

REPUBLIQUE DU CAMEROUN
Paix-Travail-Patrie

UNIVERSITE DE YAOUNDE I

FACULTE DES SCIENCES

CENTRE DE RECHERCHE ET DE FORMATION
DOCTORALE EN SCIENCES, TECHNOLOGIES
ET GEOSCIENCES

UNITE DE RECHERCHE ET DE FORMATION
DOCTORALE "PHYSIQUE ET APPLICATIONS"

BP 812 Yaoundé
email: crfd_stg@uy1.uninet.cm



REPUBLIQUE DU CAMEROUN
Peace-Work-Fatherland

UNIVERSITY OF YAOUNDE I

FACULTY OF SCIENCE

POSTGRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
TECHNOLOGY AND GEOSCIENCES

RESEARCH AND POSTGRADUATE TRAINING
UNIT FOR "PHYSICS AND APPLICATIONS"

PO BOX 812 Yaoundé
email: crfd_stg@uy1.uninet.cm

LABORATOIRE DE PHYSIQUE NUCLEAIRE, ATOMIQUE, MOLECULAIRE ET
BIOPHYSIQUE

**MODELISATION DU TRANSPORT DES POLLUANTS
DANS UN RESERVOIR D'EAU AVEC DEUX SOURCES
DE CONTAMINATION PLACEES AUX FRONTIERES.**

Thèse

Présentée et soutenue en vue de l'obtention du
Diplôme de Doctorat/PhD en Physique

Option: Physique Nucléaire, Dosimétrie et Radioprotection

Par :

TJOCK-MBAGA THOMAS

Matricule 08W0648

Master en Physique

Sous la Direction de :

BEN-BOLIE Germain Hubert

Professeur

(Université de Yaoundé I)



Année 2023



DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
DEPARTMENT OF PHYSICS

ATTESTATION DE CORRECTION DE LA THESE DE
DOCTORAT/Ph.D

Nous, Professeurs **SAÏDOU**, **NJANDJOCK NOUCK Philippe**, **HONA Jacques** et Professeur **ESSIMBI ZOBO Bernard**, respectivement Examineurs et Président du jury de la thèse de Doctorat/Ph.D de Monsieur **TJOCK-MBAGA Thomas** Matricule **08W0648**, préparée sous la direction du Professeur **BEN-BOLIE Germain Hubert**, intitulée : « **Modélisation du transport des polluants dans un réservoir d'eau avec deux sources de contamination placées aux frontières** », soutenue le **Mercredi, 17 Mai 2023**, en vue de l'obtention du grade de Docteur/Ph.D en Physique, Spécialité **Physique Nucléaire, Dosimétrie et Radioprotection**, attestons que toutes les corrections demandées par le Jury de soutenance ont été effectuées.

En foi de quoi, la présente attestation lui est délivrée pour servir et valoir ce que de droit.

Fait à Yaoundé le ...30/06/2023...

Examineurs

Pr SAÏDOU

Pr NJANDJOCK NOUCK Philippe

Le Président du

Pr ~~ESSIMBI ZOBO B.~~

Pr HONA Jacques

Le Chef de Département de Physique



Professeur

Jean-Marie Bienvou

Université de Yaoundé I

Faculté des Sciences

Département de Physique

**MODELISATION DU TRANSPORT DES POLLUANTS DANS UN
RESERVOIR D'EAU AVEC DEUX SOURCES DE
CONTAMINATIONS PLACEES AUX FRONTIERES**

THÈSE

Présentée et soutenue en vue de l'obtention du Diplôme de

Doctorat/PhD en Physique

Option: **Physique Nucléaire, Dosimétrie et Radioprotection**

Par

TJOCK-MBAGA Thomas

Matricule: 08W0648

Master en Physique

Sous la Direction de

BEN-BOLIE Germain Hubert

Professeur

Université de Yaoundé I

Laboratoire de Physique Nucléaire, Atomique, Moléculaire et Biophysique

Dédicace

Je dédie cette thèse :

À ma famille qui m'a encouragé à donner le meilleur de moi-même pour l'accomplissement de ce travail

Remerciements

Je tiens, en premier lieu, à remercier **DIEU** le maître de toute chose qui m'a donné le souffle et qui me comble de ses bienfaits, en m'entourant des personnes qui m'aiment et dont le souci est ma réussite.

J'exprime ma profonde gratitude au **Pr. BEN-BOLIE Germain Hubert**, chef de Laboratoire de Physique Nucléaire de l'Université de Yaoundé I, pour ses conseils. Son engagement et son abnégation pour la recherche ont contribué énormément à l'aboutissement de cette thèse. En dépit d'énormes tâches académiques et de ses multiples responsabilités dans l'encadrement de nombreux étudiants de Master et de Doctorat, il a toujours trouvé le temps pour discuter avec moi, de répondre à mes sollicitations et à mes différentes questions. Je serai toujours reconnaissant à son endroit, car il a contribué énormément à la préparation, à l'aboutissement et à la finalisation de cette thèse.

J'adresse mes plus sincères remerciements aux Honorables membres du jury, qui ont accepté de juger cette Thèse.

J'exprime mes remerciements au **Pr. EMA'A EMA'A Jean- Marie** qui, malgré les multiples occupations liées à sa fonction à l'ENS de Bertoua, n'a cessé de prodiguer des conseils éclairés et partagé son expérience dans le domaine du nucléaire qui m'ont été très profitables. Je lui en suis très reconnaissant.

Ma profonde gratitude va également à l'endroit du **Pr. OWONO ATEBA Pierre**, Fondateur du Laboratoire de Physique Nucléaire, de l'Université de Yaoundé I.

Je remercie le **Pr. OWONO OWONO Luc Calvin** coordonnateur de l'URFD Physique et Applications, Vice-Recteur à l'Université de Yaoundé I, pour ses conseils et sa rigueur dans le travail.

J'exprime ma reconnaissance au **Pr. EKOBEA FOUDA Henri Paul**, Vice-Recteur à l'Université de Ngaoundéré.

Je remercie grandement le **Pr. NDJAKA Jean-Marie Bienvenu**, Chef de Département de Physique, et le **Pr. KOFANE Timoléon Crépin**, pour leurs conseils et encouragements dans la finalisation de cette Thèse.

Je remercie particulièrement : **Pr. SAÏDOU** et **Pr. BOYOMO ONANA Marthe**, pour leur implication dans l'encadrement au sein du Laboratoire.

Mes remerciements vont également à tous les Enseignants du Département de Physique, en particulier aux Professeurs : **NJANDJOCK NOUCK Philippe**, **TCHAWOUA Clément**, **PEMHA ELKANA**, **WOAFO Paul**, **DJUIDJE Germaine**, **HONA Jacques**, **BODO Bertrand**, **ENYEGUE A NYAM Françoise**, **ZEKENG Serge**, **VONDOU Derbetini**, **FEWO Serge Ibrid**, **NANA ENGO Serge**, **NANA NBENJO Roméo**, **MVOGO Alain**, **SIEWE SIEWE Martin**, **MBINACK Clément**

et aux Docteurs, **CHAMANI Roméo, ABDOURAHIMI, MELI'I Jodelle Larissa, NGA ON-GODO Dieudonné.**

Ma reconnaissance va tout particulièrement aussi au **Dr. ELE ABIAMA Patrice, Maître de Recherche** pour son soutien remarquable et consistant dans l'aboutissement de mes travaux de recherches.

Je remercie également les Docteurs : **TAKEMBO Clovis, NGOUBI Hénock, ALI ZARMA, TAKOUKAM SOH Serge, ANEMENA ETOGA Emmanuel, OMON Yves, HAMADOU ISSA et TANKOU TAGNE Alain** pour leurs conseils.

Je tiens à remercier très particulièrement tous les membres du Laboratoire de Physique Nucléaire pour leurs aides et assistances particulièrement, les Docteurs **MBIDA MBEMBE Serge, MAH TSILA Philipe, HAMADOU KATARKALAH** et les doctorants , **AKAMBA MBEMBE Bertrand, NDOUVADE KANAGO Vivien Ulrich, EBODE Fabien, ADJABA Jean Liboire, M, AWE Richard, KOYANG François, YIA ETOLO Hervé, SOULEYMANOU HAMAN ADAMA, TAMIAN FOTSO Kévin, ATANGANA LIKENE Aimé, NDJOBBO Justice, AWE Richard, MGOVO ALOA Bonaventure.**

Ma gratitude va spécialement à l'égard de mes parents **MANDJANA Théodore et NGO MBAGA Lucie** qui depuis le bas âge me sont d'un soutien inconditionnel et ne cessent de me prodiguer des conseils qui ont fait de moi ce que je suis. Ils ont inculquer en moi la passion pour le travail

Je tiens à remercier mon frère jumeau **MAY MBAGA Martin** et mes soeurs **Suzanne Armelle Wayag** et **NGO MBADI Tècle** pour leur soutien incontestable durant de longues années.

Je ne saurais terminer sans remercier ma fiancée **NKOA NKOA Philomène Chancelle** qui partage ma vie au quotidien. Ton aide, ton appui et tes conseils de chaque jour ont servi à l'achèvement de ce travail.

À tous ceux qui ont contribué et participé de près ou de loin à la rédaction de cette Thèse et qui n'ont pas été cités, je leur adresse ma profonde reconnaissance.

Liste des Abréviations

CITT : Technique de la Transformée Intégrale Classique

EDP : Equation aux Dérivées Partielles

ETP : Evapotranspiration

GITT : Technique de la Transformée Intégrale-Généralisée

MATLAB : Matrix Laboratory

PCE : Pentachloroéthylène

SLP : Problème Standard de Sturm Liouville

TA_j : Taux d'Absorption du radionucléide j

TCE : Trichloroéthylène

TTL : Technique de la Transformée de Laplace

Table des matières

Dédicace	i
Remerciements	ii
Liste des Abréviations	iv
Table des matières	v
Liste des Figures	vii
Listes des Tableaux	x
Abstract	xi
Résumé	xiii
Chapitre I Revue de la littérature sur la contamination et le transport des polluants dans les eaux souterraines	5
I.1 Introduction	5
I.2 La pollution	5
I.2.1 Définition	5
I.2.2 Les sources de la pollution	6
I.2.3 Cas des radionucléides	7
I.3 Les eaux souterraines	9
I.3.1 Origine des eaux souterraines	9
I.3.2 Notion d'aquifère	9
I.3.3 Aquifère et stockage de l'eau souterraine	11
I.3.4 Usages de l'eau souterraine	13
I.4 Transport des polluants dans les eaux souterraines	14
I.4.1 La convection	14
I.4.2 La diffusion moléculaire	15
I.4.3 La dispersion mécanique ou dispersion cinématique	16
I.4.4 La bioturbation	19
I.4.5 La sorption	19
I.4.6 La dégradation	23
I.4.7 Equation de transport de polluant en milieu poreux	24

I.5	les conditions aux limites de l'équation d'advection-dispersion	25
I.6	Etat de l'art sur les travaux récents concernant la modélisation du transport de polluant dans les eaux souterraines	26
I.7	Conclusion	39
Chapitre II Matériels et méthodes		40
II.1	Introduction	40
II.2	Matériels	40
II.2.1	La GITT	40
II.2.2	La nouvelle technique semi-analytique de résolution des EADs dans les milieux poreux en couches	46
II.2.3	Le solveur d'équation aux dérivées partielles de MATLAB (MALTLAB <i>sol- veur pdepe</i>)	53
II.3	Méthode	55
II.3.1	Transport des polluants avec coefficients dépendant de la position	56
II.3.2	Transport des polluants sous bioturbation avec coefficients dépendant de la position et du temps	64
II.4	Traitement des radionuclides	71
II.4.1	Radionucléide subissant à la fois une production et une décroissance de la source	72
II.4.2	Chaîne de décroissance radioactive	73
II.5	Conclusion	74
Chapitre III Résultats et discussion		76
III.1	Introduction	76
III.2	Validation des méthodes de résolutions appliquées aux différents modèles	76
III.2.1	Transport des polluants avec des paramètres variants avec la position	77
III.2.2	Transport des polluants avec des paramètres variants en fonction de la po- sition et du temps	86
III.3	Caractéristiques générales des modèles	88
III.4	Exemples d'applications	100
III.4.1	Source de contamination dépendante périodiquement du temps	100
III.4.2	Source du problème de terrain réel du test push-pull à puits unique	103
III.4.3	Les radionucléides	105
III.5	Conclusion	113
Conclusion Générale		114
Liste des Publications issue de la thèse		116
Références Bibliographiques		117

Table des figures

Figure 1	Quelques sources de pollution [30]	6
Figure 2	Chaînes de désintégrations de l' ^{238}U , ^{235}U et ^{232}Th [31]	8
Figure 3	Trois domaines d'espace identifient trois systèmes hydrologiques emboîtés de grandeurs décroissantes : bassin hydrologique, bassin hydrogéologique et aquifère [33].	10
Figure 4	Les constituants de l'aquifère [34].	10
Figure 5	Régime d'écoulement type et temps de séjour des eaux souterraines dans les régions semi-arides [34].	11
Figure 6	Constituants physico-chimiques de l'aquifère [38].	12
Figure 7	Formation d'un gradient de concentration.	16
Figure 8	Phénomène de dispersion à l'échelle des pores. [45]	17
Figure 9	Sites d'absorption du soluté et particules absorbées [54].	20
Figure 10	Les isothermes de sorptions les plus rencontrées [56].	22
Figure 11	Evolution de la concentration $C(x,t)$ en fonction de la position à $t = 2,5$ h.	27
Figure 12	Evolution de la concentration $C(x,t)$ en fonction de la position à $t = 5$ h.	27
Figure 13	Comparaison des solutions analytiques et numériques $C(x,y,t)$ en fonction de la position à $t = 10$ h.	29
Figure 14	Etat de la pollution à $t = 1$ h.	29
Figure 15	Etat de la pollution à $t = 3$ h.	30
Figure 16	Conditions aux limites à $x = 0$	32
Figure 17	Evolution de la concentration de ^{234}U en fonction du temps à $x = 0$ (a) : conditions d'entrée de Robin et (b) condition d'entrée de Dirichlet et évolution de la concentration de ^{234}U en fonction de la position à $t = 100$ ans (c) : condition d'entrée de Robin et (d) condition d'entrée de Dirichlet	33
Figure 18	Comparaison de la concentration du contaminant pour différentes formations géologiques pour une forme de vitesse exponentielle décroissance à $t = 2$ ans pour (a) milieux homogènes et (b) milieux hétérogènes	35
Figure 19	Géométrie du transport de contaminant 2D avec une source variant en fonction de la profondeur dans un milieu poreux fini [74].	37
Figure 20	(a) Solution analytique du transport 2D avec une source variante en fonction de la profondeur, (b) Comparaison des solutions analytiques et numériques du problème.	38
Figure 21	Advection-dispersion dans un milieu contenant m couches [27]	47

Figure 22	Schéma représentatif du problème	56
Figure 23	Représentation du problème en couches	66
Figure 24	Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 1$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.	78
Figure 25	Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 1, 5$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.	79
Figure 26	Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 2$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.	80
Figure 27	Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multicouches et les solutions analytiques obtenues à l'aide de la GITT, pour le cas du transport d'un polluant dans le Grès avec deux sources de contaminations pour différentes valeurs de n	84
Figure 28	Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multicouches et les solutions analytiques obtenues à l'aide de la GITT, pour le cas du transport d'un polluant dans le Gravier avec deux sources de contaminations pour différentes valeurs de n	85
Figure 29	Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multicouches et les solutions numériques obtenues à l'aide du solveur de MATLAB <i>pdepde</i> , pour le cas du transport d'un polluant dans le Grès avec deux sources de contaminations pour deux valeurs du nombre de Pélect	87
Figure 30	Comparaison de la concentration du soluté à différents moments et différentes valeurs de n , pour les différentes formations géologiques, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations.	89
Figure 31	Distribution de la concentration du polluant en fonction de la position dans la formation géologique du Grès, pour différentes distributions d'entrée et pour $n = 1, 5$: cas des coefficients dépendant de la distance	91
Figure 32	Evolutions de la concentration en fonction du temps dans la formation de grès pour $n = 1, 5$ pour différentes distributions d'entrée : (a) $x = 0, 35 m$ et (b) $x = 0, 8 m$	93
Figure 33	Effet du coefficient de dispersion sur la distribution de la concentration du soluté dans le cas d'une contamination à deux sources d'entrée localisées aux limites du domaine.	94
Figure 34	Effet de la dépendance temporelle du terme de production $q(t)$ sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d'une contamination à deux sources d'entrée localisées aux limites du domaine.	96

Figure 35	Effet du type de conditions aux limites sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d'une contamination à deux sources d'entrée localisées aux limites du domaine.	98
Figure 36	Effet du paramètre instationnaire v sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d'une contamination à deux sources d'entrée localisées aux limites du domaine.	99
Figure 37	(a) et (b) :Distribution spatiale; (c) et (d) :distribution temporelle de la concentration de la demande biochimique en oxygène dans les eaux souterraines avec deux sources d'entrée ayant un taux d'émission sinusoïdal.	102
Figure 38	Comparaison des distributions spatiales de la concentration du PCE du modèle multicouche et la solution de Suck [102] dans le cas du test push-pull à puits unique dans les eaux souterraines.	105
Figure 39	(a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de l' ^{234}U pour différentes positions, (b) : Dose efficace engagée de l' ^{234}U due à l'injection de l'eau potable à différentes positions.	108
Figure 40	(a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de l' ^{234}U pour différentes positions en présence et en , (b) : Dose efficace engagée de l' ^{234}U due à l'injection de l'eau potable à différentes positions	109
Figure 41	(a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de chaque membre de la chaîne à $x = 50m$; (b) :Dose efficace individuelle des quatre membre de la chaîne de désintégration acquise par voie d'eau souterraine potable à $x = 50m$	111
Figure 42	(a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de chaque membre de la chaîne à $x = 100m$; (b) :Dose efficace individuelle des quatre membre de la chaîne de désintégration acquise par voie d'eau souterraine potable à $x = 100m$	112

Liste des tableaux

Table 1	Les sources de pollution en général [1]	7
Table 2	Paramètres d'entrée du problème	32
Table 3	Paramètres d'entrée du problème du problème 2D	38
Table 4	Arguments de la solution	53
Table 5	Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour les figures 27, 28 et 29 du modèle multicouches.	82
Table 6	Valeurs des paramètres des conditions aux limites utilisés pour les Figures du modèle multicouches.	83
Table 7	Erreurs maximales.	83
Table 8	Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour les figure 29 du modèle multicouches.	88
Table 9	Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour l'exemple d'application avec des sources périodiques (Figure 37).	102
Table 10	Coefficients du transport et coefficients de transport pour chaque couche, utilisés pour l'exemple d'application du test push-pull à puits unique (figure 38).	104
Table 11	Paramètres d'entrée du problème de transport de ^{234}U	106
Table 12	Paramètres d'entrée du problème de transport de de la chaîne de désintégration de ^{238}Pu	110

Abstract

In this thesis we propose two models of pollutants transport with two contaminants sources localized at the boundaries of the domain. The first model concerns the transport in groundwater with distance variable coefficients and the second, pollutant transport in groundwater with spatio-temporal dependent coefficients. In the first model, derives an analytical solution of a one-dimensional (1-D) Advection-Dispersion Equation (ADE) for solute transport with two contaminant sources incorporating the source term is derived. Groundwater velocity is considered as a linear function of space while the dispersion as a n^{th} power of velocity and analytical solutions are obtained for $n = 1, 1.5$ and 2 . The solution is derived using the Generalized Integral Transform Technique (GITT) with a new regular Sturm-Liouville Problem (SLP). In the second model, we present a new approach to solve the one-dimensional solute transport equation with distance variable coefficients and two input sources in a finite porous media. The porous medium is divided into m -layers porous media with constant coefficients in each solute transport problem. The transport equations in layer $i-1$ and i are coupled by imposing the continuity of solute concentration and the dispersive flux at the interfaces of the layers. Unknown functions representing the dispersive flux at the interfaces between adjacent layers are introduced allowing the multilayer problem to be solved separately on each layer in the Laplace domain before being numerical inverted back to the time domain. This approach is all the more innovative in that it circumvents the difficulties encountered when using conventional approaches and also overcomes their limitations. The obtained solutions for the two models are compared with numerical solutions obtained in MATLAB pedpe solver and/or with analytical solutions for transport problem in porous media with variable coefficients. Both solutions are found to be in good agreement for each of problem studied. The effects of some parameters on solute distribution are demonstrated graphically for the set of input data based on similar data available in the literature. As illustration, the second model was applied to two real problems of contamination, the first one considers an advective-dispersive transport problem with a sinusoidal time-dependent emitting rate at the boundary was study in order to illustrate the effect of sinusoidal frequency on solute concentration. The second problem concerns practical implementation of the solution to an actual field, single-well push-pull test example designed to obtain the concentration distribution of reactant consumed during the injection phase and after. Finally, as another illustration, the predictions of the two

models are used to estimate the time histories of the radiological doses of uranium at different distances from the sources boundary in order to understand the potential radiological impact on the general public for such problem.

Keywords :Advection-dispersion, Reaction, Analytical solution, Finite domain, Multi-layers analysis, Laplace transform, Two continuous sources, Pollution.

Résumé

Dans cette thèse nous proposons deux modèles de transport des polluants avec deux sources de contamination placées aux extrémités du domaine. Le premier modèle concerne le transport des polluants dans les eaux souterraines avec coefficients variables dans l'espace et le second modèle quant à lui est consacré au transport des polluants avec coefficients dépendant de la position et du temps. Dans le premier modèle, une solution analytique de l'Equation d'Advection-Dispersion en une dimension et qui tient compte du terme source est obtenue. La vitesse de l'eau souterraine est considérée comme une fonction linéaire de l'espace alors que la dispersion est considérée comme une puissance n^{ieme} de la vitesse et les solutions analytiques sont obtenues pour $n=1 ; 1,5$ et 2. Les solutions sont dérivées à l'aide de transformée intégrale généralisée (GITT) utilisant un nouvel opérateur self-adjoint. Dans le deuxième modèle, nous présentons une nouvelle approche de résolution de l'équation de transport en une dimension dans un milieu poreux avec deux sources de contamination et les coefficients variables. Le milieu poreux hétérogène est divisé en m -milieux avec coefficients constants dans chacune des équations. Les équation de transport dans les couches $i-1$ et i sont couplées en imposant la continuité de la concentration et du flux dispersif aux interfaces des couches. Des fonctions inconnues représentant le flux dispersif aux interfaces entre les couches adjacentes sont introduites, permettant ainsi au problème multicouche d'être résolu séparément dans chacune des couches par la méthode de la transformée de Laplace avant d'être inversé numériquement dans le domaine temporel. Cette approche est d'autant plus innovante qu'elle permet de contourner les difficultés rencontrées en utilisant les approches de résolution classiques et va au-delà de leurs limites. Les solutions obtenues dans les deux modèles sont comparées avec les solutions numériques obtenues à l'aide du solveur de MATLAB pdepe et/ou analytiques des problèmes de transport dans les milieux poreux avec coefficients variables. Les résultats ont montré des accords excellents entre les différentes solutions pour les types de problèmes étudiés. Les effets de certains paramètres sur la distribution du soluté ont été démontrés graphiquement à l'aide d'un ensemble de données basées sur des données similaires présentes dans la littérature. Comme illustration, le deuxième modèle a été appliqué deux problèmes de contamination réels, le premier concerne le problème de transport advectif-dispersif avec un taux d'émission sinusoïdal dépendant du temps dans le but d'étudier l'effet de la fréquence sinusoïdale sur la distribution du soluté. Le second concerne une application pratique

du problème réel de contamination par un test push-pull à puits unique dans le but d'obtenir les distributions du réactif consommé pendant la phase d'injection et après. En fin, comme autre illustration, les prédictions des deux modèles ont été utilisées pour estimer l'évolution temporelle des doses radiologiques de l'uranium à différentes positions des sources dans le but de comprendre l'impact radiologique potentiel du grand public pour ces types de problèmes.

Mots clés : Advection-dispersion, Réaction, Solution analytique, Domaine fini, Analyse multicouche, Transformée de Laplace, Deux sources continues, Pollution.

Introduction Générale

A l'heure actuelle, les études environnementales montrent une croissance perpétuelle des activités humaines ainsi que les besoins qui s'y affèrent, avec en parallèle une pollution assez flagrante [1-5]. Les sources de pollution de grande envergure étant les industries, l'agriculture, les transports et le stockage non contrôlé des déchets. Les composés rejetés se retrouvent de ce fait à des concentrations anormalement élevées dans l'environnement présentant ainsi un risque pour les milieux récepteurs. La conséquence de tel scénario est la pollution de l'air, du sol et plus important de l'eau. La pollution de l'eau dans nos localités est préoccupante, d'autant plus que l'eau est le milieu récepteur final de toutes les formes de pollution notamment de l'air et du sol [6].

Les eaux superficielles ainsi que des aquifères font très souvent les frais des pollutions diverses dont les causes sont nombreuses et variées, les plus connues étant celles liées à l'activité humaine et notamment l'urbanisation et l'industrialisation. La pollution des eaux souterraines constitue un enjeu majeur et intéresse plusieurs scientifiques tels que les physiciens, les chimistes, les hydrologistes, les géologues et les ingénieurs [7]. Les eaux souterraines peuvent être contaminées par infiltration des polluants causant ainsi une réduction de la vitesse d'écoulement de l'eau, ce qui a pour conséquence une difficulté de réhabilitation des eaux souterraines [8]. Les contaminants sont de natures différentes et d'origines diverses parmi les quels nous pouvons citer les radionucléides, les engrais, les déchets d'hôpitaux, les matières organiques, les conduites d'évacuation, les produits pétroliers. Les eaux souterraines constituant des réservoirs d'eau importants pour l'Homme, leur pollution a donc un sérieux impact sur la vie humaine, les activités humaines mais aussi sur la productivité. Il est donc important d'étudier le comportement et les caractéristiques du transport ainsi que le devenir de ces polluants dans les milieux poreux pour la santé humaine et environnementale. Le but étant la compréhension et la modélisation des processus qui gouvernent le transport des contaminants dans les milieux poreux mais aussi leurs impacts sur la qualité du sol.

Le transport des polluants dans un milieu poreux est gouverné par deux processus à savoir

l'advection et la dispersion. D'autres phénomènes tels que la dégradation naturelle, le dépôt cinétique, la bioturbation doivent être pris en compte dans l'équation de conservation de la masse d'un soluté car, ils influencent la concentration du soluté dans le milieu. Par exemple le dépôt cinétique des particules a une grande influence sur les profils de concentration du soluté [9]. Une fonction de production supplémentaire peut entraîner une augmentation considérable le niveau de concentration d'un soluté dans un milieu [10]. En outre, la concentration d'un polluant réactif (radionucléide par exemple) dans un milieu se réduit rapidement par comparaison à celle d'un polluant conservatif. D'un autre côté, la nature des sources de contamination et leurs positions jouent aussi un rôle important dans la distribution du polluant dans un milieu ainsi qu'à la réhabilitation du milieu [11]. Malgré l'influence de ces processus dans la distribution des polluants dans un milieu, plusieurs auteurs ne les considèrent pas souvent dans l'équation de la conservation de la masse. Inclure ces paramètres dans l'équation de transport des polluants permet de couvrir plusieurs aspects du transport des contaminants dans les eaux souterraines [12]. Les milieux dans les quels le transport des solutés se produit peuvent être hétérogènes (lorsque la dispersivité dépend de la position) ou homogènes (lorsque la dispersivité ne dépend pas de la position). Cette caractéristique du milieu joue un rôle important dans le transport du polluant dans un milieu [8, 13, 14].

L'équation d'Advection-Dispersion peut être résolue numériquement ou analytiquement. Malgré que les solutions numériques sont très flexibles, les solutions analytiques sont utilisées par plusieurs auteurs car elles sont relativement transparentes par rapport aux paramètres d'entrée et de sortie du modèle et elles peuvent permettre une meilleure compréhension physique des problèmes [15]. Ces solutions sont différentes les unes des autres en terme des types des conditions initiales ou aux limites, le nombre de sources de contamination, les paramètres du transport ou les méthodes de résolution utilisées. Plusieurs méthodes sont souvent employées pour la résolution analytique de l'EAD.

Plusieurs solutions analytiques concernant le transport des contaminants conservatifs ou réactifs dans les eaux souterraines et considérant l'adsorption sont présentes dans la littérature. Ces modèles sont utilisés pour investiguer sur les effets du soluté et des propriétés du milieu sur le transport des solutés mais aussi sur la réhabilitation du milieu. L'une des méthodes les plus utilisées pour la résolution analytique des EADs dans un milieu poreux fini est la Technique de la Transformée Intégrale Généralisée (TTIG), en anglais GITT. La GITT a été appliquée par [16]

pour résoudre l'EAD en une dimension dans un milieu poreux hétérogène en tenant compte du terme de source/perte, couplé à une sorption linéaire ou non linéaire et tenant aussi compte de la décroissance. La GITT a été utilisée pour la résolution analytique de l'EAD en une dimension considérant la sorption et la désorption du soluté et les paramètres variant en fonction de la position [17]. Pérez Guerrero et al. [18] ont présenté une nouvelle méthode analytique pour la résolution de l'EAD en trois dimensions dans un domaine fini avec des conditions aux limites variantes en fonction du temps pour le cas des régimes permanents et variables. Ils utilisèrent le changement de variable combiné à la forme classique de la GITT ; la Technique de la Transformée Intégrale Classique (TTIC, en anglais CITT). Pérez Guerrero et Skaggs [19] ont présenté une solution analytique générale pour le transport unidimensionnel linéaire d'un soluté dans un milieu poreux hétérogène. Ils employèrent le facteur d'intégration pour obtenir une équation de transport possédant un opérateur différentiel self-adjoint, la solution fut obtenue à l'aide de la GITT. Chen et al. [20] ont présenté une solution analytique de l'EAD bidimensionnelle en coordonnées cylindriques en utilisant une combinaison de la deuxième forme de la méthode de la transformée finie et la GITT. Récemment, Bharati et al. [21, 22, 23] ont présenté une solution analytique du transport d'un soluté avec coefficients variables en fonction de la distance, sans tenir compte du terme source. La GITT associée à un nouveau problème régulier de Sturm-Liouville avec un opérateur self-adjoint fut utilisée pour dériver la solution analytique dans un domaine fini. Cependant, lorsque les expressions des coefficients dans l'EAD deviennent complexes, il n'est plus aisé d'utiliser la GITT pour obtenir des solutions analytiques. En effet la résolution des équations transcendantales devient difficile et la résolution du potentiel transformé fait appel des techniques numériques bien compliquées.

Pour résoudre les problèmes et les difficultés rencontrés lors de l'utilisation de la GITT, certains auteurs ont eu l'idée de réutiliser la transformée de Laplace pour le cas des problèmes de transport dans un milieu en couches en introduisant des fonctions inconnues aux interfaces. Parmi ces auteurs nous pouvons citer [24-28].

Notre étude consiste à dériver des solutions analytiques de l'EAD d'un soluté en une dimension dans un milieu poreux avec deux sources de pollution de formes générales placées aux frontières du domaine. Les modèles prennent en compte des processus tels que la production du polluant, la bioturbation, la décroissance du polluant. Les paramètres de l'EAD sont considérés comme variant dans le temps, la position ou les deux. Les solutions analytiques sont obtenues à

l'aide de la GITT associée à un problème de Sturm-Liouville possédant un opérateur self-adjoint et la méthode employée par [27] pour le cas des milieux en couches. Nous démontrons les effets des paramètres tels que le degré d'hétérogénéité, la vitesse d'écoulement, le coefficient de dispersion, le coefficient de bioturbation, les fonctions d'entrées du polluant sur la distribution du polluant pour de tels problèmes. A notre connaissance aucun résultat n'a été établi dans la littérature au paravent pour la contamination des milieux avec des sources de contamination placées aux limites du domaine. Les solutions analytiques développées sont appliquées pour illustrer le transport et l'impact des radionucléides à travers la dose effective. Le travail comporte trois chapitres. Au premier chapitre, nous nous intéressons à la revue de la littérature sur la contamination et le transport des polluants dans les eaux souterraines. Le deuxième chapitre est consacré aux matériels et méthodes, nous présentons les techniques de résolutions utilisées et nous les appliquerons pour résoudre analytiquement nos modèles. Le troisième chapitre est consacré à la présentation des résultats du modèle, leur analyse et leur discussion en rapport avec les résultats numériques et les résultats présentés dans la littérature. Ce travail s'achève par une conclusion générale et des perspectives.

REVUE DE LA LITTÉRATURE SUR LA CONTAMINATION ET LE TRANSPORT DES POLLUANTS DANS LES EAUX SOUTERRAINES

I.1 Introduction

La connaissance du devenir des polluants dans un milieu passe par la modélisation du transport de ces polluants dans les milieux récepteurs. Cette modélisation dépend des propriétés du milieu et celles des polluants ainsi que de la nature de ces derniers. De plus, le milieu récepteur peut avoir des interactions avec les polluants qui s'y trouvent. Quelque soit la nature du polluant, leur origine joue un rôle important dans le processus de contamination. Il est donc important de s'intéresser aux propriétés du milieu récepteur et ceux des polluants ainsi qu'à leur comportement dans ces milieux. Dans ce premier chapitre, nous allons d'abord parler de l'origine des polluants, puis nous présenterons les réservoirs d'eau souterraine. Par la suite, nous présenterons le comportement des polluants dans les eaux souterraines avec une attention sur le processus de transport. Nous terminerons ce chapitre avec l'état de l'art sur les travaux actuels concernant la modélisation du transport de polluant dans les eaux souterraines.

I.2 La pollution

I.2.1 Définition

La pollution se définit comme étant une modification défavorable du milieu naturel qui apparaît en totalité ou en partie comme le sous-produit de l'action humaine [1]. Ces modifications

peuvent affecter l'homme directement ou au travers des ressources en produits agricoles, en eau, et autres produits biologiques. Elles peuvent aussi l'affecter en altérant les objets physiques qu'il détient, les possibilités récréatives du milieu ou encore en enlaidissant la nature [29].

1.2.2 Les sources de la pollution

Les sources de pollution peuvent être de natures différentes mais principalement, elles résultent des activités industrielles et agricoles. L'urbanisation accélérée des pays industrialisés a eu pour effet une multiplication des sources de contamination de l'environnement. L'expansion considérable de la production industrielle a engendré des masses énormes de déchets minéraux ou organiques, biodégradables ou non, parfois très toxiques. La pollution des sols va généralement provenir des xénobiotiques alors que pour la pollution de la ressource en eau, on a une forte composante microbologique couplée aux xénobiotiques [1]. Le tableau 1 regroupe les sources de pollution en général. Les industries sont en grande partie responsables de la pollution. Les polluants libérés dans l'environnement dépendent notamment des activités qui s'y affèrent. L'autre source importante de pollution est l'agriculture qui utilise souvent les pesticides. La figure 1 illustre quelques sources de pollution.

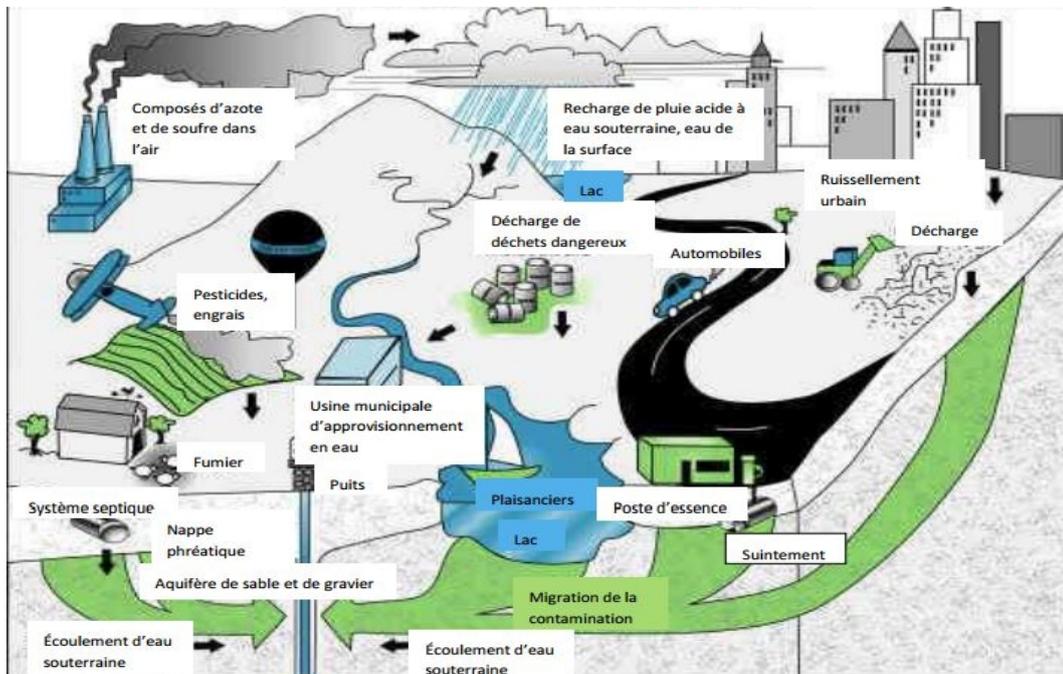


FIGURE 1 – Quelques sources de pollution [30]

TABLE 1 – Les sources de pollution en général [1]

Sources de pollution	Polluants
Epandage de boue dépurations urbaines ou industrielles, de lisier	Nitrates, phosphates, métaux lourds
Utilisation de pesticides, herbicides Industrie	Molécules plus ou moins persistantes Métaux lourds, hydrocarbures, solvants, acides, goudrons, substances radioactives ...
Pollution atmosphérique urbaine ou industrielle	Métaux lourds, dioxine, acides ...
Station-service, dépôt d'hydrocarbures	Hydrocarbures, métaux lourds
Hydrocarbures et décharges	Métaux lourds, microorganisme, acides, produits chimiques divers
Les transports	Les gaz à effet de serre, les métaux lourds...
Epandage des engrais en agriculture	Azote, Potassium, Nitrates
Installations nucléaires	Radionucléides

I.2.3 Cas des radionucléides

On attribue la présence de la radioactivité dans l'environnement à deux origines : naturelle et artificielle.

□ Origine naturelle

La radioactivité d'origine naturelle provient de différentes sources. Les principales sont :

- Le rayonnement cosmique, qui provient soit des ions issus des galaxies soit du soleil par le biais du «vent solaire» constitué principalement de protons. Le champ magnétique terrestre forme avec l'atmosphère un écran protecteur de sorte qu'une partie négligeable de ce rayonnement arrive au niveau de la mer. A l'inverse, l'importance du rayonnement cosmique augmente avec l'altitude.

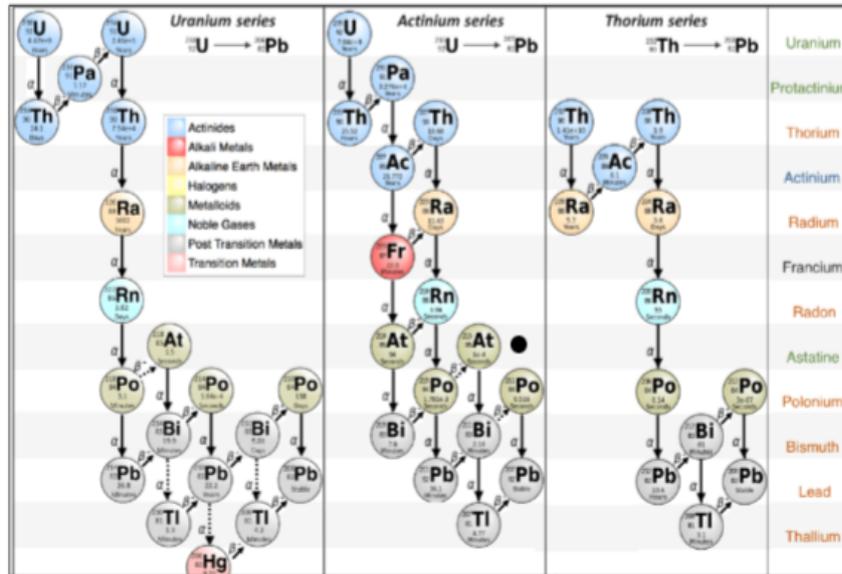
- La radioactivité atmosphérique, qui est principalement due à la présence de radon 222 sous forme gazeuse (issu de l'uranium 238) dans l'atmosphère.

- Le rayonnement tellurique, qui correspond à la radioactivité du sol qui est principalement émise par les éléments radioactifs présents dans l'écorce terrestre tels que l'uranium et le thorium.

- La radioactivité des eaux, dépendant des propriétés chimiques des terrains lessivés en surface. Certaines eaux souterraines sont riches en gaz radon dissout.

- La radioactivité induite par les produits d'activation présents dans le corps humain tels que le carbone 14 (^{14}C).

□ Origine artificielle

FIGURE 2 – Chaînes de désintégrations de l' ^{238}U , ^{235}U et ^{232}Th [31]

Contrairement aux radionucléides naturels, les radionucléides artificiels désignent l'ensemble des substances radioactives introduites dans l'environnement du fait des différentes activités nucléaires initiées depuis le début du XXe siècle. Cette radioactivité artificielle provient principalement :

- Des applications médicales. Certains radionucléides peuvent être utilisés comme source de rayonnements pour des radiographies ou comme source d'irradiation pour des radiothérapies.
- Des retombées des essais atmosphériques d'armes nucléaires (des années 1940 aux années 1980). Elles ont rejeté d'énormes quantités de radionucléides dans l'environnement. En terme de radioactivité, les radionucléides de grandes importances sont : ^3H , ^{90}Sr , ^{137}Cs , ^{241}Am et les isotopes de Pu [32].
- Des rejets autorisés en fonctionnement normal des installations nucléaires. Les radionucléides rejetés par les installations nucléaires sont multiples et diffèrent en fonction du type d'installation et de sa phase de fonctionnement (production, arrêt pour maintenance, démantèlement etc.). Les radionucléides évacués ont une période radioactive relativement courte (quelques jours au maximum), mais leur apport est régulier. Parmi ces radionucléides nous pouvons citer ^{131}I et le ^{99}Tc utilisés en médecine nucléaire.
- Des rejets accidentels. Les catastrophes majeures de Tchernobyl (Avril 1986) et de Fuku-

shima (mars 2011) ont engendré une importante contamination environnementale avec des quantités importantes de radionucléides rejetés dans l'environnement [32]. Six radionucléides artificiels (^{131}I , ^{137}Cs , ^{129}Te , ^{195}Nb et ^{136}Cs) ont été détectés dans les échantillons de sols autour de Fukushima [32].

Les autres potentielles sources de radionucléides sont la combustion du charbon, la production du ciment et l'utilisation des engrais phosphatés dans l'agriculture.

I.3 Les eaux souterraines

Le transit de l'eau dans le sol et le sous sol est une étape importante du cycle global de l'eau. Le réservoir souterrain est en dehors des océans et des glaciers, le plus important. Il stocke, environ, 40 % de l'eau douce à l'échelle planétaire [33].

I.3.1 Origine des eaux souterraines

L'eau du sol et du sous-sol provient des précipitations (P en mm) qui, après avoir fait l'objet de reprises évaporatoires (EP en mm), parviennent à la surface du sol [33]. Cette quantité d'eau précipitée, appelée pluie efficace est alors répartie en deux fractions : le ruissellement (R) qui alimente l'écoulement de surface et l'infiltration qui franchit la surface du sol. Une partie de cette lame infiltrée est reprise par l'évapotranspiration (ETP), la fraction résiduaire (IE) appelée infiltration efficace, alimente l'écoulement souterrain (Q) (voir figure 3).

I.3.2 Notion d'aquifère

Un aquifère est une formation hydrogéologique perméable permettant l'écoulement significatif d'une nappe d'eau souterraine et le captage de quantités d'eau appréciables par des moyens économiques [33]. Il s'agit d'un système hydrologique et hydrodynamique identifiable comme le montre la figure 4 par :

- Un réservoir (1), domaine d'espace fini, caractérisé par ses conditions aux limites et ses dimensions ou configuration (A) et par son organisation interne ou structure (B) ;
- Des processus internes ou mécanismes (2) hydrodynamiques, hydrochimiques et hydrobiologiques entraînant le stockage, la conduite et les échanges géochimiques de l'eau ;

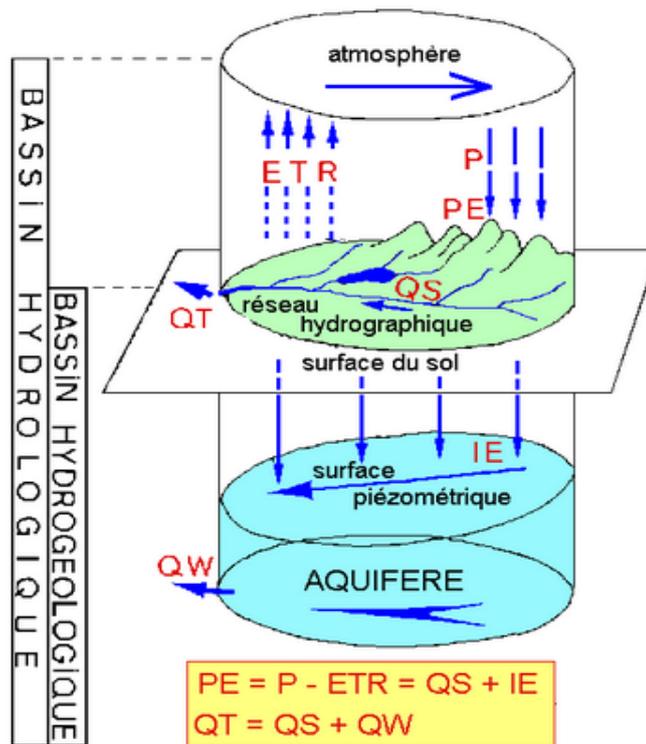


FIGURE 3 – Trois domaines d’espace identifiant trois systèmes hydrologiques emboîtés de grandeurs décroissantes : bassin hydrologique, bassin hydrogéologique et aquifère [33].

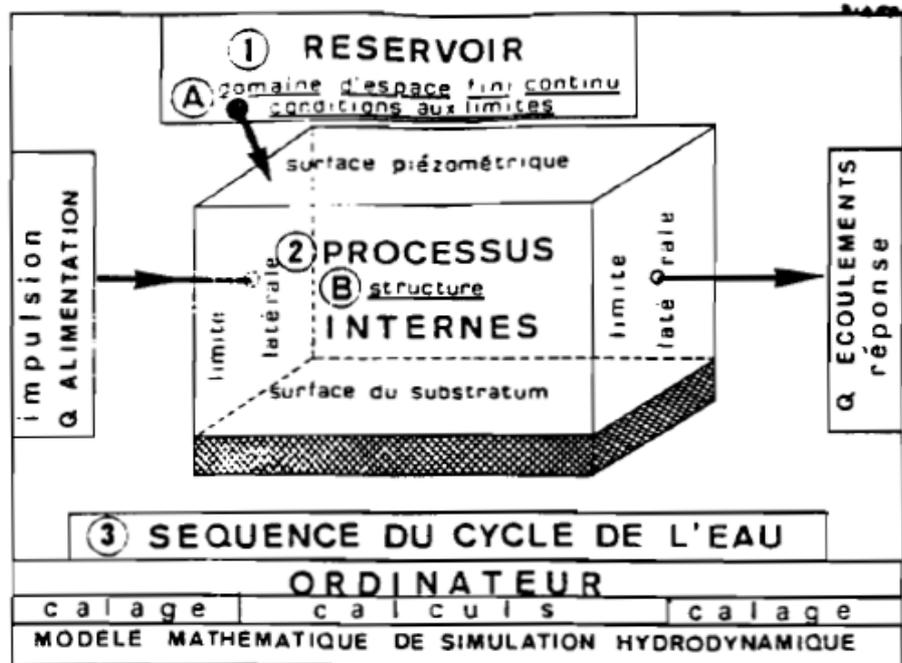


FIGURE 4 – Les constituants de l’aquifère [34].

- Une séquence du cycle de l'eau, l'environnement et caractérisé par le couple exprimé par une relation ou fonction de transfert interaction avec impulsion/réponse (fig. 4);
- La variabilité dans l'espace de ces caractéristiques; des conditions de temps, toutes les mesures des caractéristiques étant rapportées à une date (état initial) ou à une durée moyenne (variabilité des caractéristiques dans le temps) comme le montre la figure 5.

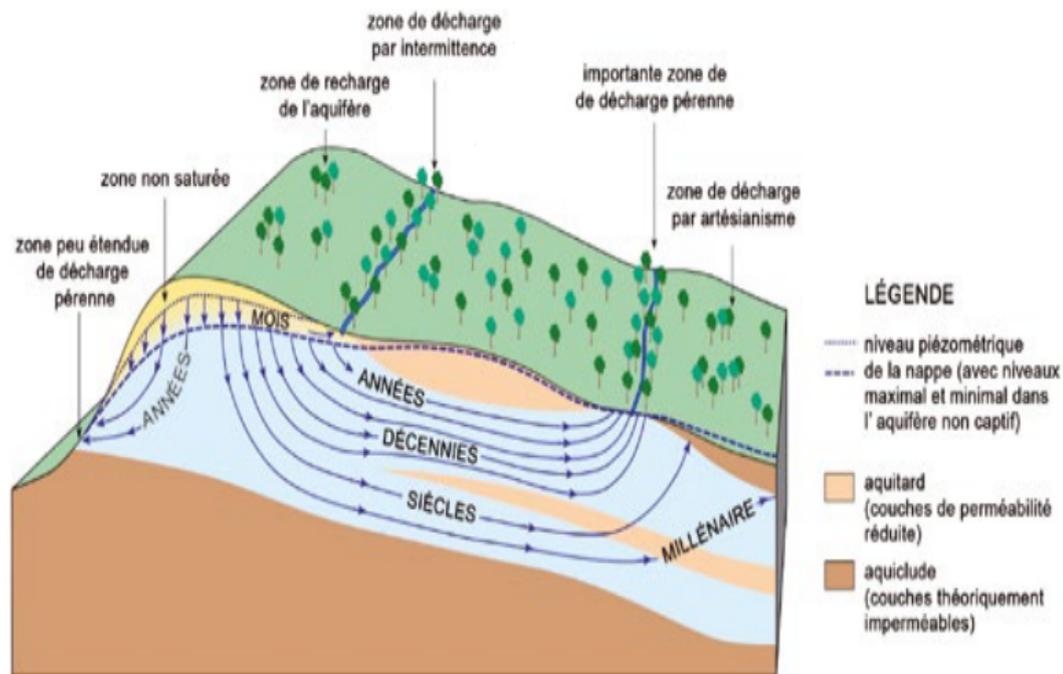


FIGURE 5 – Régime d'écoulement type et temps de séjour des eaux souterraines dans les régions semi-arides [34].

I.3.3 Aquifère et stockage de l'eau souterraine

L'aquifère est un complexe de deux constituants en interactions : le réservoir et l'eau souterraine [35, 36] (voir figure 6). La fonction principale du réservoir est l'emménagement qui règle le stockage et la libération de l'eau gravitaire. Cette fonction est déterminée par les caractéristiques physico-chimiques du réservoir (morphologie et interconnexion des vides) :

- la morphologie des pores et milieux poreux : la dimension des pores est directement liée à celle des grains du réservoir ;
- interconnexion des pores et milieu continu : la communication des pores permet le déplacement

des particules d'eau selon des trajectoires plus ou moins compliquées (tortuosité des trajectoires);

- morphologie des fissures et milieu fissuré : micro et macrofissures, fentes plus ou moins allongées issues d'un processus purement mécanique.

En fonction de ces caractéristiques, les réservoirs se classent en deux grandes catégories [37] :

- Les réservoirs poreux, constitués de roches meubles, non consolidées (voir figure 6) ;
- les réservoirs fissurés, constitués de roches compactes, consolidées (voir figure 6).

