à un cas dépourvu de pergélisol et ne subissant pas de phases successives de gel-dégel de la zone saturée, les résultats obtenus semblent montrer que :

- La zone d'écoulement libre se concentre en surface dans la partie de la nappe dégelée. Cette zone varie entre 0.5 et 2.5 m de profondeur à partir de la surface au fur et à mesure des années. Le reste du milieu poreux situé au-dessus de la zone de pergélisol reste gelé en permanence;
- Le déplacement du panache est considérablement ralenti par l'écoulement limité à une faible période de temps et à une zone limitée. Le panache a donc tendance à rester en surface lors de sa migration par advection.
- Le phénomène de dispersion est très présent et prend le dessus sur le phénomène d'advection. Même si la dispersion est plus accentuée durant la période estivale, celle-ci est également bien présente durant la période hivernale. Les successions de gel-dégel semblent également favoriser la dispersion du panache.

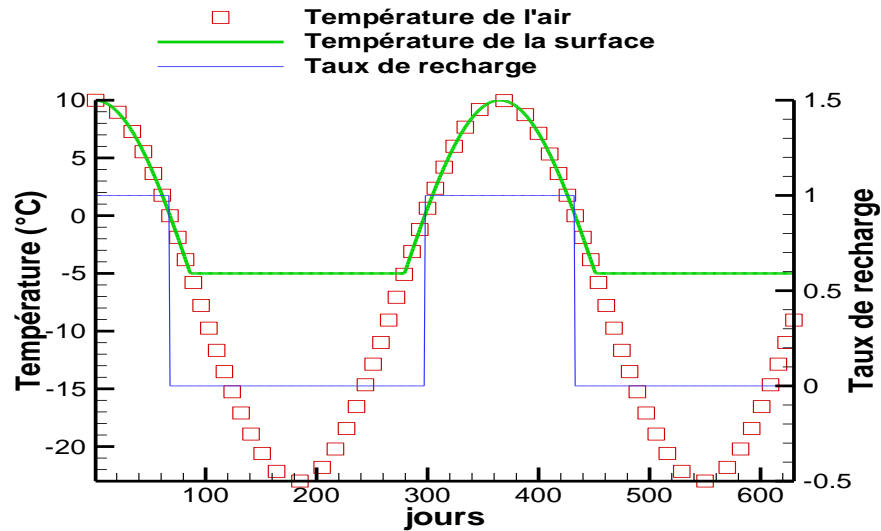
Il serait intéressant de poursuivre l'étude en prenant soin d'identifier des coefficients de dispersion plus réalistes, de faire varier la recharge en appliquant des taux évolutifs en fonction de la période considérée pour éviter une déformation démesurée de la nappe. Enfin, il serait intéressant d'optimiser les C.L. et les C.I. pour obtenir une zone active simulée plus en accord avec les données de terrain dès l'année 1.

Bibliographie

- Allard, M. et Lemay, M., (2012). Nunavik and Nunatsiavut : From science to policy. An Integrated Regional Impact Study (IRIS) of climate change and modernization. ArcticNet Inc., Quebec City, Canada, 303 p.
- Allard, M., Sarrazin, D. et l'Hérault, E., (2009). Évaluation des conditions du pergélisol sous la piste 07-25 à Kuujuaq. Réalisé pour le compte de Transports Canada. Centre d'études nordiques, Université Laval, Québec. 132 p.
- Aubé-Michaud, S., Allard, M. et L'Hérault, M., (2017). Identification des risques actuels et appréhendés sur le territoire des communautés du Nunavik en fonction des changements climatiques – phase 2 : Document de synthèse Kuujuaq. Rapport produit pour le compte du Ministère de la sécurité publique du Québec. CEN, UL.
- Bear, J., & Cheng, A-H., (2010). Modelling Groundwater Flow and Contaminant Transport, Springer.
- Carbonneau, A.S., Aubé-Michaud, S., et Allard, M., (2015). Dépôts de surface, KUJJUAQ, Québec, Nunavik; Centre d'études nordiques, échelle 1:12 000, Poly-Géo inc.,
- Chuvilin, E., et al., (2000). The use of permafrost for the storage of oil and oil products and the burial of toxic industrial wastes in the Arctic. *Polar Record*, 36(198), 211-214. doi:10.1017/S0032247400016478.
- Gustafson, K.E. and Dickhut, R.M., (1994). Molecular diffusivity of polycyclic aromatic hydrocarbons in aqueous solution, *J. Chem. Eng. Data*, 39(2):281-285.
- Lefebvre, R. et Martel, R., (2018). GL9602, Compilation de valeurs typiques pour les propriétés multiphasées des fluides et des matériaux. Notes de cours, INRS-ETE.
- Molson, J., (2018). GLG7202, Modélisation en Hydrogéologie. Notes de cours, Université Laval.
- Molson, J., & Frind, E.O., (2018). Heatflow -smoker, version 11.0. Userguide.
- Montgomery, J., H., (2007). Groundwater Chemicals Desk Reference, Fourth Edition. CRC press, ISBN : 0-8493-9276-4.
- Sherwood, M. K., and Cassidy, D. P., (2014). "Modified Fenton oxidation of diesel fuel in arctic soils rich in organic matter and iron." *Chemosphere* 113(Supplement C): 56-61.
- Yang, S.-Z., et al. (2009). "Bioremediation of Oil Spills in Cold Environments: A Review." *Pedosphere* 19(3): 371-381.