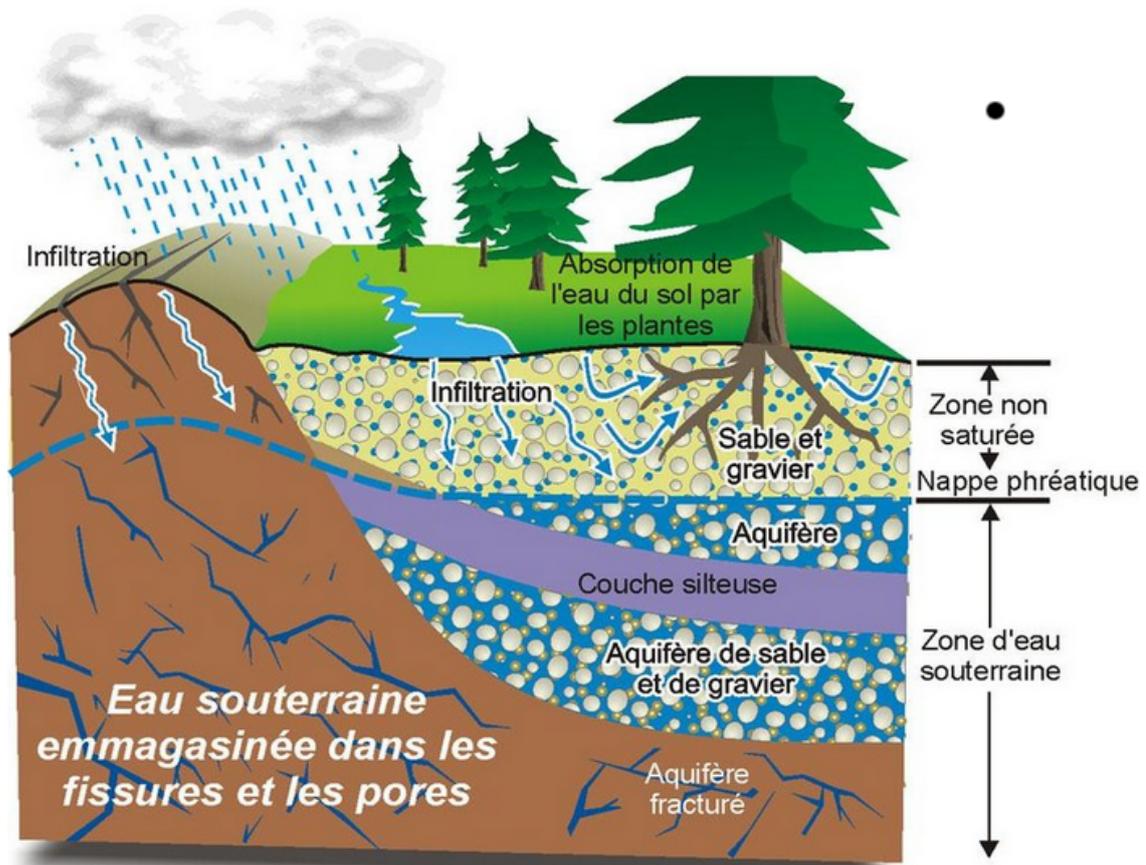


FIGURE 6 – Constituants physico-chimiques de l'aquifère [38].

Les paramètres du complexe eau/réservoir sont mesurés en laboratoire et sur le terrain par la détermination de la porosité efficace et les pompages d'essai :

- La porosité (η) est le rapport du volume des vides (V_v) au volume total de la roche (V_t) ;

$$\eta = \frac{V_v}{V_t} \quad (I.1)$$

- La porosité efficace (η_e) est le rapport du volume d'eau gravitaire (V_e), que le réservoir peut contenir à l'état saturé puis libérer sous l'effet d'un égouttage complet, à son volume total (V_t);

$$\eta_e = \frac{V_e}{V_t} \quad (\text{I.2})$$

- L'emmagasinement : le coefficient d'emmagasinement (S) se détermine sur le terrain par des pompages d'essai. Il se définit comme étant le rapport du volume d'eau libéré ou emmagasiné, par unité de surface de l'aquifère (en m^2), à la variation de charge hydraulique (Δh) correspondante. Dans une nappe à surface libre le coefficient d'emmagasinement est égal, en pratique à la porosité efficace, ce qui n'est pas le cas pour une nappe captive où il lui est 10 à 100 fois plus inférieur.

I.3.4 Usages de l'eau souterraine

L'utilisation de l'eau souterraine présente une large gamme d'applications, y compris l'alimentation des villages, villes et zones urbaines en eau potable [39]; l'alimentation des établissements institutionnels, des exploitations agricoles pour de multiples usages; l'utilisation industrielle à petite échelle et l'adduction d'eau d'urgence pour les réfugiés. Dans le monde, de nombreuses bourgades, villes, villages et collectivités locales éloignées, dépendent des eaux souterraines qui constituent leur principale source d'adduction d'eau.

L'eau souterraine est souvent la seule source disponible pour les localités éloignées des sources d'eau de surface. Le rendement d'un puits de quelques gallons à la minute (moins de 0,2 litres par seconde (*lps*)) suffit souvent pour une petite application d'une pompe à main dans un village. Pour les petites villes et les grands centres, les rendements de puits individuels de l'ordre de dizaines et de centaines de gallons par minute (1 à 10 Litres par seconde) sont souhaitables.

Le cadre stratégique du secteur de l'eau du Catholic Relief Service (CRS) spécifie quatre catégories d'utilisation de l'eau [40, 41].

- L'eau pour améliorer la santé. Favoriser la santé constitue un objectif primordial des projets d'aménagement des eaux et il devrait contribuer à faire avancer tous les projets d'alimentation en eau. Il est bien reconnu que l'utilisation domestique de l'eau contribue à améliorer la santé des ménages et des communautés.

- L'eau utilisée de manière productive pour renforcer les moyens de subsistance. L'utilisation

productive de l'eau dans l'agriculture, les petites industries et les travaux de construction locaux, contribue à renforcer les moyens de subsistance des bénéficiaires des programmes.

- L'eau et la protection de l'environnement pour soutenir les ressources naturelles. Les programmes de développement surface, car ceux-ci nécessitent un traitement intensif.
- L'eau pendant les urgences et les catastrophes pour protéger les vies et les moyens de subsistance.

Les eaux souterraines couvrent ainsi une grande variété d'utilisation pour l'Homme. Une eau polluée constitue ainsi un grand danger pour les populations qui l'utilisent, d'où l'importance de l'étude du comportement de ces polluants dans des eaux.

I.4 Transport des polluants dans les eaux souterraines

Les mécanismes de transport de polluant dans les milieux poreux sont régis par de nombreux phénomènes qui sont principalement liés à l'écoulement de l'eau souterraine. D'après les études déjà effectuées par certains auteurs dans le domaine, les principaux phénomènes liés à celle-ci sont : la convection/l'advection, la diffusion moléculaire, la dispersion cinématique, la sorption et la biodégradation [42-44].

I.4.1 La convection

Encore appelée advection, elle se définit par le transport des composés dissous suivant l'écoulement du fluide porteur dans un milieu poreux saturé. Lors de ce transport, le flux unidirectionnel est le produit de la quantité d'eau qui circule par la concentration du soluté dissout. Elle est régie par l'équation de continuité :

$$J_c = \eta_e \cdot v \cdot C \quad (\text{I.3})$$

L'équation de transport d'un soluté par convection dans un milieu s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\eta_e \cdot v \cdot C \quad (\text{I.4})$$

où J_c représente le flux de convection (kg/m^2s), v la vitesse d'écoulement de l'eau (m/s), et C la concentration du polluant dissout (kg/m^3).

Il existe deux types de convections :

- **La convection forcée** : elle suppose la présence d'un dispositif pour mettre en mouvement le fluide (pompe, compresseur...)
- **La convection libre** : le mouvement du fluide résulte de l'existence d'un gradient de température dans le fluide.

Il est à noter que si la température est uniforme, le fluide est au repos.

I.4.2 La diffusion moléculaire

C'est un phénomène qui se produit lorsqu'il existe un gradient de concentration c'est-à-dire une zone à forte concentration en composés dissout et une autre zone à faible concentration même si il n'y a pas d'écoulement [1] (voir figure 7). Il est lié au mouvement brownien des molécules en solution. Ce phénomène est principalement décrit mathématiquement par la loi de Fick donnée par :

$$J_d = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (I.5)$$

où J_d représente le flux massique de diffusion par unité de section et par unité de temps (kg/m^2s), D^* est le coefficient de diffusion moléculaire (m^2/s) et $\frac{\partial C}{\partial x}$ représente le gradient de température.

Cette expression n'est valable que pour des régimes permanents alors que dans le cas contraire, le flux varie par rapport à la distance et que la concentration varie par rapport au temps t . Dans ce cas, nous avons l'équation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial J_d}{\partial x} \quad (I.6)$$

En introduisant cette expression dans l'équation I.5, on obtient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C \quad (\text{I.7})$$

Δ est l'opérateur Laplacien



FIGURE 7 – Formation d'un gradient de concentration.

Cependant, on note qu'à cause de la nature tortueuse du milieu, le chemin parcouru par le soluté est différent de celui à l'eau libre. Il faut donc prendre en considération la tortuosité du chemin parcourue en définissant un coefficient τ tel que :

$$D_e^* = \tau D^* \quad (\text{I.8})$$

avec D_e^* coefficient de diffusion moléculaire effectif (m^2/s) et τ représente la tortuosité dont la valeur est le rapport entre le chemin parcouru en ligne droite et celui réellement parcouru. Millington et Quirck [44] ont établi une relation qui relie la tortuosité à la porosité totale de l'aquifère, elle se définit pour une aquifère donnée par :

$$\tau = \frac{\eta^{\frac{10}{3}}}{\eta} \quad (\text{I.9})$$

I.4.3 La dispersion mécanique ou dispersion cinématique

La dispersion cinématique est la conséquence de l'hétérogénéité des directions et des vitesses locales d'écoulement au sein d'un milieu poreux. Comme le mécanisme de convection,

cette dispersion cinématique n'existe pas en l'absence de mouvement du fluide à l'échelle macroscopique. Ces différentes vitesses de l'eau permettent le mélange des solutés en solution. Ce mélange est appelé dispersion mécanique. La dispersion qui se fait selon l'axe de l'écoulement est appelée dispersion longitudinale. Celle qui est normale à l'écoulement est appelée dispersion transversale. Le mécanisme de dispersion a été caractérisé par un coefficient de dispersion mécanique appelé dispersivité et noté α (m) qui est une propriété caractéristique du milieu. La dispersion mécanique ou dynamique dépend donc de l'hétérogénéité du milieu poreux. Cette hétérogénéité se traduit par une dispersion aléatoire des vitesses réelles des particules d'eau autour de la vitesse moyenne de déplacement de l'eau. Le coefficient de dispersion est égal au produit de la dispersivité et de la vitesse d'écoulement de l'eau à travers le milieu :

$$D_m = \alpha v \quad (I.10)$$

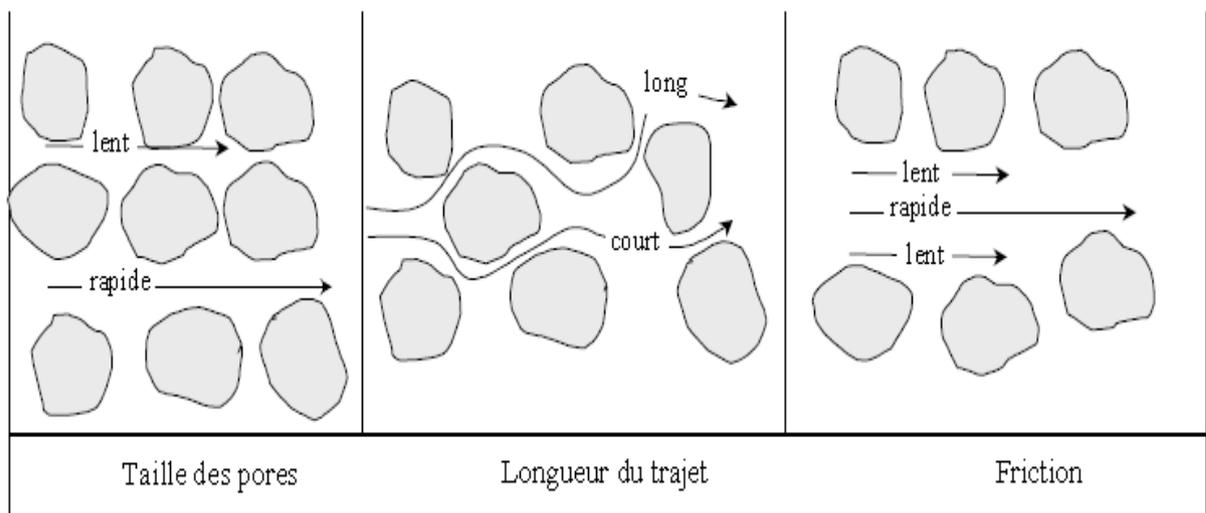


FIGURE 8 – Phénomène de dispersion à l'échelle des pores. [45]

Pour un champ de vitesse à trois dimensions dans l'aquifère, la dispersivité possède trois composantes :

- **La dispersivité longitudinale (α_L)** : elle représente la variation locale de la concentration de soluté dans la vitesse de l'eau et dans la direction de l'écoulement de l'eau. Sa valeur est le $1/10^{eme}$ de la longueur du panache ou de l'observation [46-49]. Elle est donc égale à $0,01 m$ pour l'échelle d'analyse de $1 m$ et $0,1 m$ pour une échelle d'analyse approximative de $10 m$.

- **La dispersivité transversale (α_T)** : c'est le degré de concentration qui est flou dans la direc-

tion des angles droits de l'écoulement de l'eau. Elle est dirigée sur les côtés et vers le bas et est supposée représenter un dixième de la dispersivité longitudinale. Elle est donc égale au $1/100^{eme}$ de la longueur du panache ou de l'observation [46-49].

- **La dispersivité transversale dirigée vers le haut** : elle est généralement très faible.

Etant donné que les dispersivités transversales sont négligeables, seul la dispersivité longitudinale est souvent pris en compte par la plus part des auteurs.

La dispersion mécanique ne pouvant pas être séparée de la diffusion moléculaire, on définit un autre phénomène appelé dispersion hydrodynamique dont le coefficient est la somme du coefficient de dispersion mécanique et celui de la diffusion moléculaire [47, 48]. Ce coefficient peut s'exprimer sous forme tensorielle par [47] :

$$\mathbf{D}_{ij} = \alpha_T |V| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|V|} + D^* \tau \delta_{ij} \quad (\text{I.11})$$

où $\alpha_L(m)$ et $\alpha_T(m)$ sont respectivement les dispersivités longitudinale et transversale, $v_i(m/s)$ est la vitesse d'écoulement de l'eau, $|V|$ est la norme du débit réel, $D^*(m^2/s)$ est le coefficient de diffusion moléculaire du polluant, τ est la tortuosité et δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

En une dimension et en négligeant les dispersivités transversales, le coefficient de dispersion hydrodynamique s'écrit :

$$D_h = \alpha v + \tau D^* \quad (\text{I.12})$$

L'approche hydrodispersive est régie par un nombre adimensionnel appelé le nombre de Péclet et noté Pe . Ce nombre renseigne sur la prédominance entre la diffusion et la dispersion mécanique et s'exprime par :

$$Pe = \frac{v.L}{D^*} \quad (\text{I.13})$$

où Pe représente le nombre de Péclet (-).

Nous avons donc les cas suivants :

- Pour un nombre de Péclet inférieur à 0,1 ; la diffusion est prédominante
- Pour un nombre de Péclet compris entre 0,1 et 10 ; la diffusion et la dispersion coexistent

- Pour un nombre de Péclet compris entre 10 et 10^5 environ ; la dispersion mécanique est prédominante avec la convection
- Pour un nombre de Péclet bien au-delà, la loi de Darcy est invalide.

I.4.4 La bioturbation

Il est à noter que dans un milieu à forte populations, celles-ci peuvent influencer la dispersion du polluant dans le milieu, on parle de bioturbation. La bioturbation fait référence au transfert de nutriments ou de produits chimiques par des êtres vivants dans un compartiment d'un écosystème ou entre différents compartiments. C'est aussi le mélange actif de couches de sol ou d'eau par des espèces vivantes, principalement des animaux. Il est donc important d'en tenir compte dans le processus de dispersion donc, dans l'équation de transport. En tenant compte de ce processus, le coefficient de dispersion du polluant dans un milieu s'écrit [47] :

$$D = D_h + D_B \rho_b K_d \quad (\text{I.14})$$

I.4.5 La sorption

Le processus de sorption sur un matériau poreux comme le sol comprend l'adsorption, la chimisorption, l'absorption et l'échange d'ions. L'adsorption englobe les processus par lesquels un soluté est lié à la surface d'un solide. Par exemple, un cation peut être attiré vers une région proche d'une surface argilo-minérale chargée négativement et s'y lier par des forces électrostatiques ; c'est la fixation par échange de cations. Ces mécanismes géochimiques peuvent changer le caractère des substances transportées dans un milieu poreux [50-54].

La chimisorption apparaît quand le soluté est incorporé sur le sol par réaction chimique. L'absorption intervient quand les particules poreuses de l'aquifère permettent au soluté, sa diffusion intra-particulaire puis sa sorption sur les surfaces intérieures des particules. Dans notre cas, nous ne tenterons pas de différencier ces phénomènes, nous engloberons dans le terme de sorption l'ensemble des processus cité ci-dessus. Le processus, par lequel un contaminant se distribue entre la phase solide et la phase liquide, est appelé partage [55].

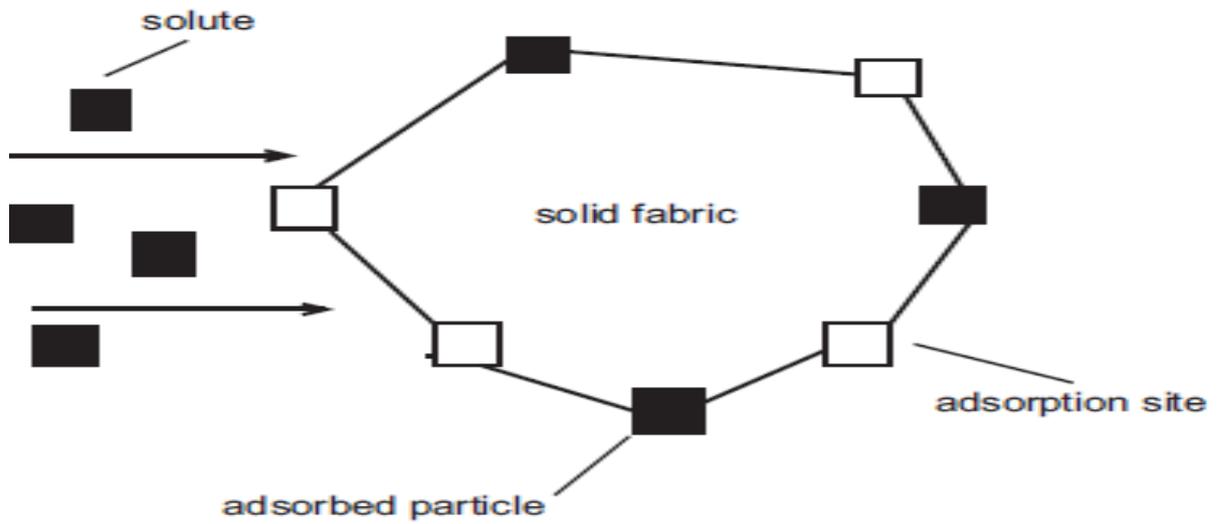


FIGURE 9 – Sites d’adsorption du soluté et particules absorbées [54].

Pour modéliser les processus de sorption en une dimension, on définit la fonction $S = S(x, t)$ qui représente la quantité du soluté absorbée. Etant donné que les solutés deviennent attachés aux particules minérales, la quantité S du soluté absorbée est souvent mesurée en terme de masse du soluté par unité de masse du sol (kg/kg). La masse du sol par unité de volume du milieu poreux est $\rho_b(1 - \eta)$ et par conséquent le taux d’adsorption est donné par :

$$F = -\rho_b(1 - \eta)S_t \quad (I.15)$$

où F représente le taux d’adsorption, ρ_b est la densité (masse volumique) du milieu poreux (kg/m^3).

Dans le cas le plus simple on peut considérer le processus d’adsorption comme une réaction chimique réversible dans laquelle un site d’adsorption du solide réagit avec une particule pour produire une particule absorbée. La réversibilité de la réaction signifie que, dans un sens strict, le processus est un processus d’adsorption-désorption. Le schéma est représenté à la figure 9 et la réaction se présente ainsi que suit :



Ici σ désigne la densité des sites d’adsorption dans la fabrique solide immobile.

In situ, si le processus de sorption est rapide par rapport à la vitesse d'écoulement de l'eau, la concentration sorbée sur le sol atteindra un équilibre local et le processus pourra être décrit par une isotherme de sorption à l'équilibre. Dans le cas inverse, où le soluté vis à vis de la surface solide sera dans un état de non équilibre local, il faudra utiliser un modèle de sorption décrivant cet état de non équilibre. On distingue plusieurs types d'isothermes de sorption donc les plus rencontrées sont :

- L'isotherme linéaire d'adsorption dans laquelle la concentration sorbée sur la matrice solide S est directement proportionnelle à la concentration du soluté en solution C :

$$S = K_d C \quad (\text{I.17})$$

K_d représente le coefficient de partage sol-eau du soluté ou coefficient de partition.

Le processus d'adsorption linéaire réduit la vitesse apparente d'advection du soluté de v/R , où R représente le facteur de retard qui sera abordé par la suite.

- L'isotherme de Freundlich dont l'expression s'écrit :

$$S = K_{fr} C^N \quad (\text{I.18})$$

où N est un entier positif

Cette isotherme peut s'écrire sous la forme logarithmique ainsi que suit :

$$\ln(S) = \ln(K_{fr}) + N \ln(C) \quad (\text{I.19})$$

L'isotherme de Freundlich est l'une des isothermes souvent utilisées pour l'adsorption de divers métaux et les composés organiques dans le sol. Malheureusement, il n'existe pas de limite supérieure sur la quantité de soluté qui peuvent être adsorbés, par conséquent l'isotherme de Freundlich doit être utilisée avec des résultats numériques à l'appui [54, 55].

- L'isotherme de Langmuir qui est une isotherme précise dont l'expression est une cinétique de potentiel de fixation. Elle permet de décrire des réactions de complexation de surface entre les espèces suivies et les sites activés du sol :

$$S = \frac{K_l S_{\max} C}{1 + K_l C} \quad (\text{I.20})$$

Cette isotherme est utilisée lorsqu'il existe un nombre fini de sites d'adsorption de densité fixe.

La figure 10 montre la courbe de ces trois isothermes telle que l'axe des abscisses représente la concentration en polluant dissout tandis que celle en ordonnée représente la concentration sorbée sur la matrice solide.

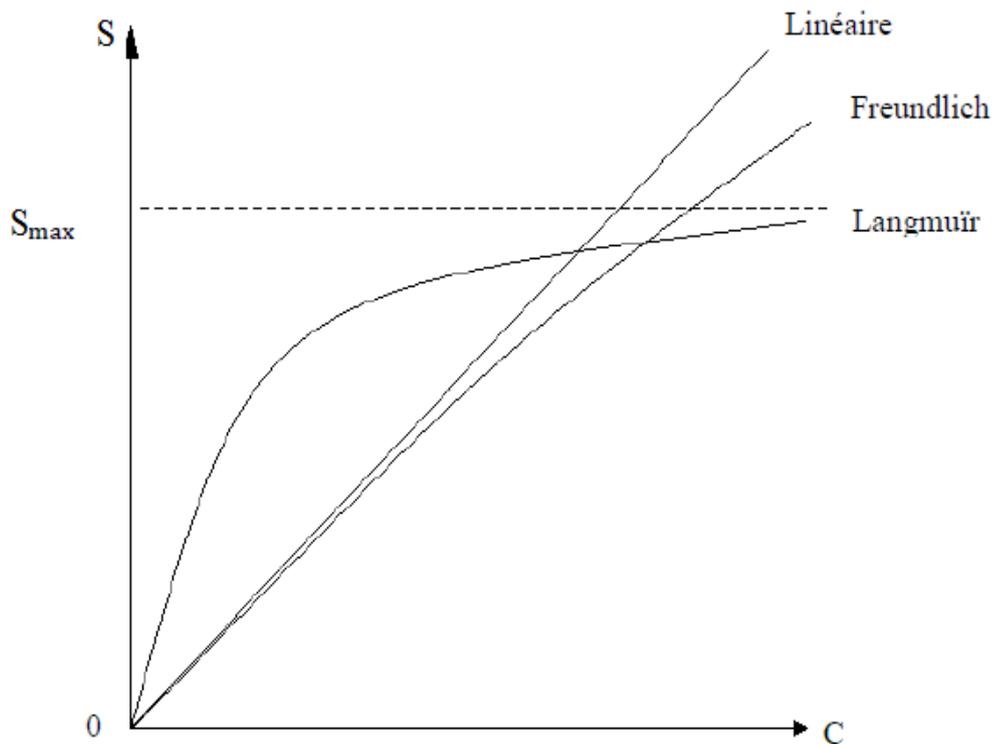


FIGURE 10 – Les isothermes de sorptions les plus rencontrées [56].

En général, le phénomène de sorption induit un effet de retard dans le transport de polluant dissout dans le milieu aquifère. Particulièrement, le coefficient de partage sol-eau (K_d) peut se déduire de la fraction en carbone organique de la matrice poreuse (f_{OC}) par la relation :

$$K_d = K_{OC} f_{OC} \quad (\text{I.21})$$

Cette expression n'est valable que pour les composés organiques uniquement [57]. En tenant compte de ce phénomène, la sorption sera introduite dans l'équation par :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\rho_b}{\eta} \frac{\partial S}{\partial t} \quad (\text{I.22})$$

I.4.6 La dégradation

Les processus de dégradation sont des phénomènes qui affectent la disparition des composés chimiques. Ils peuvent être biologiques (matières organiques) ou naturelles (radionucléides). Les bactéries et les champignons sont les principaux acteurs de la biodégradation. Selon la structure des composés chimiques, chaque composé ne sera pas dégradé selon les mêmes paramètres car il se peut que certains soient persistants par rapport aux autres. La dégradation est un phénomène complexe. Il existe différents modèles cinétiques décrivant mathématiquement ce processus :

- **Le modèle de premier ordre**

C'est le type de dégradation que subissent les composés tels que les radionucléides et d'autres substances organiques. En effet, on remarque une décroissance exponentielle de la substance polluante en résolvant l'équation différentielle [58-62] :

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C \quad (\text{I.23})$$

où λ représente la constante de dégradation du premier ordre encore appelé constante de désintégration (s^{-1}).

On en déduit dans ce cas une période ou demi-vie T (s) par dégradation d'un composé reliée à la constante de dégradation par :

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (\text{I.24})$$

- **Le modèle instantané**

Ce modèle est une amélioration de celui du premier ordre du fait de l'existence d'une limite de dégradation par une relation entre les centres nucléophiles et les centres électrophiles. Ce phénomène est décrit par le modèle mathématique de la réaction de Michaelis-Menten [63-65] :

$$\frac{dC}{dt} = -k_m \frac{C_{ED}}{K_{ED} + C_{ED}} \frac{C_{EA}}{K_{EA} + C_{EA}} \quad (\text{I.25})$$

k_m est la constante de Michaelis-Menten (-), C_{ED} la concentration en donneur d'électrons (kg/m^3), K_{EA} et K_{ED} sont respectivement les constantes de demi-saturation en accepteur d'électrons et donneur d'électrons.

Si la quantité en accepteur d'électrons est infiniment grande, on obtient une expression simple de l'équation précédente donné par [66] :

$$\frac{dC}{dt} = -k_m \frac{C_{ED}}{K_{ED} + C_{ED}} \quad (\text{I.26})$$

I.4.7 Equation de transport de polluant en milieu poreux

L'équation de transport des polluants en milieu poreux est une équation de conservation de la masse du polluant dans le domaine. En tenant compte de chacun des phénomènes intervenants lors du mouvement, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_b}{\eta} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} - vC \right) - \Gamma + \gamma \quad (\text{I.27})$$

Cette équation représente l'équation de convection-diffusion lors d'un transport de polluant représenté dans l'espace. Γ ($kg/(m^3s)$) représente les termes de pertes du polluant (puits) dans les phases liquide et solide, qui sont en général la dégradation et γ ($kg/(m^3s)$) celui des sources. Pour atteindre notre objectif, nous travaillerons avec chacun des paramètres variables dans cette équation. En ne tenant compte que des équilibres linéaires de partition, une dégradation de premier ordre, l'équation devient :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} - vC \right) - R\lambda C + \gamma \quad (\text{I.28})$$

$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{\eta}$ est le coefficient de retard

I.5 les conditions aux limites de l'équation d'advection-dispersion

Le problème d'advection-dispersion tel que donné par l'équation (I28) n'est pas complet. En effet il manque dans sa formulation des conditions aux limites qui permettent d'obtenir des solutions à ce problème. Il existe trois types de conditions aux limites à savoir les conditions aux limites de Dirichlet, de Neuman et de Robin.

■ Condition aux limites de Dirichlet

Encore appelée condition de premier type ou condition de type uniforme, elle stipule que la concentration aux limites du domaine est égale à une fonction du temps, cette fonction représentant la distribution du contaminant à la limite considérée. Sa formulation mathématique est la suivante :

$$C(x = l_i, t) = g_i(t) \quad (\text{I.29})$$

où l_i peut prendre les valeurs 0 ou L correspondant à l'origine et à la fin du domaine.

■ Condition aux limites de Neumann

Encore appelée condition aux limites de second type, elle stipule que le flux de concentration aux limites du domaine est proportionnel à une fonction dépendant du temps. Sa formulation mathématique est la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x = l_i, t) = g_i(t) \quad (\text{I.30})$$

Cette condition est le plus souvent utilisée à la limite de sortie sous une forme homogène.

■ Condition aux limites de Robin ou de Cauchy

C'est une combinaison pondérée d'une condition aux limites de Dirichlet et d'une condition aux limites de Neumann. Elle est encore appelée condition aux limites du troisième type. La condition aux limites de Robin est de la forme :

$$a_i C(x = l_i, t) + b_i \frac{\partial C}{\partial x}(x = l_i, t) = g_i(t) \quad (\text{I.31})$$

où a_i et b_i sont des fonctions qui dépendent des caractéristiques du milieu.

I.6 Etat de l'art sur les travaux récents concernant la modélisation du transport de polluant dans les eaux souterraines

La modélisation a connu un essor considérable notamment pour la simulation du transport de polluant que ce soit en terme des méthodes de résolution ou en terme des expressions des coefficients mais aussi en terme du type de problème. Divers auteurs ont proposé des modèles mathématiques de types mécanistes à l'aide d'équations différentielles établies suivant les phénomènes considérés soit en déterminant la solution exacte, soit en effectuant une analyse numérique à l'aide d'un logiciel de calcul adéquat.

■ Shubham J. et al en 2017 ont résolu l'équation de convection-diffusion pour un domaine fini à l'aide de la méthode des différences finies en utilisant les polynômes de Tchebychev [67]. Elles sont définies par :

$$U_n(x) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta} \quad (\text{I.32})$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (\text{I.33})$$

$$C(x, t=0) = C_0, \quad \frac{\partial C(x=0, t)}{\partial x} = 0 \quad \text{et} \quad C(x=L, t) = 0 \quad (\text{I.34})$$

La solution analytique pour la comparaison est :

$$C(x, t) = C_0 \left\{ 1 - 2 \exp \left[\frac{vx}{2D} - \frac{v^2 t}{4D} \right] \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\beta_k \sin \left(\frac{\beta_k x}{L} \right) \exp \left(\frac{\beta_k^2 D t}{L^2} \right)}{\beta_k + \left(\frac{vL}{2D} \right)^2 + \left(\frac{vL}{2D} \right)} \right\} \quad (\text{I.35})$$

La longueur du domaine est de $L = 12 \text{ km}$, $v = 0,6 \text{ inch/j}$, $D = 0,6 \text{ inch}^2/\text{j}$, $\lambda = 0,693/T$ et $C_0 = 1,0 \text{ mg/L}$. Les figures 11 et 12 montrent les profils de concentration obtenus à des temps de $t = 2,5 \text{ h}$ et $t = 5 \text{ h}$.

D'après les figures 11 et 12, l'utilisation des polynômes de Tchebychev ont montré une concor-

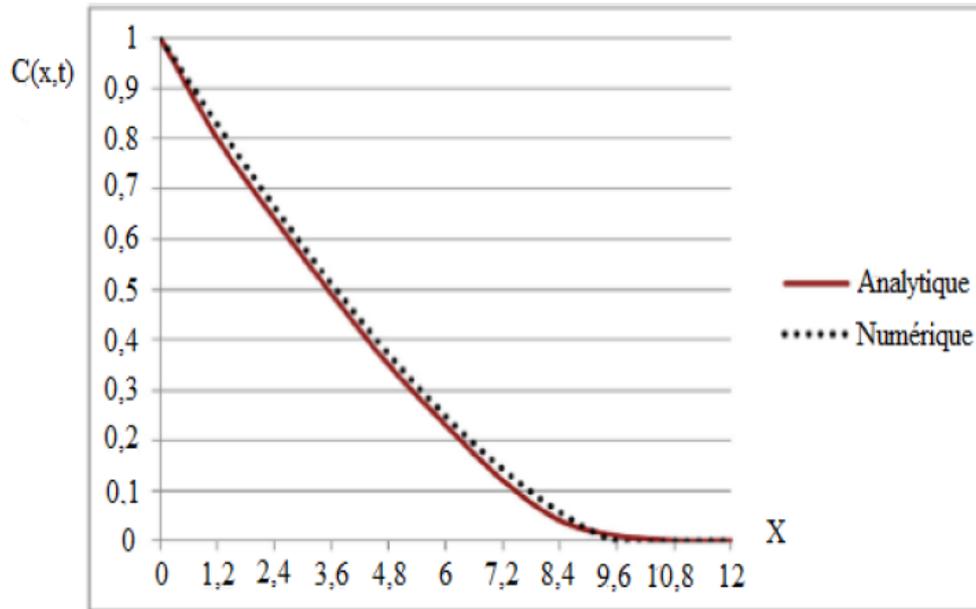


FIGURE 11 – Evolution de la concentration $C(x,t)$ en fonction de la position à $t = 2,5$ h.

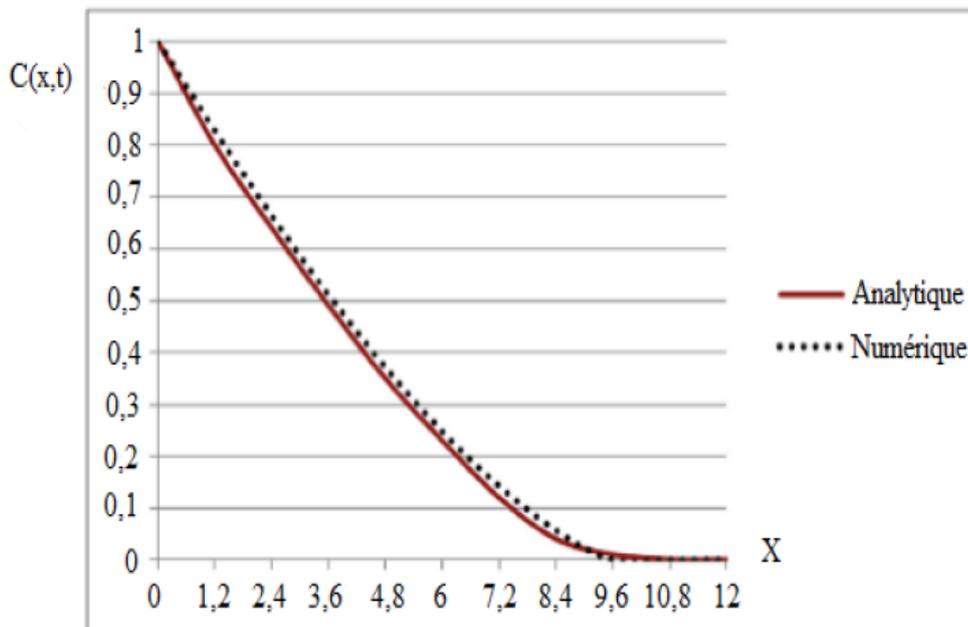


FIGURE 12 – Evolution de la concentration $C(x,t)$ en fonction de la position à $t = 5$ h.

dance assez forte entre les deux solutions dans le cas d'un système de longueur finie et de condition aux limites du premier type.

■ Lingyu Li et Zhe Yin en 2017 ont modélisé l'infiltration d'eaux usées dans l'eau souterraine d'une fuite d'un bassin d'une usine de papeterie en utilisant un modèle bidimensionnelle pour

un domaine infini avec écoulement unidirectionnel suivant l'équation de convection-diffusion [68] :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (\text{I.36})$$

$$C(x, y, 0) = 0, \quad (x, y) \neq (0, 0) \quad (\text{I.37})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} nC dx dy = m \quad (\text{I.38})$$

Pour cela, ils ont obtenu la solution analytique par la transformée de Laplace et la solution numérique par la méthode des différences finies suivant le schéma de Crank-Nicholson. La solution analytique obtenue est de la forme :

$$C(x, t) = \frac{\frac{m}{n}}{4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t}\right) \quad (\text{I.39})$$

Les deux figures 13a et 13b suivantes montrent les deux solutions avec un temps de simulation de $t = 10$ h. Les longueurs du domaine considéré suivant x et y sont $L_x = L_y = 20$, le maillage du domaine est $M_1 = M_2 = 40$ et le maillage temporel s'est fait au nombre de $N = 100$. Les coefficients de dispersion $D_x = D_y = 1$, $m = n = 1$, et la vitesse d'écoulement $v = 0,1$.

Les deux solutions ont montré une bonne concordance et la fiabilité de la méthode de Crank-Nicholson pour ce type de problème est élevée due au fait qu'il s'agit d'un schéma implicite inconditionnellement stable. Une visualisation dynamique a été possible grâce au logiciel ArcGIS. La figure 14 montre l'état de la pollution pour un temps $t = 1$ h et la figure 15 montre celle pour un temps $t = 3$ h.

Les figures 14 et 15 illustrent clairement que la concentration du polluant dans le milieu pour chacune des positions augmente au cours du temps.

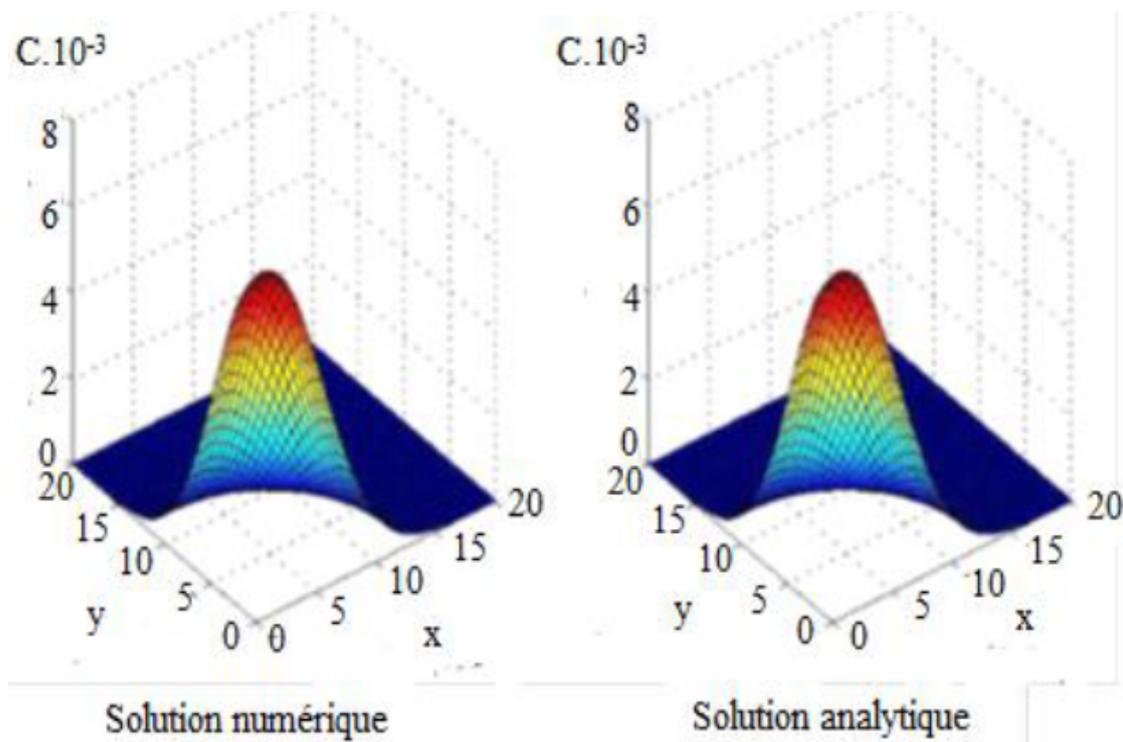


FIGURE 13 – Comparaison des solutions analytiques et numériques $C(x,y,t)$ en fonction de la position à $t = 10$ h.

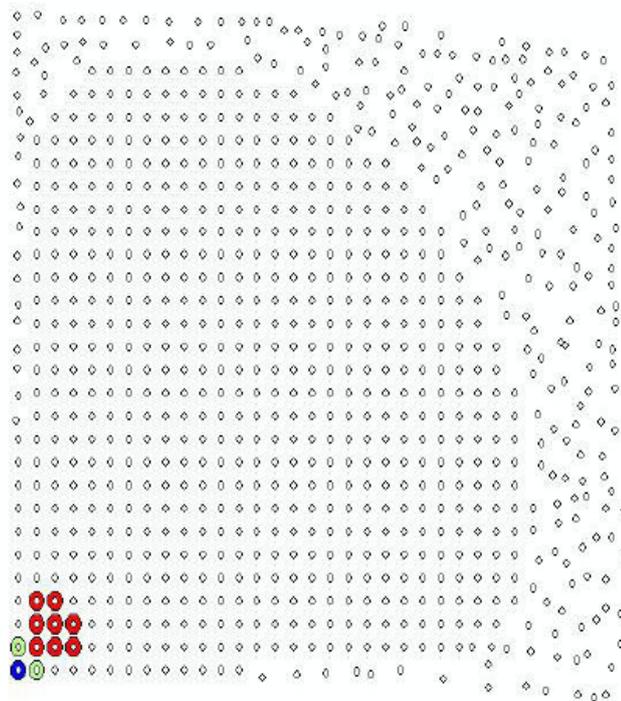
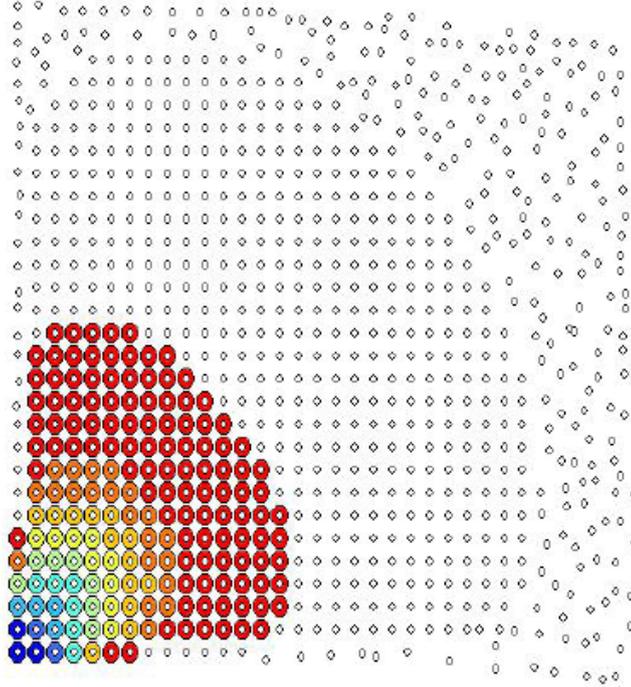


FIGURE 14 – Etat de la pollution à $t = 1$ h.

FIGURE 15 – Etat de la pollution à $t = 3$ h.

■ Moranda et al. (2018) ont modélisé le transport par advection-dispersion en une dimension des solutés réactifs dans les eaux souterraines [69]. La modélisation prenait en compte l'équilibre de sorption linéaire et une condition initiale d'entrée de type de Robin et variant dans le temps. La condition d'entrée fut exprimée comme une combinaison d'une fonction de production-désintégration du phénomène de rejet de la source dans le temps. Le problème fut formulé ainsi que suit :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (\text{I.40})$$

$$C(x, t = 0) = 0 \quad (\text{I.41})$$

$$-D \frac{\partial C(0, t)}{\partial x} + vC(0, t) = vg(t) \quad (\text{I.42})$$

$$\frac{\partial C(x \rightarrow \infty, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{I.43})$$

où $g(t)$ est une combinaison des distributions d'entrées exponentielles ($g(t) = C_0 y(1 - e^{-\lambda_p t}) + C_0 e^{-\lambda_s t}$). λ_p et λ_s (s) représentent les constantes de production et de décroissance de la source.

Le problème fut résolu en procédant par un changement de variable visant à transformer la condition aux limites de type de Robin à une condition aux limite de Dirichlet puis le théorème de Duhamel fut employé pour obtenir l'expression de la solution ainsi que suit :

$$C(x, t) = C_0 y (A(x, t) + B(x, t)) + C_0 E(x, t) \quad (\text{I.44})$$

avec

$$A(x, t) = \frac{v}{v+u} \exp\left(\frac{(v-u)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-tu}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{v}{v-u} \exp\left(\frac{(v+u)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+tu}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{v^2}{2\lambda D} \exp\left(\frac{vx}{D}\right) \exp(-\lambda t) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (\text{I.45})$$

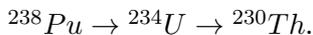
$$B(x, t) = -\exp(-\lambda_p t) \left(\frac{v}{v+w} \exp\left(\frac{(v-w)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-tw}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{v}{v-w} \exp\left(\frac{(v+w)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+tw}{2\sqrt{Dt}}\right) \right) - \frac{v^2}{2(\lambda-\lambda_p)D} \exp\left(\frac{vx}{D}\right) \exp(-\lambda t) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (\text{I.46})$$

$$E(x, t) = -\exp(-\lambda_s t) \left(\frac{v}{v+W} \exp\left(\frac{(v-W)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-tW}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{v}{v-W} \exp\left(\frac{(v+W)x}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+tW}{2\sqrt{Dt}}\right) \right) - \frac{v^2}{2(\lambda-\lambda_s)D} \exp\left(\frac{vx}{D}\right) \exp(-\lambda t) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (\text{I.47})$$

où $u = \sqrt{4D\lambda + v^2}$, $w = \sqrt{4D(\lambda - \lambda_p) + v^2}$ et $W = \sqrt{4D(\lambda - \lambda_s) + v^2}$

Des cas particuliers de solutions peuvent être obtenus à partir de cette solution pour des valeurs limites de λ_p et λ_s .

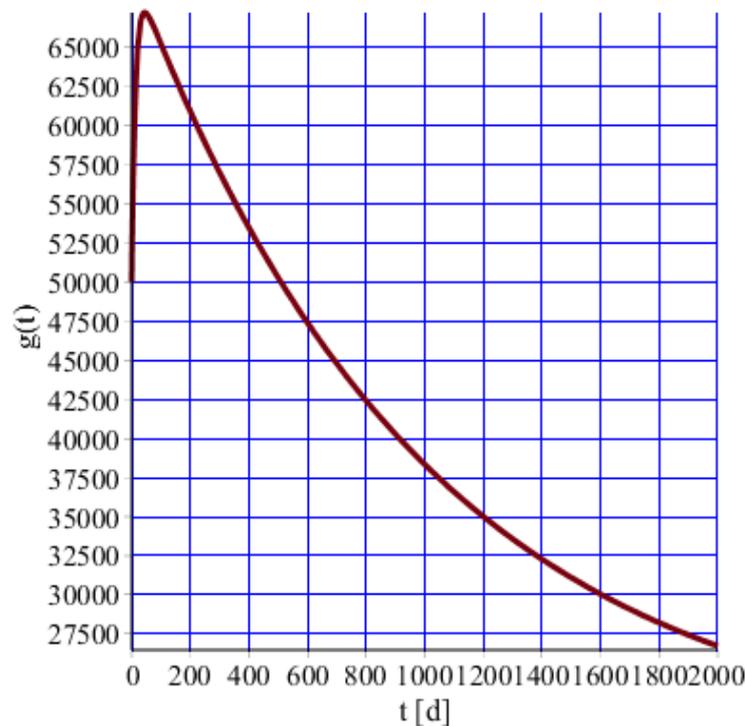
Le modèle a été appliqué au transport en 1D d'un radionucléide intermédiaire d'une chaîne de décroissance lors de son mouvement dans les eaux souterraines.



Les valeurs d'entrées du problème sont regroupées dans le tableau 2 et la fonction de distribution de la condition à la limite d'entrée à la figure 16.

TABLE 2 – Paramètres d'entrée du problème

Paramètres	Unités	Valeurs
Coefficient de dispersion, D	$m^2/year$	1000
Vitesse d'écoulement, v	$m/year$	100
Constante de décroissance radioactive, μ	$year^{-1}$	0.0000028
Constante de production, λ_p	$year^{-1}$	0.0089
Constante de décroissance de la source, λ_s	$year^{-1}$	0.0010028
Concentration initiale de ^{238}Pu , C_0	mg/m^3	5^4

FIGURE 16 – Conditions aux limites à $x = 0$.

La figure 17 montre qu'il y'a une différence entre les profils de concentration obtenus pour les deux types de conditions aux limites. Comme nous pouvons l'observer sur la figure 17c, la concentration augmente légèrement pour les premières positions puis diminue, or sur la figure 17c elle diminue avec la position. Ceci signifie que la condition aux limites de type de Dirichlet ne permet pas de satisfaire la conservation de la masse. On remarque aussi que la limite des concentrations lorsque t tend vers 0 à $x = 0$ ne satisfait pas les conditions aux limites. En effet, on espérait que la concentration de ^{234}U soit nulle à $x = 0$ pour t égale à zéro pour la condition au limite de Dirichlet. Par conséquent, la solution pour ce problème n'est valide que pour $x > 0$.

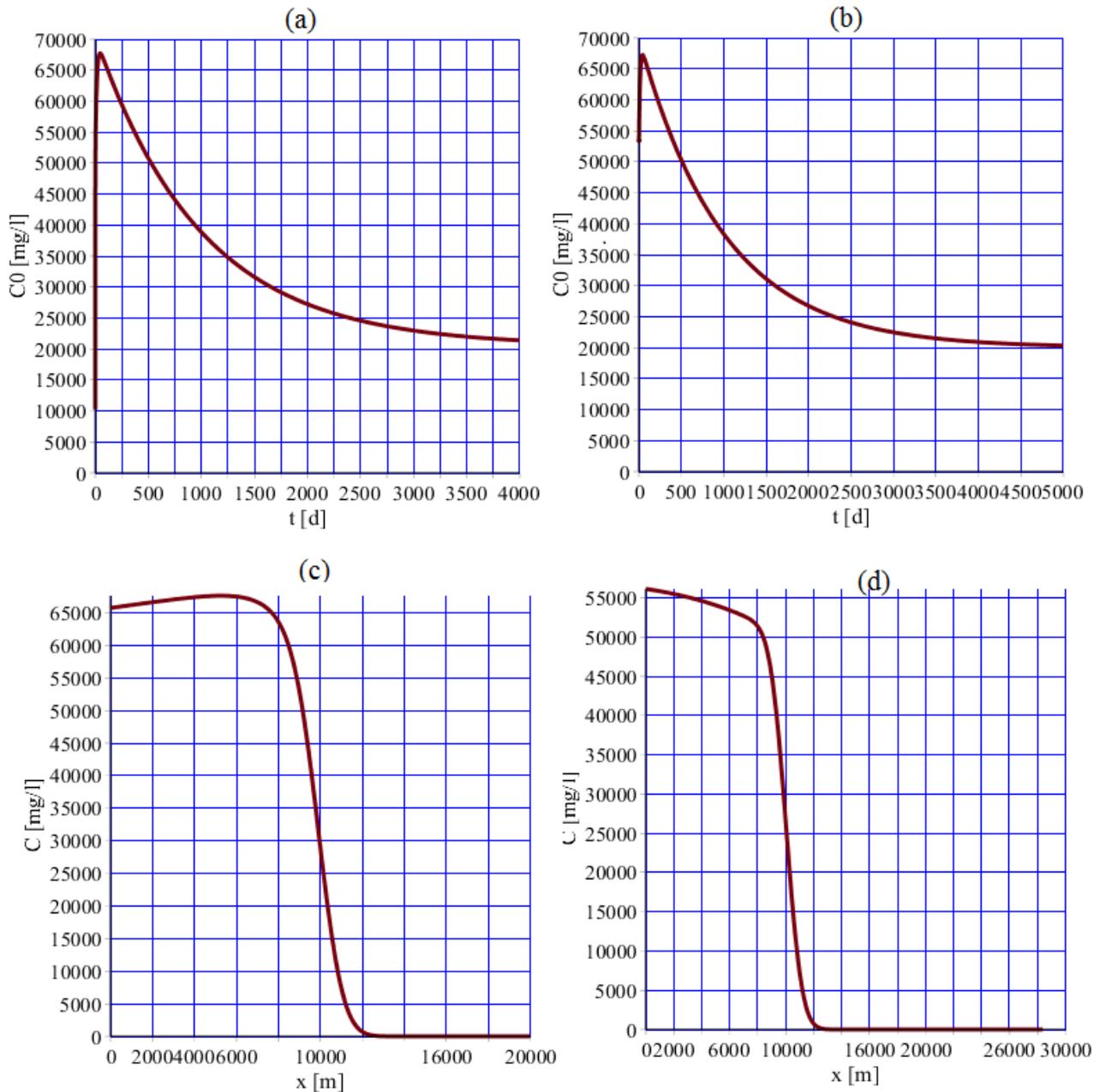


FIGURE 17 – Evolution de la concentration de ^{234}U en fonction du temps à $x = 0$ (a) : conditions d'entrée de Robin et (b) condition d'entrée de Dirichlet et évolution de la concentration de ^{234}U en fonction de la position à $t = 100$ ans (c) : condition d'entrée de Robin et (d) condition d'entrée de Dirichlet

■ Manish Chaudhary et al. (2020) ont étudié le transport en une dimension d'un soluté réactif dans un réservoir d'eau avec les paramètres de l'équation variant en fonction de la position et le temps [12]. Le problème fut analysé pour une isotherme de sorption linéaire, un domaine semi-infini, une condition d'entrée de type de Dirichlet et une condition initiale variante en fonction de la position. Le problème est défini ainsi qu'il suit :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + f \frac{\rho_b}{\eta} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, t) \frac{\partial C}{\partial x} - u(x, t) C \right] - \lambda_l C - \lambda_s \frac{\rho_b}{\eta} S + \gamma \quad (\text{I.48})$$

où f représente la fraction des sites de sorption, λ_l (s^{-1}) est le taux de décroissance dans la phase liquide et λ_s (s^{-1}) est le taux de décroissance dans la phase solide.

$$C(x, t = 0) = C_l^i \exp(-\text{sech}(\lambda_1)) + K_s^i \quad (\text{I.49})$$

$$C(x = 0, t) = C_0 \exp(-\lambda_2 t), \quad \frac{\partial C(x \rightarrow \infty, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{I.50})$$

Dans ces équations, C_l^i (kg/m^3) est la concentration initiale du polluant dans la phase liquide, K_s^i (kg/m^3) est la concentration initiale du polluant dans la phase solide, (λ_1) (m^{-1}) représente le paramètre de coefficient constant et (λ_2) (s^{-1}) est le coefficient de résistance à l'écoulement.

En tenant compte de l'expression de l'isotherme de sorption linéaire tel que donnée par [70, 71] :

$$S = K_d F C \quad (\text{I.51})$$

avec F = la fraction des particules de sorption où la sorption est instantanée.

En tenant compte de l'équation (I.51), l'équation (I.48) devient :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, t) \frac{\partial C}{\partial x} - u(x, t) C \right] - \lambda C + \gamma \quad (\text{I.52})$$

avec $R = \theta + K_d F f \frac{\rho_b}{\eta}$ et $\lambda = \lambda_l + \lambda_s \frac{\rho_b}{\eta} F k_d$.

Les solutions analytiques furent obtenues pour le cas des coefficients variables dans le temps pour les sites homogènes ($v = v_0 \varphi(mt)$ et $D = (D_0 \tau + D^*) \varphi(mt)$) et pour le cas des sites hétérogènes ($v = v_0 (1 + ax) \varphi(mt)$ et $D = (D_0 \tau + D^*) (1 + ax)^2 \varphi(mt)^2$), où a (m^{-1}) représente le coefficient d'hétérogénéité. La méthode de résolution utilisée fut la même que celle utilisée par [71-73]. Les solutions numériques pour ces deux cas furent obtenues en utilisant le schéma de Crank-Nicolson qui est plus stable que les autres méthodes explicites des différences finies.

La figure 18 illustre la comparaison des profils de concentration entre les solutions numériques et les solutions analytiques. La comparaison est faite pour deux types de formations géologiques pour un temps fixe $t = 2 \text{ ans}$. Les paramètres d'entrées utilisés sont : $C_1^0 = 1 \text{ mg/L}$, $C_1^i = 0,01 \text{ mg/L}$, $K_s^i = 0,01 \text{ mg/L}$, $\gamma = 0,01 \text{ mg/L}$, $K_d = 0,01 \text{ m}^3/\text{g}$, $m = 0,01 \text{ m}^{-1}$, $\lambda_l = 0,0027 \text{ an}^{-1}$ et $\lambda_S = 0,13 \text{ an}^{-1}$. La figure 18(a) montre que les valeurs des concentrations de la solution numérique sont supérieures à celles de la solution analytique jusqu'à une certaine distance pour les deux formations géologiques mais après une certaine distance, les deux solutions convergent ensemble jusqu'à une valeur asymptotique. La figure 18(b) montre que initialement, les valeurs des concentrations de la solution analytique sont inférieures à celles de la solution numérique jusqu'à une certaine distance après, les valeurs des concentrations de la solution analytique deviennent supérieures à celle de la solution numérique. Ceci est due à la dépendance spatiale de la dispersion dans les sites hétérogènes. Malgré cela, les deux figures montrent un bon accord entre les solutions analytiques et numériques dans les sites homogènes et hétérogènes.

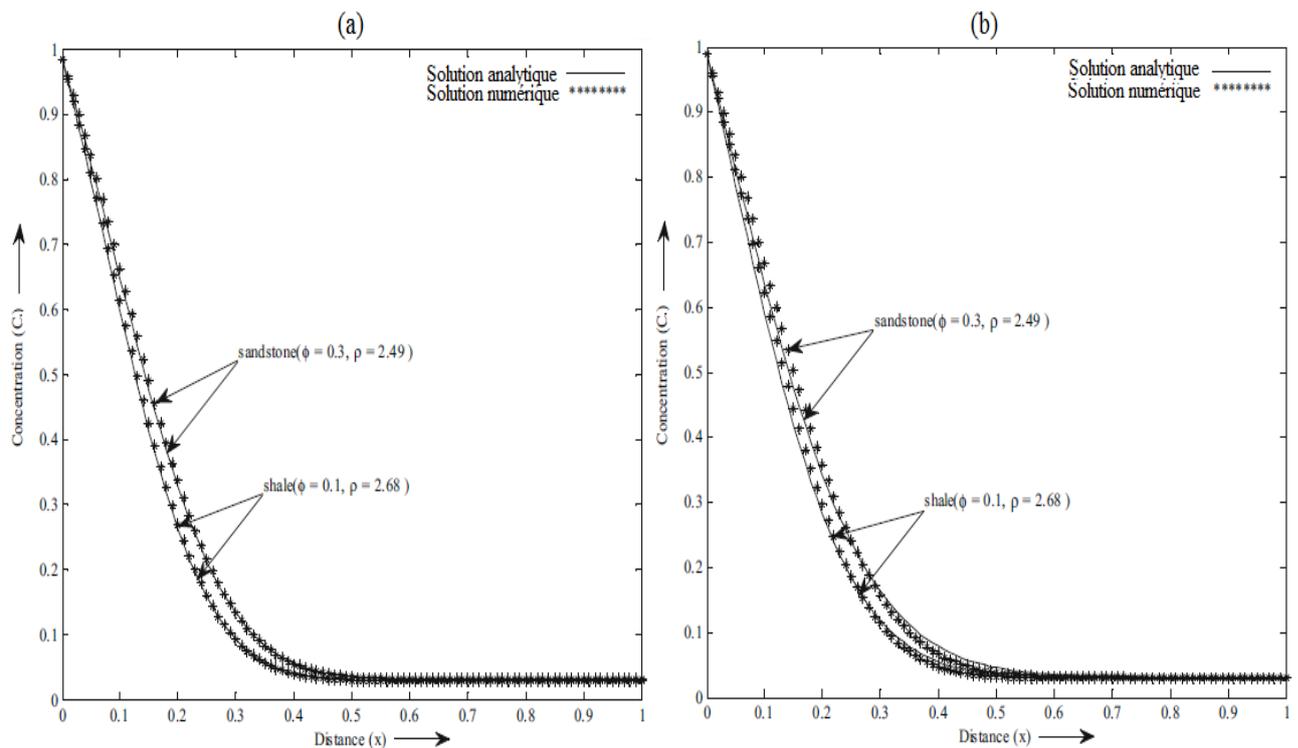


FIGURE 18 – Comparaison de la concentration du contaminant pour différentes formations géologiques pour une forme de vitesse exponentielle décroissance à $t = 2 \text{ ans}$ pour (a) milieux homogènes et (b) milieux hétérogènes

■ M. Kumar Singh et al. (2021) ont modélisé le transport des contaminants à deux dimensions dans un réservoir d'eau avec la source de contamination variant en fonction de la profondeur suivant l'équation [74] :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (\text{I.53})$$

où le facteur de retard s'exprime ainsi que suit $R = 1 + \frac{K_d \rho_b (1-\eta)}{\eta}$.

Les conditions initiales et aux limites du problème s'expriment comme suit :

$$C(x, z, t = 0) = 0 \quad (\text{I.54})$$

$$C(x = 0, z, t) = C_0 \exp(-\gamma_1 z), \quad \frac{\partial C(x = L, z, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{I.55})$$

$$\frac{\partial C(x, z = H, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{I.56})$$

où $\gamma_1 \text{ m}^{-1}$ est le paramètre de décroissance de la profondeur qui est utile pour contrôler la source de contamination.

La géométrie du transport du problème 2D du modèle est présenté à la figure. 19. La source d'entrée du contaminant avec une décroissance exponentielle en fonction de la profondeur est montrée le long de l'axe des z et les flux de contaminants sont assignés aux extrémités du domaine. la direction d'écoulement est supposée suivant la direction des x .

A cause des variations de saisons au cours de l'année et des activités humaines, la vitesse d'écoulement de l'eau dans les eaux souterraines doit varier en fonction du temps. Les expressions suivantes pour la vitesse d'écoulement et le coefficient de dispersion furent utilisées : $v = v_0 \varphi(mt)$ et $D = D_0 \varphi(mt)$. La solution analytique fut obtenue en effectuant le même changement de variable temporel que celui de [72] qui a pour but de transformer l'équation avec les paramètres dépendant du temps à une équation avec les coefficients constants puis en résolvant le problème obtenu à l'aide de la transformée de Laplace. Le schéma des différences finies de Cranck-Nickolson fut utilisé pour l'obtention de la solution numérique en vue de la validation

de la solution analytique.

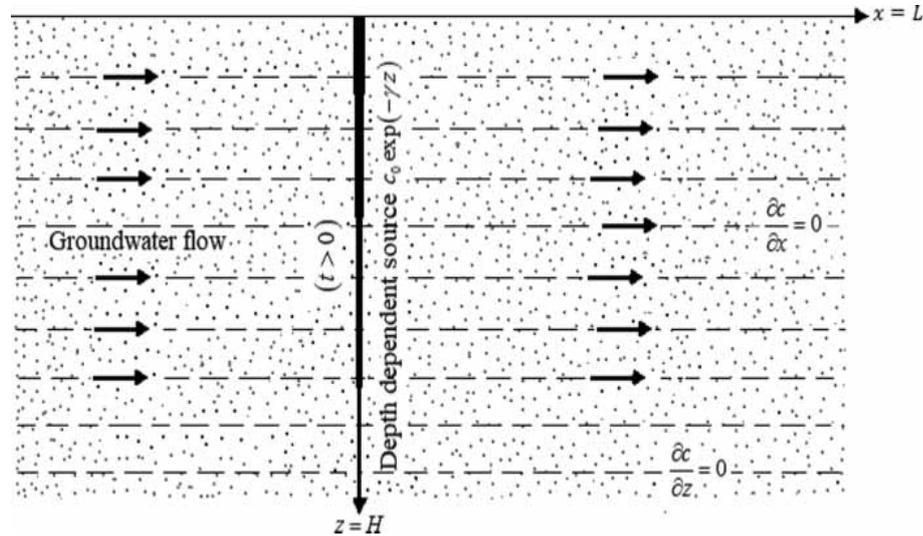


FIGURE 19 – Géométrie du transport de contaminant 2D avec une source variant en fonction de la profondeur dans un milieu poreux fini [74].

Les profils du transport du contaminant pour la solution du modèle de l'EAD proposé ont été obtenus en utilisant un ensemble de valeurs d'entrées contenues dans la littérature [75, 76]. Les longueurs du domaine considéré dans les directions longitudinale et transversale sont $L = 0,08 \text{ km}$ et $H = 0,05 \text{ km}$, respectivement. Pour la discrétisation spatiale, le maillage suivant les directions longitudinale et transversale du domaine est $P = Q = 40$ et le nombre total d'intervalles suivant le domaine temporel est considéré comme $M = 40$. Les autres paramètres sont regroupés dans le tableau 3.

La figure. 20 (a) illustre le profil de distribution de la concentration en deux dimensions avec une source d'entrée dépendant de la profondeur pour un écoulement horizontal dans un réservoir d'eau à $t = 0,2 \text{ an}$ pour la formation géologique du Gravier. On observe que la source d'entrée à $x = 0$ décroît avec la profondeur. La concentration du contaminant décroît avec la position à l'autre extrémité du domaine à cause de la dispersion, de la sorption et de la décroissance du premier ordre.

la figure. 20 (b) montre la validation des solutions analytiques et numériques dans le Gravier à $t = 0,2 \text{ an}$. On observe que la solution numérique converge bien avec la solution analytique.

TABLE 3 – Paramètres d'entrée du problème du problème 2D

Paramètres	Unités	Valeurs
Densité apparente du sol, ρ_b	L/g	2,19
Porosité, η	–	0.32 Gravier, 0,55 Sable
Dispersion longitudinale, D_{x_0}	$km^2/year$	0.003
Dispersion transversale, D_{z_0}	$km^2/year$	0.0015
Vitesse d'écoulement, v_{x_0}	$km/year$	0,045
Coefficient de repartition, K_d	L/g	0,15
Taux de contrôle de la profondeur, γ_1	km^{-1}	0,3
Coefficient de dégradation, λ	an^{-1}	0.15
Coefficient de résistance à l'écoulement, m	$year^{-1}$	1
Concentration initiale, C_i	g/L	0,05
Concentration source d'entrée, C_0	g/L	1

La distribution de la concentration des solutions analytiques et numériques se déplace à partir de la limite d'entrée et décroît avec la position jusqu'à la limite extrême du domaine.

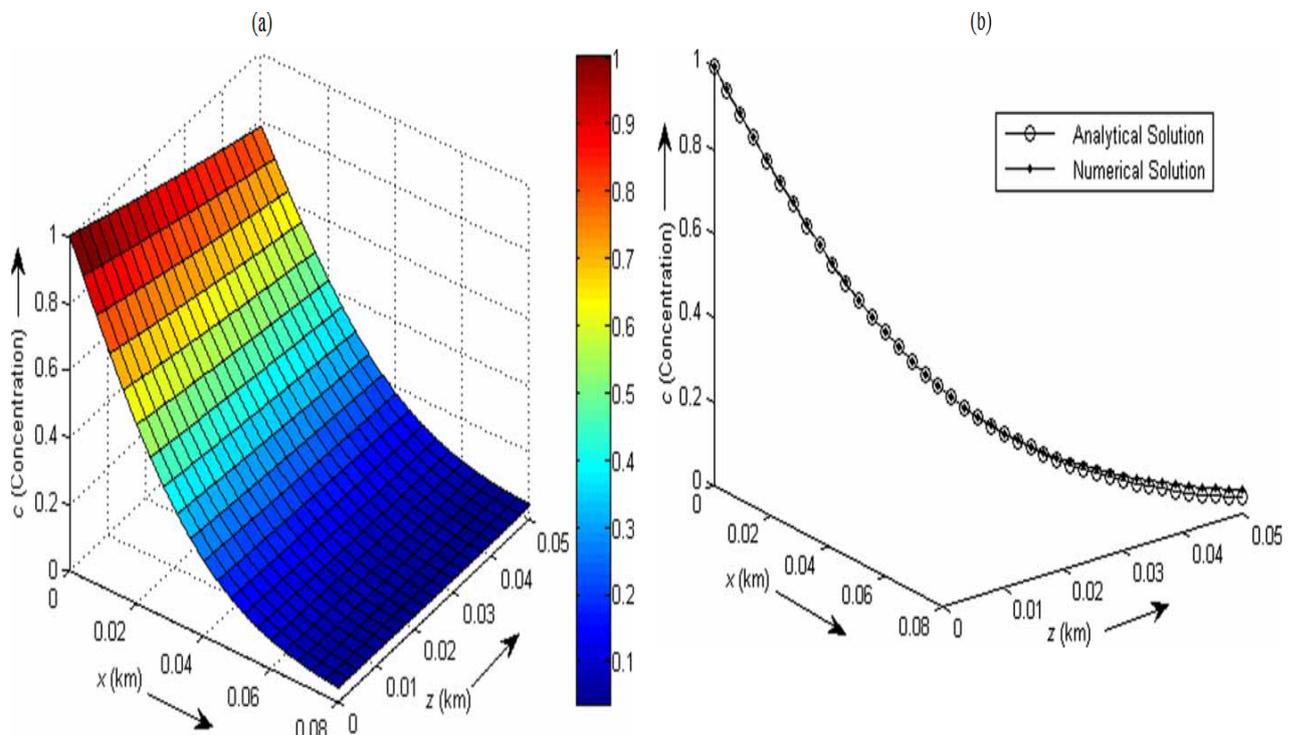


FIGURE 20 – (a) Solution analytique du transport 2D avec une source variante en fonction de la profondeur, (b) Comparaison des solutions analytiques et numériques du problème.

I.7 Conclusion

Ce premier chapitre nous a permis de voir que les polluants des eaux souterraines ont plusieurs origines et sont surtout dues aux activités humaines donc les principales sont l'industrialisation et l'agriculture. Ces polluants contaminent les eaux souterraines par infiltration à travers les processus de lessivage. Ensuite, nous avons vu qu'il existe plusieurs types d'aquifères parmi lesquels les aquifères réservoir qui constituent des sources d'eau importantes pour les besoins fondamentaux de l'Homme. Ensuite nous avons étudié les différents phénomènes qui régissent le transport des polluants dans les eaux souterraines à l'occurrence la convection, la diffusion, les interactions avec les matrices solides rassemblés en un seul paramètre appelé facteur de retard et la dégradation. Le chapitre s'est achevé par une présentation brève de quelques modèles récents concernant le transport des polluants dans les eaux souterraines. Il sera question dans le chapitre suivant de déterminer des solutions analytiques du transport des polluants dans un réservoir d'eau avec deux sources d'entrée et qui tient compte de la production du polluant dans le milieu.

MATÉRIELS ET MÉTHODES

II.1 Introduction

Le transport des polluants dans les milieux poreux tels que les réservoirs d'eau est décrit par l'EAD/ECD et prend en compte plusieurs autres paramètres. Les solutions de cette équation peuvent être obtenues analytiquement ou numériquement par diverses techniques de résolution qui dépendent du type de problème étudié. Il est donc important de bien circonscrire le problème tout en spécifiant les fonctions donc dépendent les paramètres du modèle et de choisir une technique de résolution appropriée. Dans ce chapitre il est question de la modélisation du transport de l'EAD d'un polluant dans un réservoir d'eau avec deux sources de contamination placées à l'origine et à la fin du domaine. Dans un premier temps, dans les matériels, nous présenterons les deux techniques analytiques et la méthode numérique de résolution utilisées. Dans la deuxième partie intitulée méthodes, ces techniques de résolutions seront appliquées à deux modèles de transport avec deux sources de contaminations.

II.2 Matériels

L'EAD en 1D dans un milieu hétérogène peut être résolue analytiquement par des techniques tels que la GITT ou d'autres outils mathématiques comme la transformée de Laplace. Lorsque les résultats expérimentaux ne sont pas disponible pour comparaison on a recours à des solutions numériques pour la validation des résultats des solutions analytiques. Dans cette partie nous présentons la GITT, la nouvelle technique de résolution de l'EAD dans un milieu en couches et en fin le solveur de MATLAB *pdepe*.

II.2.1 La GITT

Entendue en anglais "the Generalized Integral Transform Technique", la GITT est une technique de résolution souvent utilisée pour la résolution de l'EAD avec coefficients variables.

Elle est basée sur l'expansion des valeurs et fonctions propres et sur la détermination d'une matrice de transition.

Commençons par définir l'équation générale en une dimension du transport d'un soluté dans un milieu poreux décrivant les processus d'advection, dispersion, la sorption à l'équilibre et la décroissance suivante [16] :

$$R(C, x) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial C}{\partial x} - v(x, t) C \right) + I(C, x, t) \quad (\text{II.1})$$

Dans cette équation $R(C, x)$ représente le facteur de retard généralisé pour les isothermes de sorption, $I(C, x, t)$ $kg/(m^3 s)$ est le taux de décroissance par unité de volume de la solution aqueuse. Généralement le coefficient de dispersion $D(x, t)$ et la vitesse d'écoulement $v(x, t)$ sont tous deux considérés comme des fonctions de la position x et du temps t ; $R(C, x)$ est supposé être une fonction de la concentration et de la position; et le taux de décroissance est supposé être une fonction de la concentration C , de la position x et du temps t .

L'équation (II.1) est sujet aux conditions initiale et limites suivantes [27, 28, 77] :

$$C(x, t = 0) = f(x) \quad (\text{II.2})$$

$$a_0 C(x = 0, t) - b_0 \frac{\partial C(x = 0, t)}{\partial x} = g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.3})$$

$$a_L C(x = L, t) - b_L \frac{\partial C(x = L, t)}{\partial x} = g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.4})$$

où L (m) représente la longueur du domaine.

Dans les conditions aux limites Equations. (II.3) et (II.4) a_0 , a_L , b_0 et b_L sont des constantes qui dépendent de la vitesse et de la dispersion, $g_0(t)$ et $g_L(t)$ sont des fonctions arbitraires du temps qui définissent les sources de contamination à l'entrée ($x = 0$) et à la sortie ($x = L$) du domaine respectivement. Il est important de noter que b_0 doit être non négatif et b_L peut être négatif, a_0 et a_L doivent être tous deux positifs.

La méthode de la GITT débute par une substitution de variables dans l'équation (II.1), dans

le but d'homogénéiser les conditions aux limites des équations (II.3) et (II.4), ceci permet en tout un comportement convergent de la solution aux limites [16, 17, 78-80] :

$$C(x, t) = Q(x, t) + F(x, t) \quad (\text{II.5})$$

où $F(x, t)$ est appelée fonction de filtrage, elle satisfait exactement les conditions aux limites de $C(x, t)$. $Q(x, t)$ est solution du problème suivant :

$$\begin{aligned} R(C, x) \frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial Q}{\partial x} - v(x, t) Q \right) + I(C, x, t) - R(C, x) \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} - v(x, t) F(x, t) \right) \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

$Q(x, t)$ a les mêmes formes des conditions aux limites que les équations (II.3) et (II.4) mais avec le membre de droite égal à zéro pour chaque équation :

$$a_0 Q(x=0, t) - b_0 \frac{\partial Q(x=0, t)}{\partial x} = 0, \quad t \geq 0 \quad (\text{II.7})$$

$$a_L Q(x=L, t) - b_L \frac{\partial Q(x=L, t)}{\partial x} = 0, \quad t \geq 0 \quad (\text{II.8})$$

La condition initiale satisfaite par $Q(x, t)$ devient :

$$Q(x, t=0) = f(x) - F(x, t=0) \quad (\text{II.9})$$

Dans le but de résoudre le problème de l'équation (II.6) avec pour conditions aux limites les équations (II.7) et (II.8) et pour condition initiale l'équation (II.9) à l'aide de la GIIT, une paire de transformation, appelée la transformée intégrale et la transformée inverse, et un problème auxiliaire doivent être établis [78-80]. Dans le cas général, le problème auxiliaire de Sturm-Liouville doit être choisi de sorte que construire la paire de transformée soit simple et que la solution converge pour un petit nombre de terme dans la sommation. Tel que décrit par [19, 21, 81-83], un problème aux valeurs propres de Sturm-Liouville (STP) avec un opérateur self-adjoint du second ordre doit être utilisé. Le problème aux valeurs propres se définit comme suit :

$$\frac{d}{dx} \left(P(x) \frac{d\varphi_m}{dx} \right) + (\beta_m^2 w(x) - q(x)) \varphi_m = 0, m = 1, 2, \dots, \infty \quad (\text{II.10})$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$a_0 \varphi_m(x=0) - b_0 \frac{\partial \varphi_m(x=0)}{\partial_m x} = 0 \quad (\text{II.11})$$

$$a_L \varphi_m(x=L) - b_L \frac{\partial \varphi_m(x=L)}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.12})$$

où β_m^2 et $\varphi_m(x)$ sont respectivement les valeurs propres et leurs fonctions propres correspondantes et $w(x)$ représente la fonction poids.

Les valeurs propres sont déterminées en résolvant une équation transcendente qui, le plus souvent consiste à remplacer la fonction propre dans l'une des conditions aux limites, l'autre condition aidant lors de la normalisation. Ou alors elles sont obtenues en utilisant le déterminant des constantes de normalisation qui apparaissent dans l'expression des fonctions propres au niveau des conditions aux limites.

Les fonctions $\varphi_m(x)$ sont orthogonales les unes des autres et la relation d'orthogonalité est donnée par [81, 82] :

$$\int_0^L w(x) \varphi_m(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{m,k} N_m \quad (\text{II.13})$$

où N_m est la norme donnée par :

$$N_m = \int_0^L w(x) \varphi_m(x) \varphi_m(x) dx \quad (\text{II.14})$$

Maintenant la fonction $Q(x, t)$ est représentée sous la forme d'une série d'expansion en terme

des fonctions propres normalisées et en utilisant la propriété d'orthogonalisation (équation (II.13)) donc le résultat est la paire de transformées suivante :

$$Q(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \psi_m(x) T_m(t) \quad (\text{Inverse}) \quad (\text{II.15})$$

$$T_m(t) = \int_0^L w(x) \psi_m(x) Q(x, t) dx \quad (\text{Transformée}) \quad (\text{II.16})$$

où $\psi_m(x)$ est la fonction propre normalisée définie par $\psi_m(x) = \frac{\varphi_m(x)}{N_m}$ et $T_m(t)$ est le potentiel transformé.

Lors du traçage des courbes, la transformée inverse (équation (II.15)) doit être tronquée à un nombre fini de termes M choisi très suffisant pour produire un niveau de convergence acceptable. Par conséquent, la transformée inverse doit s'écrire ainsi qu'il suit :

$$Q(x, t) = \sum_{m=1}^M \psi_m(x) T_m(t) \quad (\text{II.17})$$

L'équation (II.17) fait intervenir les termes $T_m(t)$ ($m = 1, 2, \dots, M$), qui doivent être déterminés à partir de l'équation (II.6). Dans le but de déterminer $T_m(t)$, l'opérateur $\int_0^L w(x) \psi_m(x) dx$ doit être appliqué à chaque terme de l'équation (II.6) pour obtenir :

$$\begin{aligned} \int_0^L w(x) \psi_m(x) R(C, x) \frac{\partial Q}{\partial t} dx &= \int_0^L w(x) \psi_m(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial Q}{\partial x} - v(x, t) Q \right) dx \\ &+ \int_0^L w(x) \psi_m(x) I(C, x, t) dx - \int_0^L w(x) \psi_m(x) R(C, x) \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} dx \\ &+ \int_0^L w(x) \psi_m(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} - v(x, t) F(x, t) \right) dx \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Cette équation peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{A}(\mathbf{T}) \frac{d\mathbf{T}_m(t)}{dt} + \mathbf{B}(\mathbf{t}) \mathbf{T}_m(t) = \mathbf{G}_m(T, t) \quad (\text{II.19})$$

avec la condition initiale transformée selon :

$$\mathbf{T}_m(0) = \int_0^L w(x)\psi_m(x)(f(x) - F(x, t=0))dx \quad (\text{II.20})$$

où les éléments des matrices $M \times M$ \mathbf{A} et \mathbf{B} , et le vecteur colonne de longueur M sont donnés par :

$$A_{m,k}(\mathbf{T}) = \int_0^L w(x)\psi_m(x)\psi_k(x)R(C, x)dx \quad (\text{II.21})$$

$$B_{m,k}(t) = \int_0^L w(x)\psi_m(x)\frac{d}{dx} \left(v(x, t)\psi_k(x) - D(x, t)\frac{d\psi_k(x)}{dx} \right) dx + \psi_m(0)\frac{d}{dx} \left(v(0, t)\psi_k(0) - D(0, t)\frac{d\psi_k(0)}{dx} \right) \quad (\text{II.22})$$

$$G_m(\mathbf{T}, t) = \int_0^L \omega(x)\psi_m(x) \left(I(C, x, t) - R(C, x)\frac{\partial F(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(v(x, t)F(x, t) - D(x, t)\frac{\partial F(x, t)}{\partial x} \right) \right) dx \quad (\text{II.23})$$

On peut faire appel à la formule inverse pour la résolution du système d'équations couplées (II.19) et (II.20) à fin d'obtenir la fonction $Q(x, t)$. Ce problème doit se résoudre numériquement dans le cas général ; cependant pour le cas particulier des processus linéaires, ce problème peut être résolu analytiquement.

En considérant la sorption et la décroissance linéaire ($R(C, x) = R(x)$; $I(C, x, t) = \gamma(x, t) - \lambda(x, t)C$), l'équation (II.19) peut être simplifiée comme suit :

$$\mathbf{A} \frac{d\mathbf{T}_m(t)}{dt} + \mathbf{B}(t)\mathbf{T}_m(t) = \mathbf{G}_m(t) \quad (\text{II.24})$$

$$\text{où } A_{m,k} = \int_0^L w(x)\psi_m(x)\psi_k(x)R(x)dx$$

$$B_{m,k}(t) = \int_0^L w(x)\psi_m(x)\frac{d}{dx} \left(v(x, t)\psi_k(x) - D(x, t)\frac{d\psi_k(x)}{dx} \right) dx + \int_0^L w(x)\psi_m(x)\psi_k(x)\lambda(x, t)dx + \psi_m(0)\frac{d}{dx} \left(v(0, t)\psi_k(0) - D(0, t)\frac{d\psi_k(0)}{dx} \right)$$

$$G_m(t) = \int_0^L \omega(x) \psi_m(x) \left(\gamma(x, t) - \lambda(x, t) F(x, t) - R(x) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(v(x, t) F(x, t) - D(x, t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} \right) \right) dx \quad (\text{II.25})$$

L'équation (II.24) forme un système linéaire typique donc les solutions analytiques sont de la forme suivante [87] :

$$\mathbf{T}_m(t) = \Phi_m(t, 0) \mathbf{T}_m(0) + \int_0^t \Phi_m(t, \tau) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{G}(\tau) d\tau \quad (\text{II.26})$$

où $\Phi_m(t, \tau)$ représente la matrice de transition encore appelée "*Séries de Peano-Baker*" dans la théorie des systèmes linéaires [17, 84].

Pour des cas d'usages pratiques de simulation du problème de transport des polluants, l'applicabilité de la solution analytique décrite par les équations (II.5), (II.15) et (II.26) dépend donc fortement du degré de difficultés de l'évaluation de la matrice de transition $\Phi_m(t, \tau)$. Pour certains cas, elle peut être significativement simplifiée de sorte que la solution analytique décrite par les équations (II.5), (II.15) et (II.26) ait des valeurs pratiques.

II.2.2 La nouvelle technique semi-analytique de résolution des EADs dans les milieux poreux en couches

Dans le passé, pour résoudre les problèmes de transport dans les milieux poreux multicouches finis, on faisait appel à la GITT ou à la GITT couplée à la transformée de Laplace. Or comme vu dans la section précédente, l'utilisation de la GITT nécessite la résolution d'une équation transcendente qui dans la plus part des cas est une équation non linéaire très compliquée. Pour contourner cette difficulté liée à la résolution de cette équation pour ce type de problème, Carr (2020) [27] a proposé une nouvelle technique de résolution basée sur l'introduction des fonction inconnues représentant le flux dispersif aux interfaces des couches adjacentes que nous présenterons dans cette section.

II.2.2.1. Modèle de transport dans un milieu poreux en couches

Considérons le transport d'un soluté dans un milieu poreux constitué de m couches réparties ainsi, $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = L$. Soit $C_i(x, t)$ la concentration du soluté dans la couche i , $i = 1, 2, \dots, m$, où $x \in [x_{i-1}, x_i]$. L'équation de transport dans la couche i s'écrit :

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - \lambda_i C_i + \gamma_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.27})$$

où les coefficients R_i , D_i , v_i , λ_i et γ_i représentent les valeurs moyennes des coefficients de l'EAD dans la couche i .

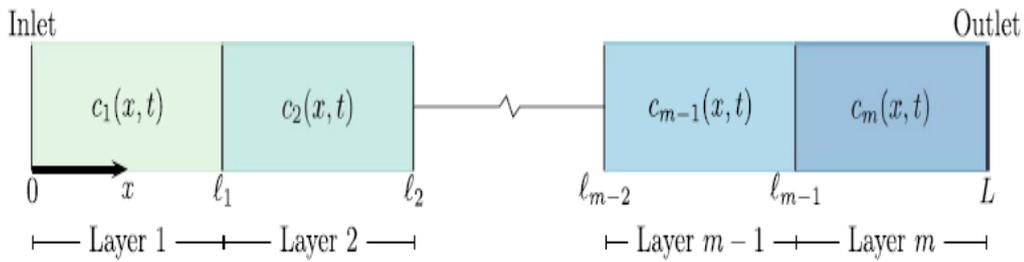


FIGURE 21 – Advection-dispersion dans un milieu contenant m couches [27]

L'équation de transport (II.27) est sujet des conditions initiale et aux limites générales suivantes :

$$C_i(x, t = 0) = f_i; \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.28})$$

$$a_0 C_1(x = 0, t) - b_0 \frac{\partial C_1(x = 0, t)}{\partial x} = g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.29})$$

$$a_L C_m(x = L, t) - b_L \frac{\partial C_m(x = L, t)}{\partial x} = g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.30})$$

La concentration et le flux dispersif sont supposés être continus à l'interface entre deux couches adjacentes [84, 87, 88] :

$$C_i(x_i, t) = C_{i+1}(x_i, t) \quad (\text{II.31})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}(x_i, t) = \theta_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial x}(x_i, t) \quad (\text{II.32})$$

II.2.2.2. Solution sémi-analytique

■ Solution générale pour m couches dans le domaine de Laplace

Pour résoudre le modèle de transport multicouche formulé par les équations (II.27)-(II.32), le modèle est reformulé en problèmes de transport dans chaque couche isolée par introduction des fonctions inconnues du temps $g_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, m-1$) représentant le flux dispersif au niveau des interfaces [24-27] :

$$g_i(t) = \theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}(x_i, t) \quad (\text{II.33})$$

Cette transformation conduit à la forme équivalente du modèle de transport multicouche (II.27)-(II.32) suivante :

- Première couche ($i = 1$)

$$R_1 \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - v_i \frac{\partial C_1}{\partial x} - \lambda_1 C_1 + \gamma_1, \quad 0 \leq x \leq x_1 \quad (\text{II.34})$$

$$C_1(x, t = 0) = f_1; \quad 0 < x < x_1 \quad (\text{II.35})$$

$$a_0 C_1(x = 0, t) - b_0 \frac{\partial C_1(x = 0, t)}{\partial x} = g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.36})$$

$$\theta_1 D_1 \frac{\partial C_1(x = l_1, t)}{\partial x} = g_1(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.37})$$

- Pour les couches intermédiaires ($i = 2, \dots, m - 1$)

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - \lambda_i C_i + \gamma_i, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.38})$$

$$C_i(x, t = 0) = f_i; \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.39})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i(x = x_{i-1}, t)}{\partial x} = g_{i-1}(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.40})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i(x = x_i, t)}{\partial x} = g_i(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.41})$$

- Pour la dernière couche ($i = m$)

$$R_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - v_m \frac{\partial C_m}{\partial x} - \lambda_m C_m + \gamma_m, \quad x_{m-1} \leq x \leq L \quad (\text{II.42})$$

$$C_m(x, t = 0) = f_m; \quad x_{m-1} \leq x \leq L \quad (\text{II.43})$$

$$\theta_m D_m \frac{\partial C_m(x = x_{m-1}, t)}{\partial x} = g_{m-1}(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.44})$$

$$a_L C(x = L, t) + b_L \frac{\partial C_m}{\partial x}(x = L, t) = g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.45})$$

avec chaque problème couplé aux autres en imposant la continuité de la concentration aux interfaces entre les couches adjacents (équation II.31) [24-27].

En appliquant la transformée de Laplace à chaque problème isolé (II.34)-(II.37), (II.38)-(II.41),(II.42)-(II.45), nous obtenons :

- Première couche ($i = 1$)

$$D_1 \frac{d^2 \bar{C}_1}{dx^2} - v_1 \frac{d\bar{C}_1}{dx} - (\lambda_1 + sR_1)\bar{C}_1 + R_1 f_1 + \gamma_1, \quad 0 \leq x \leq x_1 \quad (\text{II.46})$$

$$a_0 \bar{C}_1(x = 0, s) - b_0 \frac{d\bar{C}_1(x = 0, s)}{dx} = G_0(s) \quad (\text{II.47})$$

$$\theta_1 D_1 \frac{d\bar{C}_1(x = l_1, s)}{dx} = G_1(s) \quad (\text{II.48})$$

- Pour les couches intermédiaires ($i = 2, \dots, m - 1$)

$$D_i \frac{d^2 \bar{C}_i}{dx^2} - v_i \frac{d\bar{C}_i}{dx} - (\lambda_i + sR_i)\bar{C}_i + \bar{\gamma}_i + R_i f_i, \quad x_i \leq x \leq x_{i-1} \quad (\text{II.49})$$

$$\theta_i D_i \frac{d\bar{C}_i(x = x_{i-1}, s)}{dx} = G_{i-1}(s) \quad (\text{II.50})$$

$$\theta_i D_i \frac{d\bar{C}_i(x = x_i, s)}{dx} = G_i(s) \quad (\text{II.51})$$

- Pour la dernière couche ($i = m$)

$$D_m \frac{d^2 \bar{C}_m}{dx^2} - v_m \frac{d\bar{C}_m}{dx} - (\lambda_m + sR_m)\bar{C}_m = -\bar{\gamma}_m - R_m f_i, \quad x_{m-1} \leq x \leq x_m \quad (\text{II.52})$$

$$\theta_m D_m \frac{d\bar{C}_m(x = x_{m-1}, t)}{dx} = G_{i-1}(s) \quad (\text{II.53})$$

$$a_L \bar{C}_m(x = L, s) + b_L \frac{d\bar{C}_m(x = L, s)}{dx} = G_L(s) \quad (\text{II.54})$$

où $\bar{C}_i(x, s) = L\{C_i(x, t)\} = \int_0^{\infty} C_i(x, t)e^{-st}dt$ désigne la transformée de Laplace de $C(x, t)$, $G_i(s) = L\{g_i(t)\} = \int_0^{\infty} g_i(t)e^{-st}dt$ désigne la transformée de Laplace de $g_i(t)$, pour $1 < i < m - 1$ avec pour paramètre de Laplace s . Les transformées de Laplace de $g_0(t)$ et $g_L(t)$ sont supposées être déterminées analytiquement. Les problèmes aux valeurs limites (II.46)-(II.48), (II.49)-(II.51),(II.52)-(II-54) font tous intervenir des équations différentielles du second ordre avec coefficients constants qui peuvent être résolues en utilisant les techniques standard (les détails de résolution ne sont pas mentionnés ici) pour donner les expressions des concentrations suivantes dans le domaine de Laplace :

$$\bar{C}_1(x, s) = A_1(x, s)G_0(s) + B_1(x, s)G_1(s) + P_1(x, s), \quad (\text{II.55})$$

$$\bar{C}_i(x, s) = A_i(x, s)G_{i-1}(s) + B_i(x, s)G_i(s) + P_i(x, s), \quad i = 2, \dots, m - 1 \quad (\text{II.56})$$

$$\bar{C}_m(x, s) = A_m(x, s)G_{m-1}(s) + B_m(x, s)G_L(s) + P_m(x, s), \quad (\text{II.57})$$

où les fonctions $A_i(x, s)$, $B_i(x, s)$ et $P_i(x, s)$ sont définies dans le Tableau 1 de Carr (2020) [24].

Toutes les autres variables des équations (II.55)-(II.57) étant définies, pour déterminer $G_1(s)$, $G_2(s)$, ..., $G_{m-1}(s)$, les transformées de Laplace des fonctions inconnues aux interfaces $g_1(t)$, $g_2(t)$, ..., $g_{m-1}(t)$, on impose la continuité de la concentration à chaque interface dans le domaine de Laplace [24-27] :

$$\bar{C}_i(x_i, s) = \bar{C}_{i+1}(x_i, s), \quad i = 1, 2, \dots, m - 1 \quad (\text{II.58})$$

La substitution des équations (II.55)-(II.57) dans le système d'équations (II.58) donne un système linéaire pour $\mathbf{x} = [G_1(s), G_2(s), \dots, G_{m-1}(s)]^T$ qui peut s'exprimer sous la forme matricielle ainsi que suit :

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (\text{II.59})$$

où \mathbf{x} est une matrice colonne ayant pour éléments $G_i(s)$, les éléments de la matrice tridiagonale $(m-1) \times (m-1)\mathbf{A}$ ($\{a_{ij}\}$) et du vecteur de longueur $(m-1)$ \mathbf{b} ($\{b_i\}$) ($i = 1, 2, \dots, m-1$) sont donnés par :

$$\begin{aligned} a_{x,1} &= B_1(s_1, s) - A_2(l_1, s), \\ a_{s,2} &= -B_2(x_1, s), \\ a_{i,i-1} &= A_i(x_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2, \\ a_{i,i} &= B_i(x_i, s) - A_{i+1}(l_i, s)' \quad i = 2, \dots, m-2, \\ a_{i,i+1} &= B_{i+1}(x_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2, \\ a_{m-1,m-2} &= A_{m-1}(x_{m-1}, s), \\ a_{m-1,m-1} &= B_{m-1}(l_{m-1}, s) - A_m(l_{m-1}, s), \\ b_1 &= P_2(x_1, s) - P_1(x_1, s) - A_1(x_1, s)G_0(s), \\ b_i &= P_{i+1}(x_i, s) - P_i(l_i, s) \quad i = 2, \dots, m-2, \\ b_{m-1} &= P_m(x_{m-1}, s) - P_{m-1}(x_{m-1}, s) - B_m(x_{m-1}, s)G_L(s), \end{aligned}$$

La résolution du système linéaire de l'équation (II.59) permet de calculer les fonctions $G_1(s)$, ..., $G_{m-1}(s)$ et donc, la transformée de la concentration équations (II.55)-(II.57) peut être évaluée à n'importe quel x et s du domaine de Laplace.

II.2.2.3. Inversion numérique de la transformée de Laplace

Pour convertir les expressions des équations (II.55)-(II.57) du domaine de Laplace au domaine temporel et ainsi obtenir la concentration, nous devons calculer la transformée de Laplace inverse donnée par :

$$C_i(x, t) = L^{-1} \{ \bar{C}_i(x, s) \} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{st} \bar{C}_i(x, s) ds \quad (\text{II.60})$$

où Γ représente le contour de Hankel qui commence à $-\infty - 0i$, s'enroule autour de l'origine et se termine à $-\infty + 0i$ [85]. En introduisant le changement de variable $z = st$, en utilisant l'approximation rationnelle de e^z et par application du théorème des résidues [85], on obtient la formule d'inversion numérique suivante :

$$C_i(x, t) = L^{-1} \{ \bar{C}_i(x, s) \} = -\frac{2}{t} R_e \left\{ \sum_{k \in \mathbb{O}_N} w_k \bar{C}_i(x, s_k) \right\} \quad (\text{II.61})$$

où N est pair, \mathbb{O}_N est l'ensemble des nombres impairs plus petit que N , $s_k = z_k/t$ et w_k , $z_k \in \mathbb{C}$ sont les résidus et les pôles de la meilleure approximation rationnelle (N, N) de e^z dans la droite réelle négative. w_k et z_k sont des constantes, qui sont indépendantes de x et t et calculées à l'aide d'une fonction MATLAB fournie [85].

II.2.3 Le solveur d'équation aux dérivées partielles de MATLAB (MALTLAB *solveur pdepe*)

MATLAB possède un solveur numérique d'équation aux dérivées partielles qui utilise les différences finies progressives pour la discrétisation spatiale et les différences centrées pour la discrétisation temporelle. Ce solveur résout les problèmes aux valeurs initiales-aux limites des équations aux dérivées partielles elliptiques et parabolique en 1D.

- **Syntaxe**

La syntaxe de résolution utilisée est la suivante [86] :

$sol = pdepe(m, pdefun, icfun, bcfun, xmesh, tspan, options)$

- **Arguments**

Les arguments de la solution sont spécifiés dans le Tableau suivant :

TABLE 4 – Arguments de la solution

Arguments	Significations
m ,	paramètre correspondant à la symétrie du problème
$pdefun$	Descripteur d'une fonction définissant les composants de la <i>pde</i>
$icfun$	Descripteur d'une fonction définissant la condition initiale
$bcfun$	Descripteur d'une fonction définissant les conditions aux limites
$xmesh$	Vecteur $[x_0, x_1, \dots, x_n]$ spécifiant les points pour les quelles on veut déterminer la solution numérique dans $tspan$
$tspan$	Vecteur $[t_0, t_1, \dots, t_n]$ spécifiant les points pour les quelles on veut déterminer la solution numérique dans $xmesh$
Options	Certaines options des équations différentielles comprises dans <i>pdepe</i>

- **Description**

$sol = pdepe(m, pdefun, icfun, bcfun, xmesh, tspan, options)$ résoud la valeur initiale-limite du problème pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) paraboliques et elliptiques à une variable d'espace et de temps. $pdefun$, $icfun$ et $bcfun$ sont des descripteurs de fonctions. Les équations différentielles ordinaires (ODEs) résultant de la discrétisation dans l'espace sont intégrées pour obtenir des solutions approchées aux instants spécifiés en $tspan$. La fonction $pdepe$ renvoie les valeurs de la solution sur un maillage fourni dans $xmesh$.

$pdepe$ résout les EDP de la forme :

$$R \left(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial t} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = x^{-m} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^m f \left(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right) + I \left(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (\text{II.62})$$

Les EDPs tiennent pour $t_0 \leq t \leq t_f$ et $a \leq x \leq b$. L'intervalle $[a, b]$ doit être fini. m peut prendre les valeurs 0, 1, ou 2 correspondant aux types de symétries.

Dans l'équation (II.62) $f(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial x})$ est le terme du flux et $I(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial x})$ le terme source. Le couplage de la dérivée partielle par rapport au temps est restreint à la multiplication par une matrice diagonale $R(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial t})$. Les éléments diagonaux de cette matrice sont soit nuls soit positifs. Un élément nul correspond à une équation elliptique dans le cas contraire l'équation est parabolique.

À $t = t_0$ et pour toutes les valeurs de x , les composantes de la solution satisfont aux conditions initiales de la forme :

$$C(x, t_0) = C_0(x) \quad (\text{II.63})$$

Pour tout t et $x = a$ ou $x = b$, les composantes de la solution satisfont aux conditions aux limites de la forme :

$$p(x, t, C) + q(x, t) f \left(x, t, C, \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0 \quad (\text{II.64})$$

Lorsqu'on appelle $sol = pdepe(m, pdefun, icfun, bcfun, xmesh, tspan, options)$:

- m correspond à m .
- $xmesh$ (1) et $xmesh$ (2) correspondent à a et b .
- $tspan$ (1) et $tspan$ (2) correspondent à t_0 et t_f .

- *pdefun* évalue les termes R , f et I de l'équation (II.62). Il a la forme :

$$[R, f, I] = pdefun(x, t, C, dCdx) \quad (\text{II.65})$$

- *icfun* évalue les conditions initiales. Il a la forme :

$$C = icfun(x)$$

- *bcfun* évalue les termes p et q des conditions aux limites (équation (II.63)). Il a la forme :

$$[p1, q1, pr, qr] = bcfun[x1, C1, xr, Cr, t]$$

$C1$ est la solution approximative à la borne d'entrée $x1 = a$, Cr est la solution approximative à la borne de sortie $x2 = b$. $p1$ et $q1$ sont des vecteurs colonne correspondant à p et q évalués à $x1$, pareillement, pr et qr correspondent à xr .

L'équation générale d'Advection-Dispersion (II.1) peut se mettre sous la forme de l'équation (II.62) et ses conditions initiale équation (II.2) et aux limites équations (II.3) et (II.4) sous la forme des conditions des équations (II.63) et (II.64) respectivement. Donc le solveur *pdepe* permet d'avoir des solutions numériques de l'ADE des polluants dans un milieu poreux.

Après avoir présenté les différentes méthodes de résolution, nous allons dans la suite utiliser ces méthodes pour la résolution de deux types de problèmes de transport des polluants dans un milieu poreux avec deux sources d'entrées dans la partie méthode.

II.3 Méthode

Dans cette partie nous allons rassembler quelques phénomènes qui peuvent régir le mouvement des polluants dans les eaux souterraines afin d'établir les modèles mathématiques représentant l'ensemble de ces phénomènes. Ces modèles mathématiques permettent d'obtenir une idée concernant l'état de la pollution de l'eau souterraine dans l'espace mais aussi dans le temps pour le cas de la contamination à deux sources localisées aux extrémités du domaine (voir figure 22). Dans ce problème, les sources de pollution sont le rejet quelconque d'un même contaminant (accidentel ou anthropique) dans le sol et qui s'infiltré jusqu'au réservoirs d'eau souterraines. Une attention particulière sera faite pour les types de sources de contamination rarement citées dans la littérature. Notre variable d'intérêt est la concentration du polluant en un point quelconque du réservoir. On se proposera deux modèles unidimensionnel selon un axe x dirigé vers le canal.

Dans cette partie, les techniques de résolutions analytique (GITT) et sémi-analytique illustrées dans la première partie du chapitre sont employées chacune pour résoudre un modèle de transport avec deux sources d'entrées placées aux frontières du domaine. Le solveur de MATLAB des EDPs *pdepe* sera utilisé pour la vérification et la validation de chacune des solutions.

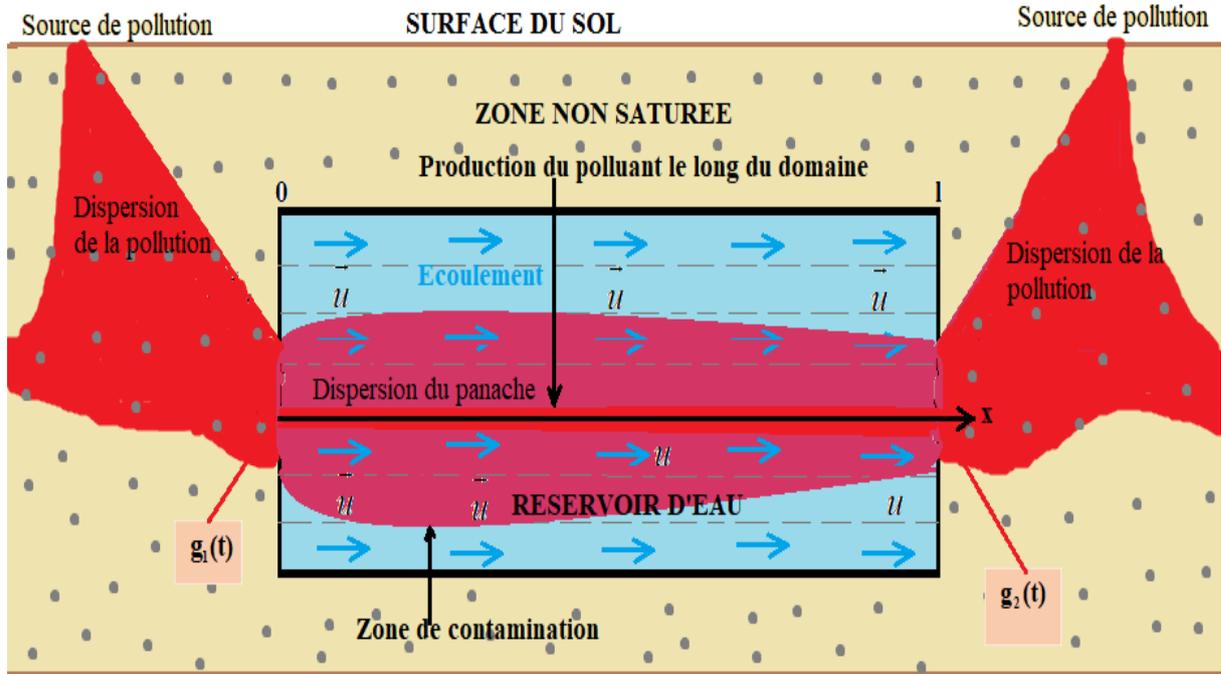


FIGURE 22 – Schéma représentatif du problème

II.3.1 Transport des polluants avec coefficients dépendant de la position

Dans cette section, nous considérons le transport 1D d'un polluant dans un aquifère horizontal. En tenant compte de tous les processus cités au Chapitre 1, l'EAD en 1D dans la forme générale, décrivant le transport d'un soluté dans un milieu poreux avec un coefficient de dispersion $D(x)$ (m^2/s) et une vitesse d'écoulement $v(x)$ (m/s) dépendant de la distance et un terme de production $\gamma(x, t)$ dépendant de la distance et du temps s'écrit sous la forme [12] :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + f \frac{\rho_b}{\eta} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial C}{\partial x} - v(x) C \right] - \lambda_l C - \lambda_s \frac{\rho_b}{\eta} S + \gamma(x, t) \quad (\text{II.66})$$

où $C(x, t)$ (kg/m^3) représente la concentration en soluté de la masse du polluant se dispersant dans la phase liquide à la position $x(m)$ du milieu et au temps $t(s)$, $S(x, t)$ (kg/m^3) est la

concentration en soluté dans la phase solide, représentant la quantité de soluté sorbée par unité de masse du solide, θ (–) représente la contenance volumétrique en eau du sol, f est la fraction des sites de sorption, ρ_b (kg/m^3) est la densité apparente du milieu poreux, η la porosité du milieu, λ_l et λ_s (s^{-1}) sont respectivement les constantes de dégradation du premier ordre du soluté dans les phases liquide et solide. Le terme non homogène $\gamma(x, t)$ représente une fonction arbitraire de production d'ordre zéro, dépendant de la position et du temps. Le membre de gauche de l'équation (II.66) représente le changement de concentration du soluté dans le temps, dans les phases liquide et solide respectivement pour les premier et deuxième termes. Le premier terme du membre de droite représente l'influence de la dispersion sur la distribution de la concentration du soluté et le second terme le changement de la concentration du soluté dû au transport advectif du soluté. Les troisième et quatrième termes du membre de droite représentent les décroissances du premier ordre du soluté dans les phases liquide et solide respectivement. Le cinquième terme représente la production d'ordre zéro ($\gamma(x, t) > 0$) ou de perte ($\gamma(x, t) < 0$) du soluté, qui représente la production ou le puits interne/externe dans le milieu.