Annexes

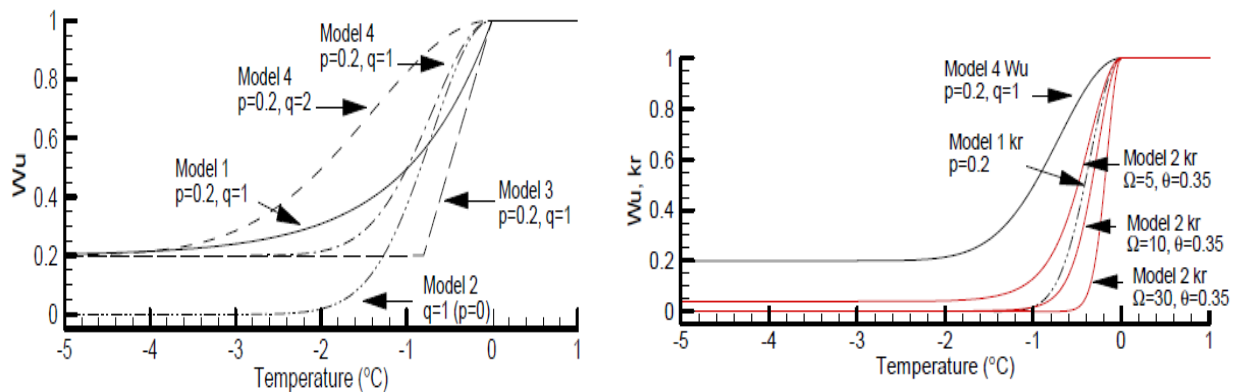
Annexe 1 : Variation de la température de l'air, de la surface et du taux de recharge en fonction du temps



Variation de la température de l'air, de la température de surface et du taux de recharge dans le cas de la zone nordique

Des détails supplémentaires associés à cette figure sont définies dans l'annexe 2.

Annexe 2 : Variation de la teneur en eau gelée et de la perméabilité relative en fonction de la température



Variation de la teneur en eau (W_u) et de la perméabilité (k_r) en fonction de la température

- ✓ Le modèle retenu pour la teneur en eau liquide (W_u) est un modèle de type 1 avec $p=0.1$ et $q=1$;

- ✓ Le modèle retenu pour la perméabilité relative (k_r) est un modèle de type 2 avec $\Omega=50$ et $\theta=0.35$;

Annexe 3 : discrétisation du modèle

Nous avons voulu vérifier que les discrétisations spatiale et temporelle associées au modèle respectaient les critères du nombre de Peclet (Pe) et du nombre de Courant (Cr) associé. Cependant, le système étant 2D, nous avons dû considérer les nombres de Pe et de Cr suivant x et z . Les vitesses considérées sont celles mesurées dans le cas du modèle du Sud aux coordonnées $(x;z)=(60;4)$, c'est en effet pour ce modèle que les vitesses V_x et V_z étaient les plus importantes :

- $V_x = 2,34 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$;
- $V_z = 4,85 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}$;

La discrétisation retenue est la suivante :

- $\Delta x = 1$; $\Delta y = 1$; $\Delta z = 0.33$;
- $\Delta t = 0.1$; Cette valeur faible a été retenue pour s'assurer d'obtenir une réponse plausible étant donnée la complexité du modèle et les trois processus à simuler.