De plus, nous supposons que l'expression de la dépendance temporelle de l'équilibre isotherme linéaire entre la substance soluté dans la phase solide-liquide est donnée par [70, 71] :

$$S = Fk_dC \quad (\text{II.67})$$

où F (–) représente la fraction massique des particules de sorption où la sorption est instantanée, K_d (m^3/kg) fait référence au coefficient de distribution ($0 < F < 1$).

Le coefficient de dispersion est la somme de la diffusion moléculaire du milieu, qui prend en compte la nature tortueuse des voies du soluté et le coefficient de dispersion mécanique [87]. Dans cette étude, la vitesse d'écoulement de l'eau souterraine est supposée être régie par l'équation de Darcy. En raison de la recharge régulière, la vitesse des eaux souterraines augmentera de façon linéaire avec la position [88]. Par conséquent la vitesse et la dispersion sont considérées comme dépendent de la position dans leur forme générale. Pour les études, les expressions particulières sont choisies pour ces grandeurs. Dans ce travail, les expressions de la vitesse d'écoulement et le coefficient de dispersion sont supposées suivre la théorie de la dispersion selon laquelle la dispersion est proportionnelle à la puissance n^{ieme} de la vitesse ($D \propto v^n$) [89], où n est peut prendre les valeurs 1, 1,5 et 2. Par conséquent, les expressions de la vitesse et

du coefficient de dispersion hydrodynamique sont considérées comme suit :

$$\begin{aligned} v(x, t) &= v_0(a_1 + a_2x) \\ D(x, t) &= (D_0 + D^*\tau)(a_1 + a_2x)^n \end{aligned} \quad (\text{II.68})$$

τ représente la tortuosité, D_0 (m^2/s) et D_0^* (m^2/s) sont respectivement les coefficients de dispersion hydrodynamique et de diffusion uniformes, v_0 (m/s) la vitesse constant dans un milieu homogène. a_1 est un paramètre sans dimension et a_2 (m^{-1}) représente le paramètre d'hétérogénéité.

Dans cette étude, le terme source/puits est exprimé par un produit de deux fonctions simples dépendant chacune d'une variable comme proposé par [10] :

$$\gamma(x, t) = \gamma_0 p(x) q(t) \quad (\text{II.69})$$

où γ_0 est le coefficient de production d'ordre zéro uniforme (kg/m^3s).

En remplaçant les équations (II.67), (II.68) et (II.69) dans l'équation (II.66), on obtient :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (a_1 + a_2x)^n \frac{\partial C}{\partial x} - v_0 (a_1 + a_2x) \right] - \lambda C + \gamma_0 p(x) q(t) \quad (\text{II.70})$$

Dans cette équation, $R = \theta + f \frac{\rho_b}{\eta} F K_d$ est le facteur de retard, $\lambda = \lambda_l + \lambda_S \frac{\rho_b}{\eta} F K_d$ est le coefficient de décroissance effectif dans le milieu, $D_{x_0} = D_0 + \tau D_0^*$.

L'écoulement des eaux souterraines est considéré le long de l'axe des x dans un milieu fini, cela signifie que l'eau s'écoule de $x = 0$ à $x = L$ (voir figue 22). Avant que les sources de pollution ne soient injectées dans le réservoir, il est supposé contenir une contamination de fond. Cette contamination peut s'exprimer comme une combinaison linéaire d'une certaine concentration initiale dans les phases liquide et solide [12]. Dans cette étude, la concentration antérieure dans la phase liquide est supposée être une fonction arbitraire de la variable d'espace, tandis que la concentration initiale dans la phase solide est uniforme avec la distance. La condition initiale peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$C(x, t) = h(x) + K_s^i; \quad x \geq 0, \quad t = 0 \quad (\text{II.71})$$

où $h(x)$ est la distribution de la concentration initiale dans la phase liquide et K_s^i (kg/m^3) la concentration initiale dans la phase solide.

La formation géologique dans laquelle se produit le transport du soluté est supposée délimitée par deux plans, c'est à dire les plans d'équation ($x = 0$) et ($x = L$) avec deux sources de pollution localisées à ces plans de sorte que le polluant entre à travers ces plans (figure 22). Comme l'écoulement se produit de $x = 0$ vers $x = L$, cette situation peut faire référence à l'EAD avec simultanément des entrées dans le sens de l'écoulement (cas de la contamination sur le plan $x = 0$) et en sens inverse de celui de l'écoulement (cas de la contamination sur le plan $x = L$). Nous considérons que les concentrations d'entrées à travers les plans peuvent s'exprimer de façon générale sous la forme des conditions de Dirichlet suivantes :

$$C(x, t) = g_1(t), \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (\text{II.72})$$

$$C(x, t) = g_2(t), \quad x = L, \quad t > 0 \quad (\text{II.73})$$

où $g_1(t)$ et $g_2(t)$ représentent la quantité des polluants entrant à travers les plans $x = 0$ et $x = L$ respectivement.

Les conditions initiale équation (II. 71) et aux limites équations (II.72) et (II.73) sont similaires à la situation de la diffusion de la chaleur à travers une feuille de matériau plane avec les surfaces $x = 0$ et $x = L$ maintenues à des températures constantes C_1 et C_2 respectivement et une distribution initiale de la température aléatoire tel qu'étudié par [72]. L'un des cas intéressant pour ce type de problème est la situation pour la quelle les deux surfaces sont maintenues à la même température.

Généralement, les solutions analytiques de l'EAD tel que formulé par les équations (II. 70) à (II. 73) sont obtenues à l'aide de la GITT qui est basée sur l'évaluation de la matrice de transition et la résolution des équations transcendentales. À cause de la forme des coefficients de l'équation (II. 70), il est facile de déterminer analytiquement la matrice de transition.

Pour appliquer la GITT, il est nécessaire d'homogénéiser les conditions aux limites car les solutions des problèmes non homogène basées sur des développement des fonctions-propres peuvent converger lentement ou même présenter un comportement anormal, en particulier au

voisinage des frontières. Par conséquent, la nouvelle variable indépendante suivante est définie :

$$C(x, t) = f_1(t) + [f_2(t) - f_1(t)] \frac{x}{l} + Q(x, t) \quad (\text{II.74})$$

où $Q(x, t)$ est la solution du problème suivant :

$$\begin{aligned} R \frac{\partial Q}{\partial t} = & D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} - \left[u_0 (a_1 + a_2 x) - n a_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] \frac{\partial Q}{\partial x} - (u_0 a_2 + \mu_0) Q \\ & + \gamma_0 p(x) q(t) - \frac{[g_2(t) - g_1(t)]}{l} \left[u_0 (a_1 + a_2 x) - n a_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] \\ & - (\lambda + u_0 a_2) \left\{ g_1(t) + [g_2(t) - g_1(t)] \frac{x}{l} \right\} - R \left[\frac{dg_1(t)}{dt} + \left(\frac{dg_2(t)}{dt} - \frac{dg_1(t)}{dt} \right) \frac{x}{l} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.75})$$

$Q(x, t)$ obéit aux conditions initiale et aux limites suivantes :

$$Q(x, t) = h(x) + K_s^i - g_1(0) - [g_2(0) - g_1(0)] \frac{x}{l}; \quad x \geq 0, \quad t = 0 \quad (\text{II.76})$$

$$Q(x, t) = 0; \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (\text{II.77})$$

$$Q(x, t) = 0; \quad x = L, \quad t > 0 \quad (\text{II.78})$$

En suivant les procédure de la GITT tel que décrit à la section précédente, il faut choisir un problème auxiliaire aux valeurs propres. Tel que détaillé par [16-19] un problème aux valeurs propres de Sturm-Liouville avec un opérateur self-adjoint de second ordre doit être choisi. Le problème régulier de Sturm-Liouville choisi pour cette étude est le même que celui proposé par [21-23] qui a la particularité de faire converger la concentration pour les cinq premiers termes de sommation. Ce problème EDO de Sturm-Liouville s'écrit ainsi :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{d\varphi}{dx} + (1 + \beta)\varphi = 0 \quad (\text{II.79})$$

qui peut se mettre sous la forme explicite avec son opérateur self-adjoint ainsi :

$$\frac{d}{dx} \left(e^{x/L} \frac{d\varphi}{dx} \right) + (1 + \beta) e^{x/L} \varphi = 0 \quad (\text{II.80})$$

Les conditions aux limites associées à ce problème sont identiques à ceux associées à l'EAD (II. 75) et s'expriment ainsi :

$$\varphi(0) = 0 \quad (\text{II.81})$$

$$\varphi(L) = 0 \quad (\text{II.82})$$

La solution triviale de cette équation est $\varphi = 0$. Les solutions non triviales sont appelées fonctions propres appartenant à chaque valeur propre β_m et qui s'exprime ainsi :

$$\varphi_m(x) = \exp(-x/2l) \sin \left[\left(\sqrt{3 + 4\beta_m/2} \right) x \right] \quad (\text{II.83})$$

avec les valeurs propres données par :

$$\beta_m = \frac{m^2 \pi^2}{L^2} - \frac{3}{4}, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

La propriété d'orthogonalisation satisfaite par l'ensemble des fonctions propres $\varphi_m(x)$ en référence à la fonction poids $w(x) = e^{x/L}$, associée à l'équation (II. 80) est donnée par :

$$\int_0^L e^{x/L} \varphi_m(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{mk} N_m \quad (\text{II.84})$$

où N_m est la norme. La norme et les fonctions propres normalisées sont données par :

$$N_m = \int_0^L e^{x/L} \varphi_m(x) \varphi_m(x) dx = \frac{L}{2} \quad (\text{II.85})$$

$$\psi_m(x) = \frac{\varphi_m(x)}{\sqrt{N_m}} \quad (\text{II.86})$$

Maintenant la fonction inconnue $Q(x, t)$ est représentée sous la forme d'un développement en série de Fourier en terme des fonctions propres normalisées $\psi_m(x)$ ainsi que suit :

$$Q(x, t) = \sum_{m=1}^{M \rightarrow \infty} \psi_m(x) T_m(t) \quad (\text{Inverse}) \quad (\text{II.87})$$

La transformée intégrale est obtenue en utilisant la procédure de [79, 90] c'est à dire en appliquant l'opérateur $\int_0^L w(x) \psi_m(x) (\bullet) dx$ à chaque membre de l'équation (II.75) et en tenant compte de la norme équation (II.85) des conditions et de la condition d'orthogonalité équation (II.86) pour obtenir :

$$T_m(t) = \int_0^L \rho(x) \psi_m(x) Q(x, t) dx \quad (\text{Transformée}) \quad (\text{II.88})$$

La paire d'équation (II.87) et (II.88) constitue la paire de transformée.

En substituant cette solution (équation (II.88)) dans l'équation (II.75), puis en multipliant par $e^{x/L} \psi(x)$, en intégrant sur le domaine et en tenant compte de la propriété d'orthogonalité, on obtient un système d'équations différentielles du premier ordre qui peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{A} \frac{d\mathbf{T}_m(t)}{dt} + \mathbf{B}\mathbf{T}_m(t) = \mathbf{G}_m(t) \quad (\text{II.89})$$

avec la condition initiale transformée de la sorte :

$$\mathbf{T}_m(0) = \sqrt{2} \int_0^L \left\{ h(x) + K_s^i - g_1(0) - [g_2(0) - g_1(0)] \frac{x}{L} \right\} e^{x/2L} \sin\left(m\pi \frac{x}{L}\right) dx \quad (\text{II.90})$$

Les éléments des matrices $M \times M$ \mathbf{A} et \mathbf{B} et le vecteur colonne \mathbf{G} de longueur M sont donnés par :

$$A_{m,k} = \frac{2}{L} R \int_0^L \sin\left(m\pi \frac{x}{L}\right) \sin\left(k\pi \frac{x}{L}\right) dx \quad (\text{II.91})$$

$$\begin{aligned}
B_{m,k} &= \frac{2}{L} \int_0^L D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \left[\left(\frac{m^2 \pi^2}{L^2} - \frac{1}{4L^2} \right) \sin \left(m\pi \frac{x}{L} \right) + \frac{m\pi}{L^2} \cos \left(m\pi \frac{x}{L} \right) \right] \sin \left(k\pi \frac{x}{L} \right) dx \\
&+ \frac{2}{L} \int_0^L \left[u_0 (a_1 + a_2 x) - n a_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] \left[\frac{m\pi}{L} \cos \left(m\pi \frac{x}{L} \right) - \frac{1}{2L} \sin \left(m\pi \frac{x}{L} \right) \right] \sin \left(k\pi \frac{x}{L} \right) dx \quad (\text{II.92}) \\
&+ \frac{2}{L} \int_0^L (u_0 a_2 + \mu) \sin \left(m\pi \frac{x}{L} \right) \sin \left(k\pi \frac{x}{L} \right) dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_m(t) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \left\{ q(t) p(x) - \frac{(g_2(t) - g_1(t))}{L} \left[u_0 (a_1 + a_2 x) - n a_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] \right. \\
&\quad \left. - (u_0 a_2 + \mu) \left[g_1(t) + (g_2(t) - g_1(t)) \frac{x}{L} \right] - R \left[\frac{dg_1(t)}{dt} + \left(\frac{dg_2(t)}{dt} - \frac{dg_1(t)}{dt} \right) \frac{x}{L} \right] \sin \left(\frac{m\pi}{L} x \right) e^{\frac{x}{2L}} \right\} dx \quad (\text{II.93})
\end{aligned}$$

Les fonctions $\psi_m(x)$ étant orthogonales les unes des autres, alors \mathbf{A} est une matrice diagonale ayant pour éléments R .

Etant donné que les coefficients ne dépendent pas du temps, la matrice \mathbf{B} est constante. La matrice de transition $\Phi_m(t, \tau)$ se réduit sous sa forme exponentielle. Dans ce cas les coefficients de Fourier sont donnés par :

$$\mathbf{T}_m(t) = \exp(-\mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} t) \mathbf{T}_m(0) + \exp(-\mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} t) \times \int_0^t \exp(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \tau) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{G}(\tau) d\tau \quad (\text{II.94})$$

L'expression des coefficients de Fourier de l'équation (II.94) est l'une des formes particulière de celle de l'équation (II.26) pour les quelles la solution analytique peut être obtenue.

Des solutions analytiques sont obtenues dans un cadre euclidien et fractal, c'est-à-dire pour $n = 1, 1,5$ et 2 , représentant un indice de la dépendance spatiale du coefficient de dispersion dans la théorie de la dispersion telle que proposée par [89]. Selon cette théorie, le coefficient de dispersion a trois expressions. Pour $n = 1$, la dispersivité (rapport du coefficient de dispersion et de la vitesse) est constante, $n = 1,5$ elle croît en fonction d'une racine carrée de la distance et, pour ($n = 2$) elle croît linéairement avec la distance. Comme [21-23], nous avons trouvé que notre solution analytique converge à des valeurs acceptables avec les cinq premiers termes de la série de Fourier ($M = 5$). Ainsi, la solution en série de Fourier avec les cinq premiers termes s'écrit :

$$\begin{aligned}
C(x, t) &= g_1(t) + [g_2(t) - g_1(t)] \frac{x}{L} + \sqrt{2} \exp(-x/2L) \left[T_1(t) \sin \left(\pi \frac{x}{L} \right) + T_2(t) \sin \left(2\pi \frac{x}{L} \right) \right. \\
&\quad \left. + T_3(t) \sin \left(3\pi \frac{x}{L} \right) + T_4(t) \sin \left(4\pi \frac{x}{L} \right) + T_5(t) \sin \left(5\pi \frac{x}{L} \right) \right] \quad (\text{II.95})
\end{aligned}$$

Les coefficients de la série de Fourier sont obtenus pour des valeurs spécifiques des paramètres d'entrées.

II.3.2 Transport des polluants sous bioturbation avec coefficients dépendant de la position et du temps

Dans cette partie nous considérons un problème de transport des polluants dans un réservoir d'eau avec deux sources d'entrées du contaminant un peu plus complexe que le précédent.

Considérons l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + f \frac{1-\eta}{\eta} \rho_b \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x,t) \frac{\partial C}{\partial z} - v(x,t)C \right) - \mu_l C - \frac{1-\eta}{\eta} \rho_b \mu_s S + q(x,t) \quad (\text{II.96})$$

Les paramètres de l'équation étant définis plus haut.

Le coefficient de dispersion et la vitesse pour ce problème dépendent maintenant du temps et de la position, et leurs expressions sont données par :

$$\begin{cases} v(x) = v_0 \chi_2(x) \xi_2(vt) \\ D(x) = (D_0 + \tau D^*) \chi_1(x) \xi_1(vt) \end{cases} \quad (\text{II.97})$$

Les fonctions instationnaires $\xi_1(vt)$ et $\xi_2(vt)$ sont des expressions de la variable adimensionnelle (vt). $v = 0$ correspond aux paramètres indépendants du temps. $\xi_1(vt) = 1$ et $\xi_2(vt) = 1$ pour ($v = 0$) ou $t = 0$. Le premier cas représente le flux constant et le dernier cas représente l'état initial. $\chi_1(x)$ et $\chi_2(x)$ sont des fonctions arbitraires de la position qui dépendent du type de formation géologique et de la théorie utilisée.

En considérant l'équilibre isotherme linéaire tel que décrit par l'équation (II.67), l'expression du terme source/puits donné par l'équation (II.69) et l'équation (II.97), l'équation (II.96) s'écrit :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_0 + \tau D^*) \chi_1(x) \xi_1(vt) \frac{\partial C}{\partial x} - v_0 \chi_2(x) \xi_2(vt) C \right] - \lambda C + \gamma_0 p(x) q(t) \quad (\text{II.98})$$

L'équation (II.98) est soumise aux conditions initiales et aux limites suivantes :

$$C(x, t = 0) = f_l(x) + f_s(x) = f(x) \quad (\text{II.99})$$

$$v_0\xi_2(vt)C(x=0, t) - \delta D(x=0)\xi_1(vt)\frac{\partial C(x=0, t)}{\partial x} = v_0g_0(t) \quad (\text{II.100})$$

$$v_L\xi_2(vt)C(x=L, t) - \delta D(x=L)\xi_1(vt)\frac{\partial C(x=L, t)}{\partial x} = v_Lg_L(t) \quad (\text{II.101})$$

où $f_l(x)$ et $f_s(x)$ représentent les distributions initiales de la concentration du soluté dans les phases liquide et solide respectivement. $f(x)$ est la distribution aléatoire du soluté dans le milieu.

L'un des processus qui influence le niveau de concentration et la distribution d'un polluant dans le sol est la bioturbation. La bioturbation fait référence au transfert de nutriments ou de produits chimiques par des êtres vivants dans un compartiment d'un écosystème ou entre différents compartiments. C'est aussi le mélange actif de couches de sol ou d'eau par des espèces vivantes, principalement des animaux. Il est donc important d'en tenir compte dans l'équation d'advection-diffusion. Compte tenu des phénomènes de bioturbation, l'équation d'advection-diffusion (II.98) [46] :

$$R\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [(D_0 + \tau D^* + \rho_b K_d D_B)\chi_1(x)\xi_1(vt)\frac{\partial C}{\partial x} - v_0\chi_2(x)\xi_2(vt)C] - \lambda C + \gamma_0 p(x)q(t) \quad (\text{II.102})$$

où D_B (m^2/s) est le coefficient de biodiffusion.

Les conditions aux limites de cette équation s'écrivent :

$$v_0\xi_2(vt)C(x=0, t) - \delta[D(x=0) + (R-1)D_B]\xi_1(vt)\frac{\partial C(x=0, t)}{\partial x} = v_0g_0(t) \quad (\text{II.103})$$

$$v_L\xi_2(vt)C(x=L, t) - \delta[D(x=L) + (R-1)D_B]\xi_1(vt)\frac{\partial C(x=L, t)}{\partial x} = v_Lg_L(t) \quad (\text{II.104})$$

Le problème (II.102) avec ces conditions initiale et aux limites ne peut pas être résolu analytiquement en utilisant la GITT et la détermination de la matrice de transition pour ce type de problème fait intervenir des techniques numériques un peu complexes. Nous avons donc eu

l'idée de résoudre ce problème en utilisant une méthode basée sur le modèle multicouches.

La stratégie de résolution débute par la transformation du problème de transport avec des coefficients variables dans le temps et dans l'espace à un problème multicouches avec des coefficients dépendant du temps uniquement. A cette fin, le milieu poreux est divisé en m -couches poreuses réparties ainsi $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = L$ (voir figure 23).

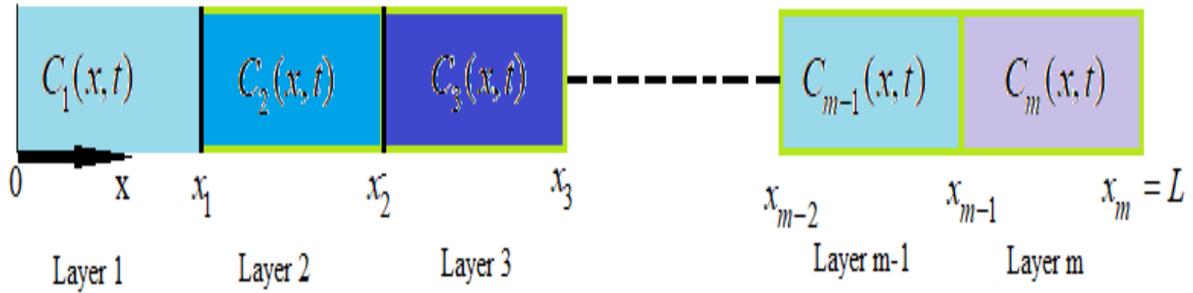


FIGURE 23 – Représentation du problème en couches

La concentration du polluant dans la couche i est notée $C_i(x, t)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) où $x \in [x_{i-1}, x_i]$ représente la distance à l'origine $x = 0$. L'équation de transport du soluté (II.102) s'exprime dans la couche i ainsi que suit :

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \xi_1(vt) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - v_i \xi_2(vt) \frac{\partial C_i}{\partial x} - \lambda_i C_i + \gamma_i q(t), \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.105})$$

où les coefficients R_i , D_i (m^2/s), λ_i (s^{-1}) et γ_i ($kg/(m^3s)$) représentent les valeurs moyennes des coefficients dans la couche i , définie dans leur forme générale par :

$$\zeta_i = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \zeta(x) dx \quad (\text{II.106})$$

Les équations du transport du soluté du système (II.105) sont soumis aux conditions initiale et aux limites suivante :

$$C_i(x, 0) = f_i; \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{II.107})$$

$$v_1(t)C_1(x=0, t) - \delta D_1(t) \frac{\partial C_1(x=0, t)}{\partial x} = v_1(t)g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.108})$$

$$v_m(t)C_m(x=L, t) - \delta D_m(t) \frac{\partial C_m(x=L, t)}{\partial x} = v_m(t)g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.109})$$

$$\text{où } f_i = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

Au niveau des interfaces, nous imposons la continuité de la concentration et du flux dispersif entre les couches adjacentes :

$$C_i(x_i, t) = C_{i+1}(x_i, t) \quad (\text{II.110})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}(x_i, t) = \theta_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial x}(x_i, t) \quad (\text{II.111})$$

Maintenant le problème de transport du système d'équations (II.105) avec coefficients variables en fonction du temps est transformé en un système d'équation avec coefficients constants en introduisant les nouvelles variables suivantes tel que décrit par [91] :

$$X = \int \frac{\xi_2(vt)}{\xi_1(vt)} dx = \frac{\xi_2(vt)}{\xi_1(vt)} x \quad (\text{II.112})$$

$$t^* = \int \frac{\xi_2^2(pt)}{\xi_1(pt)} dt \quad (\text{II.113})$$

Comme $\xi_1(vt)$ et $\xi_2(vt)$ sont des fonctions sans dimension, t^* a la même dimension que celui du temps t . De plus les critères de sélection de $\xi_1(vt)$ et $\xi_2(vt)$ vérifient que $t^* = 0$ pour $t = 0$. Par conséquent la nature de la condition initiale ne change pas dans le nouveau domaine temporel. Le problème d'Advection-Dispersion du système d'équations (II.105) se réduit à une forme avec les coefficients constant suivante :

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t^*} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial X} - \mu_i C_i + \gamma_i(t^*), \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i \quad (\text{II.114})$$

$$\text{où } \mu_i = \lambda_i \frac{\xi_2^2(vt)}{\xi_1(vt)}$$

Les conditions des équations (II.107) à (II.111) peuvent s'écrire en terme des nouvelles variables indépendantes ainsi que suit :

$$C_i(X, 0) = F_i; \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i \quad (\text{II.115})$$

$$v_1 C_1(0, t^*) - D_1 \frac{\partial C_1(0, t^*)}{\partial X} = g_0(t^*), \quad t^* > 0 \quad (\text{II.116})$$

$$v_m C_m(0, t^*) - D_m \frac{\partial C_m(0, t^*)}{\partial X} = g_m(t^*), \quad t^* > 0 \quad (\text{II.117})$$

$$C_i(X_i, t^*) = C_{i+1}(X_i, t^*) \quad (\text{II.118})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(X_i, t^*) = \theta_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial X}(X_i, t^*) \quad (\text{II.119})$$

La solution analytique du système d'équations (II.114)-(II.119) est obtenue dans le domaine de Laplace en utilisant la procédure proposée par [27].

◆ Le modèle est reformulé par un système de m -problèmes d'équations de transport dans chaque couche isolée séparément par introduction de fonctions inconnues $g_i(t^*)$ ($i = 1, \dots, m-1$) [24-27] représentant le gradient négatif du flux de la concentration aux interfaces des couches :

$$g_i(t^*) = \theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(l_i, t^*) \quad (\text{II.120})$$

Ce qui entraîne le système d'équations (II.115)-(II.117) de s'écrire dans chaque couche isolée ainsi que suit :

• **Première couche** ($i = 1$)

$$R_1 \frac{\partial C_1}{\partial t^*} = D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_1}{\partial X} - \mu_1 C_1 + \gamma_1(t^*), \quad 0 \leq X \leq l_1 \quad (\text{II.121})$$

$$C_1(X, t^* = 0) = F_1; \quad 0 < X < l_1 \quad (\text{II.122})$$

$$v_1 C_1(X = 0, t^*) - \delta D_1 \frac{\partial C_1(X = 0, t^*)}{\partial X} = v_1 g_0(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.123})$$

$$\theta_1 D_1 \frac{\partial C_1(X = l_1, t^*)}{\partial X} = g_1(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.124})$$

• **Couches intermédiaires** ($i = 2, 3, \dots, m - 1$)

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t^*} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial X} - \mu_i C_i + \gamma_i(t^*), \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i \quad (\text{II.125})$$

$$C_i(X, t^* = 0) = F_i; \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i \quad (\text{II.126})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(x = l_{i-1}, t^*) = g_{i-1}(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.127})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(X = l_i, t^*) = g_i(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.128})$$

• **Dernière couche** ($i = m$)

$$R_m \frac{\partial C_m}{\partial t^*} = D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial X^2} - v_m \frac{\partial C_m}{\partial X} - \mu_m C_m + \gamma_m(t^*), \quad l_{m-1} \leq X \leq l_m \quad (\text{II.129})$$

$$C_m(X, t^* = 0) = F_m; \quad l_{m-1} \leq X \leq l_m \quad (\text{II.130})$$

$$\theta_m D_m \frac{\partial C_m(X = l_{m-1}, t^*)}{\partial X} = g_{m-1}(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.131})$$

$$v_m C_m(X = l_m, t^*) - \delta D_m \frac{\partial C_m(X = l_m, t^*)}{\partial X} = v_m g_L(t^*), \quad t^* \geq 0 \quad (\text{II.132})$$

Avec chaque problème couplé aux autres en imposant la continuité de la concentration aux interfaces des couches adjacentes tel que donné par [24-28].

◆ En appliquant la transformée de Laplace des problèmes de transport pour chaque couche isolée et en utilisant l'approche standard de résolution des équations différentielles non homogène du second ordre, on obtient les expressions suivantes des concentrations dans chaque couche :

$$\bar{C}_1(X, s) = A_1(X, s)G_0(s) + B_1(X, s)G_1(s) + P_1(X, s), \quad (\text{II.133})$$

$$\bar{C}_i(X, s) = A_i(X, s)G_{i-1}(s) + B_i(X, s)G_i(s) + P_i(X, s), \quad i = 2, \dots, m-1 \quad (\text{II.134})$$

$$\bar{C}_m(X, s) = A_m(X, s)G_{m-1}(s) + B_m(X, s)G_L(s) + P_m(X, s), \quad (\text{II.135})$$

où les fonctions $A_i(X, s)$, $B_i(X, s)$ et $P_i(X, s)$ sont définies dans le Tableau 1 de [27].

En imposant la continuité de la concentration à chaque interface dans le domaine de Laplace, on détermine $G_1(s)$, $G_2(s)$, ..., $G_{m-1}(s)$, les transformées de Laplace des fonctions inconnues aux interfaces $g_1(t)$, $g_2(t)$, ..., $g_{m-1}(t)$ [24-28] :

$$\bar{C}_i(l_i, s) = \bar{C}_{i+1}(l_i, s), \quad i = 1, 2, \dots, m-1 \quad (\text{II.136})$$

La substitution des équations (II.133)-(II.135) dans le système d'équations (II.136) conduit à un système linéaire pour $\mathbf{x} = [G_1(s), G_2(s), \dots, G_{m-1}(s)]^T$ qui peut s'exprimer sous la forme matricielle ainsi que suit :

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (\text{II.137})$$

où les éléments de la matrice \mathbf{A} et du vecteur colonne sont donnés par :

$$a_{X,1} = B_1(s_1, s) - A_2(l_1, s),$$

$$a_{s,2} = -B_2(l_1, s),$$

$$a_{i,i-1} = A_i(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{i,i} = B_i(l_i, s) - A_{i+1}(l_i, s) \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{i,i+1} = B_{i+1}(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{m-1,m-2} = A_{m-1}(l_{m-1}, s),$$

$$a_{m-1,m-1} = B_{m-1}(l_{m-1}, s) - A_m(l_{m-1}, s),$$

$$b_1 = P_2(l_1, s) - P_1(l_1, s) - A_1(l_1, s)G_0(s),$$

$$b_i = P_{i+1}(l_i, s) - P_i(l_i, s) \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$b_{m-1} = P_m(l_{m-1}, s) - P_{m-1}(l_{m-1}, s) - B_m(l_{m-1}, s)G_L(s),$$

♦ La dernière étape consiste à appliquer la transformée inverse de Laplace pour évaluer la concentration du soluté dans le domaine temporel. Cette concentration est obtenue en utilisant l'approche décrite par [85] pour l'inversion numérique de la transformée de Laplace :

$$C_i(x, t) = L^{-1} \{ \bar{C}_i(x, s) \} = -\frac{2}{t} Re \left\{ \sum_{k \in \mathcal{O}_N} w_k \bar{C}_i(x, s_k) \right\} \quad (\text{II.138})$$

II.4 Traitement des radionuclides

Les radionucléides font partis des contaminants habituellement étudiés pour les dommages qu'ils peuvent créer à l'environnement et aux êtres vivants. Les radionucléides ont une origine naturelle et/ou artificielle et, plusieurs d'entre eux sont membres d'une chaîne de désintégration des radionucléides. Les radionucléides peuvent entrer dans les systèmes des eaux souterraines par lixiviation des produits de stockage des installations nucléaires, au voisinage de la surface d'enfouissement des déchets, lors des opérations de broyage et d'extraction et également après

des accidents malheureux dans des centrales nucléaires. Pour illustrer le premier modèle utilisé dans ce travail, plusieurs exemples de transport des radionucléides dans les eaux souterraines avec deux sources de contamination sont abordés. Les sources de radionucléides sont d'une grande importance pour la simulation du transport des radionucléides car elles régissent l'ampleur des concentrations de la radioactivité, les formes et tailles des panaches des nucléides. Ici, nous considérons une région source qui contient des quantités spécifiées de sources de nucléides par section transversale perpendiculaire à la direction d'écoulement des eaux souterraines et supposons que le taux de libération du nucléide est proportionnel aux quantités de nucléides restant dans le dépôt.

Lorsqu'on étudie la distribution des radionucléides dans un milieu, on s'intéresse le plus souvent à leur impact environnemental, notamment à la dose efficace que l'être humain peut absorber. Sur la base du modèle étudié, on peut déterminer la dose d'absorption d'un radionucléide j par ingestion d'eau potable [92].

Les historiques temporels des concentrations à différentes distances des sources aux limites doivent être utilisés pour évaluer les débits de dose efficaces engagés consommés par les membres du grand public par ingestion d'eau potable. La dose efficace engagée par personne d'un radionucléide donné dans les eaux souterraines peut être calculée par :

$$Dose \ Efficace \ Engagee = TA_j \times C_j \times CDI_j \quad (II.139)$$

où TA_j est le taux d'absorption du radionucléide j ($m^3/jour$), C_j est la concentration en radioactivité du nucléide j dans les eaux souterraines (Bq/m^3) et CDI_j est le coefficient de dose d'ingestion du nucléide j pour le groupe d'âge adulte (Sv/Bq).

II.4.1 Radionucléide subissant à la fois une production et une décroissance de la source

Pour ce cas d'espe, les fonctions d'entrée aux frontières dans les équations. (II.72) et (II.73) s'écrivent :

$$g_1(t) = C_1 K (e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t}) \quad (\text{II.140})$$

$$g_2(t) = C_2 K (e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t}) \quad (\text{II.141})$$

où λ_s (an^{-1}) et λ_p (an^{-1}) sont respectivement la constante de décroissance et de production, K est la vitesse cinétique globale.

II.4.2 Chaîne de décroissance radioactive

L'étude du transport des chaînes de désintégration radioactives est très importante car elle permet d'avoir une meilleure estimation de la dose individuelle due à chaque radionucléide et ainsi évaluer la dose globale par ingestion pour un adulte. En effet, lors des études des modèles de transport dans les eaux souterraines d'un seul radionucléide dissout les interactions parents-filles ne sont pas prises en compte, ceci entraîne des erreurs significatives dans la prédiction du comportement de tous les membres de la chaîne de désintégration. Nair et al. (2010) [93] lors d'une étude sur une chaîne de décroissance radioactive ont montré que les modèles de transport tenant compte des interactions parents-filles donnent une dose efficace totale 1000 fois supérieure à celles des modèles ne considérant qu'un seul contaminant. Les processus de désintégration en chaîne sont particulièrement importants pour modéliser le transport des actinides et des transuraniens.

Dans les modes de rejet préférentielle (en anglais preferential release PR) et de rejet exponentielle (exponential release ER), la source de radionucléides libère une quantité de chaque radionucléide proportionnelle aux quantités totales de nucléides restant dans le stockage et par conséquent au taux de rejet [94, 95]. Un ensemble d'équations couplées est utilisé pour calculer la quantité totale de chaque nucléide dans les sites de déchets en fonction du temps. Les équations couplées et leurs conditions initiales requises peuvent être exprimées mathématiquement comme suit [92, 93, 96] :

$$\frac{dM_1(t)}{dt} = -\lambda_1 M_1(t) - \gamma_1 M_1(t) \quad (\text{II.142})$$

$$\frac{dM_j(t)}{dt} = -\lambda_j M_j(t) + \lambda_{j-1} M_{j-1}(t) - \gamma_j M_j(t), \quad j = 2, 3, \dots, n \quad (\text{II.143})$$

$$M_j(t = 0) = M_j^0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (\text{II.144})$$

Où $M_j(t)$ (Bq/m^2) représente la quantité de nucléide par unité de section transversale perpendiculaire à la direction de l'écoulement des eaux souterraines restant dans le site de déchets à l'instant t , γ_j (s^{-1}) est la constante de proportionnalité pour le nucléide qui quantifie le taux de rejet de chaque dépôt et M_j^0 est la quantité de chaque nucléide présent à l'instant initial. Le premier terme du membre de droite de l'équation (III.11) représente la disparition du nucléide j par désintégration, le deuxième terme représente l'apparition du nucléide j à partir de la désintégration du membre précédent de la chaîne ($j - 1$). Le troisième terme définit le taux de rejet hors du stockage, qui est proportionnel à sa quantité restante ($M_j(t)$).

Les solutions des équations (III.10) à (III.12) compte tenu de la condition initiale de l'équation (2.9) sont données par les équations généralisées de Bateman [19, 100] :

$$M_j(t) = M_1^0 \sum_{k=1}^j \beta_{jk} \exp(-\mu_k t) \quad (\text{II.145})$$

où $\mu_k = \lambda_k + \gamma_k$, les coefficients β_{jk} et μ_k tiennent compte des réactions de décomposition (λ_k) dans la source de déchets et de la lixiviation (γ_k) de chaque espèce à de la source. Le coefficient β_{jk} est donné par

$$\beta_{j,k} = \sum_{m=1}^k \frac{\binom{M_m^0}{M_1^0} \binom{1}{\lambda_j} \prod_{r=m}^j \lambda_r}{\prod_{l=m}^j (\mu_l - \mu_k)}$$

$$l = m$$

$$j \neq k$$

Les fonctions sources d'entrées du modèle $g_1(t)$ et $g_2(t)$ pour cet exemple d'application sont proportionnelles aux quantités de chaque nucléides j présents dans le site de dépôt à l'instant t .

II.5 Conclusion

Dans ce chapitre, il était question de présenter les matériels et méthodes utilisés pour la résolution des modèles de transport des contaminants avec deux sources d'entrées. Nous avons dans un premier temps présenté les différentes méthodes de résolution pour un tel problème

d'Advection-Dispersion avec des paramètres variables en fonction du temps et de la position et en tenant compte du terme de production du contaminant dans le milieu. Parmi ces méthodes nous avons :

→ La GITT qui nous a permis de résoudre le problème du transport d'un soluté avec des coefficients dépendant uniquement de la position et des conditions aux limites générales de type Dirichlet. Cette méthode est basée sur la détermination des fonctions propres et valeurs propres.

→ La technique de résolution des problèmes de transport dans un milieu multicouches. Cette technique a été utilisée pour la résolution semi-analytique d'un problème un peu plus complexe que le premier. Cette fois-ci, les coefficients de l'équation dépendaient à la fois du temps et de la position. Le problème originel a été transformé en problème multicouches en divisant le milieu en m -couches par le biais du calcul des valeurs moyennes, puis de nouvelles variables ont été introduites pour avoir un problème multicouche simple. Ce problème a été résolu par la nouvelle méthode proposée par [27].

La résolution des problèmes de transport ainsi présenté par ces méthodes sont nouvelles.

Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les différents résultats obtenus tout en nous appuyant sur l'effet de certains paramètres sur la distribution du polluant dans le milieu pour ce type de problème.

RÉSULTATS ET DISCUSSION

III.1 Introduction

Les problèmes de transport des contaminants dans un milieu poreux sont d'un enjeu important pour l'Homme et pour l'état du milieu considéré. Des modèles sont utilisés pour caractériser cette pollution en vue de ressortir des informations sur certaines propriétés du milieu et des polluants. Dans le chapitre précédent, nous avons proposé deux modèles de transport des polluants avec deux sources d'entrées afin de se renseigner sur la distribution de la concentration dans le milieu mais aussi sur l'effet de cette contamination sur l'Homme. L'applicabilité d'un modèle ou d'une méthode de résolution passe par sa validation avec des modèles/méthodes existants. Dans ce chapitre, les valeurs théoriques et expérimentales des coefficients de l'EAD rencontrées dans la littérature sont utilisées pour caractériser la concentration des polluants dans certaines formations géologiques. N'ayant pas pu entrer en possession des données expérimentales pour ces types de problèmes, nous allons dans un premier temps comparer nos résultats avec ceux obtenus en utilisant le solveur d'équations aux dérivées partielles de MATLAB (pdepe) et d'autres méthodes de résolution. Par la suite l'influence de certains paramètres sur la distribution du polluant dans le réservoir pour les deux types de problèmes sera abordée. A la fin du chapitre, les modèles seront appliqués au transport des radionucléides dans un réservoir d'eau où nous ferons une prédiction de la distribution de certains radionucléides dans le milieu et des doses efficaces absorbées par l'Homme lors de l'ingestion de pareils eaux.

III.2 Validation des méthodes de résolutions appliquées aux différents modèles

Cette section est consacrée à la validation et la vérification des méthodes de résolutions utilisées. La validation se fera pour chaque type de problème.

III.2.1 Transport des polluants avec des paramètres variants avec la position

◆ Cas de la GITT

La distribution de la concentration d'un soluté due à deux sources d'entrées est obtenue par la solution analytique proposée dans la direction longitudinale d'un réservoir d'eau avec écoulement dans un domaine fini et un domaine temporel également fini tel que mentionné dans la section 2 du Chapitre précédent. Pour un milieu special court, [12] a proposé d'utiliser $\exp(-\sec(\sigma x))$ comme distribution de la concentration initiale dans la phase liquide car, elle décroît faiblement avec la position par rapport à la distribution exponentielle et elle peut bien représenter les mouvements lents des eaux souterraines.

L'exactitude de la solution analytique est évaluée en utilisant le problème de transport suivant :

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \frac{\partial C}{\partial x} - u_0 (a_1 + a_2 x) \right] - \lambda C + \gamma_0 \exp[-(a - x)] \exp(-vt); \quad (\text{III.1})$$

$$C(x, t) = C_l^0 \exp[-\sec(\lambda_1 x)] + K_s^i; \quad x, \geq 0, \quad t = 0 \quad (\text{III.2})$$

$$C(x, t) = C_l^1 \exp(-\lambda_1 t), \quad x = 0, \quad t > 0. \quad (\text{III.3})$$

$$C(x, t) = C_l^2 \exp(-\lambda_1 t), \quad x = L, \quad t > 0 \quad (\text{III.4})$$

La solution analytique est vérifiée en comparant les résultats analytiques aux résultats numériques obtenus en utilisant le solveur de MATLAB *pdepe* pour les problèmes aux valeurs initiales.

Nous avons considéré un domaine spatial et temporel fini défini ainsi $0 \leq x(m) \leq 1$ et $0 \leq t$ (année). La concentration du soluté est évaluée à partir de la solution analytique donnée par l'équation (II.95) et les cinq coefficients de Fourier par l'équation (II.88). Lorsque le coefficient de distribution K_d est négligeable (c'est à dire $K_d \approx 0$), il n'existe pas d'interaction entre les phases solide et liquide du sol, le facteur de retard dans ce cas est égal à la contenance volumétrique en eau θ . Dans cette exemple, $\theta < 1$, par conséquent, R devient inférieur à 1 pour le cas mentionné. Ceci indique qu'une seule fraction de la concentration de la phase liquide participe au mécanisme de transport.

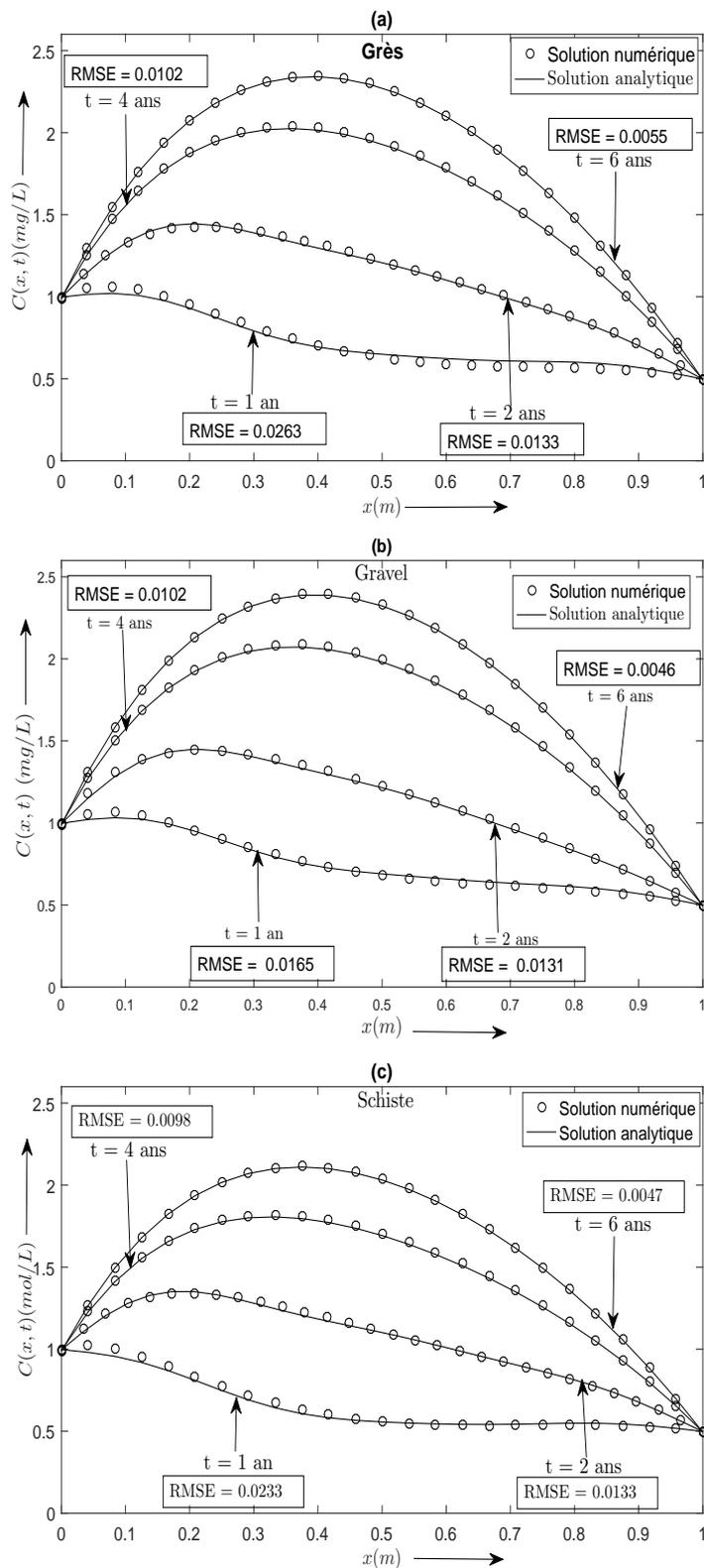


FIGURE 24 – Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 1$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.

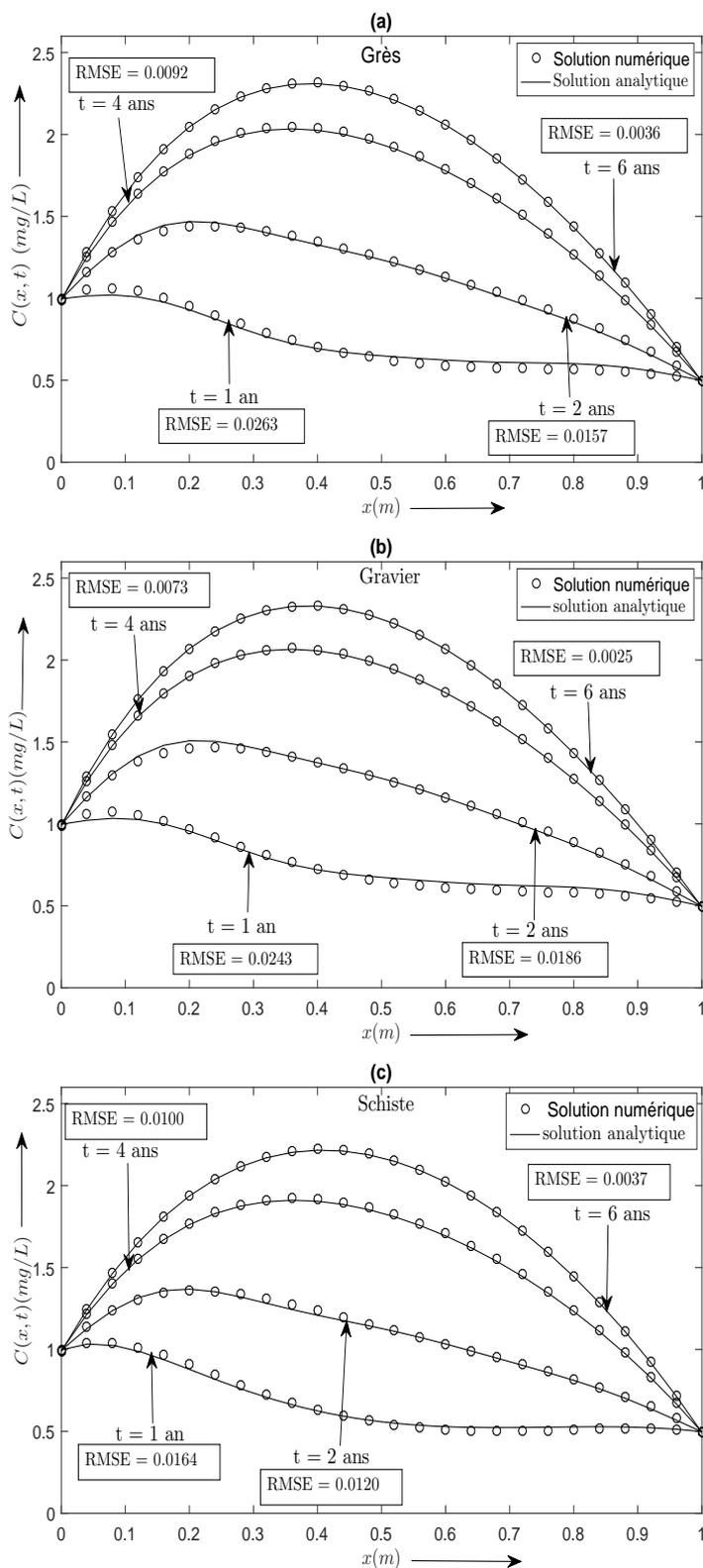


FIGURE 25 – Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d’un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 1, 5$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.

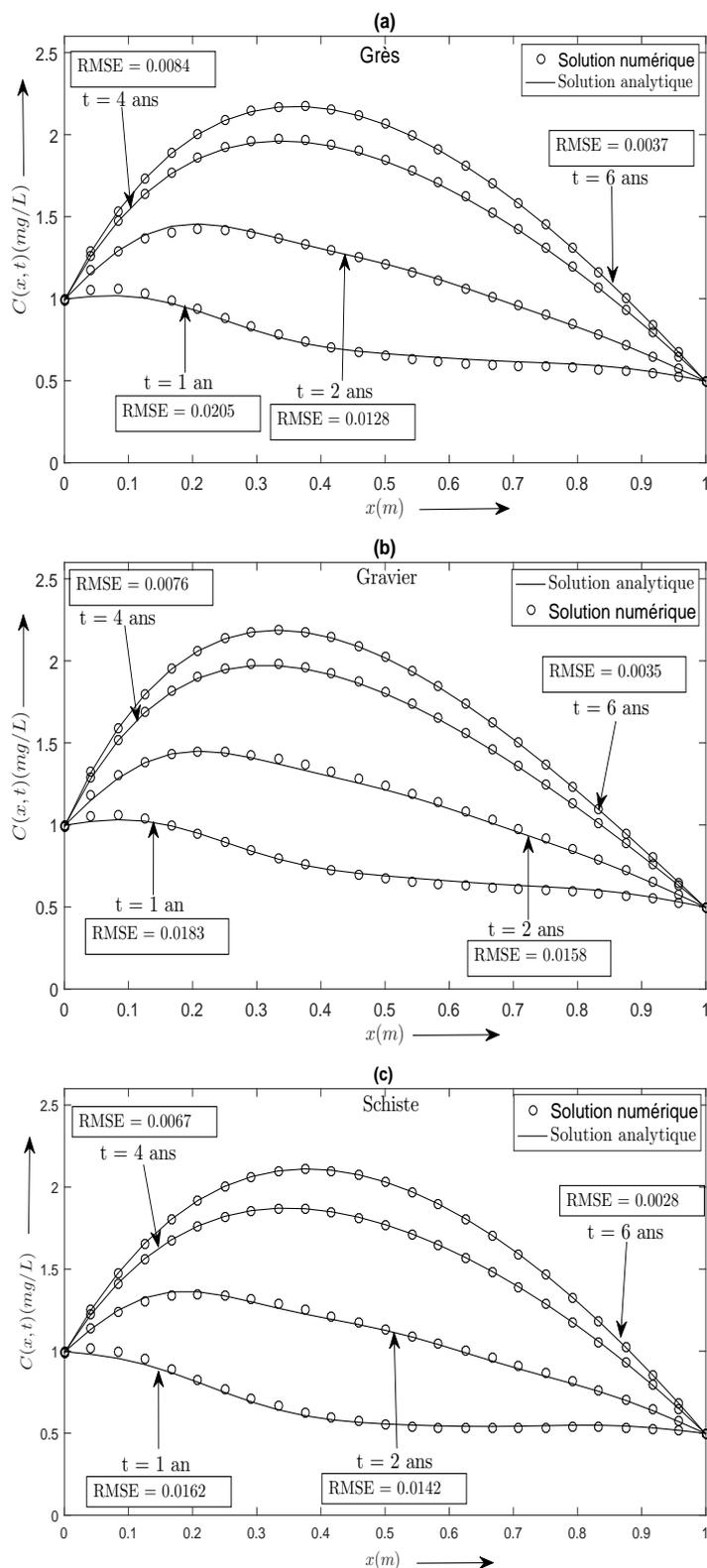


FIGURE 26 – Comparaison des solutions analytiques obtenues en utilisant la GITT et des solutions numériques à différents temps, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations pour $n = 2$ (a) Grès, (b) Gravier et (c) Schiste.

Les paramètres d'entrées utilisés ici sont donnés par [12, 76] $C_l^1 = 1 \text{ mg/L}$, $C_l^i = 0,01 \text{ mg/L}$, $K_S^i = 0,01 \text{ mg/L}$, $v_0 = 0,01 \text{ m/an}$, $D_{x_0} = 0,01 \text{ m}^2/\text{an}$, $D^* = 0,002 \text{ m}^2/\text{an}$, $f = 0,8$, $F = 0,5$, $v = 0,01 \text{ an}^{-1}$, $\lambda_l = 0,0027 \text{ an}^{-1}$, $\lambda_S = 0,13 \text{ an}^{-1}$, $a_1 = 1$, $a_2 = 0,8 \text{ m}^{-1}$. La concentration d'entrée uniforme à la fin du domaine est considérée comme la moitié de celle d'entrée à l'origine du domaine $C_l^2 = 0,5 \text{ mg/L}$. $a = 3 \text{ m}^{-1}$ et $\gamma_0 = 0,02 \text{ mg}/(\text{L an})$. Trois formations géologiques ont été considérées, ayant les porosités moyennes η et les densités apparentes suivantes [89, 97] : $\eta = 0,3$ (grès), $0,1$ (schiste), $0,5$ (gravier) ; $\rho_b = 2,49$ (grès), $2,39$ (schiste), $2,68$ (gravier).

Les figures. 24, 25 et 26 contiennent les courbes qui illustrent la distribution de la concentration du soluté dans le réservoir pour trois types de formations géologiques aux temps $t = 1, 2, 3, 4$ et 6 ans pour $n = 1, 1,5$ et 2 respectivement. Les lignes solides représentent les courbes des solutions analytiques et les symboles circulaires celles des solutions numériques. On observe que pour toutes les valeurs de n et dans chaque formations géologiques, à $t = 1 \text{ an}$ pour cette exemple, les profils du soluté sont qualitativement similaires à ceux prédit par les modèles standard d'Avection-Dispersion (la concentration décroît avec la position). La similarité s'arrête rapidement. En effet à partir de $t = 2 \text{ ans}$, la concentration du soluté augmente avec la distance à partir d'une valeur approximative de 1 mg/L à $x = 0 \text{ m}$ jusqu'à une valeur maximale de la concentration, alors le pic de concentration se déplace puis la concentration décroît jusqu'à une valeur appoximative de $0,5 \text{ mg/L}$ à la fin du domaine. Cette augmentation de la concentration est due à l'effet de la source de production additive dans le milieu qui décroît avec la position. L'augmentation de la concentration dépend du temps, de la valeur de n et du type de formation géologique . On peut en effet observer que pour un instant donné, le pic de concentration dans chaque formation géologique décroît lorsque n augmente. Mais aussi le maximum de concentration croît graduellement avec le temps. On peut également constaté que les pics de concentration sont larges, cette largeur augmente avec le temps. La largeur des pics de concentration sur une large distance est due ici à la présence des deux sources de contamination, chacune agissant séparément à une frontière du réservoir.

Les solutions analytiques dans chaque cas ont été comparées aux solutions numériques obtenues en utilisant le solveur de MATLAB *pdepe*. Les résultats montrent que dans chaque formation géologique et pour chacune des formes de la dispersivité, les deux solutions sont en accord tel qu'illustré par les valeurs des écarts quadratiques moyennes (EQM) (en anglais Roots Means Square Error (RMSE)) qui sont de l'ordre de 10^{-2} et 10^{-3} (voir figures 24, 25 et 26). On peut donc

conclure que la méthode de résolution analytique utilisée pour ce type de problème est fiable et qu'elle converge bien pour cinq termes de sommation.

◆ **Cas du modèle multicouches**

Le modèle multicouches a d'abord été utilisé dans le cas simpliste pour le quel les coefficients de l'EAD varient juste en fonction de la position. Pour ce cas, $X = x$ et $t^* = t$. Pour celà, nous reprenons l'exemple précédent que nous résolvons en utilisant le modèle multicouches. Les paramètres d'entrée utilisés restant les mêmes que précédemment excepté le paramètre d'hétérogénéité qui vaut $a = 0.5 \text{ m}^{-1}$. Le milieu a été divisé en quatre couches et les valeurs moyennes des coefficients dans chaque couche sont regroupées dans le tableau 5. Les paramètres des conditions aux limites sont regroupés dans le tableau 6.

TABLE 5 – Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour les figures 27, 28 et 29 du modèle multicouches.

Courbes	L	i	x_i	n	D_i	v_i	γ_i	θ_i	f_i
	[m]		[m]		[m^2/s]	[m/s]	[$\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$]	[m^3/m^3]	[kg/m^3]
Figures 27 et 28	1	1	0.3	1	0.00224	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
		2	0.5		0.00264	0.0132	0.01813	0.4	0.0036788
		3	0.7		0.00296	0.0148	0.014841	0.4	0.0036789
		4	1		0.00336	0.0168	0.01158	0.4	0.0036789
Figures 27 et 28	1	1	0.3	1,5	0.002374	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
		2	0.5		0.003034	0.0132	0.01813	0.4	0.0036788
		3	0.7		0.003602	0.0148	0.014841	0.4	0.0036789
		4	1		0.004358	0.0168	0.01158	0.4	0.0036789
Figures 27 et 28	1	1	0.3	2	0.002518	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
		2	0.5		0.003489	0.0132	0.01813	0.4	0.0036788
		3	0.7		0.004385	0.0148	0.014841	0.4	0.0036789
		4	1		0.005654	0.0168	0.01158	0.4	0.0036789
Figure 29	1	1	0.3	2	0.011599	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
		2	0.5		0.01841	0.0132	0.01813	0.4	0.0036788
		3	0.7		0.015418	0.0148	0.014841	0.4	0.0036789
		4	1		0.01769	0.0168	0.01158	0.4	0.0036789

Les figures 27 et 28 illustrent les distributions de la concentration du polluant en fonction de la position, à des temps fixés, pour différentes valeurs de n dans le grès et le gravier respectivement. Les lignes représentent les concentrations du modèle multicouches et les symboles circulaires celles obtenues à l'aide de la GITT. Les courbes montrent que dans chaque formation géologiques et pour toutes les valeurs de n , la concentration augmente avec la position à partir d'une valeur approximative de $1 \text{ mg}/\text{L}$ à l'origine du réservoir jusqu'à une valeur maximale de concentration puis diminue jusqu'à une valeur de $0,5 \text{ mg}/\text{L}$ à la fin du domaine. La

comparaison entre les concentrations de la solution multicouches et celle de la GITT montre un bon accord entre les deux solutions tel que illustré par les valeurs les plus élevées des erreurs maximales entre les deux solutions dans le tableau 7.

TABLE 6 – Valeurs des paramètres des conditions aux limites utilisés pour les Figures du modèle multicouches.

Courbes	a_0	b_0	a_L	b_L	$g_0(t)$	$g_L(t)$
Figures 27 et 28	1	0	1	0	$C_0 \exp(-0,002t)$	$0,5C_0 \exp(-0,002t)$
Figure 29 (R-D)	v_1	D_1	1	0	$v_1 C_0$	$0,5C_0$
Figure 29 (D-R)	1	0	v_m	D_m	C_0	$0,5v_m C_0$
Figure 35(a) (D-D)	1	0	1	0	$C_0 \exp(-0,002t)$	$0,5C_0 \exp(-0,002t)$
Figure 35(b) (R-D)	v_1	D_1	1	0	$v_1 C_0 \exp(-0,002t)$	$0,5C_0 \exp(-0,002t)$
Figure 35 (D-R)	1	0	v_m	D_m	$C_0 \exp(-0,002t)$	$v_m 0,5C_0 \exp(-0,002t)$
Figure 35 (R-R)	v_1	D_1	v_m	D_m	$v_1 C_0 \exp(-0,002t)$	$0,5v_m C_0 \exp(-0,002t)$

TABLE 7 – Erreurs maximales.

Problème 1						
	Figure 27			Figure 28		
	$n = 1$	$n = 1,5$	$n = 2$	$n = 1$	$n = 1,5$	$n = 2$
$t = 1 \text{ an}$	0,003	0,0034	0,0028	0,0034	0,0032	0,0028
$t = 2 \text{ ans}$	0,0074	0,0068	0,0075	0,0067	0,0067	0,0083
$t = 3 \text{ ans}$	0,0119	0,0118	0,0125	0,0102	0,0108	0,0135
$t = 4 \text{ ans}$	0,0184	0,0176	0,0196	0,0153	0,0167	0,0204
$t = 5 \text{ ans}$	0,0342	0,0356	0,0364	0,0328	0,0352	0,0356
Figure 29						
	(a)	(b)	(c)	(d)		
$t = 0,05 \text{ an}$	$t = 0,008$	$t = 0,0072$	$t = 0,00302$	$t = 0,0027$		
$t = 0,1 \text{ an}$	$t = 0,00557$	$t = 0,00554$	$t = 0,0067$	$t = 0,00183$		
$t = 0,15 \text{ an}$	$t = 0,0083$	$t = 0,0084$	$t = 0,0083$	$t = 0,00153$		
$t = 0,25 \text{ an}$	$t = 0,0112$	$t = 0,0106$	$t = 0,0076$	$t = 0,00201$		
$t = 0,5 \text{ an}$	$t = 0,0124$	$t = 0,0114$	$t = 0,0054$	$t = 0,00323$		
Problème 3						
$t = 0,5 \text{ jour}$	$t = 1 \text{ jour}$	$t = 2 \text{ jours}$	$t = 3 \text{ jours}$	$t = 4 \text{ jours}$		
0,0023	0,0082	0,0056	0,0032	$t = 0,0033$		

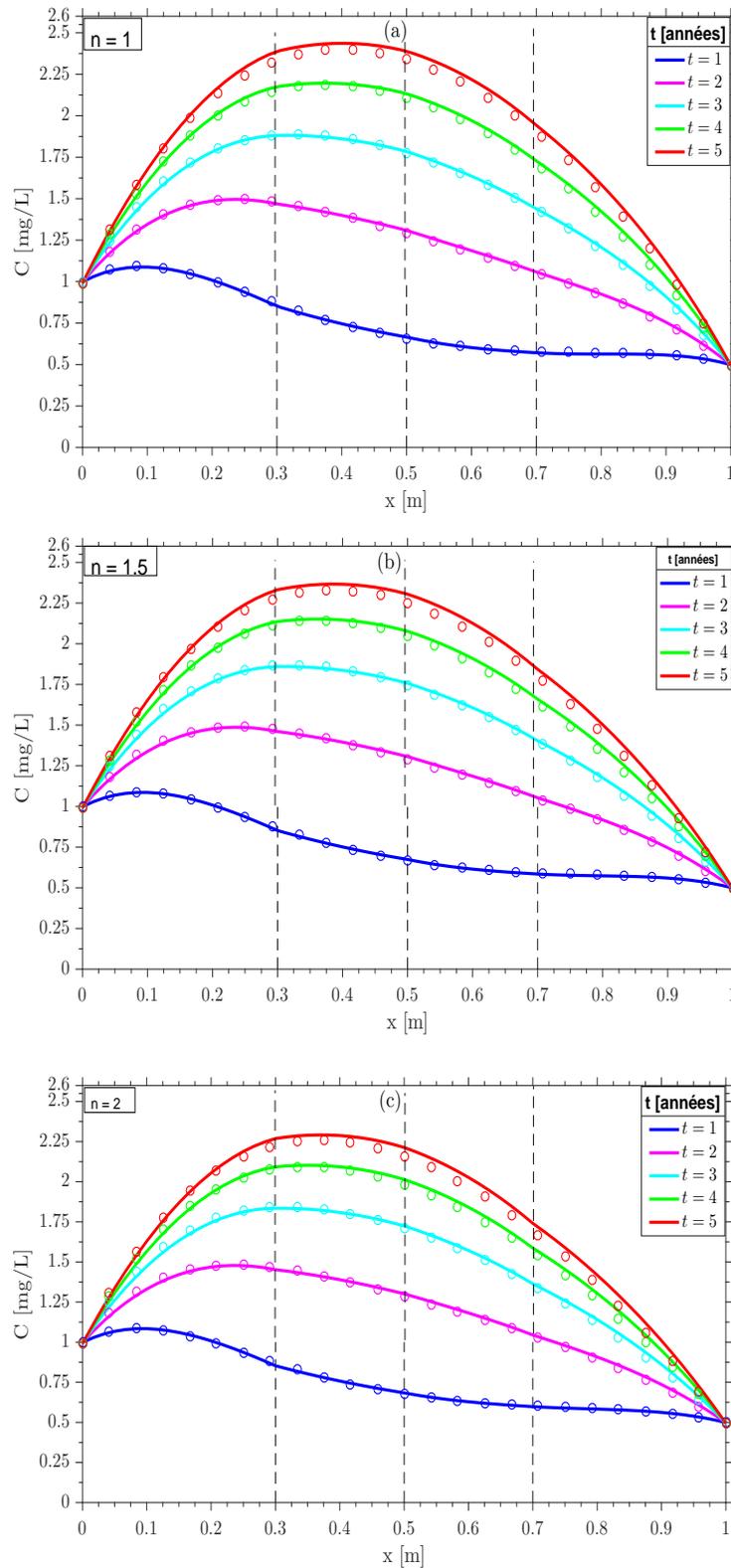


FIGURE 27 – Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multicouches et les solutions analytiques obtenues à l’aide de la GITT, pour le cas du transport d’un polluant dans le Grès avec deux sources de contaminations pour différentes valeurs de n .

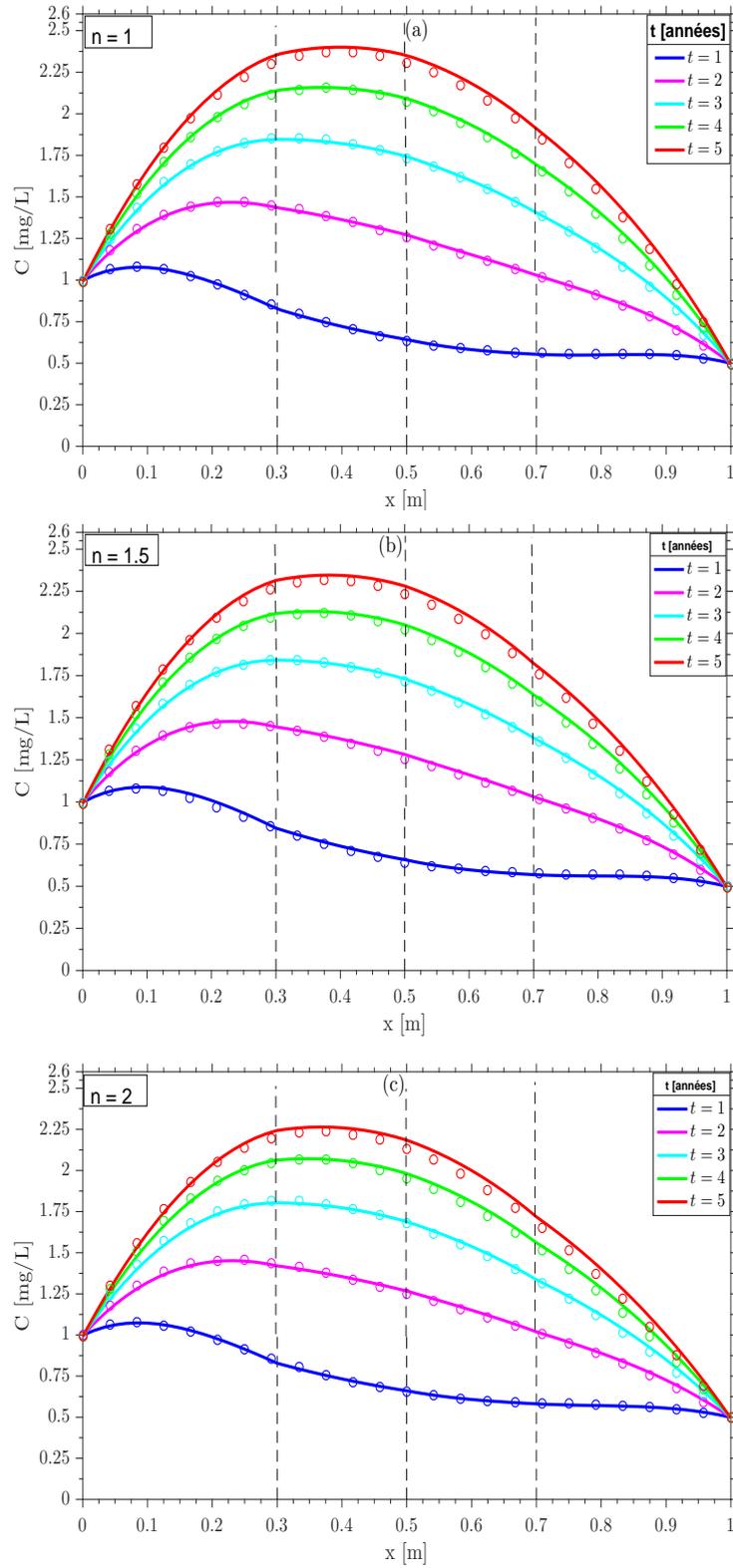


FIGURE 28 – Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multi-couches et les solutions analytiques obtenues à l’aide de la GITT, pour le cas du transport d’un polluant dans le Gravier avec deux sources de contaminations pour différents valeurs de n .

III.2.2 Transport des polluants avec des paramètres variants en fonction de la position et du temps

Dans cette partie, l'analyse multicouche est utilisée pour déterminer les concentrations d'un polluant pour un cas particulier du deuxième modèle de transport avec deux sources de contaminations à savoir :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (1 + ax)^n \xi(vt) \frac{\partial C}{\partial x} - u_0 (1 + ax) \xi(vt) C \right] \quad (\text{III.5})$$

correspondant à $\xi_1(vt) = \xi_2(vt) = \xi(vt) = \exp(-0.01t)$, représentant la forme exponentielle décroissante de la vitesse d'écoulement. Pour ce choix des fonctions instationnaires, $X = x$ et $t^* = 1/0.01(1 - \exp(-0.01t))$. Pour l'illustration, seul le cadre fractal de la dispersivité est considéré ($n = 1, 5$). Initialement, le milieu poreux est considéré comme dépourvu de soluté, le taux de décroissance et la production d'ordre zéro sont considérés comme nuls. Nous considérons également deux cas de problème tel qu'étudié par [22], concernant le nombre de Péclet supérieur à un et le nombre de Péclet inférieur à un. Les paramètres d'entrée utilisés pour ce problème sont [22] : $a = 0,2 \text{ km}^{-1}$, $v_0 = 0,6 \text{ km/an}$, $D_0 = 0.71 \text{ km}^2/\text{an}$ (pour un nombre de Peclet inférieur à 1) et $v_0 = 0,71 \text{ km/an}$, $D_0 = 0.6 \text{ km}^2/\text{an}$ (pour un nombre de Peclet supérieur à 1). Par la suite, nous considérons deux combinaisons des conditions aux limites à savoir Robin-Dirichlet (R-D) et Dirichlet-Robin (D-R). Les paramètres de transport pour chaque couche sont présentés dans le tableau 7 et les conditions dans le tableau 6.

La figure 29 compare les concentrations de la solution du modèle multicouche obtenue pour six couches et la solution numérique obtenue à l'aide du solveur MATLAB *pdepe* pour le problème d'origine, pour les limites de types Robin-Dirichlet (a, b) et limites de types Dirichlet-Robin (c, d), respectivement. Les courbes sont obtenues pour deux valeurs du nombre de Péclet représentant les deux descriptions de transport mentionnées ci-dessus. Les courbes illustrent que pour les limites de type Robin-Dirichlet, la concentration du soluté diminue légèrement avec la distance parcourue à partir d'une valeur imposée par la condition aux limites à l'origine ($x = 0 \text{ km}$) jusqu'à une valeur minimale de concentration, puis augmente jusqu'à la valeur de 0,5 à la fin du

domaine. Alors que pour les limites de type Dirichlet-Robin, la concentration du polluant diminue avec la distance parcourue d'une valeur de 1 à l'origine jusqu'à une valeur minimale de concentration, puis augmente jusqu'à une valeur de concentration à la fin du domaine donnée par la condition d'entrée de sortie. Ces différents comportements de la concentration du polluant dans les deux combinaisons des conditions ax limites sont dues à la présence des deux sources de contamination localisées aux frontières du domaine. Les courbes montrent également que les deux solutions sont en excellent accord pour chaque choix des couples de valeurs v_0 et D_0 , vérifiant que le modèle multicouches reproduit bien le modèle original du milieu hétérogène.

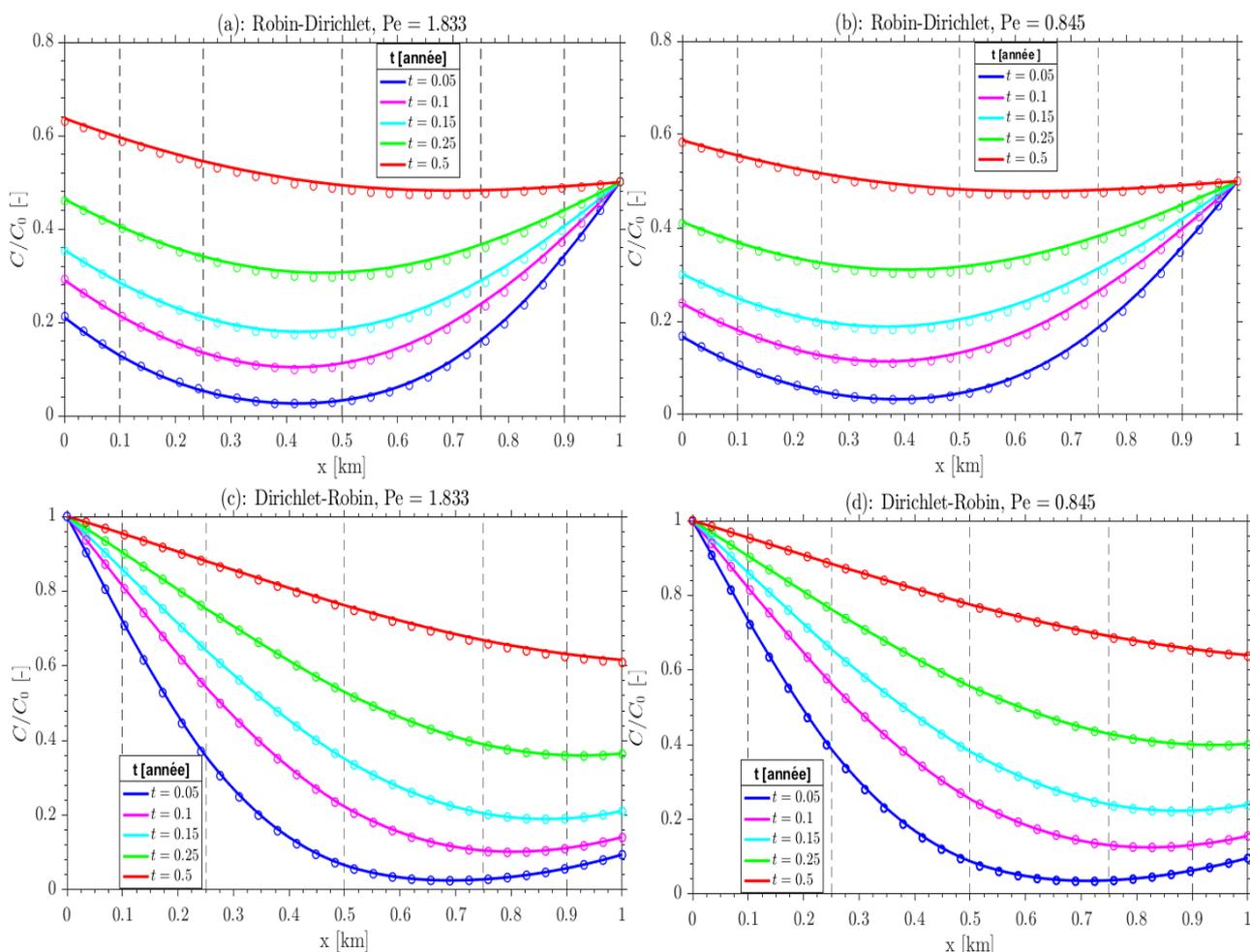


FIGURE 29 – Comparaison des solutions semi-analytiques obtenues en utilisant le modèle multicouches et les solutions numériques obtenues à l'aide du solveur de MATLAB *pdepde*, pour le cas du transport d'un polluant dans le Grès avec deux sources de contaminations pour deux valeurs du nombre de Péclet

TABLE 8 – Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour les figure 29 du modèle multicouches.

L	i	x_i	$Pe = 0,845$		$Pe = 1,833$		R_i	γ_i	θ_i	λ_i	f_i
			D_i	v_i	D_i	v_i					
[km]		[km]	[km ² /an]	[km/an]	[km ² /an]	[km/an]	[–]	[–]	[–]	[an ⁻¹]	[–]
1	1	0,1	0,720625	0,6060	0,6060	0,71710	1	0	0,4	0	0
	2	0,25	0,747619	0,6210	0,6210	0,3485	1	0	0,4	0	0
	3	0,5	0,791408	0,6450	0,6450	0,76325	1	0	0,4	0	0
	4	0,75	0,8472546	0,6750	0,6750	0,79875	1	0	0,4	0	0
	5	0,9	0,892804	0,6990	0,6990	0,82715	1	0	0,4	0	0
	6	1	0,9216852	0,7140	0,7140	0,8449	1	0	0,4	0	0

III.3 Caractéristiques générales des modèles

Dans cette section nous démontrons l’effet de certains paramètres et phénomènes sur la distribution de la concentration du polluant dans un réservoir d’eau, dans le cas du modèle de contamination à deux sources placées aux frontières du domaine. Pour cela nous considérons le réservoir d’eau de longueur 1 m avec ses caractéristiques tel que proposé par [12].

✦ Effets cumulés de la porosité η et de la densité apparente du milieu ρ_b

Les concentrations du polluant dans les trois formations géologiques sont comparées pour chaque valeur de n dans la figure 30. Les caractéristiques des formations géologiques étudiées diffèrent juste au niveau de la porosité η et de la densité apparente du milieu ρ_b . Les courbes ont été obtenues pour le cas du modèle de transport avec coefficients dépendant de la position, à $t = 2$ et 4 ans avec les mêmes paramètres d’entrée que ceux des figures 24, 25 et 26. La figure 30 montre que pour $n = 1$ et $n = 1,5$, la concentration est plus élevée dans le gravier de densité apparente ($\rho_b = 2,68$) que dans le grès ($\rho_b = 2,49$) et le schiste ($\rho_b = 2,39$) à chaque position et à chaque instant. Alors que pour $n = 2$, à $t = 2$ ans, les valeurs de la concentration dans le gravier sont plus élevées à chacune des positions du domaine suivant $0 \leq x \leq 0,2m$, mais après une distance de $0,2$ m jusqu’à la fin du domaine, les valeurs de concentration sont plus grandes dans le de grès. A cet instant, la formation géologique de schiste a les valeurs les plus faibles de concentration en polluants dans tout le domaine. A $t = 4$ ans, les valeurs de concentration en polluant sont plus élevées dans le gravier par rapport aux grès pour $0 \leq x \leq 0,35$ m et que dans les formations schisteuses pour ce domaine $0 \leq x \leq 0,55$ m. A ce temps, les valeurs de concentration dans le grès sont supérieures à celles de la formation de schiste à chacune des positions du domaine. Nous notons également que lorsque n augmente, la différence entre les

niveaux de concentration du polluant dans les différentes formations géologiques diminue.

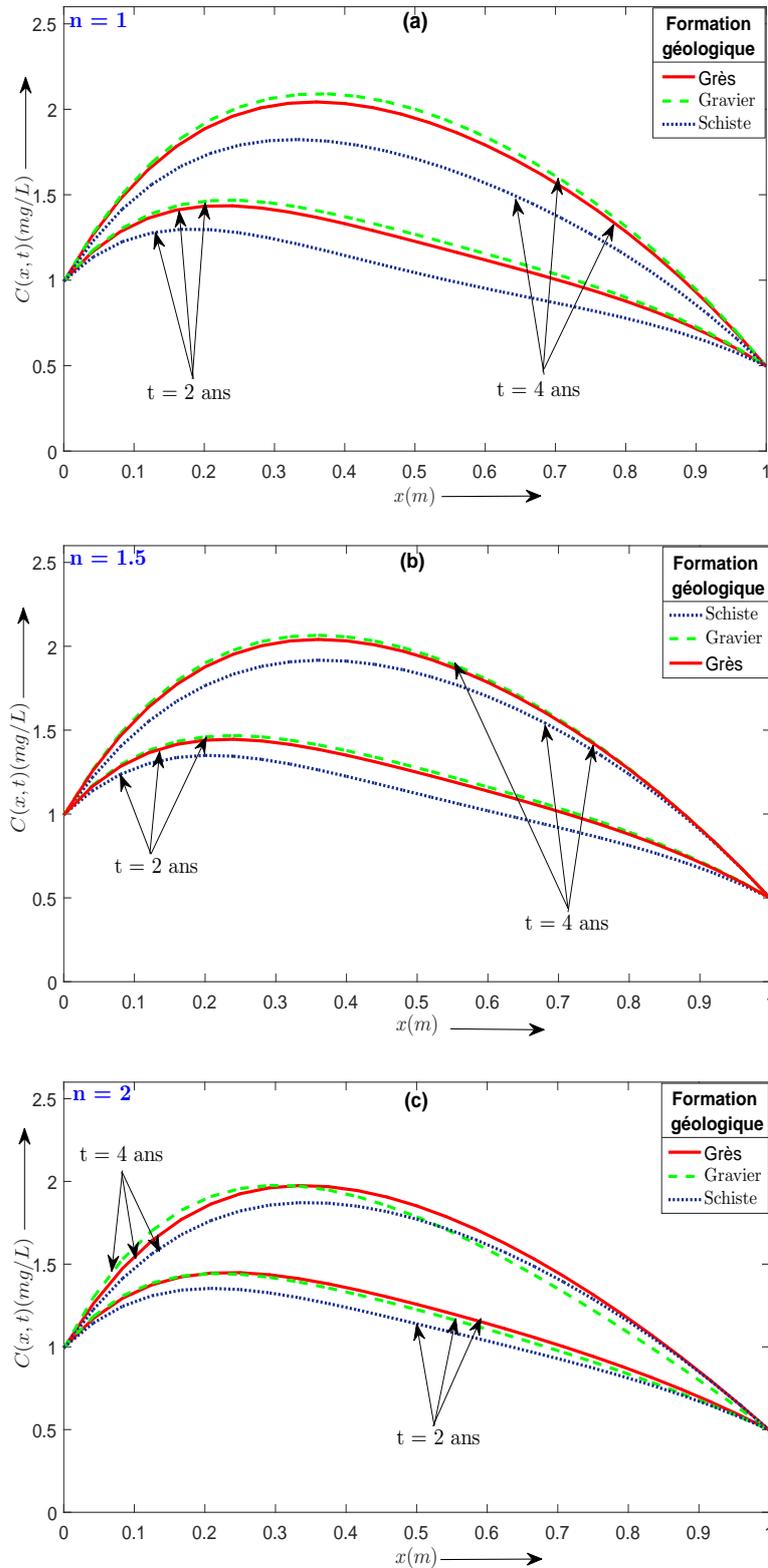


FIGURE 30 – Comparaison de la concentration du soluté à différents moments et différentes valeurs de n , pour les différentes formations géologiques, pour le cas du transport d'un polluant avec deux sources de contaminations.

Au cours des dernières décennies, les activités humaines et le développement industriel ont considérablement augmenté le nombre de sources de pollution dans l'environnement, en particulier dans les eaux souterraines. Certains déchets sont évacués par des fosses septiques, d'autres substances comme le pétrole sont transportées via des canalisations. Ces sources peuvent être l'origine de multiples contaminations d'un milieu à différentes positions. Bien que la littérature contienne de nombreuses études faisant référence à de multiples sources d'entrée de contaminants, peu d'entre elles ont pris en compte l'effet du type de distribution d'entrées (par exemple [98]). Mais aucun auteur n'a considéré les sources d'entrée localisées l'origine et à la fin du domaine. Les solutions analytiques obtenues dans cette étude sont illustrées pour le transport de contaminants avec décroissance et production de la source qui ont de nombreuses applications hydrologiques réel dans le monde et sont d'une grande importance dans la contamination des sols. C'est le cas de la désintégration séquentielle de contaminants multi-espèces tels que l'azote, les solvant chlorés et les radionucléides.

✂ Effet de la distribution d'entrée aux frontières

La figure 31 illustre la distribution du polluant à $t = 1, 3, 5, 10$ et 50 ans dans un milieu hétérogène pour $n = 1, 5$. Le modèle de concentration des contaminants est étudié pour la formation géologique de grès ($\eta = 0, 3, \rho_b = 2, 49$). Cinq distributions d'entrée de polluants avec décroissance de la production sont utilisées pour illustrer l'effet de la distribution de la source d'entrée sur le modèle de concentration de soluté. La première considère la combinaison linéaire de la distribution exponentielle d'entrée ($g_{1,2}(t) = C_{1,2}(1 - e^{-\lambda_p t}) + C_{1,2}e^{-\lambda_s t}$), où $\lambda_p(an^{-1})$ et $\lambda_s(an^{-1})$ représentent respectivement la constante de production et de décroissance. Pour cette distribution d'entrée, il est possible d'obtenir des distributions d'entrée bien connues pour des valeurs particulières des constantes de production/décroissance.

- **Cas 1 :** Pour $\lambda_p = 0$ et $\lambda_s \rightarrow \infty$, on obtient $g_{1,2}(t) = C_{1,2}$.
- **Cas 2 :** Pour $\lambda_p \rightarrow \infty$, on obtient $g_{1,2}(t) = C_{1,2} + C_{1,2}e^{-\lambda_s t}$.
- **Cas 3 :** Pour $\lambda_s \rightarrow 0$, on obtient $g_{1,2}(t) = C_{1,2}(1 - e^{-\lambda_p t})$.

La dernière distribution d'entrée étudiée est celle considérant une réaction consécutive de la source donnée par $g_{1,2}(t) = C_{1,2}K(e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t})$, où K représente la vitesse cinétique globale. Cette distribution peut être particulièrement utile pour la décroissance radioactive des déchets à la source ou la dégradation du PCE (tétrachloroéthylène) en TCE (trichloroéthylène) dans les sols [69]. Les valeurs des paramètres d'entrée utilisées sont les mêmes que celles de la figure 25.

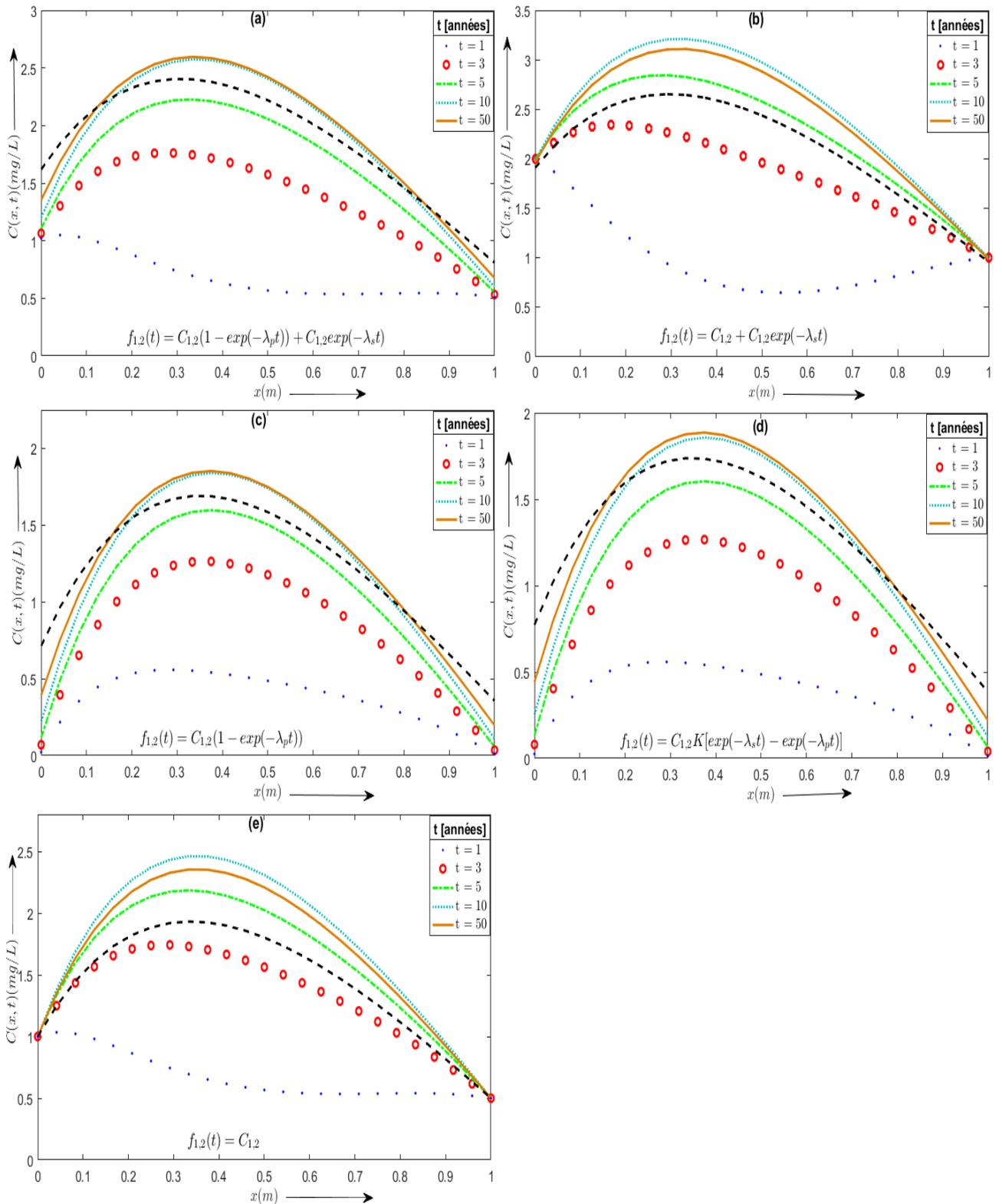


FIGURE 31 – Distribution de la concentration du polluant en fonction de la position dans la formation géologique du Grès, pour différentes distributions d’entrée et pour $n = 1, 5$: cas des coefficients dépendant de la distance

Les valeurs suivantes sont prises pour les constantes de décroissance et de production $\lambda_p = 0,025 \text{ an}^{-1}$, $\lambda_s = 0,002 \text{ an}^{-1}$ et la vitesse cinétique $K = 1,5$.

On observe clairement qu'à $t = 1 \text{ an}$ pour cet exemple, les profils des concentrations du polluant présentent des allures différentes pour les diverses distributions d'entrée aux limites. Mais après une certaine période, la concentration du polluant commence par une valeur imposée par la limite d'entrée à la première extrémité du réservoir c'est-à-dire $x = 0$ et la concentration augmente avec la fonction de source supplémentaire dans l'aquifère. Le pic de concentration de polluant se déplace à cause des deux sources d'entrée ; après la concentration du contaminant diminue avec la distance jusqu'à une valeur de concentration à la fin du domaine donnée par la distribution d'entrée à cette position. Cependant, les valeurs les plus élevées de la concentration du polluant sont observées pour la distribution d'entrée $f(t) = C(1 + \exp(-\lambda_s t))$ qui est une distribution exponentielle décroissante et les valeurs les plus faibles pour celle $f(t) = C(1 - \exp(-\lambda_p t))$ qui est une distribution exponentielle croissante. En somme, la figure démontre clairement que la distribution de la concentration de polluant dans l'aquifère est significativement affectée par les distributions d'entrées aux limites.

Les figures 32.a et 32.b contiennent les courbes de l'évolution de la concentration du polluant en fonction du temps aux positions $x = 0,35 \text{ m}$ et $x = 0,8 \text{ m}$ respectivement, pour les différentes distributions d'entrée précédentes. Les paramètres d'entrée restent les mêmes que pour la Figure (25). On observe qu'à ces positions, la concentration pour chacune des distributions augmente rapidement à partir d'une valeur nulle à $t = 0$ jusqu'à une valeur maximale atteinte entre 5 et 10 *ans*, puis elle commence à diminuer progressivement avec le temps. Les taux de croissance et décroissance dépendent de la distribution d'entrée du polluant. Par exemple, nous pouvons observer que les taux croissance et décroissance de la concentration du polluant sont plus élevés pour la distribution d'entrée exponentielle décroissante ($f(t) = C(1 + e^{-\lambda_s t})$) par rapport aux autres distributions. Pour la distribution d'entrée exponentielle croissante ($f(t) = C(1 - e^{-\lambda_p t})$), la concentration en polluant augmente lentement par rapport aux autres distributions, et le taux de diminution est très faible. Cependant, les valeurs de la concentration les plus élevées sont observées à $x = 0,35 \text{ m}$. Ces courbes illustrent à nouveau que la distribution de la concentration est significativement affectée par la forme de la distribution d'entrée.

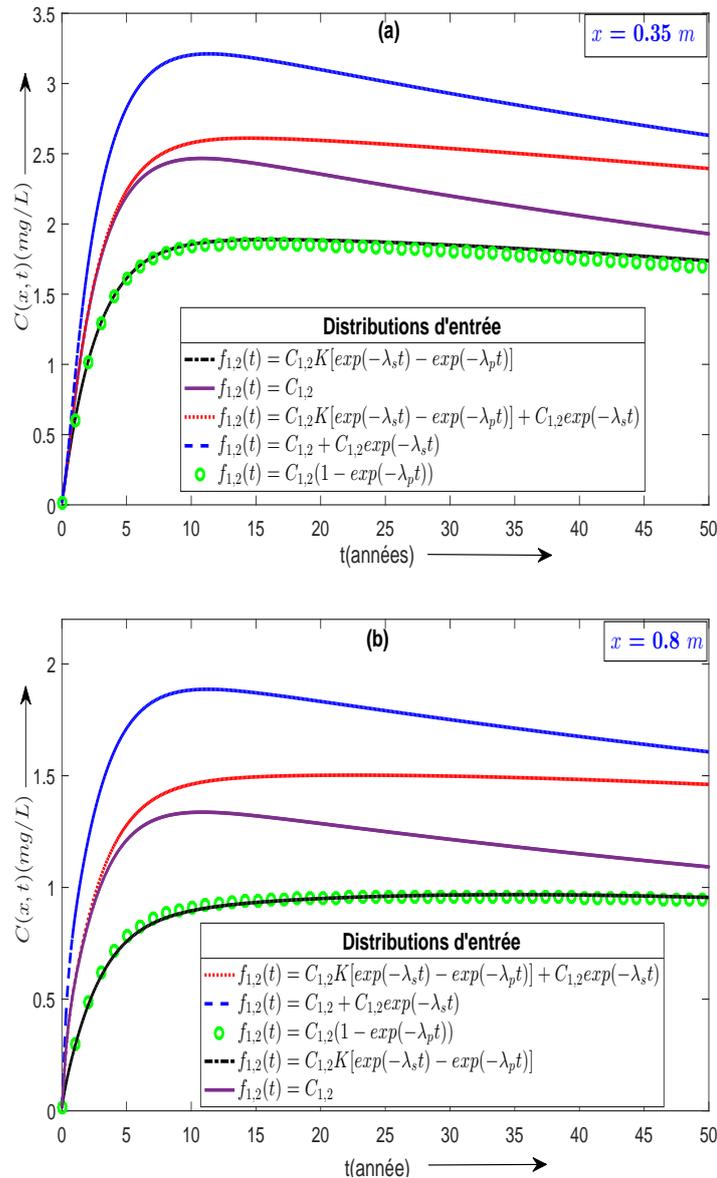


FIGURE 32 – Evolutions de la concentration en fonction du temps dans la formation de grès pour $n = 1, 5$ pour différentes distributions d’entrée : (a) $x = 0, 35$ m et (b) $x = 0, 8$ m

✧ Effets du coefficient de dispersion

Les profils de concentration du polluant en fonction de la position sont représentés pour quatre valeurs du coefficient de dispersion ($D_0 = 0, 05, 0,02, 0,01$ et $0,005$ m^2/an) à $t = 50$ ans, avec une vitesse fixe et un temps particulier comme indiqué sur la figure. 33. Les figures 33(a), 33(b) et 33(c) illustrent ces distributions dans la formation géologique du grès pour $n = 1, 1,5$ et 2 respectivement. La distribution d’entrée de la combinaison linéaire exponentielle est considérée avec les paramètres restant les mêmes que sur les figures 24, 25 et 26 respectivement.

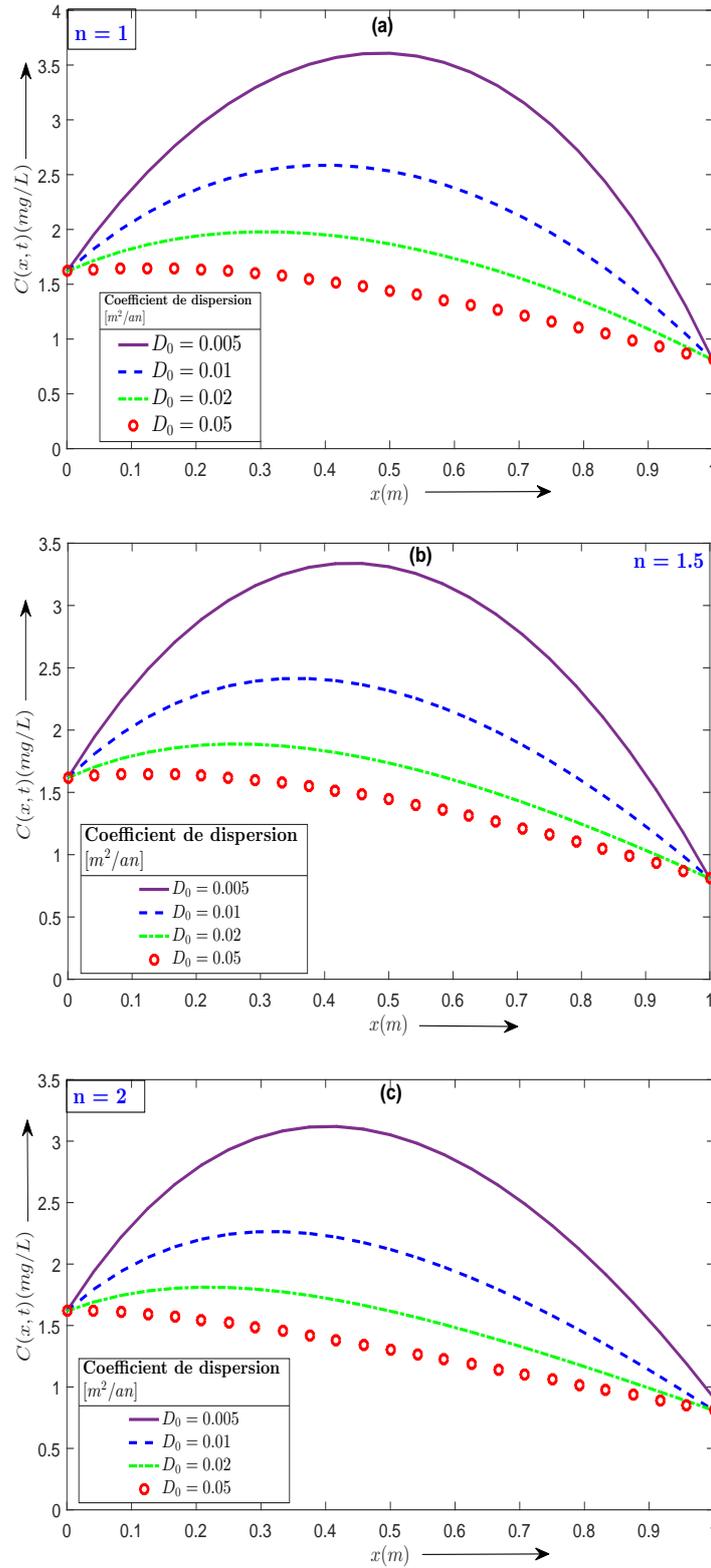


FIGURE 33 – Effet du coefficient de dispersion sur la distribution de la concentration du soluté dans le cas d’une contamination à deux sources d’entrée localisées aux limites du domaine.

Les courbes montrent que, pour les chaque valeur du coefficient de dispersion, la concentration du polluant dans le réservoir augmente à partir d'une valeur approximative de $1,65 \text{ mg/L}$ à l'entrée du réservoir jusqu'à une valeur maximale qui dépend de la valeur de n . Ensuite, la concentration en polluant diminue lorsque la distance augmente jusqu'à atteindre une valeur de concentration fixe à l'extrémité du réservoir. Le pic de concentration dans chaque cas est large à cause de la présence des deux sources de contamination. La concentration du polluant dans le réservoir augmente rapidement pour des faibles valeurs du coefficient de dispersion par rapport aux valeurs élevées du coefficient de dispersion, tandis qu'elle diminue rapidement pour des grandes valeurs du coefficient de dispersion par rapport aux faibles valeurs du coefficient de dispersion. Pour une valeur fixe de n , les valeurs des concentrations à chacune des positions intermédiaires diminue avec l'augmentation du coefficient de dispersion. L'augmentation du coefficient de dispersion diminuera la valeur maximale de la concentration du soluté. En outre, les profils de concentration pour une valeur fixe de n sont semblables pour toutes les valeurs de D_0 . Donc la dispersion n'affecte pas le type de distribution de la concentration dans le réservoir, mais agit uniquement sur le niveau de concentration. On observe également que lorsque n augmente, la concentration atteint sa valeur maximale rapidement pour toutes les valeurs du coefficient de dispersion. Dans l'ensemble, le pic de concentration du polluant pour tous les profils dans le front est important, se déplace à partir d'une fonction de source supplémentaire et diminue vers la limite de sortie. Aussi, les valeurs de concentration aux positions intermédiaires dépendent du coefficient de dispersion ainsi que de la valeur de n , mais celles des limites du réservoir ne dépendent ni de n ni de D_0 . Il est clair que le processus de dispersion joue un rôle important pour la détermination de la distribution de concentration en présence de deux sources de contamination.

✕ Influence de la dépendance temporelle du terme de production

La figure 34 élucide l'effet de la dépendance temporelle du terme de production sur la distribution de la concentration du soluté dans le réservoir avec une dispersivité racine carrée ($n = 1,5$) dans la formation géologique de grès pour un temps fixe de $t = 5 \text{ ans}$. Quatre expressions de fonctions décroissantes dans le temps pour le terme de production sont utilisées pour illustrer cet effet : la fonction exponentielle décroissante ($q(t) = \exp(-vt)$), une fonction sinusoïdale ($q(t) = 1 - \sin(vt)$), une fonction hyperbolique ($q(t) = \frac{1}{1 + \sinh(vt)}$) et une fonction inverse $q(t) = \frac{1}{1 + \sinh(vt)}$. Ces fonctions sont les fonctions les plus utilisées dans la littérature pour

la dépendance temporelle du terme de production et sont spécifiques à chacune des régions du monde. Les profils de concentration du soluté sont obtenus avec les mêmes valeurs de paramètres que sur la figure 24.