Nous avons ensuite déterminé les nombres de Peclet grâce aux relations suivantes associées à une dispersion bidimensionnelle dans le cas du modèle du Sud :

$$Pe_x = \left| \frac{v_x \Delta x}{D_{xx}} \right| \quad \text{avec} \quad D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{\bar{v}} + \alpha_T \frac{v_y^2}{\bar{v}} + D^*$$

$$Pe_z = \left| \frac{v_z \Delta z}{D_{zz}} \right| \quad \text{avec} \quad D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{\bar{v}} + \alpha_T \frac{v_z^2}{\bar{v}} + D^*$$

$$\text{Avec } \bar{v} = \sqrt{v_x^2 + v_z^2} = 2.34 \cdot 10^{-6} \text{ m/s} \quad \text{et} \quad D^* = 0.38 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

Nous avons obtenu dans le cas de la dispersion faible ($\alpha_L=1$ et $\alpha_T=0.01$)

- $Pe_x = 1.00$;
- $Pe_z = 0.65$;

On note donc que la discrétisation spatiale retenue pour notre modèle respecte le critère visé, soit $Pe < 2$, pour les composantes en x et en z . Nous avons ensuite vérifié les composantes en x et z du nombre de courant grâce aux relations suivantes :

- $Cr_x = \frac{v_x \Delta t}{\Delta x} = 0.02;$
- $Cr_z = \frac{v_z \Delta t}{\Delta z} = 0.00127;$

En considérant un Peclet limite de 2 les valeurs limites pour le nombre de Courant sont de :

- $Cr_x = \frac{Pe_x}{2} = 0.5;$
- $Cr_z = \frac{Pe_z}{2} = 0.325;$

La discrétisation temporelle choisie respecte donc le critère du nombre de Courant également.

Dans les cas de la zoner Sud avec dispersion élevée, les zones Nordiques à dispersion faible et élevée, il est donc évident que ces critères sont respectés dans la majorité du domaine. En effet, les vitesses sont plus faibles dans le cas zone nordique que dans le cas zone sud et un facteur de dispersion plus élevé permet un maillage plus grossier.

Annexe 4 : Fichier smoker.data, zone nordique, dispersion faible

THERMAL HEAT FLOW MODEL: therm.data, Basel heat

101x2x7 TOTAL TRANSPORT NODES (100x1x6 ELEMENTS) 2D cross-section

Feb 2017

```

1 0 1 0 0 0 1 3 0 0 0 1 1 ;KPRT,KCN,KWT,KINT,KINTV,KGO,ksat,kmass,ktair,krk,kdz,ksubtr,Krltop

1 1 1 ;ngx,ngy,ngz (number of subregion in each directions)
100 ;xlim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc
1 ;ylim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc
6 ;zlim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc

100 ;nlx dx= 1
1 ;nly dy= 20
21 ;nlz dz=

10 0. ;nwtl, DATUM (flow) counting down from the top
26 1 1 22 +1 ;observation well
51 1 1 22 +1 ;observation well
76 1 22 22 +1 ;sample in the river
101 1 22 22 -1 ;sample in the river

0 0 0 0 0 0 1 1 0.000 -1 ;no fractures

0 0 0 0 0 2 5 ;B.C.'S (FLOW)
1 101 1 2 2E-08 -1 ;flux top m/s (ynod1, ynod2 ; znod1, zond2)
76 76 1 2 21 21 4.5 +1 ;head fixed node middle (little river, 4.5m)
101 101 1 2 21 21 4 -1 ;head fixed node right (soak river, 4m)

1 2100 8.000E-5 8.000E-5 8.000E-5 2.7 830.0 2650.00 .35 1.0 -1 ;elements, KX, KY, KZ (m/s), thermal
K solids, cm, pm, porosity, sat
1 100 1 1 20 20 8.e-5 8.e-5 8.e-5 2.7 830. 2650. 0.35 1.0 -1 ;indexed K (m/s) top layer

0e-5 ;SS
0 4.5 ;INIT,H0 (READ FLOW I.C.)

0 0 0 0 1 4 0 ;B.C.'S (heat TRANSPORT) -
1 101 1 2 -1. -1 ;Ttop ; température de -1 degC à la base cf. document

0 0 0 0 0 1 0 ;B.C.'S (mass TRANSPORT) -
1 74 1 2 0. +1 ;Ttop c=0 : simplification car pas de condition limite type 3 pour ce modèle, on
laisse le ruisseau libre
78 98 1 2 0. -1 ;Ttop c=0 : simplification car pas de condition limite type 3 pour ce modèle, on
laisse le ruisseau libre

```

```

2.50 0.35 0.3                ;top: TCON,porsurf (m,s) ,satsurf : pas de zone non saturée donc ksat=1 et
cette ligne est inutile
-23 16.5 365. 0 -5 0 0      ;surf at min,amp,per,phase,cutoff – air temp      tgradx tdradt
1. 0. 365. 0 -5 0 0      ;surf at min,amp,per,phase,cutoff - Bz      tgradx tdradt
0.5 0. 365. 0 -5 0 0      ;surf at min,amp,per,phase,cutoff - Sat      tgradx tdradt

0 0 0. 0. +1                ;IVEL,VX,VY,VZ (m/s),iflipv

1 1 0.1 0.01 0.32e-9 1.5 0.0 0.0 1      ;ALh,ALv,ATH,ATV,(m) DD(m^2/s),retard,decay,agefx=1,kdisp(=0
original)

4187. 1000. 2108. 920. 0.6 2.1 3.34e5      ;THERMAL PROPS cf,pf, ci,pi tclw,tcli(m,s) , L. HEAT

0.1 1 0.0 50. 1 2          ;,P,Q,Ts,omega,modelWu,modelkr porous media (pas d'eau non gelée si T<0,
chaleur latente

0.05 0.5 0.0 50. 0 0      ;,P,Q,Ts,omega,modelWu,modelkr fracture media

1 101 1 2 1 11 -1 -1 +1      ;TEMP.I.C.(END WITH -1) (ix1-ix2) (iy1-iy2) (iz1-iz2) Tbot,Ttop, -1
1 101 1 2 12 21 -1 10 -1

20 30 1 2 18 20 1.0 1.0 -1      ;Conc I.C.(END WITH -1) (ix1-ix2) (iy1-iy2) (iz1-iz2) Cbot,Ctop, -1

.01 .01 .01 12 12          ;CCP,CCT,CCW,MAXIT1,MAXIT2 (critères de convergence et itération limite)
1.0 1.00 .96              ;OVER-RELAX HEADS,TEMP.,TSA

0 0 0 0 0                  ;KNOX(1-5)TRANSV. (sortie de coupe 2D dans le plan yz)
1 0 0 0 0                  ;KNOY(1-5)LONG. (sortie de coupe 2D dans le plan xz)
0 0 0 0 0                  ;knoz (sortie de coupe 2D dans le plan xy)

0 0 0 0 0                  ;five 3d print times (days) (set to zero if no 3D print is needed)

0 68. 0.1 20 10 999 999      +1 ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1 0 1.0                  ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0. -1              ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0 -1              ;SOURCE flow rate per node

68. 297. 0.1 20 10 999 999      +1 ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1e-10 0 1.0              ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0. -1              ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0 -1              ;SOURCE flow rate per node

297. 433. 0.1 20 10 999 999      +1 ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1e10 0 1.0              ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0. -1              ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay

```

```

0 0 0 0 0 0      -1      ;SOURCE flow rate per node
433 662. 0.1 20 10 999 999      +1      ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1e-10 0 1.0      ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0.      -1      ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0      -1      ;SOURCE flow rate per node

662. 798. 0.1 20 10 999 999      +1      ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1e10 0 1.0      ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0.      -1      ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0      -1      ;SOURCE flow rate per node

798. 1027. 0.1 20 10 999 999      +1      ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1e-10 0 1.0      ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0.      -1      ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0. 0. -1      ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0      -1      ;SOURCE flow rate per node