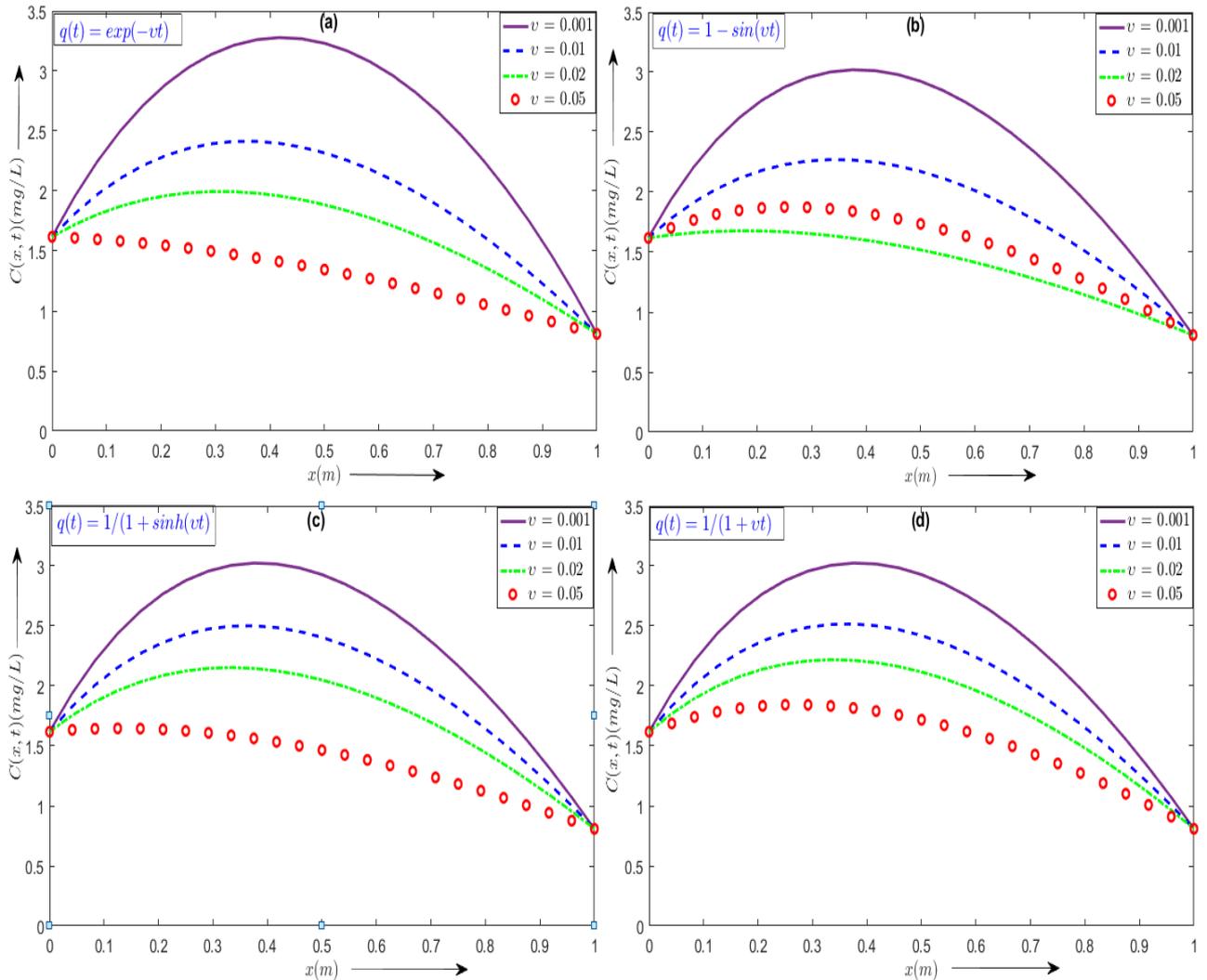


FIGURE 34 – Effet de la dépendance temporelle du terme de production $q(t)$ sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d’une contamination à deux sources d’entrée localisées aux limites du domaine.

Pour tous les profils, la concentration commence par une valeur constante à l’origine du domaine, augmente avec la distance jusqu’à une valeur maximale, puis décroît jusqu’à une valeur minimale en fin de domaine. Les valeurs de la concentration du polluant aux frontières du réservoir ne dépendent que de l’expression de la fonction dépendante du temps. Les figures

montrent que pour une expression de $q(t)$ donnée, le niveau de concentration à différentes positions est atténué avec l'augmentation du paramètre ν , à l'exception de la fonction sinusoïdale. Pour cette fonction, le niveau de concentration diminue avec l'augmentation de la valeur de ν jusqu'à une certaine valeur, puis commence à augmenter avec l'augmentation de la valeur de ν . Ce résultat peut être attribué au comportement périodique de la fonction sinusoïdale, qui a pour effet de faire dépendre le niveau de concentration en fonction de la fréquence de la fonction sinusoïdale. Les courbes montrent également que la variation du paramètre ν entraîne une variation importante du niveau de concentration du polluant dans le cas des fonctions sinusoïdale et exponentielle décroissante par rapport aux autres fonctions. On peut également observer que pour une valeur de ν fixée, les valeurs les plus élevées et les plus faibles de la concentration ne sont pas fixes à une fonction. Elles dépendent du taux de décroissance le plus élevé et le plus faible entre ces fonctions. En somme, il est clair que la dépendance temporelle du terme de production joue un rôle important sur le niveau de la concentration du polluant dans le milieu.

✂ Influence du type de conditions aux limites d'entrées

Les conditions aux limites d'entrée à chaque extrémité du domaine peuvent être du type de Dirichlet (premier type) ou de Cauchy ou de Robin (troisième type). Pour cela, quatre combinaisons de frontière d'entrée sont considérées. Etant donné que l'utilisation de la GITT n'est pas évidente pour chacune des combinaisons, le modèle multicouche est utilisé pour la résolution du problème de transport avec les coefficients dépendant de la position et du temps. La figure 35 illustre les distributions de la concentration du polluant pour les quatre combinaisons de frontière d'entrée pour la formation géologique du grès et à différents temps. La distribution de la concentration des contaminants est prédit pour la forme exponentielle décroissante de la vitesse d'écoulement et de la dispersion, c'est-à-dire $\xi_1(vt) = \xi_1(vt) = \xi(vt) = \exp(-vt)$, qui est l'une des formes de vitesses que l'on rencontre dans les eaux souterraines dans le monde à cause des variations des saisons [13]. Pour cette forme de la vitesse $X = x$ et $t^* = (1/\nu)(1 - \exp(-vt))$. Les paramètres d'entrée utilisés sont les mêmes que pour la figure 24, le paramètre instationnaire est pris comme $\nu = 0,01 \text{ an}^{-1}$. Le milieu a été divisé en quatre couches, les valeurs moyennes des coefficients dans chaque couche sont données dans le tableau 5 et les valeurs des paramètres des conditions aux limites dans le tableau 6. Les courbes de la figure 35 montrent que l'effet du terme source additionnel est mieux perceptible lorsque la condition à la limite d'entrée est du type de Dirichlet à cause de sa nature uniforme. Cet effet est plus visible dans le cas de la

combinaison Derichlet-Derichlet. Pour le cas de la combinaison Robin-Derichlet, l'effet du terme source est moins perceptible. Il est presque inexistant dans le cas de la combinaison Robin-Robin à cause de la nature croissante de cette-ci. On on peut observer que le niveau de concentration et la distribution de la concentration dépendent du type de des conditions aux limites.

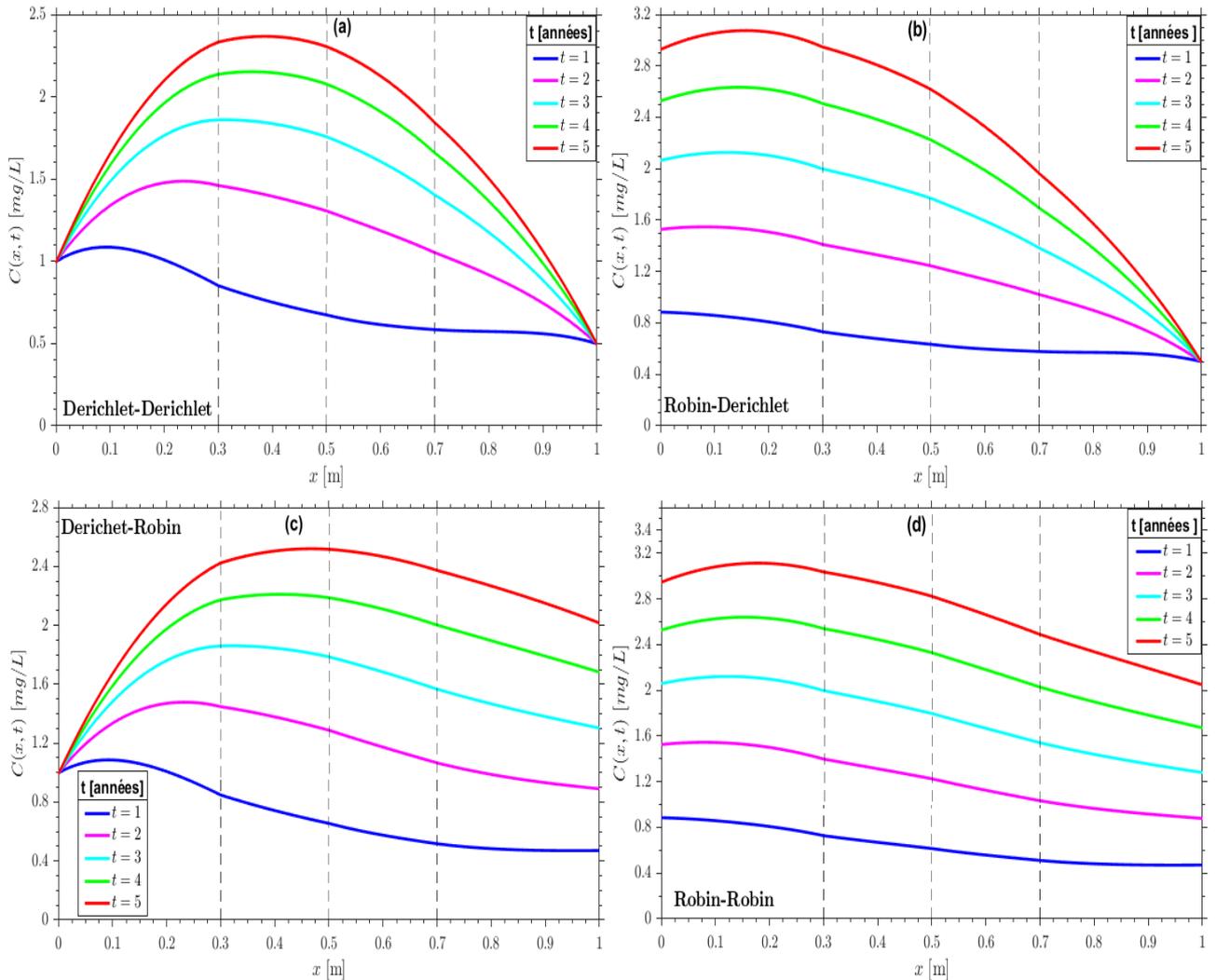


FIGURE 35 – Effet du type de conditions aux limites sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d’une contamination à deux sources d’entrée localisées aux limites du domaine.

✂ Influence du paramètre instationnaire v

La figure 36 illustre l’effet du paramètre instationnaire sur la distribution de la concentration de soluté dans le cas des coefficients dépendant du temps et de la position à $t = 2$ et 4 ans . Pour

l'illustration, la formation géologique du grès est considérée. Les concentrations sont tracées pour cinq valeurs du paramètre instationnaire ($v = 0,01, 0,05, 0,1, 0,2$ et $0,5 \text{ an}^{-1}$). La figure montre que le niveau de concentration à toutes les positions diminue avec l'augmentation de la valeur du paramètre instationnaire pour ce type de fonction de production temporelle. Nous observons également que les écarts entre les valeurs des concentrations pour les différentes valeurs de v augmente avec le temps. Ceci est due à la nature de la fonction instationnaire.

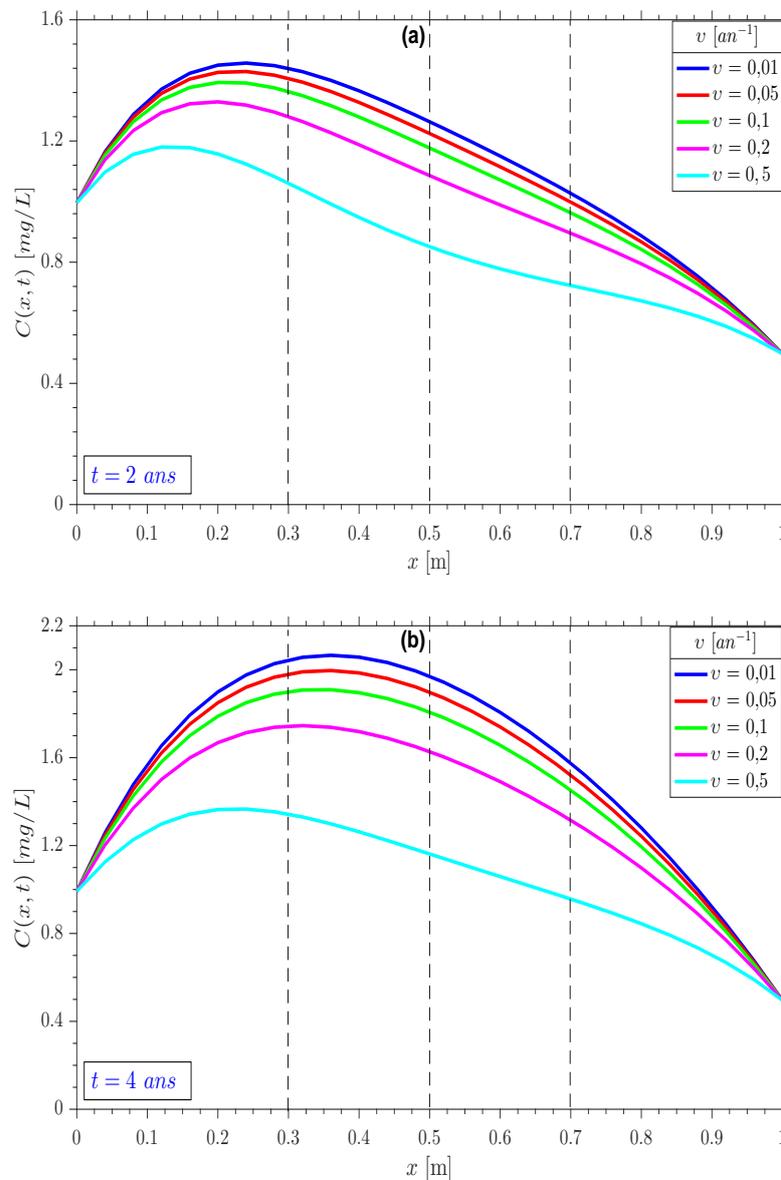


FIGURE 36 – Effet du paramètre instationnaire v sur la distribution spatiale de la concentration du contaminant dans le cas d'une contamination à deux sources d'entrée localisées aux limites du domaine.

III.4 Exemples d'applications

Plusieurs sources de contamination sont présentes dans l'environnement et certaines font l'objet d'études à cause de leur importance ou du danger qu'elles constituent pour les organismes vivants. Ces sources de contamination sont de natures diverses. Plusieurs chercheurs ont développé des modèles faisant intervenir les systèmes d'équations du transport par advection-dispersion couplées par le terme de désintégration du premier ordre [92,99-101] mais les expressions des solutions analytiques concernant certains types de sources de contamination sont rares. Dans cette partie, les modèles sont appliqués à des sources de contamination rarement citées dans la littérature mais qui ont des applications hydrologiques réelles à travers le monde entier. Une attention particulière est portée à trois types de sources ; celles périodiquement dépendantes du temps, une source du problème de terrain réel du test push-pull à puits unique et celles qui tiennent compte à la fois de la production et de la décroissance de la source.

III.4.1 Source de contamination dépendante périodiquement du temps

Cet exemple considère un problème de transport advectif-dispersif avec un taux d'émission aux frontières dépendant sinusoïdalement du temps $g_{0,L}(t) = C_{0,L}(1 + \sin(\omega t))$. Où ω (jr^{-1}) est la fréquence des sources d'entrée sinusoïdales. Dans cette application, nous ne considérons pas la production d'ordre zéro et la distribution initiale. Un tel exemple d'application peut être utilisé pour la prédiction de la concentration de la demande biochimique en oxygène (DBO) dans les eaux souterraines avec deux sources d'entrée, résultant des lixiviats de déchets de décharges périodiques. Nous considérons une combinaison de frontières de type Robin-Dirichlet. Aussi, on considère un milieu dans lequel le coefficient de dispersion est proportionnel à la vitesse ($n = 1$). Les paramètres de transport suivants sont utilisés pour cet exemple d'application [102] $v_0 = 1$ m/jr, $D_0 = 2$ m²/jr, $a_1 = 1$, $a_2 = 0,005$ m⁻¹. La valeur de a_2 est choisie de telle sorte que la vitesse d'écoulement de l'eau souterraine reste inférieure à 2 m/jr, qui est la valeur la plus élevée de la vitesse de l'eau souterraine [21]. Le milieu est divisé en six couches comme indiqué dans le tableau 8. Les coefficients des conditions aux limites sont répertoriés dans le tableau 6. Les figures 37.a et 37.b illustrent l'évolution temporelle des profils de concentration spatiale pour les fréquences de la fonction d'entrée périodique sinusoïdale $\omega = 0,5$ et $0,25$ (jr^{-1}) respectivement. Pour $\omega = 0,5$ jr^{-1} , $g(t)$ a les maxima en $\omega t = 4k\pi - 3\pi$, les points d'inflexion

(du positif au négatif) en $\omega t = 4k\pi - 2\pi$, les minimas en $\omega t = 4k\pi - \pi$, et les points d'inflexion (du négatif au positif) en $\omega t = 4k\pi$, respectivement. Alors que, pour $\omega = 0,25 jr^{-1}$, $g(t)$ a les maximas en $\omega t = 8k\pi - 6\pi$, les points d'inflexion (du positif au négatif) en $\omega t = 8k\pi - 4\pi$, les minimas en $\omega t = 8k\pi - 2\pi$, et les points d'inflexion (du négatif au positif) en $\omega t = 8k\pi$, respectivement. La figure 37.a démontre clairement que la concentration de polluant présente quatre profils différents correspondant aux quatre points particuliers de la fonction d'entrée. De plus, l'entrée de limite périodique n'affecte que le profil de concentration près de la limite d'entrée inférieure. Les amplitudes périodiques du profil de concentration sont rapidement atténuées à cause de l'hétérogénéité du milieu provoquant un processus de dispersion plus élevé et donc la conséquence est l'atténuation de l'onde de concentration. La figure 37.b illustre les profils de distribution des concentrations de polluants aux mêmes temps utilisés dans la figure 37.a. Les courbes montrent que pour le temps correspondant aux points particuliers sur la fonction d'entrée, c'est-à-dire ($\omega t = 2\pi, 4\pi, 6\pi$ et 8π), les profils de concentration sont similaires à ceux de la figure 37.a pour les temps correspondants. Mais le niveau de concentration des polluants à ces instants-là est plus élevé pour $\omega = 0,25 jr^{-1}$ par rapport à $\omega = 0,5 jr^{-1}$. Chacun des autres temps a sa propre distribution de concentration de polluants. Cependant, l'onde de concentration s'atténue loin de la limite d'entrée pour $\omega = 0,25 jr^{-1}$ par rapport à $\omega = 0,5 jr^{-1}$.

Les figures 37.c et 37.d montrent les courbes de l'évolution de la concentration en fonction du temps pour différentes positions pour $\omega = 0,5$ et $0,25 jr^{-1}$ respectivement. Ces courbes illustrent clairement que pour les positions intermédiaires, l'onde de concentration périodique dépendante du temps ne se présente que près de la limite d'entrée inférieure pour $\omega = 0,5 jr^{-1}$. Alors que pour $\omega = 0,25 jr^{-1}$, l'onde de concentration périodique dépendant du temps se présente dans chacune des positions intermédiaires. Cependant, à l'extrémité du domaine ($x = 60 m$), la concentration pour les deux valeurs de $\omega = 0,5$ présente l'onde de concentration périodique dépendant du temps, donnée par la fonction d'entrée en ce point. Globalement, les figures 37.c et 37.d illustrent également que l'amplitude de la concentration dépendante périodiquement du temps s'atténue rapidement dans le cas de $\omega = 0,5 jr^{-1}$ que pour $\omega = 0,25 jr^{-1}$. En résumé, la fréquence d'entrée à la limite inférieure et la position d'observation influencent le processus de dispersion sur la propagation de l'onde de concentration périodique. Mais, la fréquence de la seconde source de concentration d'entrée à la sortie du domaine n'influence pas ce processus, elle influence juste sur le niveau de concentration en polluant.

TABLE 9 – Coefficients du transport et conditions initiales pour chaque couche, utilisés pour l'exemple d'application avec des sources périodiques (Figure 37).

L	m	i	x_i	D_i	v_i	R_i	γ_i	θ_i	λ_i	f_i
[m]			[m]	[m ² /jour]	[m/jour]	[–]	[–]	[–]	[jour ⁻¹]	[–]
60	6	1	10	2,050	1,025	1	0	0,4	0,002	0
		2	20	2,150	1,075	1	0	0,4	0,002	0
		3	30	2,250	1,125	1	0	0,4	0,002	0
		4	40	2,350	1,175	1	0	0,4	0,002	0
		5	50	2,450	1,225	1	0	0,4	0,002	0
		6	60	2,550	1,725	1	0	0,4	0,002	0

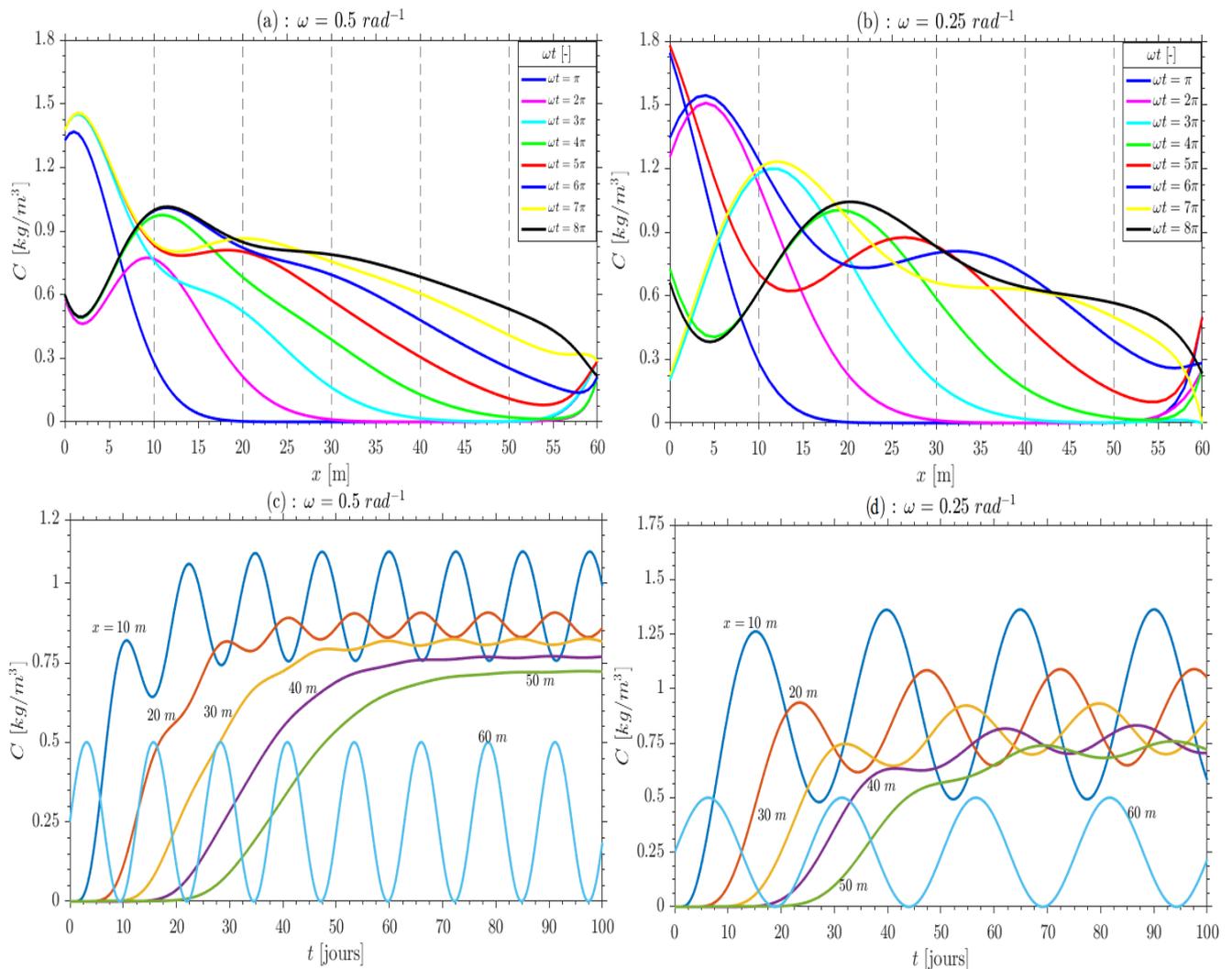


FIGURE 37 – (a) et (b) :Distribution spatiale ; (c) et (d) :distribution temporelle de la concentration de la demande biochimique en oxygène dans les eaux souterraines avec deux sources d'entrée ayant un taux d'émission sinusoïdal.

III.4.2 Source du problème de terrain réel du test push-pull à puits unique

Le modèle multicouche a également été appliqué à un problème de terrain réel de test push-pull (PPT) à puits unique. Les PPT sont généralement utilisés dans la littérature pour la quantification de divers processus à médiation microbienne dans le sous-sol [99, 103, 104]. La méthode consiste en l'injection pulsée d'une solution d'essai dans la zone saturée d'un aquifère par un puits suivi de l'extraction de la solution d'essai et de l'eau souterraine mélange du même puits, obtenant ainsi des mesures des concentrations du traceur, des réactifs, et produits de réaction éventuels. La solution d'essai contient un conservateur traceur et un ou plusieurs solutés réactifs qui sont sélectionnés pour étudier des activités microbiennes spécifiques. Dans cette application, nous voulons étudier les processus de dichloration. Par conséquent, le PCE est considéré comme le soluté réactif. La même enquête a également été menée par [99] pour tester le modèle (Developing semi-analytical solutions for multispecies transport coupled with a sequential first-order reaction network under variable flow velocities and dispersion coefficients) au réactif PCE et à ses produits. Il a utilisé sa solution semi-analytique proposée pour obtenir la distribution de concentration des réactifs et des produits pendant la phase d'injection uniquement pour faire ressortir des informations quantitatives sur les processus microbiens in situ. Ses résultats ont été comparés à ceux de 2DFATMIC qui est applicable aux conditions transitoires dans les zones saturées et non saturées. En supposant un taux d'injection de $30 \text{ m}^3/d$, le temps d'injection nécessaire pour obtenir un champ d'écoulement en régime permanent a été supposé égal à 5 *jours*. Dans ces conditions, les vitesses autour du puits injecteur sont données par :

$$v(x) = \frac{Q}{2\pi B\theta x} \quad (\text{III.6})$$

où Q (*m/jour*) est le taux d'injection ou de pompage, B (*m*) est l'épaisseur de l'aquifère et x (*m*) est la longueur du puits. La solution semi-analytique proposée par [102] était en excellent accord avec les résultats numériques de 2DFATMIC.

Dans cet exemple, le modèle multicouche et la méthode de solution proposée par [102] sont utilisés pendant et après la phase d'injection pour obtenir les distributions de concentration du soluté réactif uniquement. La deuxième distribution peut être utile pour obtenir des informations quantitatives sur les processus de remédiation du réactif PCE dans les eaux souterraines. La distribution de flux est considérée pour des milieux hétérogènes et des solutions sont également

obtenues pour des temps inférieurs 5 *jours* pour la simple comparaison des résultats. Les paramètres utilisés pour la simulation et les paramètres pour chaque couche sont répertoriés dans le tableau 10 et les paramètres choisis pour la condition aux limites d'entrée dans le tableau 6. La figure 38.a montre que pour les deux solutions, à chaque instant et pendant la phase d'injection, le profil de concentration en PCE présente trois zones de concentration. Dans la première zone, la concentration commence avec une valeur approximative de 1 mol/m^3 à la première extrémité du puits, c'est-à-dire $x = 0 \text{ m}$ puis, elle diminue lentement avec la distance, dans la deuxième zone, il y a une diminution soudaine du niveau de concentration tandis que pour la troisième zone, la concentration de PCE diminue très légèrement avec la distance et se rapproche asymptotiquement la valeur 0 jusqu'à la fin de l'aquifère. Les valeurs de la concentration augmentent avec le temps signifiant bien que nous sommes pendant la phase d'injection du PCE dans l'aquifère.

TABLE 10 – Coefficients du transport et coefficients de transport pour chaque couche, utilisés pour l'exemple d'application du test push-pull à puits unique (figure 38).

Coefficient du transport [99]			Coefficients des couches					
Paramètres	Unités	Valeurs	L	i	x_i	D_i	v_i	f_i
			[m]		[m]	[m ² /jour]	[m/jour]	mg/mL
Taux d'injection	<i>m/jour</i>	30	10	1	0, 2	29, 13985	291, 3985	0
Profondeur de l'aquifère	<i>m</i>	10		2	0, 5	1, 45832	14, 5832	0
Porosité	[–]	0, 1		3	1	0, 66191	6, 6191	0
Dispersivité longitudinale	<i>m</i>	0, 1		4	2	0, 33095	3, 3095	0
Facteur de retard	[–]	1		5	3	0, 19359	1, 9359	0
Taux de décroissance	<i>jour</i> ⁻¹	0, 075		6	4	0, 13736	1, 3736	0
Condition initiale	<i>mol/mL</i>	0		7	5	0, 0698	0, 698	0
Concentration d'entrée	<i>mol/mL</i>	1		8	7	0, 0698	0, 698	0
Longueur du domaine	<i>m</i>	10		9	10	0, 05327	0, 5327	0

La figure 38.b illustre que pour les deux solutions, le PCE commence avec une concentration nulle sur une longue distance, puis la concentration augmente avec la position, présente un front de concentration et diminue avec la position jusqu'à une valeur de concentration nulle à la fin du domaine. La concentration maximale dans le front et le niveau de concentration diminuent avec le temps. De plus, la distance pour laquelle la concentration est nulle augmente avec le temps, ce qui peut aider à la réhabilitation du milieu. Le temps approximatif nécessaire au milieu pour une réhabilitation complète est de 20 *jours*. Dans l'ensemble, la solution semi-analytique proposée pour le modèle multicouche et les résultats semi-analytiques de [99] sont en commun accord.

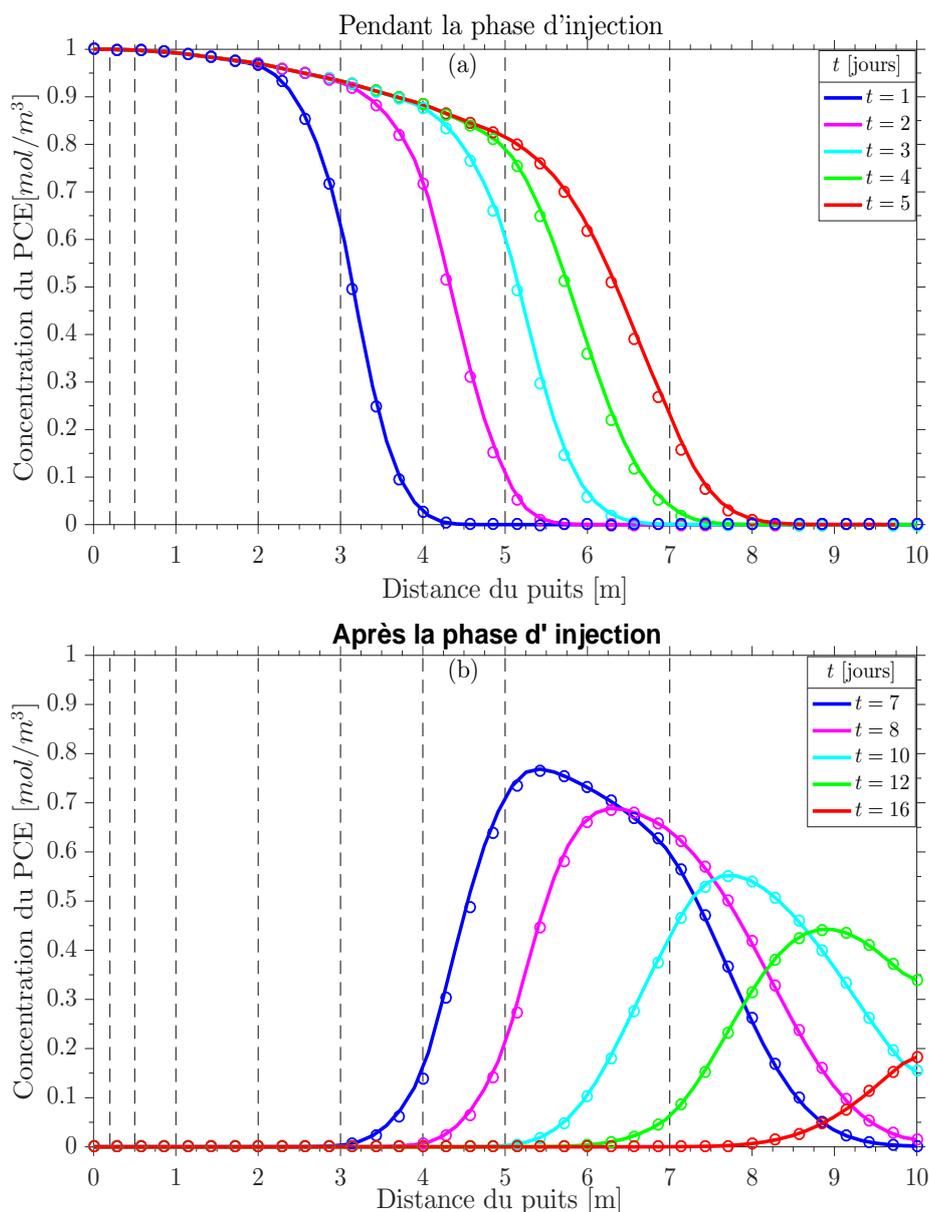


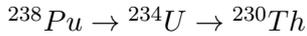
FIGURE 38 – Comparaison des distributions spatiales de la concentration du PCE du modèle multicouche et la solution de Suck [102] dans le cas du test push-pull à puits unique dans les eaux souterraines.

III.4.3 Les radionucléides

Dans cette partie, les deux cas abordés la dernière section du chapitre 2 concernant les radionucléides sont étudiés pour certains radionucléides dans le but d'évaluer les doses efficaces engagées pour un adulte.

■ Radionucléide subissant à la fois une production et une décroissance de la source

Pour ce cas, l'exemple d'application suivante a été considéré : le transport d'un deuxième membre d'une chaîne de désintégration des radionucléides lors de son déplacement dans les eaux souterraines avec deux sources d'entrées :



Dans l'exemple choisi, la source de radionucléide subit à la fois une décroissance et une production.

Les paramètres d'entrée, utilisés ici, proviennent de [12, 95, 96, 99, 101, 104] à l'exception de la valeur de concentration d'entrée et ils sont répertoriés dans le tableau 11.

TABLE 11 – Paramètres d'entrée du problème de transport de ${}^{234}\text{U}$

Paramètres	Unités	Valeurs
Contenance volumétrique en eau, θ	m^3/m^3	0,4
Coefficient de distributionn, K_d	m^3/kg	0,2
Porosité, η		Grès, 0,3 Schiste, 0,1 Gravier, 0,5
Densité apparente, ρ_b	kg/m^3	Grès, 2490 Schiste, 2680 Gravier, 2390
Coefficient de dispersion, D	$m^2/year$	1000
Vitesse d'écoulement, v	$m/year$	100
Constante de décroissance radioactive, λ	$year^{-1}$	0.0000028
Constante de production, λ_p	an^{-1}	0.0089
Constante de décroissance de la source, λ_s	an^{-1}	0.0010028
Concentration initiale de ${}^{238}\text{Pu}$ à l'origine, C_1	Bq/m^2	10^{15}
Concentration initiale de ${}^{238}\text{Pu}$ à la fin du domaine, C_2	Bq/m^2	$5 * 10^{14}$
Taux d'absorption de ${}^{234}\text{U}$, TA	$m^3/jour$	0,005
Coefficient d'injection de dose ${}^{234}\text{U}$, CID	Sv/Bq	$4,8 * 10^{-8}$

La figure 39.a représente la concentration en radionucléide dans les eaux souterraines en fonction du temps à différentes distances de l'origine ($x = 50, 100$ et $200 m$) pour différentes formations géologiques. La concentration de ${}^{234}\text{U}$ à chacune des positions augmente aux premières années jusqu'à un pic de concentration puis commence à diminuer après un certain temps. Le taux d'augmentation et le taux de diminution dépendent de la formation géologique et de la position considérée. Cependant, la concentration maintient les tendances croissante jusqu'à $t = 10000 ans$. Le niveau de concentration croît rapidement dans la formation géologique du gravier avec pour porosité $\eta = 0,5$ par rapport au grès $\eta = 0,3$ et au schiste $\eta = 0,1$. Il en est de

même pour le taux de diminution de la concentration du radionucléide. La formation de gravier a la concentration radioactive la plus élevée par rapport aux deux autres formations géologiques. La valeur de concentration la plus élevée est observée pour $x = 200 \text{ m}$ à $t = 1000 \text{ ans}$ avec la valeur de $2,1 \times 10^9 \text{ Bq/m}^3$. Il ressort donc que la distribution du radionucléide dépend de la formation géologique dans la quelle se produit le transport. D'autres part, le niveau de concentration de la radioactivité décroît avec la position puis augmente du fait de la deuxième source radioactive localisée à la deuxième extrémité du domaine.

La figure 39.b décrit l'évolution temporelle de la dose efficace du radionucléide absorbée à différentes distances de l'origine ($x = 50, 100$ et 200 m) pour les mêmes formations géologiques utilisées pour les concentrations. Une comparaison des figures. 39.a et 39.b montre que l'amplitude des doses à différentes positions et pour chaque formation géologique suit la même séquence que l'amplitude de la concentration correspondante. Comme les concentrations radioactives, les valeurs des doses les plus élevées sont obtenues pour la formation géologique de gravier pour un adulte situé à 200 m de l'origine. A cet position, la valeur la plus élevée de l'amplitude de la dose est d'environ $0,021 \text{ Sv/an}$. La plus petite valeur de la dose est obtenue pour la formation de schiste à 100 m de l'origine. Cependant, pour les trois formations géologiques et à chacune des positions, les doses annuelles sont toutes supérieures à la recommandation de l'OMS de $0,1 \text{ mSv/an}$ pour la voie de l'eau potable.

La figure 40 illustre la distribution temporelle de la concentration du radionucléide et de la dose effective pour différentes positions, en présence et en absence de la bioturbation. Elle permet de voir l'effet du coefficient de biodiffusion sur la dose que peut ingérer un adulte en consommant de l'eau contaminée. Les courbes ont été obtenues avec les mêmes paramètres que ceux de la figure 39 dans la formation géologique du grès. Les lignes représentent l'évolution de la concentration et de la dose en absence de biodiffusion et les cercles celles tenant compte de la biodiffusion. Les courbes révèlent qu'en négligeant le phénomène de bioturbation, on serait amené à sous-estimer la dose efficace qui peut être absorbée par un adulte pendant les premières années. La durée de sous-estimation est d'autant plus grande que la position d'observation augmente. Par contre, on serait amené à surestimer la dose après que les pics de dose soient atteints et ceux pendant une longue période. La période concernée par cette surestimation diminue lorsque la position d'observation augmente. Que l'on tienne compte de la bioturbation ou non, les doses pour toutes les positions sont supérieures à celle de la limite de dose annuelle recom-

mandée par l’OMS pour la voie d’eau potable. Il est donc important lors de la modélisation du transport des radionucléides dans un milieu poreux de tenir compte au minimum du nombre de paramètres possible pour une meilleure estimation du risque radiologique encouru par le grand public. C’est le cas par exemple de la dose efficace engagée absorbée par ingestion d’une eau contaminée comme illustré dans cet exemple d’application.

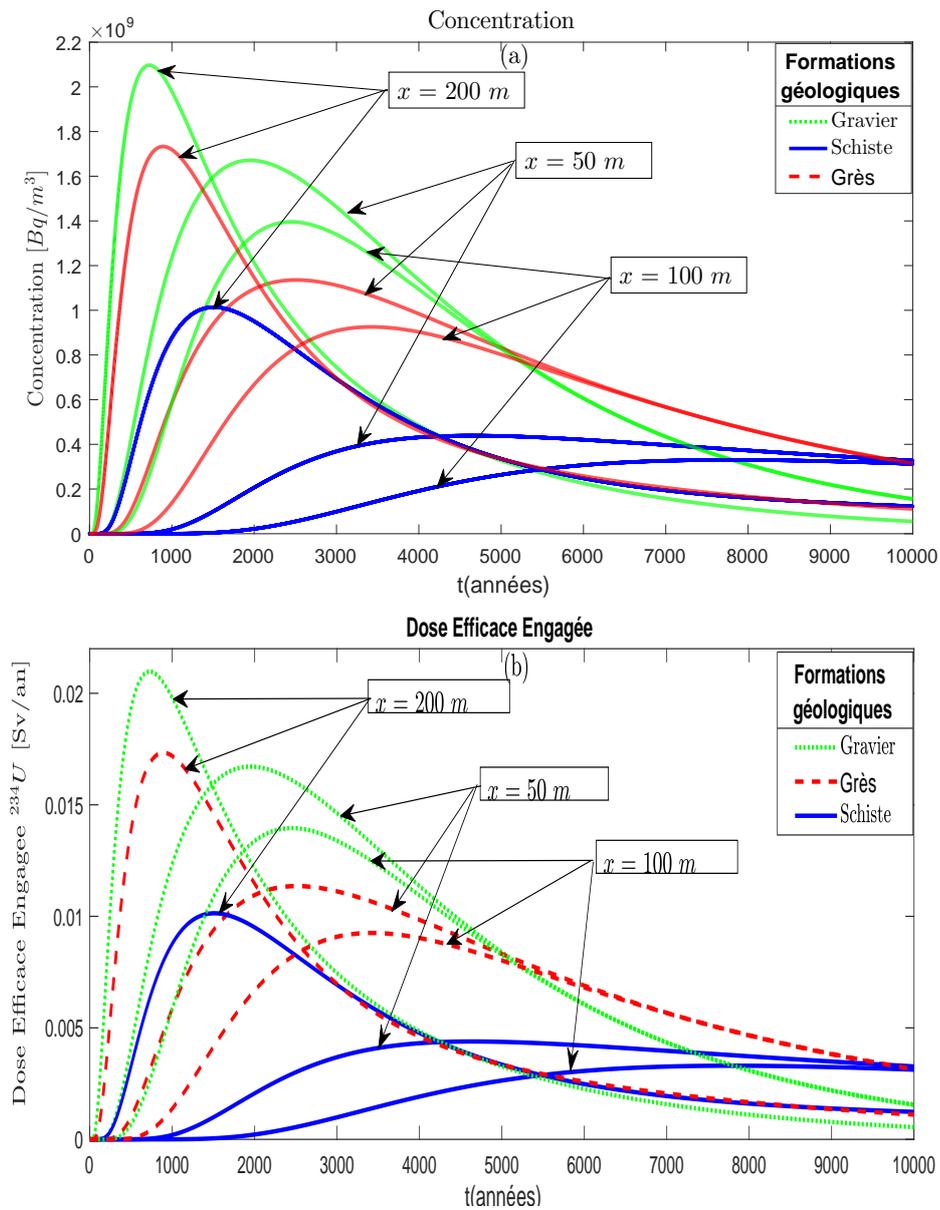


FIGURE 39 – (a) : Historiques de l’évolution temporelle de la concentration de l’ ^{234}U pour différentes positions, (b) : Dose efficace engagée de l’ ^{234}U due à l’injection de l’eau potable à différentes positions.

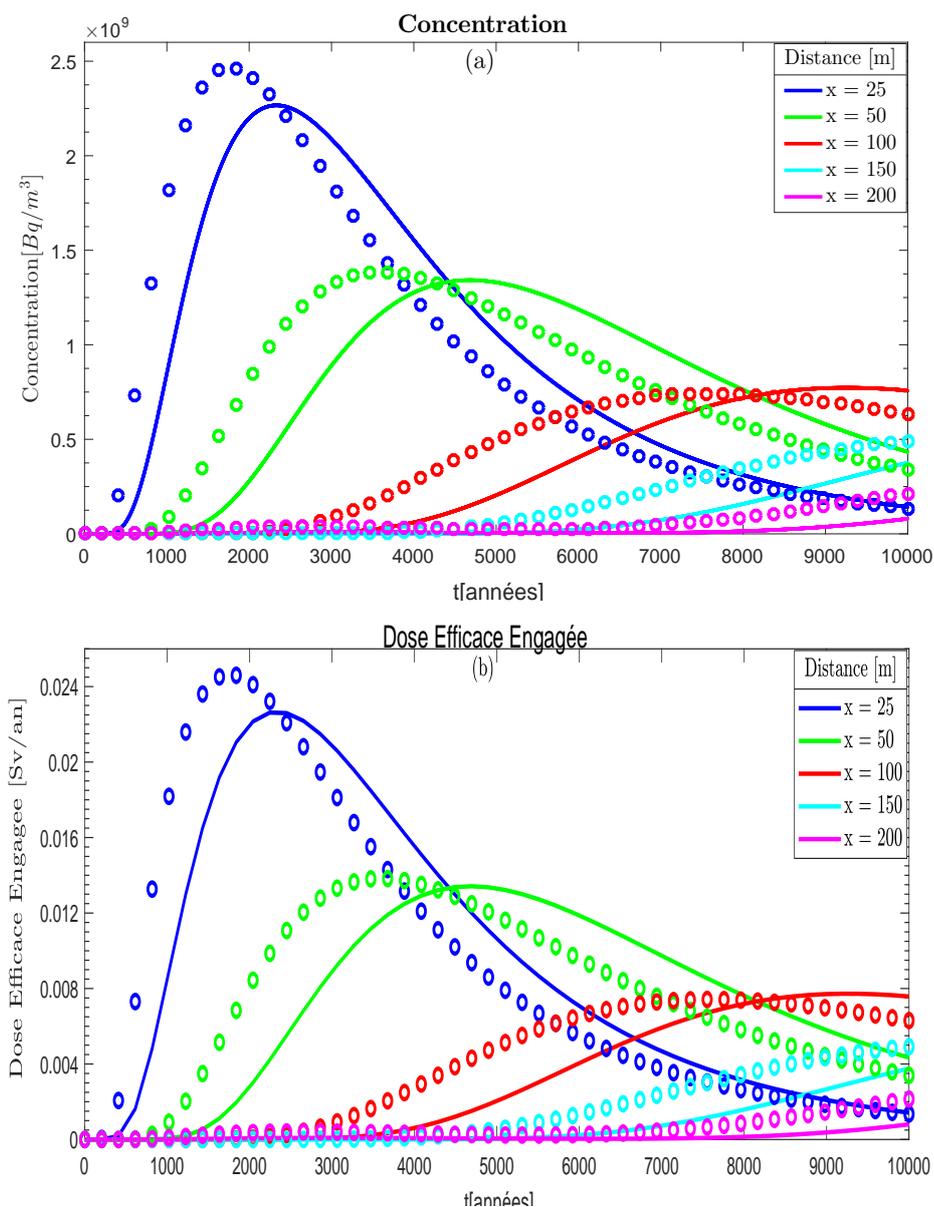
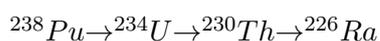


FIGURE 40 – (a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de l' ^{234}U pour différentes positions en présence et en , (b) : Dose efficace engagée de l' ^{234}U due à l'injection de l'eau potable à différentes positions .

■ Chaîne de décroissance radioactive

Pour cet exemple, nous considérons la chaîne de décroissance du plutonium 238 (^{238}Pu), qui est produit par réaction nucléaire à partir de l'uranium 238 (^{238}U) utilisé comme combustible. Nous nous limitons aux quatre premiers membres de la chaîne qui comprend les radionucléides suivant :



Les paramètres d'entrée, utilisés ici, proviennent de [12, 92, 93, 99, 104, 105] à l'exception de la valeur de concentration d'entrée et ils sont répertoriés dans le tableau 12.

TABLE 12 – Paramètres d'entrée du problème de transport de de la chaîne de désintégration de ^{238}Pu

Radionucléides	Pu-238	U-234	Th-230	Ra-226
Période (année)	87,7	$2,44 \times 10^5$	$7,7 \times 10^4$	$1,6 \times 10^3$
Activité initiale (Bq/m^2)	0	0	0	0
Activité de la source $C_1(Bq/m^2)$	1×10^{15}			
Activité de la source $C_2(Bq/m^2)$	5×10^{14}			
Coefficients d'ingestion de dose (Sv/Bq)	$4,5 \times 10^{-8}$	$4,9 \times 10^{-8}$	$2,1 \times 10^{-7}$	$2,8 \times 10^{-7}$
Coefficient de distribution (ml/g)	500	200	2000	500
Taux de rejet (an^{-1})	0.001	0.001	0.001	0.001
Taux d'ingestion ($L/jour$)	5	5	5	5

Les figures 41 et 42 illustrent les distributions des concentrations (figures 41.a et 42.a) et des doses efficaces annuelles (figures 41.b et 42.b) pour chaque radionucléide de la chaîne de désintégration aux positions $x = 50 m$ et $x = 100 m$ respectivement. Les différentes courbes sont obtenues pour la formation géologique du gravier. Les figures 41.a et 42.a amontrant que à $x = 50 m$, la concentration du ^{238}Pu augmente à partir de $t = 0 an$ jusqu'à environ $t = 1000 ans$ où elle atteint une valeur approximative de $10^7 Bq/m^3$ puis commence à diminuer et atteint une valeur négligeable après environ $5800 ans$. Les traces de concentration de ^{238}Pu apparaissent encore approximativement à $7300 ans$ puis disparaissent après $t = 9100 ans$. Cette seconde apparition est due à la deuxième source de contamination placée à la fin du domaine. Par contre à la même position, les concentrations de ^{234}U , ^{230}Th et ^{226}Ra maintiennent les tendances croissantes jusqu'à $10000 ans$. On peut aussi observer que le ^{226}Ra a la concentration en radioactivité la plus élevée jusqu'à $50 ans$, tandis que la concentration de ^{234}U est supérieure à celles du ^{230}Th et du ^{226}Ra à partir de $50 ans$. À $x = 100 m$ on observe les mêmes comportements au niveau des concentrations de chaque radionucléide les valeurs des concentrations sont faibles par rapport à la position $x = 50 m$. À cette position, la concentration de ^{238}Pu augmente jusqu'à environ $t = 1800 ans$ puis diminue et devient insignifiante après environ $5800 ans$. Elle réapparaît à $7000 ans$, augmente légèrement puis redevient négligeable au bout de $9000 ans$.

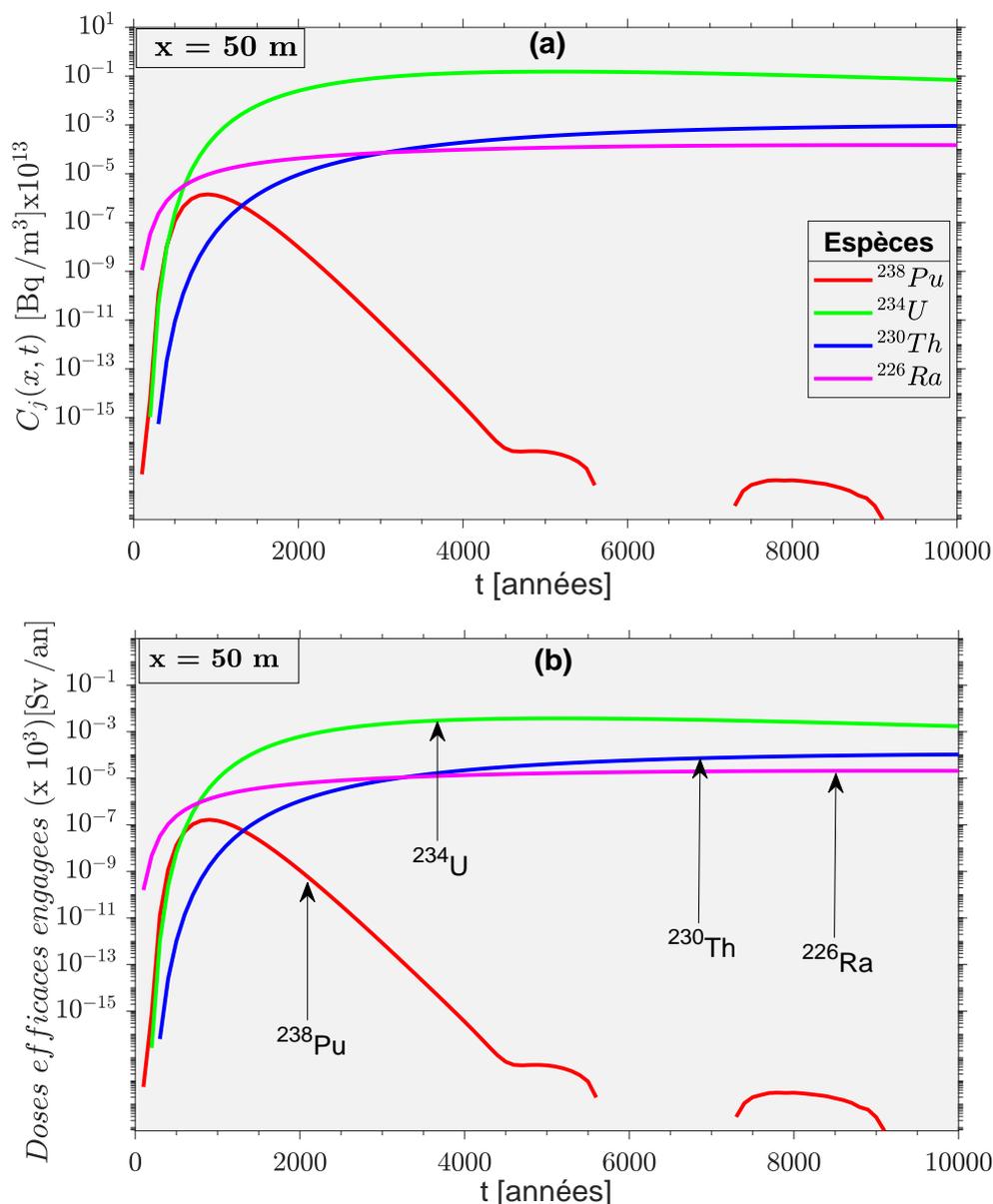


FIGURE 41 – (a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de chaque membre de la chaîne à $x = 50\text{ m}$; (b) : Dose efficace individuelle des quatre membre de la chaîne de désintégration acquise par voie d'eau souterraine potable à $x = 50\text{ m}$.