```

Annexe 5 : fichier smoker.data, zone sud, dispersion faible

THERMAL HEAT FLOW MODEL: therm.data, Basel heat

101x2x7 TOTAL TRANSPORT NODES (100x1x6 ELEMENTS) 2D cross-section

Feb 2017

```

1 0 1 0 0 0 1 3 0 0 0 1 1 ;KPRT,KCN,KWT,KINT,KINTV,KGO,ksat,kmass,ktair,krk,kdz,ksubtr,Krltop

1 1 1 ;ngx,ngy,ngz (number of subregion in each directions)
100 ;xlim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc
1 ;ylim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc
6 ;zlim (m) zone 1, zone 2, zone 3, etc

100 ;nlx dx= 1
1 ;nly dy= 1
21 ;nlz dz= 0,28

10 0. ;nwtl, DATUM (flow) counting down from the top
26 1 1 22 +1 ;observation well
51 1 1 22 +1 ;observation well
76 1 22 22 +1 ;sample in the river
101 1 22 22 -1 ;sample in the river

0 0 0 0 0 0 1 1 0.000 -1 ;no fractures

0 0 0 0 0 2 5 ;B.C.'S (FLOW)
1 101 1 2 2.E-08 -1 ;flux top m/s (ynod1, ynod2 ; znod1, zond2)
76 76 1 2 21 21 4.1 +1 ;head fixed node middle (little river, 4.5m)
99 100 1 2 21 21 3.7 -1 ;head fixed node right (soak river, 4m)

1 2100 6.8E-5 6.8E-5 6.8E-5 2.7 830.0 2650.00 .35 1.0 -1 ;elements, KX, KY, KZ (m/s), thermal K solids,
cm, pm, porosity, sat
1 100 1 1 20 20 6.8e-5 6.8e-5 6.8e-5 2.7 830. 2650. 0.35 1.0 +1 ;indexed K (m/s) top layer
1 100 1 1 1 10 1e-20 1e-20 1e-20 2.7 830. 2650. 0.35 1.0 -1 ;simulation présence pergélisol

0e-5 ;SS
0 4.5 ;INIT,H0 (READ FLOW I.C.)

0 0 0 0 1 1 0 ;B.C.'S (heat TRANSPORT) -
1 101 1 2 8. -1 ;Ttop ; température de -1 degC à la base cf. document
1 101 1 2 8. -1 ;Ttop ; température de -1 degC à la base cf

0 0 0 0 0 1 0 ;B.C.'S (mass TRANSPORT) -
1 74 1 2 0. +1 ;Ttop c=0 : simplification car pas de condition limite type 3 pour ce modèle, on
laisse le ruisseau libre
77 98 1 2 0. -1 ;Ttop c=0 : simplification car pas de condition limite type 3 pour ce modèle, on
laisse le ruisseau libre

```

```

2.50 0.35 0.3 ;top: TCON,porsurf (m,s) ,satsurf : pas de zone non saturée donc ksats=1 et
cette ligne est inutile
8 0.01 365. 0 8 0 0 ;surfat min,amp,per,phase,cutoff – air temp tgradx tdradt
1. 0. 365. 0 8 0 0 ;surfat min,amp,per,phase,cutoff - Bz tgradx tdradt
0.5 0. 365. 0 8 0 0 ;surfat min,amp,per,phase,cutoff - Sat tgradx tdradt

0 0 0. 0. +1 ;IVEL,VX,VY,VZ (m/s),iflipv

1 1 0.1 0.01 0.38e-9 1.5 0.0 0.0 1 ;ALh,ALv,ATH,ATV,(m) DD(m^2/s),retard,decay,agefx=1,kdisp(=0
original)

4187. 1000. 2108. 920. 0.6 2.1 3.34e5 ;THERMAL PROPS cf,pf, ci,pi tclw,tcli(m,s) , L. HEAT

0.1 1 0.0 50. 1 2 ;,P,Q,Ts,omega,modelWu,modelkr porous media (pas d'eau non gelée si T<0,
chaleur latente

0.05 0.5 0.0 50. 0 0 ;,P,Q,Ts,omega,modelWu,modelkr fracture media

1 101 1 2 1 11 8 8 +1 ;TEMP.I.C.(END WITH -1) (ix1-ix2) (iy1-iy2) (iz1-iz2) Tbot,Ttop, -1
1 101 1 2 12 21 8 8 -1

20 30 1 2 18 20 1.0 1.0 -1 ;Conc I.C.(END WITH -1) (ix1-ix2) (iy1-iy2) (iz1-iz2) Cbot,Ctop, -1

.01 .01 .01 12 12 ;CCP,CCT,CCW,MAXIT1,MAXIT2 (critères de convergence et itération limite)
1.0 1.00 .96 ;OVER-RELAX HEADS,TEMP.,TSA

0 0 0 0 0 ;KNOX(1-5)TRANSV. (sortie de coupe 2D dans le plan yz)
1 0 0 0 0 ;KNOY(1-5)LONG. (sortie de coupe 2D dans le plan xz)
0 0 0 0 0 ;knoz (sortie de coupe 2D dans le plan xy)

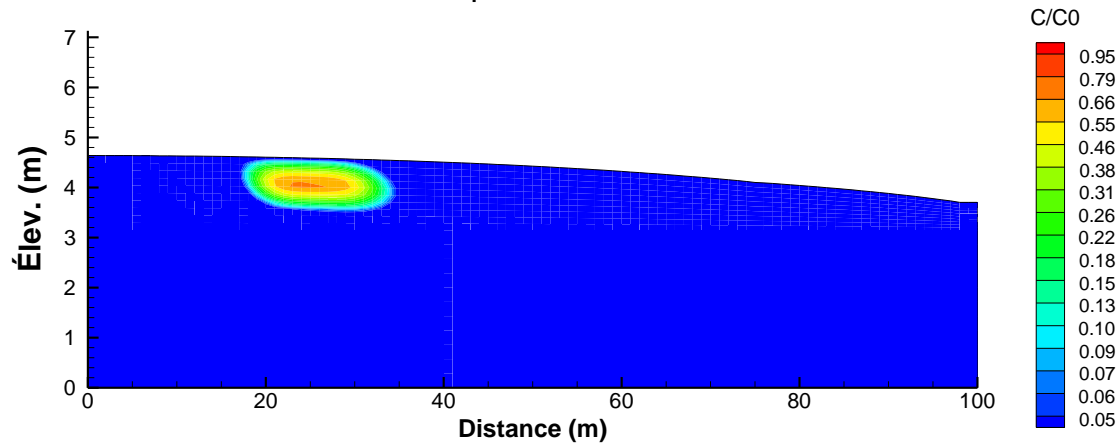
0 0 0 0 0 ;five 3d print times (days) (set to zero if no 3D print is needed)

0 1027. 0.1 20 10 999 999 -1 ;T0,T1,DT,KPLOT(days),kflow,k3dplot,kmom,more
0 1 0 1.0 ;hinc,rinc,rtdiff,sfact
0 0 0 0 0. -1 ;surface temp patch
0 0 0 0 0 0 0. 0.0. -1 ;internal heat source, fluxin1 (w/m2),fluxin2(W/m3) decay
0 0 0 0 0 0 -1 ;SOURCE flow rate per node

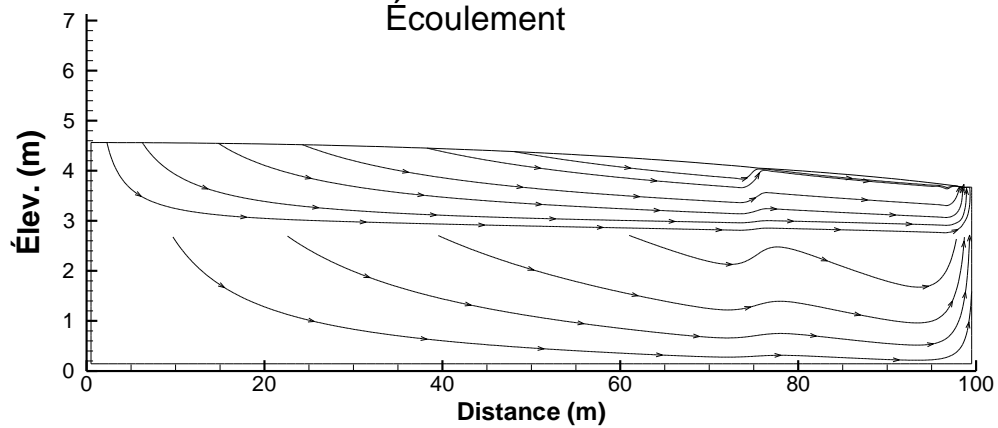
```