Les figures 42.a et 42.b montrent que l'amplitude des doses pour les différents nucléides suit la même séquence que les amplitudes de concentration. À la position $x = 100\text{ m}$, le ^{226}Ra contribue presque la dose totale pendant la période comprise entre 0 et 50 ans, alors que la plus grande partie de la dose totale est apportée par l' ^{234}U après 50 ans. Pour cette position, la contribution du ^{238}Pu à la dose totale devient négligeable au bout de 5600 ans. À une distance de $x = 100\text{ m}$, la majeure partie de la dose totale est apportée par ^{226}Ra jusqu'à 3000 ans.

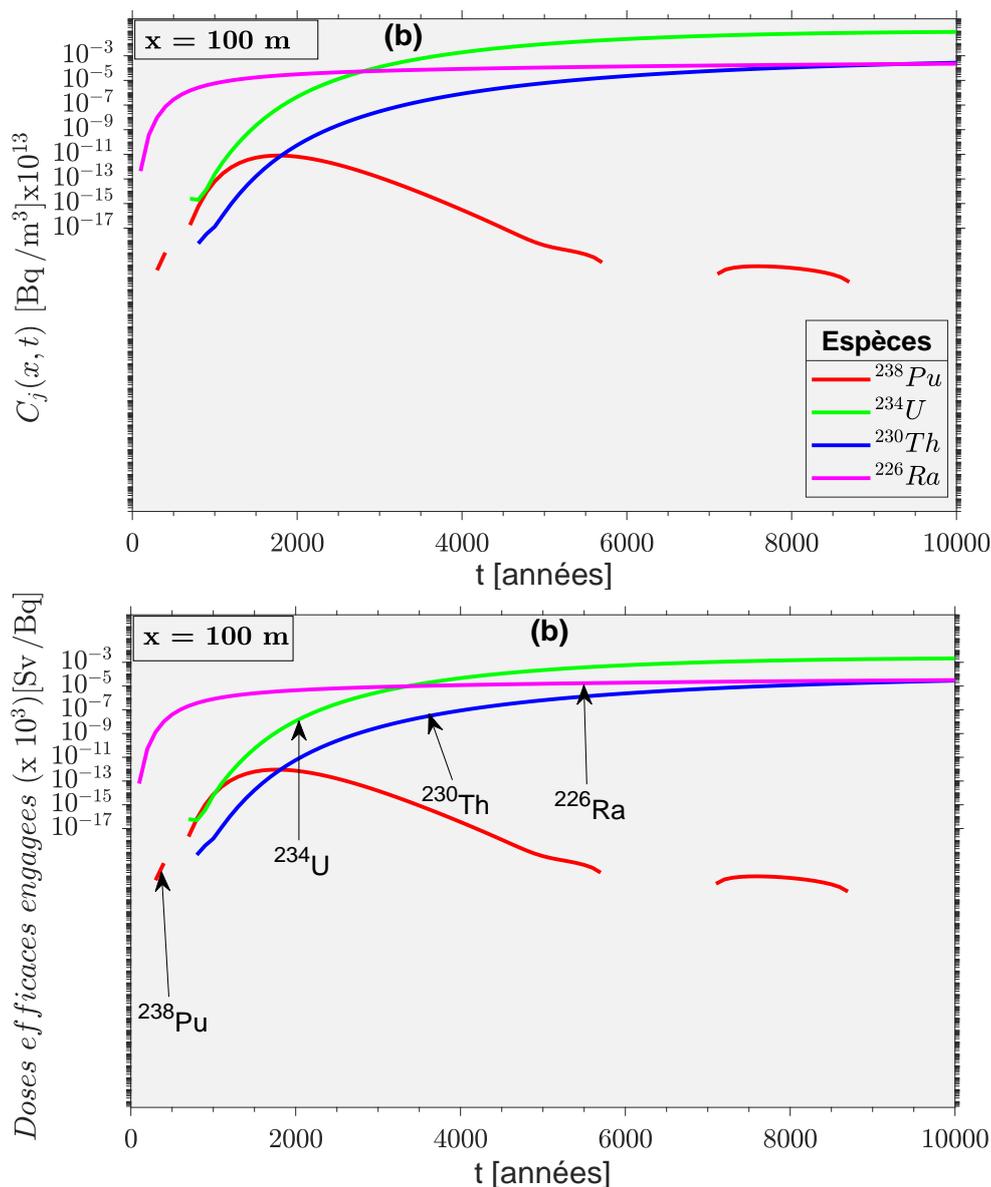


FIGURE 42 – (a) : Historiques de l'évolution temporelle de la concentration de chaque membre de la chaîne à $x = 100m$; (b) :Dose efficace individuelle des quatre membre de la chaîne de désintégration acquise par voie d'eau souterraine potable à $x = 100m$.

Après 300 ans pour cette position, l' ^{234}U apporte la plus grande contribution à la dose totale suivi du ^{226}Ra et du ^{230}Th qui contribuent approximativement la même quantité après 8000 ans. Cependant, les doses totales annuelles dues aux différents radionucléides diminuent avec la position à cause de la dispersion des différents nucléides dans le milieu. La comparaison avec les lignes directrices applicables montre que les doses annuelles totales à $x = 50$ m et $x = 500$ m sont toutes supérieures à la ligne directrice de l'OMS de 0,1 mSv/an pour la voie de gestion

l'eau potable. La comparaison entre les figures 39.b et 41.b montrent que les amplitudes de doses de ^{234}U en considérant la chaîne de désintégration sont près de 300 fois supérieures à celles obtenues lorsqu'on considère ^{234}U isolé. Il est donc nécessaire pour un radionucléide appartenant à une chaîne de désintégration de prendre en compte les interactions entre les membres de la chaîne pour une meilleure estimation du risque radiologique. Les solutions analytiques généralisées peuvent prédire rapidement et avec précision la migration unidimensionnelle du soluté (tel que les radionucléides) puis évaluer l'impact radiologique posé par les radionucléides dans l'environnement à la suite de fuites d'un dépôt de déchets nucléaires ou d'un rejet accidentel d'une installation nucléaire.

III.5 Conclusion

Ce chapitre nous a permis d'utiliser la GITT et l'analyse multicouche au modèles de transport d'un polluant avec coefficients variables dans un réservoir d'eau avec deux sources de contamination placées aux extrémités du domaine. Les résultats des modèles ont tout d'abord été comparés aux résultats numériques du solveur de MATLAB *pdepe* et analytiques des méthodes de résolution utilisées dans la littérature. Les résultats ont été trouvés en excellent accord, ce qui a permis de valider les modèles et les méthodes mathématiques de résolution utilisées. Par la suite les effets de certains paramètres tels que le coefficient de dispersion, le terme de production, la porosité du milieu, le paramètre instationnaire, la distribution de la source d'entrée sur la distribution de la concentration dans le milieu ont été étudiés pour de tels modèles. Dans la dernière partie du chapitre, les modèles ont été appliqués à quatre problèmes réels de contamination à deux sources de pollution. Ces problèmes concernent les sources périodiquement dépendantes du temps, une source du problème de terrain réel du test push-pull à puits unique, celles qui tiennent compte à la fois de la production et de la décroissance de la source et à une chaîne de désintégration radioactive. Il en ressort qu'il est important de tenir compte de tous les paramètres nécessaires du moins le maximum pour une meilleure estimation de l'impact environnemental et surtout du risque encouru par contamination surtout aux radionucléides. Mais aussi, pour les radionucléides il est important de prendre en compte les interactions parents-filles lors de l'évaluation des doses.

Conclusion Générale

Dans notre travail intitulé «Modélisation du transport des polluants dans un réservoir d'eau avec deux sources de contamination placées aux frontières », nous nous proposons d'élaborer :

→ un modèle de transport avec deux sources d'entrées et les coefficients dépendant de la position ;

→ un modèle de transport avec deux sources d'entrées et des coefficients dépendant de la position et du temps.

Ce travail a été bati en trois chapitres.

Dans le premier chapitre, après une brève présentation de l'origine des polluants de l'environnement et surtout des eaux souterraines avec un intérêt particulier sur les radionucléides, nous avons présenté les eaux souterraines de leurs origines à leurs usages en passant par la catégorisation de ces derniers. Il ressort que c'est de part ces usages que les personnes peuvent être contaminées. Par la suite, nous avons étudié les différents processus qui entrent dans le transport des contaminants dans les milieux poreux à savoir la dispersion, la diffusion, la bioturbation, l'advection, la dégradation, la sorption avec tous les paramètres nécessaires et la production du contaminant. Ces processus nous ont permis d'écrire l'équation de transport d'un contaminant ou équation de conservation de la masse, mieux connue sous le nom d'équation d'advection-dispersion. La dernière partie du chapitre a été consacrée à l'état de l'art sur quelques travaux récents concernant la modélisation du transport des polluants dans les eaux souterraines.

Ensuite dans le deuxième chapitre, nous avons proposé deux modèles de transport des polluants avec deux sources d'entrée qui tient compte de l'impact du terme de production du polluant. L'un concerne le transport avec les coefficients dépendant uniquement de la position et l'autre le transport avec coefficients dépendant de la position et du temps. Le premier modèle a été résolu analytiquement à l'aide de la transformée intégrale généralisée (GITT) qui est basée sur l'expansion des fonctions et valeurs propres. Les solutions analytiques ont été obtenues pour trois valeurs de n dans la théorie de la dispersion. Le deuxième modèle a été résolu par la technique de la transformée de Laplace après des changements de variables et la transformation du modèle à coefficients variables à un modèle multicouche à coefficients constants. Ces méthodes de résolution nous ont ainsi permis d'obtenir les concentrations des polluants dans les deux cas.

En fin dans le chapitre trois, les solutions analytiques et semi-analytiques de la concentration nous ont permis de faire une prédiction des distributions de la concentration des polluants dans les réservoirs pour un nombre de jeu de paramètres d'entrée des modèles. Les résultats expérimentaux de tels modèles n'étant pas disponibles, mais de tels modèles étant susceptibles

de présenter des problèmes réels de contamination, les résultats des modèles ont été comparés avec certains contenus dans la littérature et ont été trouvés en accord avec ces derniers. Les modèles ont été appliqués à quatre types de sources de contamination rarement citées dans la littérature mais qui ont des applications hydrologiques réelles à travers le monde. A l'occurrence, nous avons appliqué le modèle au rejet périodique de la demande biochimique en oxygène, un problème réel de test push-pull à puits unique, un problème de contamination d'un radionucléide donc la source subissait en même temps une production et une décroissance et un problème de transport d'une chaîne de désintégration radioactive. Le dernier exemple nous a permis de faire une prédiction sur la dose que le grand public peut absorber en consommant de l'eau potable souterraine contaminée.

La présente étude nous a permis :

- D'améliorer les modèles sur le transport avec coefficients variables ;
- D'appliquer de nouvelles techniques de résolution pour les problèmes des transport un peu complexes.
- D'aborder la résolution des problèmes de transport à deux sources de pollution placées aux extrémités.
- De tenir compte d'un grand nombre de paramètres dans l'EAD pour mieux nous renseigner sur la distribution des polluants dans les eaux souterraines.
- De faire une estimation des doses efficaces absorbées par ingestion d'une eau souterraine potable contaminée par un radionucléide ou une chaîne de radionucléide.

Ce travail peut être utilisé pour une étude préliminaire de la prédiction de la distribution de la concentration des polluants dans les eaux souterraines avec deux sources de contamination. D'autre part, il peut être recommandé comme un outil d'évaluation des risques liés à la consommation des eaux souterraines. Toutefois, nous constatons que les modèles utilisés ne sont qu'applicable qu'à une dimension aux cas de l'équilibre de sorption isotherme linéaire, d'une perméabilité et au cas d'un seul polluant. Dans l'avenir, nous comptons élaborer des modèles multidimensionnels applicables à :

- une chaîne de désintégration radioactive ou non, pour une sorption non équilibrée ;
- une double perméabilité ;
- plusieurs sources de contamination de natures différentes.

Liste des Publications

[1] T. Tjock-Mbaga, J. M. Ema'a Ema'a, P. Ele Abiama, G. H. Ben-Bolie (2022), Analytical solutions for solute transport from two-point sources along porous media flow with spatial dispersivity involving flexible boundary inputs, initial distributions and zero-order productions, Poll. 8(4) : 1398-1417.

[2] T. Tjock-Mbaga, Ali Zarma, P. Ele Abiama, J. M. Ema'a Ema'a, G. H. Ben-Bolie (2023), Application of multilayer analysis to contaminant transport along porous media flow with variable coefficients and two-input sources. poll. 9(1) : 22-242.

Bibliographie

- [1] L. Rakotohavana Hajaina Mamitiana (2019). *Modélisation du transport des polluants dans les eaux souterraines : applications aux hydrocarbures aromatiques polycycliques*. Master, Université d'Antananarivo.
- [2]] G. H. Ben-Bolie (2008). *Modèles compartimentaux de la migration dans le sol et du transfert sol-pin du ^{137}Cs* . Thèse de Doctorat, Université de Yaoundé I.
- [3] J. M. Ema'a Ema'a, G. H. Ben-Bolie, P. Ele Abiama, Ali Zarma and P. Owono Ateba (2015). *A three-dimensional analytical solution for study of air pollutant dispersion in a finite layer*. *Boundary-Layer Meteorol.* 155 : 289-300.
- [4] A. S. Tankou Tagne, P. Ele Abiama, Ali Zarma, P. Owono Ateba and G. H. Ben-Bolie (2021). *A three-dimensional fractional solution for air contaminants dispersal in the planetary layer*. *Helveticum* 7 (5) : e07005.
- [5] A. S. Tankou Tagne, P. Ele Abiama, Ali Zarma, P. Owono Ateba and G. H. Ben-Bolie (2022). *A unified three-dimensional extended fractional analytical solution for air pollutants dispersion*. *Fractals* 30 (3) : 1-14.
- [6]] L. Kengni, P. Tematio, K. Filali Rharrassi , J. Tepoule Ngueke , E. I. Tsafack , T. L. Mboumi and S. Mounier (2012) *Int. J. Biol. Chem. Sci.* 6(4) : 1838-1853.
- [7] R. R. Yadav and Lav Kush Kumar (2017). *One-dimensional spatially dependent solute transport in semi-infinite porous media : an analytical solution*. *Int. J. Eng. Sci. and Technol.* 9 (4) : 20-27.
- [8] A. Kumar and R. R. Yadav (2015). *One-dimensional solute transport for uniform and varying pulse type input point source through heterogeneous medium*. *Environ. Technol.* 36 (4) : 487-495.
- [9] X. Chen, X. Zhang and Z. Wu (2019). *Analytical solution for one-dimensional transport of particles considering dispersion in deposition kinetics*. *Geofluids* 2019.
- [10] R. Kumar, A. Chatterjee M. K. Singh and V. P. Singh (2019). *Study of solute dispersion with source/sink impact in semi-infinite porous medium*. *Pollution* 6 (1) : 87-98.
- [11] M. Kumar Singh, S. Rajput and R. Kumar Singh (2021). *Study of 2D contaminant transport with depth varying input source in a groundwater reservoir* *Water Supply* 21 (4) : 1464-1480.
- [12] M. Chaudhary, C. Kumar, Thakur and M. Kumar Singh (2020). *Analysis of 1-D pollutant transport in semi-infinite groundwater reservoir*. *Environ. Earth Scie.* 79 (1) : 24.
- [13] R. R. Yadav and L. K. Kumar (2018). *Two-dimensional conservative solute transport with temporal and scale-dependent dispersion : analytical solution*. *Int. J. of Adv. in Math.* (2018) (2) : 90-111.

- [14] R. R. Yadav and L. K. Kumar (2019). *Solute transport for pulse type input point source along temporally and spatially dependent flow*. *Pollution* **5** 1 : 53-70.
- [15] E. Park and H. Zhan (2001). *Analytical solution of contaminant transport from one-, two-, and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer*. *J. Cont. Hydrol.* **53** : 41-61.
- [16] C. Liu, J. E. Szecsody, J. M. Zachara, and W. P. Ball (2000). *Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media*. *Adv. Water Resour.* **23** (5) : 483-492.
- [17] T. H. Skaggs, N. J. Jarvis, E. M. Pontedeiro, M. Th. van Genuchten and R. M. Cotta (2007). *Analytical advection-dispersion model for transport and plant uptake of contaminants in the root zone*. *Vadose Zone* **6** (1) : 890-898.
- [18] J. S. Pérez, Guerrero, L. C. G. Pimentel, T. H. Skaggs and M. Th. van Genuchten (2009). *Analytical solution of the advection-diffusion transport equation using a change-of-variable and integral transform technique*. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **52** (1314) : 3297-3304.
- [19] J. S. Pérez, Guerrero and T. H. Skaggs (2010). *Analytical solution for one-dimensional advection-dispersion transport equation with distance-dependent coefficients*. *J. Hydrol.* **390** (1-2) : 57-65.
- [20] J. S. Chen, J. T. Chen, C. W. Liu, C. P. Liang, and C. W. Lin (2011). *Analytical solutions to two-dimensional advection-dispersion equation in cylindrical coordinates in finite domain subject to first- and third-type inlet boundary conditions*. *J. Hydrol.* **405** (3-4) : 522-531.
- [21] V. K. Bharati, V. P. Singh, A. Sanskrityayn and N. Kumar (2017). *Analytical solution of advection diffusion equation with spatially dependent dispersivity*. *J. Eng. Mech.* **143** (11) : 1-11.
- [22] V. K. Bharati, V. P. Singh, A. Sanskrityayn and N. Kumar (2018). *Analytical solutions for solute transport from varying pulse source along porous media flow with spatial dispersivity in fractal & Euclidean framework* *Eur. J. Mech. B Fluids* **72** : 410-421.
- [23] V. K. Bharati, V. P. Singh, A. Sanskrityayn, and N. Kumar (2019). *Analytical solution for solute transport from a pulse point source along a medium having concave/convex spatial dispersivity within fractal and Euclidean framework*. *J. Earth Syst. Sci.* **128** (203).
- [24] E. J. Carr and I. W. Turner (2016). *A semi-analytical solution for multilayer diffusion in a composite medium consisting of a large number of layers*. *Appl. Math. Model.* **40** : 7034-7050.
- [25] M. R. Rodrigo and A. L. Worthy (2016). *Solution of multilayer diffusion problems via the Laplace transform*. *J. Math. Anal. Appl.* **444** (1) : 475-502.
- [26] R. A. Zimmerman, T. A. Jankowski and D. M. Tartakovsky (2016). *Analytical models of axisymmetric reaction-diffusion phenomena in composite media*. *Int. J. Heat Mass Tran.* **99** : 425-431.
- [27] E. J. Carr (2020). *New semi-analytical solutions for advection-dispersion equations in multilayer porous media*. *Transp. Porous Med.* **135** : 39-58.
- [28] E. J. Carr (2021). *Generalized semi-analytical solution for coupled multispecies advection-dispersion equations in multilayer porous media*. arXiv : 2006.15793v2 [Physics-Comp-Ph] 27 Jan 2021.

- [29] I. Brianso and Y. Girault (2014). *innovations et enjeux éthiques des politiques environnementales et patrimoniales : l'UNESCO et le conseil de l'Europe*. *Ethique publique* **16** (1).
- [30] Association pour le Contrôle de la Radioactivité dans l'Ouest (ACRO) (2012). *Etude de la radioactivité dans l'environnement autour du C.N.P.E de Blayais*.
- [31] M. M. Sy (2016). *Analyse d'incertitude en situation accidentelle. Transfert de radionucléides dans l'environnement et évaluation de l'exposition humaine par voie alimentaire* Thèse de Doctorat, Université Aix-arseille.
- [32] B. Jagetiya, A. Sharma, A. Soni and U. Kumar Khatik (2014). *Phytoremediation of radionuclides : A report on the state of the art, Chapter 1 in Radionuclide contamination and remediation through plants*, Springer.
- [33] J. L. Saos et R. Malou (1992). *Elments d'hydrodynamiquede l'eau dans la zone sature*. Rapport ORSTOM, Centre de Dakar, 10 p., multigr.
- [34] AGW-Net, BGR, IWMI, Cap Net, RAOB, et IGRCAC (2015). *L'intégration de la gestion des eaux souterraines pour les organismes de bassins transfrontaliers en Afrique - un manuel de formation* .
- [35] J. Mania (1999). *Cours d'hydrogéologie*, Université de Besançon.
- [36] P. A. Roche (2002). *Hydrogéologie*. D.E.A. Sciences et Techniques de l'Environnement, textitEcole Nationale des ponts et chaussées, 55p.
- [37] Ph. Leblanc (1986). *Structure et hydrodynamique des milieux fissurés aquifères, synthèse bibliographique*. Bureau de recherches géologiques et minières, SGN, Dpartement eau..
- [38] G. Chaillou, M. Touchette, A. M. Remillard and E. Malenfant (2012). *Les sols et le cycle de l'eau*, Research Gate.
- [39] V. W. Uh, J. A. Baron, W. W. Davis, D. B. Warner and C. C. Seremet (2009). *Exploitation des eaux souterraines, concepts de base des programmes d'hydraulique du CRS. Qualité du Programme eau et assainissement*.
- [40] *Projet Sphère, Geneva : Projet Sphère* (2004).
- [41] F. G. Riscoll (1986). *Groundwater and Wells Second Ed*. St. Paul, MN : Johnson Filtration Systems, Inc.
- [42] INERIS (2010). *Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle*, 252 p.
- [43] M. Vasudevan, G. Suresh Kumar, M. Indumathi and M. Nambi Berlin (2015). *Numerical modelling on fate and transport of petroleum hydrocarbons in an unsaturated subsurface system for varying source scenario*. *J. Earth Sys. Sci.* **124** : 655-674.
- [44] J. M. Quirk and R. J. Millington (1961). *Permeability of porous media*. *Trans. Faraday Soc.* **57** : 1200-1207.
- [45] R. W. Gelhar and C. L. Axness (1983). *Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifer*. *Water Resour. Research* **19**(1) : 161-180.

- [46] M. E. Elshamy, S. A. Mathias and A. P. Butler, (*Imperial College/NRP, United Kingdom* (2007).
- [47] S. Inazumi, H. Hashida and Y. Ueyama (2017). *Transportation behaviour of radionuclide substances in soils. Environ. Geotech.* **6**(8) : 506-520.
- [48] National Institute for Environmental Studies (2012). See <http://kinki.env.go.jp/>.
- [49] V. Renu and G. Suresh Kumar (2016). *Numerical modeling of benzene dissolution into groundwater and transport of dissolved benzene in a saturated fracture-matrix system. Environ. Process* **3** : 781-802.
- [50] M. Valipour (2013). *increasing irrigation efficiency by management strategies : cutback and surge irrigation. ARPN J. Agric. Biol. Sci.* **8**(1) : 35-43.
- [51] T. H. Skaggs and F.J. Leij (2002). *Solute transport : theoretical background.* Chapter 6 in *Methods of soil analysis. Part 4. physical methods, 1353-1380* J. Dane and C. Topp (eds.), Madison, Wisc. : SSSA.
- [52] Šimunek and M. Th. Van Genuchten (2007). *Contaminant transport in the unsaturated zone : theory and modeling.* Chapter 22 in *The Handbook of Groundwater Engineering*, 2nd ed., p 221-2254 J. W. Delleur (ed.), CRC Press, Boca Raton, FL.
- [53] J. D. Logan, *Transport Modeling in Hydrological System, Chapter 2, 226 p*, Vol. 15 New-York : (Springer).
- [54] F. Jouannin (2004). *Etude de la mobilité des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) contenus dans un sol industriel pollué*, Thèse de doctorat, Lyon, INSA.
- [55] P. Grathwohl (1998). *Diffusion in natural porous media : contaminant transport, sorption/ desorption and dissolution kinetics*, Boston : Kluwer Academic Publishers, Springer USA.
- [56] Y. S. Yang, X. Du, Y. Cao, Y. Lei and M. Yang (2013). *Fate and transport of petroleum hydrocarbons in vadose zone : compound-specific natural attenuation. Water Air Soil Pollution* **224** : 1-14.
- [57] T. P. Clement, R. Sethi, A. D. Molfetta and M. Rolle (2008). *A kinetic approach for simulating redox-controlled fringe and core biodegradation processes in groundwater : model development and application to a landfill site in Piedmont, Italy. Hydrol. Process* **22**(25) : 4905-4921.
- [58] S. Simpkins, M. Alexander and S. K. Schmidt (1985). *Models for kinetics biodegradation of organic compounds not supporting growth. Applied Environ. Microb.* **50** (2) : 323-331.
- [59] D. Schäfer, A. Manconi, S. Grandel and A. Dahmke (2005). *Consequence of different kinetics approaches for simulation of microbial degradation on contaminant plume development, in reactive transport in soil and groundwater processes and models*, P. 127-140, Berlin Germany : Springer Verlag.
- [60] H. Prommer, G. B. Davis, D. A. Barry and C. T. Miller (2003). *Modeling the fate of petroleum hydrocarbons in groundwater in Proceedings of the fifth national workshop on the assessment of site contamination. Australie, Adelaide, S, Australie National Environmental Council Service Corporation.*

- [61] Thierry Blondel (2001). *Pollution souterraine : paramètres et paramétrage des Modèles en écoulement et en transport de polluants*. 120 p, INERIS, Projet TRANSPOL-volet. (2001).
- [62] P. Bossew, G. Kirchner (2004). *Modelling the vertical distribution of radionuclides in soil. Part1 : the convection-dispersion equation revisited*. *J. Environ.*
- [63] K. Bunzl (1978). *Transport and accumulation of radionuclides in the soil. A kinetic model*. *GSF-Bericht S-527, Gesellschaft für Strahlenforschung. Radioact.* **73** (2) :127-150.
- [64] P. A. S Ham, R. J. Schotting, H. Prommer and G. B. Davis (2004). *Effect of hydrodynamic dispersion on plume lengths for instantaneous bimolecular reactions*. *Adv. Water Resour.* **27** (8) : 803-813.
- [65] M. L. Brusseau, P. S. C. Rao and R. W. Gillham (1989). *Sorption nonideality during organic contaminant transport in porous media. Critical reviews in environmental science and technology*. **19** (1) : 33-99.
- [66] M. S. Ali, E. Amro and A. Hassan, Jeddah (2019). *solute transport model for groundwater contamination in Wadi Bani Malik, Jeddah, Saudi Arabia Arabian Journal of Geosciences* **12** (148) : 1-10.
- [67] J. Shubham, C. Manish, S. H. Ong and S. Das (2017). *Numerical solution of one-dimensional finite solute transport system with first type boundary condition*. *AIInt. J. applied Comp. Math.* **3** (4) : 3035-3045.
- [68] L. Li and Z. Yin (2017). *Numerical simulation of groundwater diffusion equation*. *American J. Comp. Math.* **7** : 350-370.
- [69] A. Moranda, R. Cianci and O. Paladino (2018). *Analytical solutions of one-dimensional contaminant transport in soils with source production-decay* *Soil Syst.* **2** (3) : 40.
- [70] Y. Sim and C. V. Chrysikopoulos (1996). *AOne-dimensional virus transport in porous media with time-dependent inactivation rate coefficients*. *Water Resour. Res.* **32** (8) :2607-2611.
- [71] M. K. Singh and P. Das (2015). *Scale dependent solute dispersion with linear isotherm in heterogeneous medium*. *J. Hydrol.* **520** : 289-299.
- [72] J. Crank (1975). *The mathematics of diffusion, 2nd edn*. Oxford University Press, London.
- [73]] A. Gharehbaghi (2016). *Explicit and implicit forms of differential quadrature method for advection-diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite domain*. *J. Hydrol.* **541** : 935-940.
- [74] M. Kumar Singh, S. Rajput and R. Kumar Singh (2021). *Study of 2D contaminant transport with depth varying input source in a groundwater reservoir*. *water Supply* **21** (4) : 1464-1480.
- [75] L. W. Gelhar, C. Welty, and K. R. Rehfeldt (1992). *A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers*. *Water Resour. Research* **28** (7) : 1955-1974.
- [76] M. K. Singh and P. Kumari (2014). *Contaminant concentration prediction along unsteady groundwater flow*. in *Modelling and simulation of diffusive Processes. Simulation Foundations, Methods and Applications*, p. 257-275, S. Basu & N. Kumar, eds, . Springer, Cham.

- [77] Z. Xu, J. R. Travis and W. Breitung (2007). *Green's Function Method and its Application to verification of diffusion models of GASFLOW Code*. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe.
- [78] A. R. Almeida and R. M. Cotta (1995). *Integral transform methodology for convection-diffusion problems in petroleum reservoir engineering*. *Int. J. Heat Mass Transfer* **38** 18 : 3359-67.
- [79] R. M. Cotta (1993). *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. Boca Raton, CRC Press.
- [80] C. Liu, W. P. Ball and J. H. Ellis (1998). *An analytical solution to onedimensional solute advection-dispersion equation in multi-layer porous media*. *Transp. Porous Media* **30** : 25-43.
- [81] J. S. Pérez Guerrero, L. C. G. Pimentel and T. H. Skaggs (2013). *Analytical solution for the advection-dispersion transport equation in layered media*. *Int. J. Heat Mass Transfer* **56** (1-2) : 274-282.
- [82] M. D. Mikhailov and M. N. Ozisik (1984). *Unified Analysis and Solution of Heat and Mass Diffusion*, 524 p., Wiley and Sons Inc, New York.
- [83] F. J. Leij, J. H. Dane and M. Th. van Genuchten (1991). *Mathematical analysis of one-dimensional solute transport in a layered soil profile*. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **55** (4) : 944-953.
- [84] W. J. Rugh (1996). *Linear system theory*. Englewood Cliffs, NJ : Prentice-Hall, Simon & Schuster / A Viacom Company.
- [85] L. N. Trefethen, J. A. C. Weideman and T. Schmelzer (2006). *Talbot quadratures and rational approximations*. *Numer. Math.* **46** : 653-670.
- [86] R. D. Skeel and M. Berzins (1990). *A method for the spatial discretization of parabolic equations in one space variable*. *J. Sci. Stat. Comp.* **11** (1) : 1-32.
- [87] M. C. Thorne (2014). *Kinetic Models for Representing the Uptake of Radionuclides in Plants*. in *Radionuclide contamination and remediation through plants (Chapter 11)*, 215-234, Springer .
- [88] S. E. Serrano (1992). *The form of the dispersion equation under recharge and variable velocity, and its analytical solution*. *Water Resour. Res.* **28** (7) : 1801-1808.
- [89] R. A. Freeze and J. A. Cherry (1979). *Groundwater*. Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs **7632** (604).
- [90] M. N. Ozisik (1993). *Heat Conduction-2nd edition*. John Wiley and Sons Inc., New York, pp. 97-98.
- [91] D. Kumar Jaiswal, A. Kumar and R. R. Yadav (2011). *Solute transport along temporally and spatially dependent flows through horizontal semi-infinite media : dispersion proportional to square of velocity*. *J. Water Resour. Protect.* **16** (3) : 76-84.
- [92] J. S. Chen, J. P. Liang, C. H. Chang and M. H. Wan (2019). *Simulating three-dimensional plume migration of a radionuclide decay chain through groundwater*. *Energies* **12** 3740.
- [93] R. N. Nair and F. Sunny, S. T. Manikandan (2010). *Modelling of decay chain transport in groundwater from uranium tailing ponds*. *Appl. Math. Model.* **34** (9) : 23002311.

- [94] H. C. Burkholder and M. Cloninger (1977). *The Reconcentration phenomenon of radionuclide chain migration*, 69th Annual Meeting of the American Institute of Chemical Engineers November 28 - Decem, 1977.
- [95] K. Higashi and T. Pigford (1980). *Analytical models for migration of radionuclides in geologic sorbing media*. *J. Nucl. Sci. Technol.* **17** (7) : 700-709.
- [96] M. Th. van Genuchten (1985). *Convective-dispersive transport of solutes involved in a sequential first-order decay reactions*. *Comput. Geosci.* **11** (2) : 129-147.
- [97] G. E. Manger (1963). *Porosity and bulk density of sedimentary rocks*. U.S, Atomic Energy Commission USGPO, Washington, D.C..
- [98] J. M. V. Mazarheti, M. Samani and H. M. V. Samani (2013). *Analytical solution to one-dimensional advectiondiffusion equation with several point sources through arbitrary time-dependent emission rate patterns*. *J. Agr. Sci. Tech.* **15** (6) : 1231-1245.
- [99] H. Suk (2013). *Developing semi-analytical solutions for multispecies transport coupled with a sequential first-order reaction network under variable flow velocities and dispersion coefficients*. *Water Resour. Research* **49** (5) : 3044-3048.
- [100] C. Yu, M. Zhou, J. Ma, X. Cai, and D. Fang (2019). *Application of the homotopy analysis method to multispecies reactive transport equations with general initial conditions*. *Hydrogeol. J.* **27** (5) : 1779-1790.
- [101] J. S. Chen, L.Y. Li, K. H. Lai and C. P. Liang (2017). *Analytical model for advective-dispersive transport involving flexible boundary inputs, initial distribution and zero-order productions*. *J. Hydrol.* **554** : 187-199.
- [102] J. D. Istok, M.D. Humphrey, M. H. Schroth, M.R. Hyman and K.T. O'Reilly (1997). *Single-well, push-pull test for in situ determination of microbial activities*. *Ground Water* **35** (4) : 619-631.
- [103] M. F. Snodgrass and P. K. Kitanidis (1998). *A method to infer in-situ reaction rates from push-pull experiments (R825689C068)*. *Ground Water*. American Chemical Society, Washington, Dc, **36** (4) : 645-650.
- [104] Y. Kim, J. D. Istok and L. Semprini (2004). *Pus-pull tests for assessing in situ aerobic cometabolism*. *Ground Water* **42** (3) : 329-337
- [105] ICRP (2012). *Compendium of Dose Coefficients based on ICRP Publication 60*. ICRP Publication : Ottawa, ON, Canada.



Analytical Solutions for Solute Transport from two-point Sources along Porous Media Flow with Spatial Dispersivity involving Flexible Boundary Inputs, initial Distributions and Zero-order Productions

Thomas Tjock-Mbaga^{1*}, Patrice Ele Abiama^{1,2}, Jean-Marie Ema'a Ema'a³ and Germain Hubert Ben-Bolie¹

¹Laboratory of Nuclear Physics, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaounde I, P.O. Box 812, Cameroon

²Nuclear Technology Section, Energy Research Laboratory, Institute of Geological and Mining Research, Yaounde, Cameroon

³Higher Teacher Training College, Department of physics, University of Bertoua, P.O. Box 652, Cameroun

Received: 13.03.2022, Revised: 23.06.2022, Accepted: 19.07.2022

Abstract

This study derives an analytical solution of a one-dimensional (1-D) Advection-Dispersion Equation (ADE) for solute transport with two contaminant sources incorporating the source term. Groundwater velocity is considered as a linear function of space while the dispersion as a n^{th} power of velocity and analytical solutions are obtained for $n = 1.0, 1.5$ and 2.0 . The solution is derived using the Generalized Integral Transform Technique (GITT) with a new regular Sturm-Liouville Problem (SLP). Analytical solutions are compared with numerical solutions obtained in MATLAB *pedpe* solver and are found to be in good agreement. The obtained solutions are illustrated for linear combination of exponential input distribution and its particular cases. The dispersion coefficient and temporal variation of the source term on the solute distribution are demonstrated graphically for the set of input data based on similar data available in the literature. As an illustration, model predictions are used to estimate the time histories of the radiological doses of uranium at different distances from the sources boundary in order to understand the potential radiological impact on the general public for such problem.

Keywords: Advection, Dispersion, Groundwater, Analytical solution, Contaminant, Two sources.

INTRODUCTION

The pollution of groundwater has seriously increased over the years as a result of socioeconomic development, and interests many Scientists. The groundwater can be contaminated through the infiltration leachate process causing a reduction of groundwater flow rate, which results in difficult rehabilitation of groundwater. This pollution has a serious impact on human lives, and activities as well as productivity. Thus, it is very important to study the solute transport characteristics in porous media for human and ecological health. The transport of a solute in porous media is governed by the processes of advection and the dispersion. The mediums through which the solute transport occurs are homogeneous or heterogeneous. This characteristic of media as an important role to the solute transport through them (Kumar & Yadav, 2014; Sanskrityayn et al., 2018; Yadav & Kumar, 2019). The advection-dispersion equation can be solved numerically or analytically. Analytical solutions are still pursued by many scientists because they are relatively transparent with respect to model inputs and outputs, and they can provide better physical insights into the problems (Park & Zhan, 2001).

* Corresponding author Email: tjockmbaga@yahoo.fr

Many analytical solutions of contaminants transport in subsurface of water considering adsorption are present in the literature. Using the Laplace Transform Technique (LTT), van Genuchten (1981) obtained analytical solutions for ADE with zero-order production, simultaneous adsorption, and first-order decay for chemical transport. van Genuchten & Alves (1982) proposed several solutions that quantitatively describe the behaviour of solute in surface/subsurface in finite and semi-infinite medium considering adsorption, first-order decay and zero-order production in homogeneous medium. Considering the dispersion coefficient as a linear and exponential increasing space function, Yates (1992) developed an analytical solution of advection dispersion equation in one-dimension. Zoppou & Knight (1997) obtained an analytical solution for the space dependent dispersion. Su et al. (2005) developed an analytical solution to ADE with space-time dependent dispersion coefficient for predicting solute transport in a steady and saturated subsurface flow through heterogeneous porous media. Zhan et al. (2009) obtained an analytical solution for 2-D solute transport using first and third type boundary conditions. Mazarheti et al. (2013) derived analytical solution of one-dimensional solute transport with several point sources and arbitrary time-dependent emission rate. Its analytical solution was valid only for constant-parameters. Using the LTT, Kumar & Yadav (2014) developed a 1-D analytical solution for conservative solute transport in heterogeneous porous media for pulse type input point source. Kumar et al. (2019) studied the effect of the source/sink term on the solute.

One of the methods commonly used to solve the ADE in finite domain with distance dependent coefficients is the GITT. The GITT was applied by Liu et al. (2000) to solve the one-dimensional ADE in heterogeneous porous media with source/sink term, coupled with either linear or nonlinear sorption and decay. The GITT coupled with the LTT were used by Chen & Liu, (2011) to solve a 1-D ADE in a finite spatial domain with an arbitrary time-dependent inlet boundary condition. For a finite spatial domain, the 1-D ADE considering the sorption and desorption of solute, with arbitrary space dependent coefficients was solved analytically using the GITT (Skaggs et al., 2007). Pérez Guerrero et al., (2009) presented a new analytical method to solve a 3-D ADE in a finite domain with time varying boundary condition for both transient and steady-state regimes using change of variables in combination with the Classic Integral Transform Technique (CITT). Chen et al. (2011) presented an analytical solution of two-dimensional ADE in cylindrical coordinates using a combination of the second kind finite transform method and the GITT. Recently, Bharati et al. (2017); Bharati et al. (2018) and Bharati et al. (2019) presented an analytical solution of solute transport with distance depending coefficients without source term, using the GITT with a new regular SLP with a self-adjoint operator to derive analytical solutions in a finite domain. Although these studies proposed novel methods to solve the ADE, they did not incorporate several parameters on the solute transport such as the source term and the presence of several pollutant sources. Including many parameters in pollutant transport equation is helpful to cover many aspects of contaminant transport in groundwater in more natural way (Chaudhary et al., 2020).

The aim of this study is to investigate analytically for the 1-D ADE in heterogeneous domain, with space and time dependent production term and two inputs localized at the boundaries of the domain. The analytical solution is obtained using the GITT with associated advection-dispersion SLP using a self-adjoint operator. The analytical solution is validated with the help of the numerical solution. To our knowledge, no such results have established previously for this type of problem. The main focus of this study was to investigate the effect of the two points input sources, the additional source term and the degree of heterogeneity on contaminant distribution. The experimental results for this type of problem are not available in the literature for verification. However, this study is likely to present a real scenario of groundwater contamination. The developed analytical model is applied to illustrate the time variation of uranium radioactivity concentration and the potential radiological impact through the time histories of the radiological doses at different distances from the origin.

MATERIALS AND METHODS

In this study, we consider one-dimensional solute transport in a horizontal aquifer. The one-dimensional ADE in general form, describing a non-conservative solute transport in a finite porous media domain with spatially dependent dispersion coefficient, $D(x)[L^2T^{-1}]$, Darcy velocity $u(x)[LT^{-1}]$, and zero-order production may be written as Chaudhary et al. (2020):

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + f \frac{\rho_b}{\eta} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial C}{\partial x} - u(x)C \right] - \mu_l C - \mu_s \rho_b S + \gamma(x, t) \quad (1)$$

where $C(x, t)$ is the solute concentration in the liquid phase $[ML^{-3}]$ at a position $x[L]$ of the medium at a time $t[T]$, $S(x, t)$ is the solid phase concentration $[ML^{-3}]$, representing the sorbed solute per unit mass of solid, θ is the volumetric water content, f represents the fraction of sorption site, ρ_b is the bulk density of porous media $[ML^{-3}]$, η is the porosity of the porous media, μ_l and μ_s are the first order decay rate of the liquid and solid phases concentration respectively, $\gamma(x, t)$ stands for an arbitrary space and time variable zero-order production. The left-hand side of Eq. (1) represents change in solute concentration in liquid and solid phases with time respectively for the first and second terms. The right-hand side of the Eq. (1) represents the influence of the dispersion on the solute concentration distribution by the first term and the change of the solute concentration due to advective solute transport by the second term. The third and the fourth terms of the right-hand represent the first-order decay of solute in the liquid and solid phases in the medium respectively. The fifth term represents the zero-order production $\gamma(x, t) > 0$ or sink $\gamma(x, t) < 0$ for solute which represents internal/external production or sink of the solute in the medium.

Furthermore, we assumed that the expression for a linear equilibrium between the solute substances in the solid-liquid phase is given by Sim & Chrysikopoulos (1996) and Singh & Das (2015):

$$S = Fk_d C \quad (2)$$

where F represents the mass fraction of sorption particles where sorption is instantaneous, K_d refers to the distribution coefficient $[L^3M^{-1}]$. For an instantaneous sorption in all the mass $F = 1$.

In this study, the groundwater velocity is assumed to be governed by the Darcy equation. Due to the steady recharge, groundwater velocity will be increasing linearly with position (Serrano, 1992). Hence both the dispersion coefficient and velocity are considered spatially dependant in general form. In this study, the expression of groundwater velocity and dispersion coefficient are considered to follow the dispersion theory according to which the dispersion is proportional to the n^{th} -power of the space velocity ($D \propto u^n$) (Freeze & Cherry, 1979), where n is considered as 1.0, 1.5, and 2.0. Thus, the expression of velocity and hydrodynamic dispersion coefficients are considered as follows:

$$u(x, t) = u_0(a_1 + a_2x) \text{ and } D(x, t) = (D_0 + D^* \tau)(a_1 + a_2x)^n \quad (3)$$

where τ is the tortuosity, $D_0[L^2T^{-1}]$, $D^*[L^2T^{-1}]$ and $u_0[LT^{-1}]$ are respectively constant mechanical dispersion coefficient, molecular diffusion coefficient and velocity in a steady flow domain through a homogeneous porous medium. a_1 is a non-dimensional parameter and $a_2[L^{-1}]$ represents the heterogeneity parameter.

In this study, the source/sink is expressed by single function on space and time-dependent as

that proposed by Kumar et al. (2019):

$$\gamma(x, t) = \gamma_0 p(x) q(t) \tag{4}$$

where γ_0 is the uniform zero-first order production coefficient [$ML^{-3}T^{-1}$].
By substituting Eqs. (2), (3), and (4) into Eq. (1) we get:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \frac{\partial C}{\partial x} - u_0 (a_1 + a_2 x) \right] - \mu C + q_0 p(x) q(t) \tag{5}$$

where $R = \theta + f(\rho_b/\eta) Fk_d$ is the retardation factor and $\mu = \mu_l + \mu_s \rho_b Fk_d$.

Before pollutant sources are injected in the medium, it is supposed to contain a background contamination. This contamination can be expressed as a linear combination of some input contaminant concentration in liquid and solid phases respectively (Chaudhary et al., 2020). In this study, it is assumed that previous concentration in the liquid phase is an arbitrary space variable function, while the input concentration in the solid phase is uniform with distance. The initial condition may be written in general form as follows.

$$C(x, t) = h(x) + K_s^i; \quad x, \geq 0, \quad t = 0 \tag{6}$$

where $h(x)$ is the input liquid phase concentration and K_s^i the input solid phase concentration.

The geological formation of the medium through which the dispersion occurs is considered to be bounded by two parallel planes, e.g. the planes at $x = 0$, $x = l$ with two pollutant sources located at the two planes so that the pollutant enters through the planes (see Fig. (1)).

As the groundwater flows from $x = 0$ to $x = l$, this situation could be referred to advection-dispersion with simultaneous input in the flow direction and against the direction of the flow. In this study, the surface concentrations variables are considered and may be expressed in general form as:

$$C(x, t) = f_1(t), \quad x = 0, \quad t > 0 \tag{7}$$

$$C(x, t) = f_2(t), \quad x = l, \quad t > 0 \tag{8}$$

where $f_1(t)$ and $f_2(t)$ are the amount of pollutant concentration entering through the planes $x = 0$ and $x = l$ respectively. The initial and the boundary conditions Eqs. (6)-(8) are similar to the situation of the diffusion into a plane sheet of material with surfaces, $x = 0$, $x = l$, maintained at constant concentrations C_1 and C_2 respectively, having a general initial heat distribution studied by Cranck (1975).

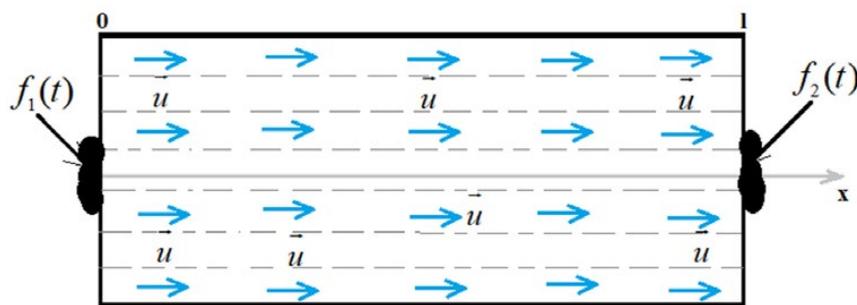


Fig. 1. Graphical representation of the problem

Generally, the analytical solution of the ADE defined in Eqs. (5)-(8) is obtained using the GITT. To apply the GITT, it is necessary to homogenize the boundary conditions as the solutions of non-homogeneous problems based on eigen-function expansions may converge slowly or even exhibit anomalous behaviour, especially in the vicinity of the boundaries (Ozisk, 1980; Almeida & Cotta, 1995; Cotta & Mikhailov, 1997; Liu et al., 2000). The following new independent variable is defined:

$$C(x,t) = f_1(t) + [f_2(t) - f_1(t)] \frac{x}{l} + Q(x,t) \tag{9}$$

where $Q(x,t)$ is the solution of the following problem:

$$\begin{aligned} R \frac{\partial Q}{\partial t} = & D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} - [u_0(a_1 + a_2 x) - na_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1}] \frac{\partial Q}{\partial x} - (u_0 a_2 + \mu_0) Q + q_0 p(x) \\ & - \frac{[f_2(t) - f_1(t)]}{l} [u_0(a_1 + a_2 x) - na_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1}] - (\mu + u_0 a_2) \left\{ f_1(t) + [f_2(t) - f_1(t)] \frac{x}{l} \right\} \\ & - R \left[\frac{df_1(t)}{dt} + \left(\frac{df_2(t)}{dt} - \frac{df_1(t)}{dt} \right) \frac{x}{l} \right] \end{aligned} \tag{10}$$

$Q(x,t)$ have the same forms of boundary conditions as Eqs. (7) and (8) but with the right side now set equal to zero for both equations.

The initial condition of $Q(x,t)$ becomes

$$Q(x,t) = h(x) + K_s^i - f_1(0) - [f_2(0) - f_1(0)] \frac{x}{l}; \quad x \geq 0, \quad t = 0 \tag{11}$$

When solving problem using the GITT, a pair of transforms, namely an integral transform and an inverse transform, has to be established (Almeida & Cotta, 1995; Cotta, 1993; Liu et al., 1998; Suk, 2013). The auxiliary problem must be chosen such that constructing the pair of transforms be simplified and that the solution converges for much lesser number of terms. Bharati et al. (2017) and Pérez Guerrero et al. (2009) proposed to use an eigenvalue problem of SLP with self-adjoin second order operator. The regular SLP chosen for this study is the same as that proposed by (Bharati et al., 2017; Bharati et al., 2018; Bharati et al., 2019) which has the particularity of making concentration converge for the first five number of summation. The selected ODE of the SLP is written as:

$$\frac{d}{dx} \left(e^x \frac{d\varphi}{dx} \right) + (1 + \beta) e^x \varphi = 0 \tag{12}$$

with the following associated two homogeneous first type boundary conditions:

$$\varphi(x = 0) = 0 \tag{13}$$

$$\varphi(x = l) = 0 \tag{14}$$

The trivial solution of this problem is $\varphi = 0$. The nontrivial solutions are called the eigenfunctions belonging to each eigen values β_m , and may be expressed as (Bharati et al., 2017):

$$\varphi_m(x) = \exp(-x/2l) \sin \left[\left(\sqrt{3 + 4\beta_m} / 2 \right) x \right] \quad (15)$$

where the eigen values β_m are given by $\beta_m = \frac{m^2 \pi^2}{l^2} - \frac{3}{4}$ and $m = 1, 2, 3, 4, \dots$

The orthogonality property for the set of linearly independent eigen functions $\varphi_m(x)$ reference to the weight function $\rho(x) = e^x$, associated with Eq. (12) is given by:

$$\int_0^l e^{x/l} \varphi_m(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{mk} N_m \quad (16)$$

where N_m is the norm and δ_{mk} is the Kronecker delta. The norm and the normalized eigen functions $\psi_m(x)$ are respectively given by:

$$N_m = \int_0^l e^{x/l} \varphi_m(x) \varphi_m(x) dx = \frac{l}{2} \quad (17)$$

$$\psi_m(x) = \frac{\varphi_m(x)}{\sqrt{N_m}} \quad (18)$$

Now, the unknown function $Q(x, t)$ is represented as a series expansion in terms of the normalized eigen functions $\psi_m(x)$ as:

$$Q(x, t) = \sum_{m=1}^{M \rightarrow \infty} \psi_m(x) T_m(t) \quad (\text{Inverse}) \quad (19)$$

where $T_m(t)$ is the transformed "potential". Eq. (19) is the inverse transform rule. The corresponding transform rule is obtained by following the procedure of Cotta (1993) and Ozisik (1993) i.e. applying the operator $\int_0^l \rho(x) \psi_m(x) (\bullet) dx$ to both sides of Eq. (10) and using Eq. (19) (the orthogonality property) and Eq. (20) to obtain

$$T_m(t) = \int_0^l \rho(x) \psi_m(x) Q(x, t) dx \quad (\text{Transform}) \quad (20)$$

Substituting this solution in the ADE in Eq. (10), multiplying by $e^x \psi_m(x)$, integrating over the given domain, and using the orthogonality properties in Eq. (17), the result is a system of first order ordinary differential equations, a system of IVP, in matrix form, as:

$$\mathbf{A} \frac{d\mathbf{T}_m(t)}{dt} + \mathbf{B}\mathbf{T}_m(t) = \mathbf{G}_m(t) \quad (21)$$

with the transform initial condition

$$\mathbf{T}_m(0) = \sqrt{2} \int_0^l \left\{ h(x) + K_s^i - f_1(0) - [f_2(0) - f_1(0)] \frac{x}{l} \right\} e^{x/2l} \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) dx \tag{22}$$

where elements of the $M \times M$ matrices \mathbf{A} and \mathbf{B} and the M -length vectors \mathbf{G} are given by:

$$A_{m,k} = \frac{2}{l} R \int_0^l \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(k\pi \frac{x}{l}\right) dx \tag{23}$$

$$\begin{aligned} B_{m,k} = & \frac{2}{l} \int_0^l D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \left[\left(\frac{m^2 \pi^2}{l^2} - \frac{1}{4l^2} \right) \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) + \frac{m\pi}{l^2} \cos\left(m\pi \frac{x}{l}\right) \right] \sin\left(k\pi \frac{x}{l}\right) dx \\ & + \frac{2}{l} \int_0^l \left[u_0(a_1 + a_2 x) - na_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] \left[\frac{m\pi}{l} \cos\left(m\pi \frac{x}{l}\right) - \frac{1}{2l} \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) \right] \sin\left(k\pi \frac{x}{l}\right) dx \\ & + \frac{2}{l} \int_0^l (u_0 a_2 + \mu) \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(k\pi \frac{x}{l}\right) dx \end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned} G_m(t) = & \sqrt{\frac{2}{l}} \int_0^l \left\{ q(t)p(x) - \frac{(f_2(t) - f_1(t))}{l} \left[u_0(a_1 + a_2 x) - na_2 D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^{n-1} \right] - (u_0 a_2 + \mu) \left[f_1(t) + (f_2(t) - f_1(t)) \frac{x}{l} \right] \right. \\ & \left. - R \left[\frac{df_1(t)}{dt} + \left(\frac{df_2(t)}{dt} - \frac{df_1(t)}{dt} \right) \frac{x}{l} \right] \sin\left(m\pi \frac{x}{l}\right) e^{\frac{x}{2l}} \right\} dx \end{aligned} \tag{25}$$

The Fourier coefficients in Eq. (21) are given by:

$$\mathbf{T}_m(t) = \exp(-\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}t) \mathbf{T}_m(0) + \exp(-\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}t) \times \int_0^t \exp(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\tau) \mathbf{A}^{-1} \mathbf{G}(\tau) d\tau \tag{26}$$

The expression of the Fourier coefficients in Eq. (26) is a particular form of that in Eq. (17) of Liu et al. (2000).