Annexe 6: Résultats zone sud, facteur de dispersion faible, $t=34$ jours

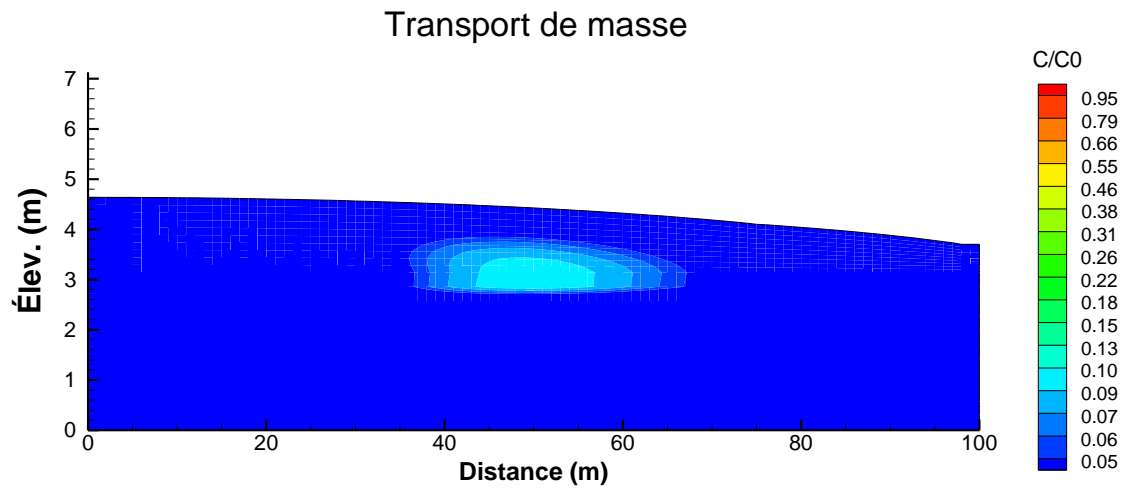
Transport de masse



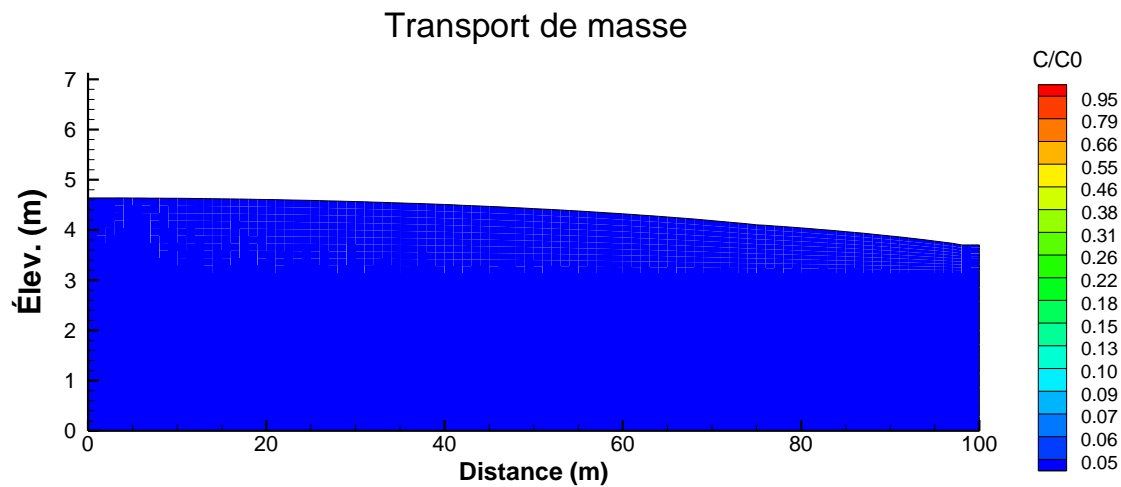
Écoulement



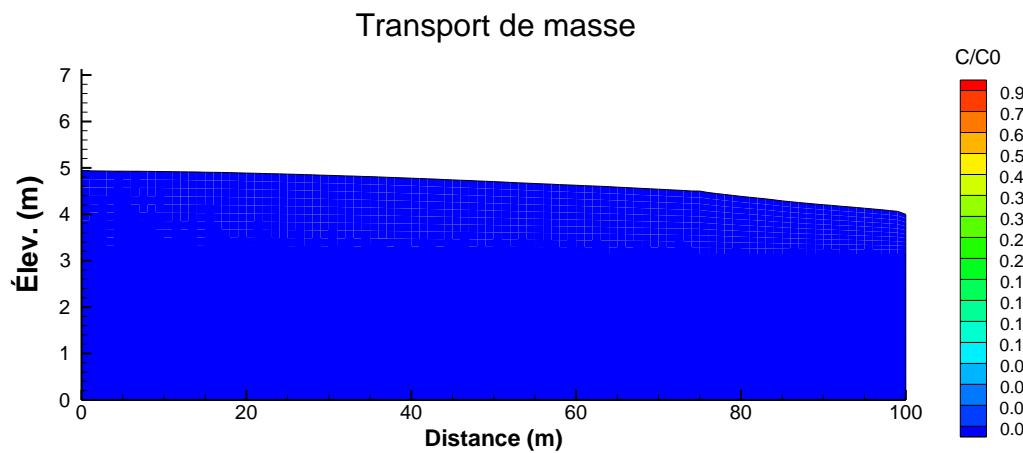
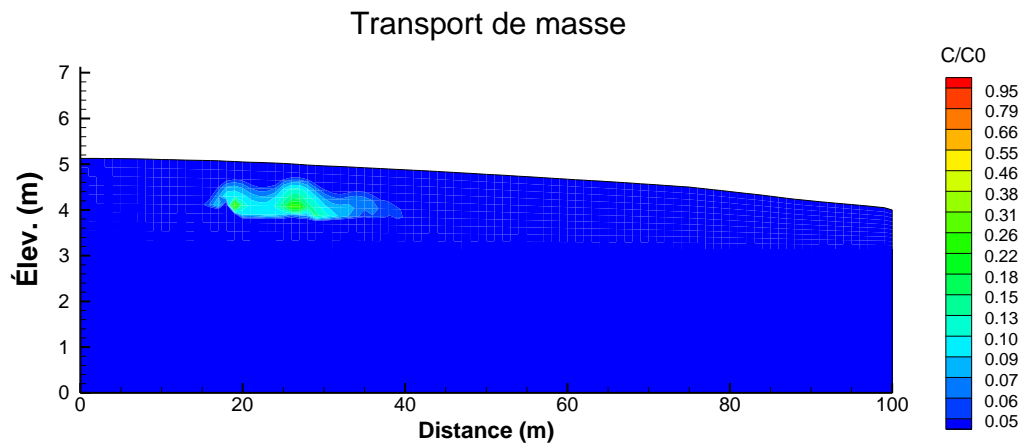
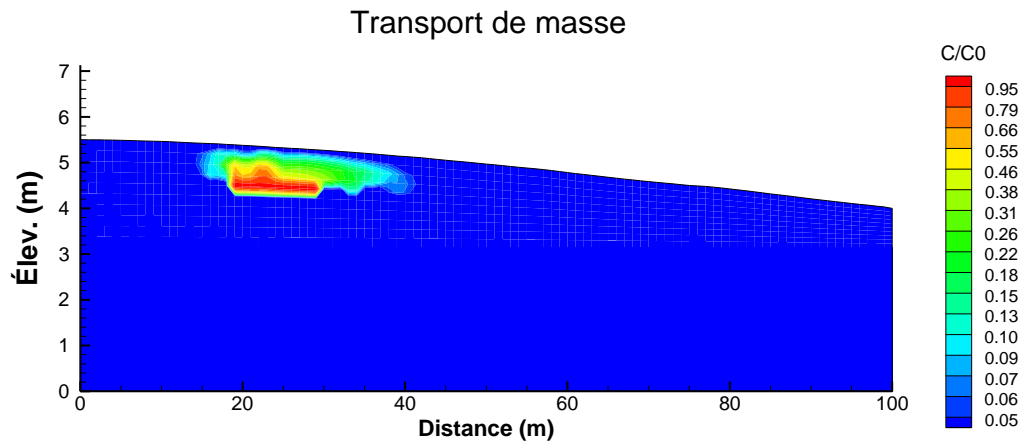
Annexe 7. : Résultats zone Sud, facteurs de dispersion faible, t=399 jours



Annexe 8. : Résultats zone Sud, facteurs de dispersion faible, t=764 jours



Annexe 10 : Zone nordique, facteurs de dispersion élevés, t=34 jrs, t=399 jrs et t=764 jrs respectivement



Annexe 11: Zone Sud, facteurs de dispersion élevés, t=34 jrs et t=399 jrs respectivement