Analytical solutions are obtained in Euclidean and fractal framework i.e for $n = 1, 1.5$ and 2 , representing an index of the spatial dependence of the dispersion coefficient in the dispersion theory $D \propto u^n$ as proposed by Freeze & Cherry (1979). As Bharati et al. (2017), Bharati et al. (2018) and Bharati et al. (2019), we found that our analytical solution converges to the designer pattern with the first five terms ($N = 5$) of the Fourier series. Thus, the solution in Fourier series with first five terms may be written as:

$$\begin{aligned} C(x,t) = & f_1(t) + [f_2(t) - f_1(t)] \frac{x}{l} + \sqrt{2} \exp(-x/2) \left[T_1(t) \sin\left(\pi \frac{x}{l}\right) + T_2(t) \sin\left(2\pi \frac{x}{l}\right) + T_3(t) \sin\left(3\pi \frac{x}{l}\right) \right. \\ & \left. + T_4(t) \sin\left(4\pi \frac{x}{l}\right) + T_5(t) \sin\left(5\pi \frac{x}{l}\right) \right] \end{aligned} \tag{27}$$

RESULTS AND DISCUSSION

Verification of the solution

The solute concentration pattern due to two continuous point sources is obtained from the proposed analytical solutions in groundwater finite flow domain and finite temporal domain as mentioned in the previous section. For short special domain, Chaudhary et al. (2020) proposed to use $\exp(-\sec(\lambda x))$ as distribution of background concentration in the liquid phase because, its decreasing rate is much slower than exponential and could well represent slow movement of groundwater.

The accuracy of the analytical solutions is evaluated using the following solute transport problem

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (a_1 + a_2 x)^n \frac{\partial C}{\partial x} - u_0 (a_1 + a_2 x) \right] - \mu C + \gamma_0 p(x) q(t) \quad (28)$$

$$C(x, t) = C_i \exp[-\sec(\lambda x)] + K_s^i; \quad x, \geq 0, \quad t = 0 \quad (29)$$

$$C(x, t) = C_1 \exp(-\lambda_1 t), \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (30)$$

$$C(x, t) = C_2 \exp(-\lambda_1 t), \quad x = l, \quad t > 0 \quad (31)$$

where $C_i [ML^{-3}]$ is the uniform input liquid phase concentration, $C [ML^{-3}]$ and $C_2 [ML^{-3}]$ are the uniform sources concentration at the origin and end of the domain respectively, and $\lambda_1 [T^{-1}]$ is the flow resistance coefficient.

We considered a finite spatial and temporal domain defined as $0 \leq x(m) \leq 1$ and $0 \leq t(year) \leq 7$. The solute concentration strength is evaluated from the analytical solutions given in Eq. (27) and the five time-dependent Fourier coefficients are given by Eq. (20). If the solute distribution coefficient K_d is negligible (i.e. $K_d \approx 0$), there is no interaction between the solute and soil, and the retardation factor R becomes equal to water content θ , which is less than 1. So, the retardation factor R becomes less than 1 for the case mentioned above. This indicates that only a fraction of liquid phase concentration participates in the transport mechanism. The input parameters values used are given by Singh & Kumari (2014) $C_1 = 1.0 \text{ mg/L}$, $C_i = 0.01 \text{ mg/L}$, $K_s^i = 0.01 \text{ mg/L}$, $u_0 = 0.01 \text{ m/year}$, $D_0 = 0.01 \text{ m}^2/\text{year}$, $a_1 = 1$, $D^* = 0.002 \text{ m}^2/\text{year}$, $f = 0.8$, $K_d = 0.01$, $s = 0.01 \text{ year}^{-1}$, $\mu_l = 0.0027 \text{ year}^{-1}$, $\mu_s = 0.13 \text{ year}^{-1}$, $a_2 = 0.8 \text{ m}^{-1}$, $\gamma_0 = 0.02 \text{ mg/L year}$. The uniform input concentration in the end of the domain is set to be $C_2 = 0.5 \text{ mg/L}$. The space variation function of the source term is also considered as $a = 3 \text{ m}^{-1}$. Three geological formations are considered here with average porosity η and bulk density ρ_b as follows (Manger, 1963; Freeze & Cherry, 1979): $\eta = 0.3$ (sandstone), 0.1 (shale), 0.5 (gravel); $\rho_b = 2.49$ (sandstone), 2.39 (shale), 2.68 (gravel).

Figures (2), (3) and (4) plot the curves showing the solute concentration distribution in the reservoir for the three types of geological formations at $t = 1, 2, 4$ and 6 years for $n = 1$, $n = 1.5$ and $n = 2$ respectively. The solid lines represent the curves of analytical solutions and the circles symbol, those of numerical solutions. It is found that for each value of n and both geological formations, at $t = 1 \text{ year}$ in this example, the solute profile is qualitatively similar to that predicted with standard advection-dispersion models. After a certain time, the solute concentration increases with traveling distance from approximative value of 1.0 mg/L at $x = 0 \text{ m}$ to a maximum value of concentration, then decreases back to 0.5 mg/L at the end of

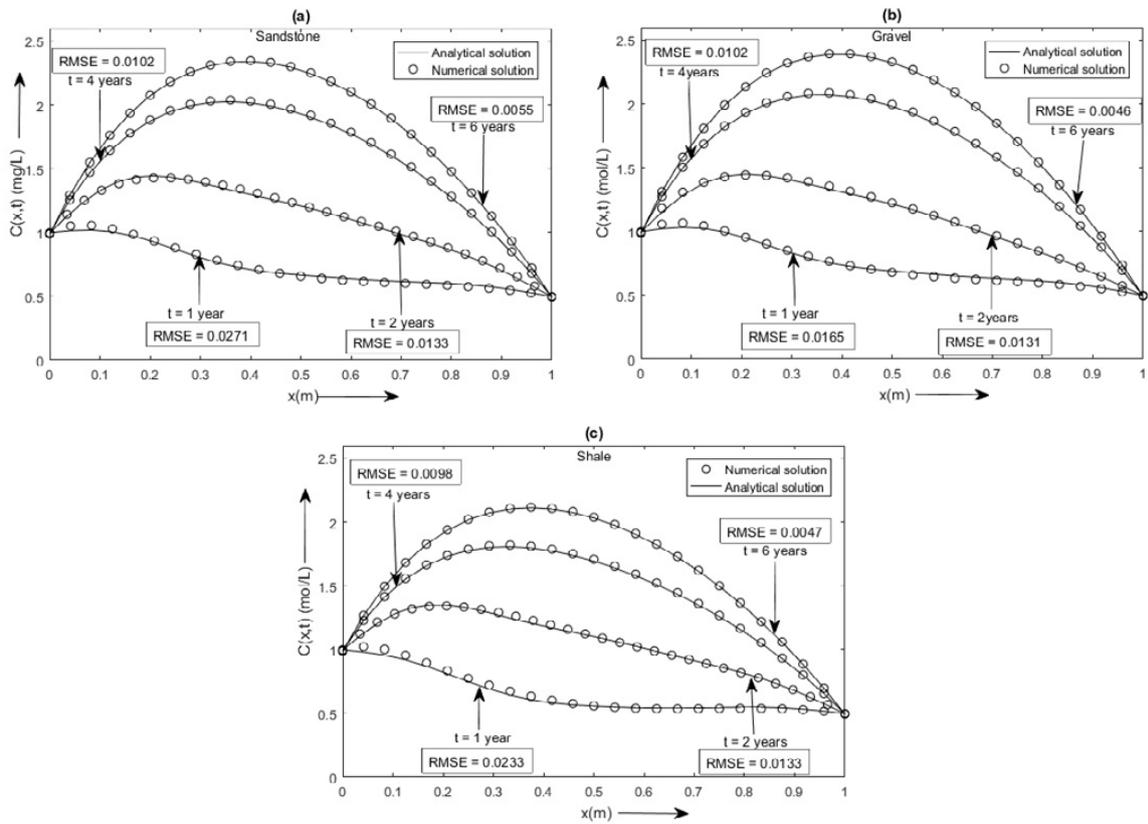


Fig. 2. Comparison of analytical and numerical solutions for contaminant transport with two input sources at four different times for $n = 1$ obtained for different geological formations.

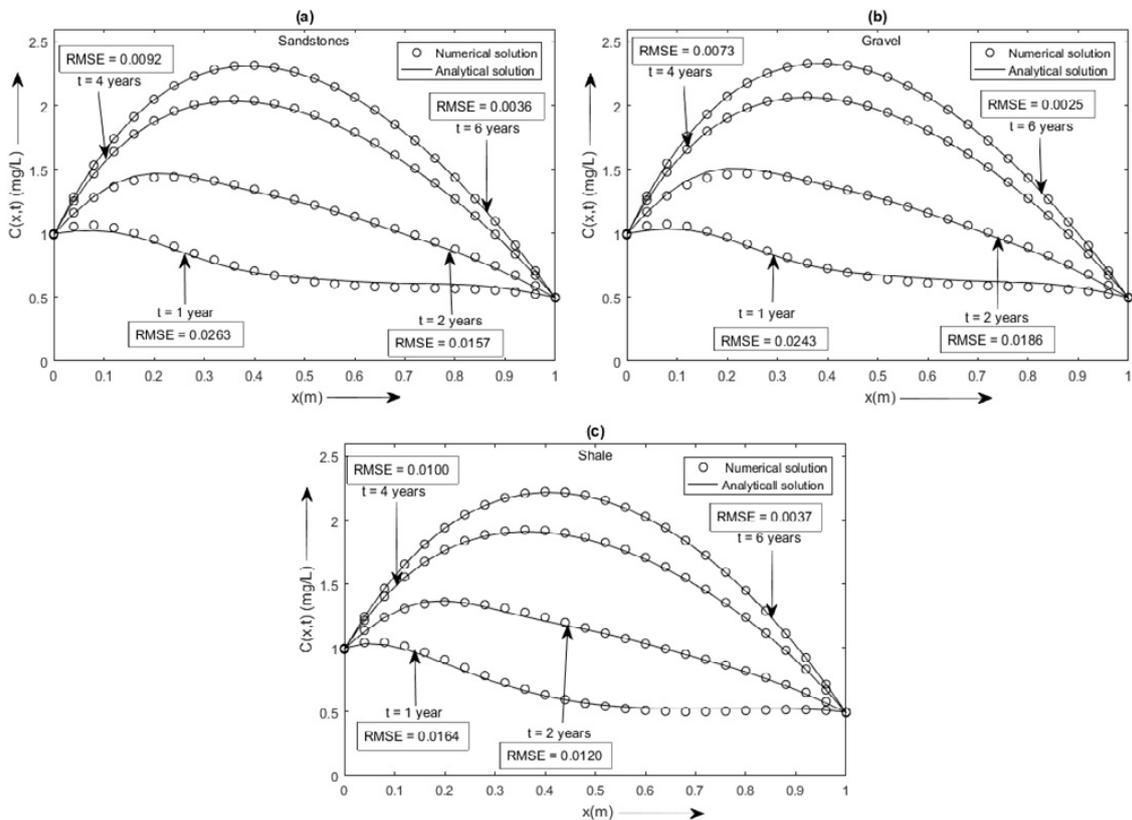


Fig. 3. Comparison of analytical and numerical solutions for contaminant transport with two input sources at four different times for $n = 1.5$ obtained for different geological formations.

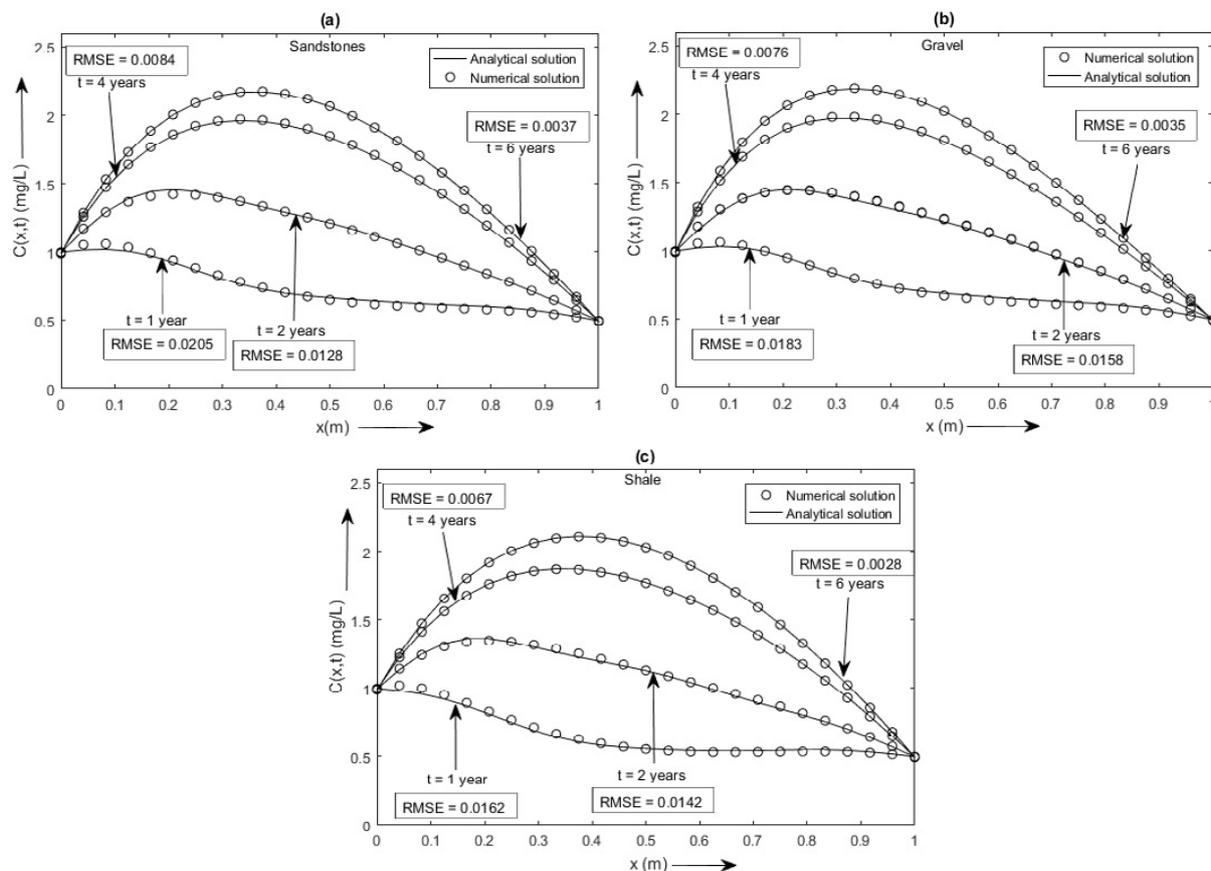


Fig. 4. Comparison of analytical and numerical solutions for contaminant transport with two input sources at four different times for $n = 2$ obtained for different geological formations.

the domain. This build-up of concentration is due to the concentration effect of the additional source term in the reservoir that decreases with distance. The solute build-up depends on the geological formation and on the value of n , for a fixed time. For example, a comparison of Figs. 2(a)-4(c) show that the peak of concentration decreases with the increasing value of n in both geological sites. The distance concerned by the solute build-up is very important and increases with increasing time, also, the maximum of concentration value gradually increases with increasing time. The solute build-up in a large distance is due to the presence of two contaminant sources, each acting separately at the boundary of the reservoir.

The analytical solutions in each case are also compared with the respective numerical solutions obtained using MATLAB *pdepe* solver. The results show that in each geological formation, both solutions are in good agreement in both forms of dispersity, as illustrated by the curves and the value of Root Mean Square Error (RMSE). Hence, the higher values of RMSE are observed for $n = 1.5$. It can be concluded that analytical solutions converge well with five terms of summation.

Pollutant concentrations in both geological formations are compared for each value of n in Figure 5. The curves are plotted at $t = 2$ years and $t = 4$ years with the same input as in Figs. (2)-(4). Figure 5 depicts that for $n = 1$ and 1.5 , the concentration level is higher in gravel with bulk density ($\rho_b = 2.68$) compared to sandstone ($\rho_b = 2.49$) and shale ($\rho_b = 2.39$) at each of the position and time. While for $n = 2$ at the fixed time $t = 2$ years, the concentration values of gravel formation are higher at each of the position for this domain i.e., $0 \leq x \leq 0.2$ m but from 0.2 m to the end of the domain, the concentration values are higher for the sandstone formation. At this time, the shale geological formation has the lower values of pollutant concentration in all the domain. At fixed time $t = 4$ years, the pollutant concentration values are higher in

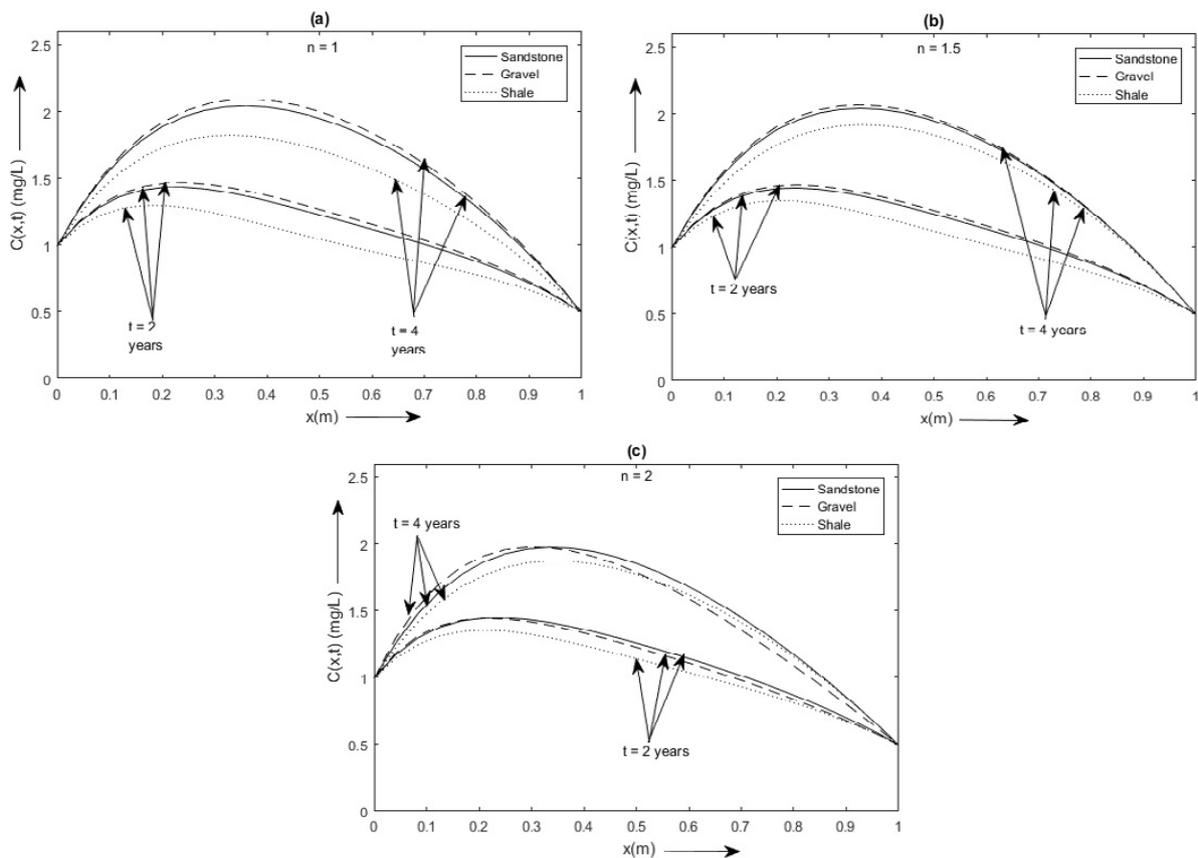


Fig. 5. Comparison of solute concentration at different times for different geological formations

gravel in comparison to sandstone for $0 \leq x \leq 0.35$ m and than shale formation for this domain $0 \leq x \leq 0.55$ m. At this time, the concentration values in sandstone are higher than those of shale formation at each of the position of the domain. We also note that when n increases, the difference on pollutant concentration levels in both formation decreases.

Illustration of the model

In the last decades, human activities and industrial development of industrialization these last decades have increased considerably the number of pollution sources in the environment, particularly in the groundwater. Some contaminants wastes are evacuated by septic tanks, other substances as petroleum are transported via pipes. These sources can be cause multiple contaminations of a medium in different positions. Although literature contains many studies referring to multiples contaminants input sources, few of them considered the effect of a variety of boundary inputs (e.g. Mazarheti, 2013). But no one has considered the input sources localized at the origin and end of the domain. The analytical solutions obtained in this study are illustrated for contaminant transport with source-production decay which have many real world hydrological applications and are large importance in soil contamination. This is the case of sequential decay of multi-species contaminants as nitrogen, chlorinated solvent, and radionuclide.

Figure 6 illustrates the pollutant distribution at $t = 1, 3, 5, 10$ and 50 years in heterogeneous medium for $n = 1.5$. Contaminant concentration pattern is investigated for sandstone geological formation ($\eta = 0.3$, $\rho_b = 2.49$). Five pollutant input distributions with production-decay are used to illustrate the effect of input source to the solute concentration pattern. The first one considers

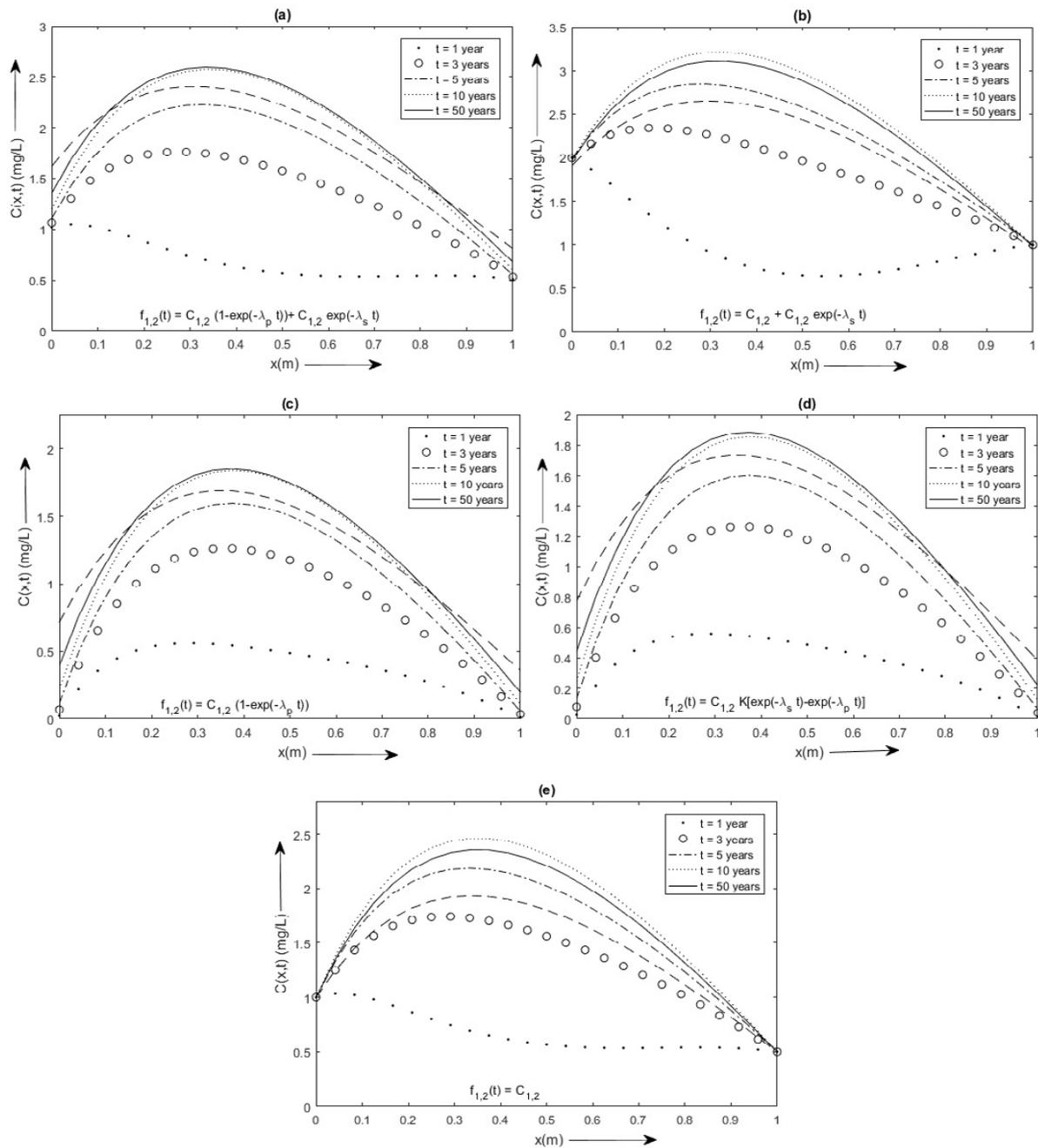


Fig. 6. Solute distribution pattern in sandstone formation for different input distributions for $n = 1.5$

the linear combination of exponential inlet distribution ($f_{1,2}(t) = C_{1,2}(1 - e^{-\lambda_p t}) + C_{1,2} e^{-\lambda_s t}$), where $\lambda_p [T^{-1}]$ and $\lambda_s [T^{-1}]$ represent the production and decay constant respectively. For this input distribution, it is possible to obtain well known input distributions for particular values of the production/decay constants.

- Case 1: For $\lambda_p = 0$ and $\lambda_s \rightarrow \infty$ we have $f_{1,2}(t) = C_{1,2}$
- Case 2 : For $\lambda_p \rightarrow \infty$, we obtain $f_{1,2}(t) = C_{1,2} + C_{1,2} e^{-\lambda_s t}$
- Case 3 : For $\lambda_p \rightarrow 0$, we obtain $f_{1,2}(t) = C_{1,2}(1 - e^{-\lambda_p t})$

The last input distribution investigated consider a consecutive reaction at the source given by $f_{1,2}(t) = C_{1,2}K(e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t})$, where K represents the global kinetic rate. This solution can be particularly useful for waste radioactive decay at the source or PCE (tetrachloroethylene) to TCE (trichloroethylene) degradation in soils (Moranda, 2018).

The input parameters values used, and the other distribution function are the same as in Figure (3). Additionally, the following values are taken for decay and production constants $\lambda_p = 0.025 \text{ year}^{-1}$, $\lambda_s = 0.002 \text{ year}^{-1}$ and the kinetic rate $K = 1.25$.

It is clearly observed that, at $t = 1 \text{ year}$ for this example, the pollutant concentration strength exhibits different patterns for the various inputs boundary distribution. But after certain a period, the pollutant concentration starts with a value imposed by the input at the first end of the reservoir i.e., $x = 0$ and concentration increased with one additional source function in the aquifer. The maximum value of pollutant concentration moved from the additional source function; after the contaminant concentration decreased with distance to the concentration value at the end of the domain given by the input distribution at this position. However, the higher pollutant concentration values are observed for the input distribution $f(t) = C + C e^{-\lambda_s t}$ and the lower values for $f(t) = C(1 - e^{-\lambda_p t})$. The figure clearly demonstrate that the pollutant concentration strength is significantly affected by the input boundary distributions.

Figures 7.a and 7.b show the concentration breakthrough curves for $n = 1.5$ at $x = 0.35 \text{ m}$ and $x = 0.8 \text{ m}$ respectively for the different input distributions. The input parameters remain the same as in Figure (3). It is observed that at these positions, the concentration in both distributions increases sharply from zero value at $t = 0$ up to a maximum value reached between 5 and 10 years, and it starts decreasing gradually with time. The increasing and the decreasing rates depend on the pollutant input distribution. For example, we can observe that the increasing and decreasing rates are higher for $f(t) = C + C e^{-\lambda_s t}$ in comparison with other distributions. For $f(t) = C(1 - e^{-\lambda_p t})$, the pollutant concentration increases slowly compared to the other distributions, and the decreasing rate is very low. However, the higher concentration values are observed at $x = 0.35 \text{ m}$. These curves again clearly illustrate that the concentration strength is significantly affected by the form of the input distribution.

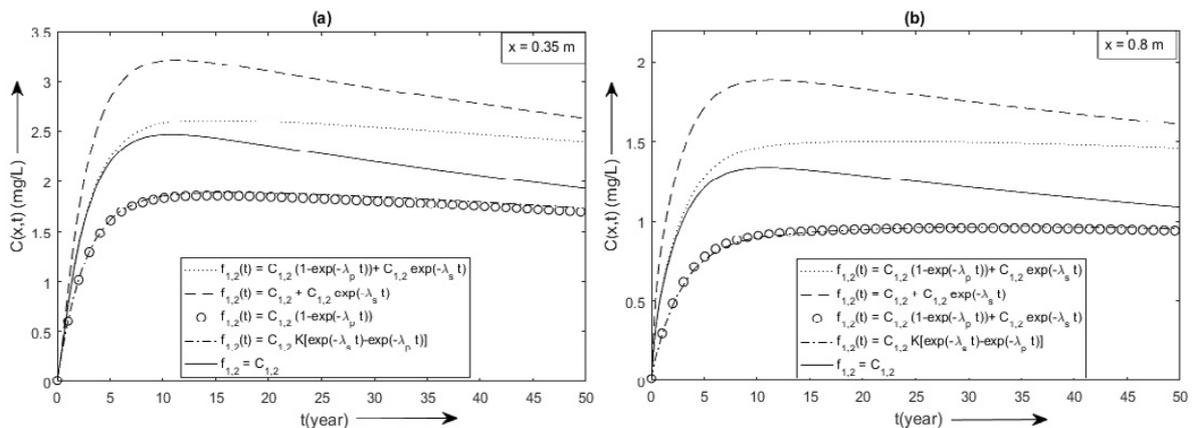


Fig. 7. Breakthrough curves obtained in sandstone formation for $n = 1.5$ for different input distributions.

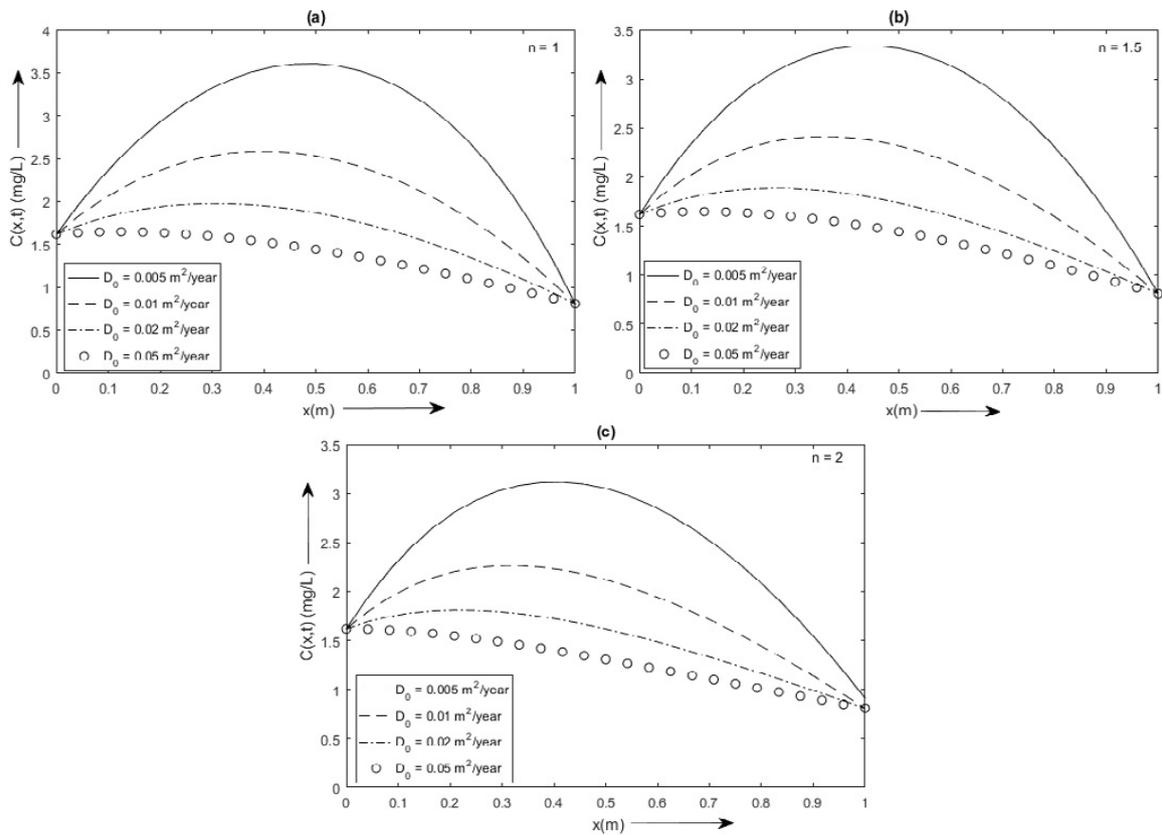


Fig. 8. Effect of dispersion coefficient on solute concentration distribution in presence of two sources localized at $x = 0$ and $x = 1$ km.

The pollutant concentration profile is depicted for four different dispersion profiles ($D_0 = 0.05$, 0.02 , 0.01 and $0.005 \text{ m}^2 / \text{year}$) with fixed velocity and particular time $t = 50 \text{ years}$ as shown in the Fig.8. Figs. 8(a), 8(b) and 8(c) demonstrate this strength for $n = 1$, 1.5 and 2 respectively.

The linear combination of exponential inlet distribution is considered with input parameters remaining the same as in Figs. 2, 3 and 4 respectively. The curves show that, for both values of dispersion coefficient, the pollutant concentration was approximated as $1.65 \text{ mg} / \text{L}$ at the inlet location of the reservoir and concentration increased to a maximum value depending on the value of n because of additional source function. After, the pollutant concentration decreases when distance increases until reaching a fixed concentration value at the end of the reservoir. The peak concentration in each case is large because of the presence of the two contamination sources. The increasing rate is higher for lower values of dispersion coefficient in comparison with higher values of dispersion coefficient while, the decreasing rate is lower for higher values of dispersion coefficient in comparison to lower values of dispersion. For a fixed value of n , the concentration values at each of the intermediate position increases with the decreasing value of the dispersion coefficient. Increasing the dispersion coefficient will decrease the maximum value of solute concentration. Overall, the peak pollutant concentration for various profiles in the front is large, moved from one additional source function and decreases towards the exit boundary. Also, the concentration values at intermediate positions depend on the dispersion coefficient as well as on the value of n . It is clear that the dispersion process plays an important role for the determination of the concentration distribution in the presence of two input sources.

Figure 9 elucidates the effect of time dependence of production term on the concentration pattern in the medium with square root dispersivity ($n = 1.5$) in sandstone geological formation

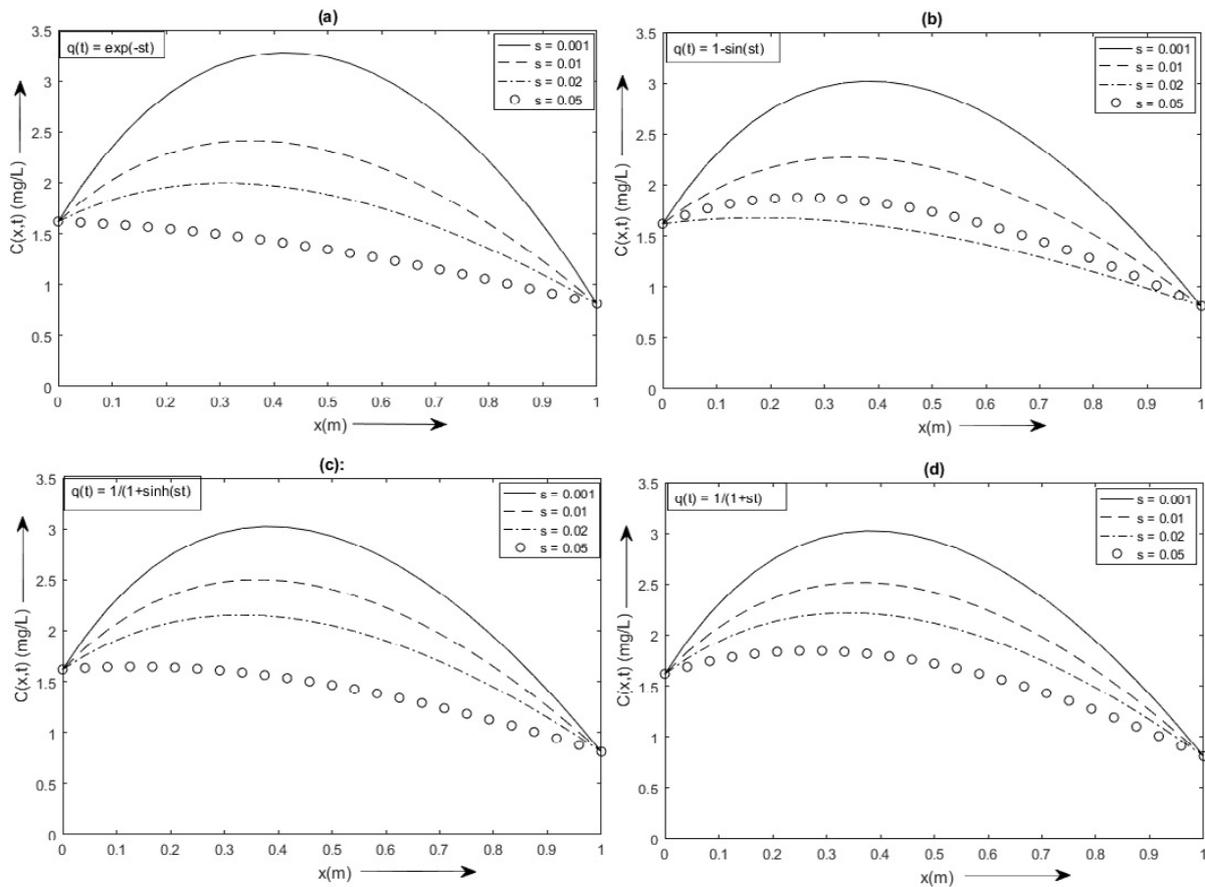


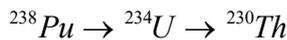
Fig. 9. Effect of source term and unsteady parameter on contaminant concentration

for a fixed time $t = 5$ years. Four expressions of time decreasing functions for the production term are used to illustrate this effect; the exponential decreasing function ($q(t) = \exp(-st)$), a sinusoidal function ($q(t) = 1 - \sin(st)$), an hyperbolic function ($q(t) = \frac{1}{1 + \sinh(st)}$) and $q(t) = \frac{1}{1 + st}$. The solute concentration profiles are obtained with the same parameters values as in Fig. (3.a). For all the profiles, the concentration starts with a constant value at the origin of the domain, increases with distance to a maximum value, then decreases to a minimum value at the end of the domain. The pollutant concentration values at the boundary of the domain depend only on the expression of the time dependent function. The figure depicts that the concentration level at different positions is attenuated with the increasing value of the parameter s in both the expressions of time dependent source term except for the sinusoidal function. For this function, the concentration level decreases with the increasing value of s until a certain value and then begins to increase with the increasing value of s . This result can be attributed to the periodical behavior of the sinusoidal function, causing the concentration level to depend to the frequency s of the sinusoidal function. The curves depicts also that the variation of the parameter s produces an important variation on pollutant concentration level in the case of sinusoidal and exponential decaying functions in comparison with the other.

Example of application

Many contaminant sources are present in the environment and some of them are subject of studies due to their importance or the damage they can cause to living organisms. These contaminant sources are of various nature and origin, among which the radionuclides. Several

radionuclides are members of a radionuclide decay chain. A lot of researchers have developed various models involving sets of advective-dispersive transport equations coupled by first-order decay (van Genuchten, 1985; Suk, 2013; Chen et al., 2019; Yu et al., 2019) but analytical solutions in closed form that consider both production and decay at the source are scarcely available (Paladino et al., 2018; Moranda et al., 2018; Sanskrityayn & Kumar, 2017). To illustrate the model, the following example of application has been considered: a transport of a second member of radionuclide decay chain during its movement into groundwater with two sources



In the chosen example, the radionuclide source undergoes at the same time a decay and a production so that the boundary functions in Eqs. (7) and (8) are written as

$$f_1(t) = C_1 K (e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t}) \quad (32)$$

$$f_2(t) = C_2 K (e^{-\lambda_s t} - e^{-\lambda_p t}) \quad (33)$$

where λ_s and λ_p are respectively the decay and production constant [T^{-1}], K is the kinetic rate.

When studying the distribution of radionuclides in a medium, we are most often interested in their environmental impact, especially in the effective dose that human beings can absorb. Based on the studied model, one can determine the radionuclide absorbing dose from ingestion of drinking water.

The committed effective dose per person from a given radionuclide through groundwater can be calculated by:

$$\text{Committed effective dose} = IR \times C \times DF \quad (34)$$

where IR is the rate of intake (m^3 / day), C is the radioactivity concentration in groundwater of the nuclide (Bq / m^3), and DF is the ingestion dose coefficient of the nuclide for the adult age group (Sv / Bq).

Input parameters, used here, are kept from (Carntrell et al., 2003; ICRP, 2012; Chen et al., 2019; Chaudhary et al., 2020) except for input concentration value and, they are summarized in Table 1.

Figure 10.a depicts the radionuclide concentration as a function of time at different distances from the origin ($x = 50$, $x = 100$ and $x = 200$ m) for different geological formations. The concentration of ^{234}U at each of the position increases in the early time period and starts decaying after a certain year depending on the geological formation and the position. However, the concentration of ^{234}U maintains the increasing trends up to 10,000 years. The gravel formation has the higher radioactive concentration than the two others geological formations. The highest value of concentration is observed for $x = 200$ m at $t = 1,000$ years with the value of 2.1×10^9 Bq / m^3 . It could be seen that the radioactivity concentration level decreases with position and then increases due to the second radioactive source localized at the end of the domain.

Figure 10.b depicts the time history of radionuclide dose at different distances from the origin ($x = 50$, $x = 100$ and $x = 200$ m) for different geological formations. A comparison of Figs. 10.a with 10.b shows that the amplitude of the doses at different positions and for each geological formation follows the same sequence of the magnitude of the corresponding concentration. As the radioactive concentration, the higher dose values are obtained for gravel formation for an

Table 1. Input parameters for uranium

Parameters	Units	Values
Water content, θ	m^3 / m^3	0.4
Distribution coefficient, K_d	m^3 / kg	0.2
Porosity, η	-	Sandstone, 0.3
		Shale, 0.1
		Gravel, 0.5
Bulk density, ρ_b	Kg / m^3	Sandstone, 2490
		Shale, 2680
		Gravel, 2390
Effective dispersion coefficient, D_0	$m^2 / year$	1000
Groundwater velocity, u_0	$m / year$	100
Radioactive decay constant, μ	$year^{-1}$	0.0000028
Production constant, λ_p	$year^{-1}$	0.0089
Source decay constant, λ_s	$year^{-1}$	0.0010028
Initial amount of radionuclide, C_1	Bq / m^2	10^{15}
Initial amount of radionuclide, C_2	Bq / m^2	5×10^{14}
Rate of intake, IR	m^3 / day	0.005
Ingestion dose coefficient, DF	Sv / Bq	4.9×10^{-8}

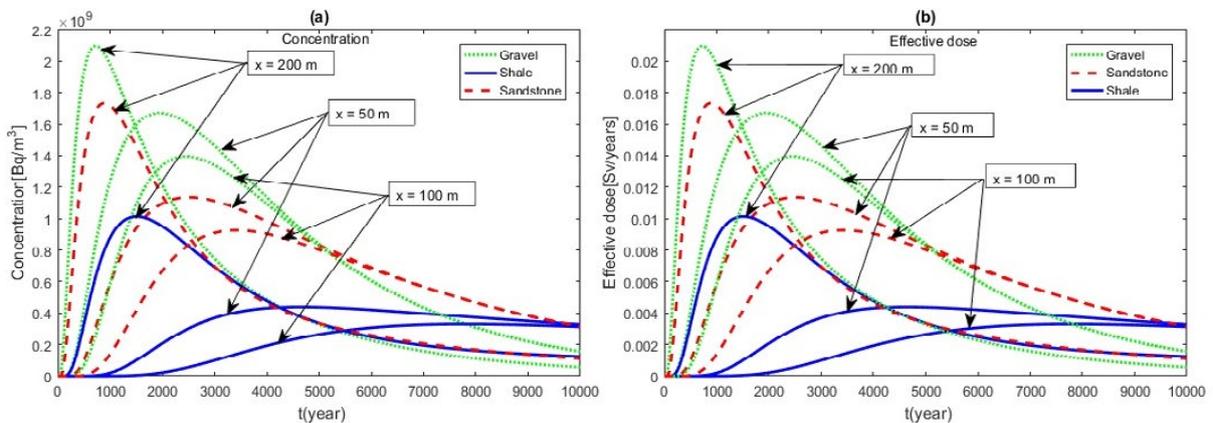


Fig. 10. (a) Time history radionuclide at different distances from the origin ; (b) Effective dose of radionuclide acquired through drinking groundwater pathway at different distances from the origin

adult located at $x = 200\ m$ from the origin. At that location, the highest value of the amplitude of the dose is about $0.021\ Sv / year$.

The smallest value of the dose is obtained for the shale formation at $100\ m$ of the origin. However, for both geological formations and at both positions, the annual doses are all above the WHO guideline of $0.1\ mSv/year$ for the drinking water pathway. The generalized analytical solutions can quickly and accurately predict the one-dimensional solute (as radionuclide) migration and assess the radiological impact posed by radionuclides in the environment as a result of leakages from a nuclear waste repository or accidental discharge from a nuclear facility.

COCLUSION

An analytical solution of 1-D ADE solute transport with distance dependent coefficients in a sorbing finite groundwater reservoir with an additional source-sink term was derived. The transport problem considered an hypothetical two continuous pollutant sources localized at the origin and at end of the domain. The velocity was considered as a linear function of space function while the dispersion coefficient was considered as a n^{th} power of the velocity. Analytical solution is derived via the GITT using an advection-dispersion SLP with a new self-adjoint operator. The effect of some parameters on the equation was investigated with the help of graphs. The results show that for such situations, the concentration increases in the direction of flow, reaching a peak of concentration, then decreases with distance because of the additional source function which decreases with position. The peak concentration is large due to the presence of two pollutant input sources at the boundary of the reservoir. The concentration levels in the reservoir depend on the geological formation and the degree of heterogeneity (value of n), with the highest value obtained for $n = 1$. Overall, by varying the input boundary conditions, the values of n , the dispersion coefficient, the value of uniform source term and the geological formation a set of concentration profile can be generated. The accuracy of the calculated analytical contaminant strength is analysed with their corresponding numerical results obtained by MATLAB *pdepe Solver*, which were found in acceptable compliance with each other for both values of n . The obtained analytical solution could be useful for estimating the transport of contaminant in heterogeneous and homogeneous, sorbing groundwater reservoir with two sources of contaminations. Furthermore, it can be recommended as a tool for assessing human risk by drinking water as illustrated by the example of application studied. In the future, we intent to address the problem for the case of unsteady parameters but also to extend the study to the case of several contaminants sources through arbitrary time-dependent emission rate patterns.

ACKNOWLEDGMENTS

The first author acknowledges support by the Center of Excellence of Information and Communication Technologies (C.E.T.I.C) and the Department of Physics of the University of Yaoundé 1. The content of this manuscript does not reflect the views of the agencies and no official endorsement should be inferred.

GRANT SUPPORT DETAILS

The present research did not receive any financial support.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that there is not any conflict of interests regarding the publication of this manuscript.

LIFE SCIENCE REPORTING

No life science threat was practiced in this research.

REFERENCES

Almeida, A. R. and Cotta, R. M. (1995). Integral transform methodology for convection-diffusion problems

- in petroleum reservoir engineering. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 38(18); 3359-3367.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2017). Analytical solution of advection diffusion equation with spatially dependent dispersivity. *J. Eng. Mech.*, 143(11); 1-11.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2018). Analytical solutions for solute transport from varying pulse source along porous media flow with spatial dispersivity in fractal & Euclidean framework. *Eur. J. Mech. B Fluids*, 72; 410-421.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2019). Analytical solution for solute transport from a pulse point source along a medium having concave/convex spatial dispersivity within fractal and Euclidean framework. *J. Earth Syst. Sci.*, 128(203).
- Carnotrell, K. J., Serne, R. J. and Last, G. V. (2003). Hanford contaminant distribution coefficient database and users guide. U.S. department of Energy under contract DE-AC06-76RL01830, Pacific Northwest National laboratory Richland Washington 99352. PNNL-13895 Rev. 1.
- Chaudhary, M., Kumar, Thakur, C. and Kumar Singh, M. (2020). Analysis of 1-D pollutant transport in semi-infinite groundwater reservoir. *Environmental Earth Sciences* (2020) 79(24).
- Chen, J. S., Chen, J. T., Liu, C. W., Liang, C. P. and Lin, C. W. (2011). Analytical solutions to two-dimensional advection-dispersion equation in cylindrical coordinates in finite domain subject to first- and third-type inlet boundary conditions. *J. Hydrol.*, 405; 522-531.
- Chen, J. S. and Liu, C. W. (2011). Generalized analytical solution for advection-dispersion equation in finite spatial domain with arbitrary time-dependent inlet boundary condition. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 15(8); 2471-2479.
- Chen, J. S., Liang, J. P., Chang, C. H. and Ming-Hsien (2019). Wan simulating three-dimensional plume migration of a radionuclide decay chain through groundwater. *Energies*, 2019 12(3740).
- Cotta, R. M. (1993). *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, Boca Raton, FL.
- Cotta, R. M. and Mikhailov, M. D. (1997). *Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computations*. Wiley-Interscience, New York (1997).
- Crank, J. (1975). *The Mathematics of Diffusion*. Oxford Univ. Press London, 2nd ed.
- Freeze, R. A. and Cherry, J. A. (1979). *Groundwater*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- ICRP. *Compendium of Dose Coefficients based on ICRP Publication 60*; ICRPP ublication: Ottawa, ON, Canada, 2012.
- Kumar, A. and Yadav, R. R. (2014). One-dimensional solute transport for uniform and varying pulse type input point source through heterogeneous medium. *Environmental technology*.
- Kumar, R., Chatterjee, A., Singh, M. K. and Singh, V. P. (2019). Study of solute dispersion with source/sink impact in semi-infinite porous medium. *Pollution*, 6(1); 87-98.
- Liu, C., Ball, W. P. and Ellis, J. H. (1998). An analytical solution to one-dimensional solute advection-dispersion equation in multi-layer porous media. *Transp. Porous Media*, 30; 25-43.
- Liu, C., Szecsody, J. E., Zachara, J. M. and Ball, W. P. (2000). Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. *Adv. Water Resour.*, 23; 483-492.
- Manger, G. E. (1963). Porosity and bulk density of sedimentary rocks. U.S. Atomic Energy Commission USGPO, Washington, D.C.
- Mazarheti, M. Samani, J. M. V. and Samani, H. M. V. (2013). Analytical solution to one-dimensional advection-diffusion equation with several point sources through arbitrary time-dependent emission rate patterns. *J. Agr. Sci. Tech.*, 15; 1231-1245.
- Moranda, A., Cianci, R. and Paladino, O. (2018). Analytical solutions of one-dimensional contaminant transport in soils with source production-decay. *Soil Syst.*, 2018, 2(40).
- Ozisik, M. N. (1980). *Heat Conduction*. Wiley, New York.
- Ozisik, M. N. (1993). *Heat Conduction*. John Wiley and Sons Inc., New York.
- Pang, L., Hunt, B., 2001. Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model. *J. Contam. Hydrol.*, 53 (12); 2139.
- Park, E. and Zhan, H. (2001). Analytical solution of contaminant transport from one-, two-, and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. *J. Contam. Hydrol.*, 53; 41-61.
- Pérez, Guerrero, J. S., Pimentel, L. C. G., Skaggs, T. H. and van Genuchten, M. Th. (2009). Analytical solution of the advection-diffusion transport equation using a change-of-variable and integral transform technique. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 52(1314); 3297-3304.
- Pérez, Guerrero, J. S. and Skaggs, T. H. (2010). Analytical solution for one-dimensional advection-dispersion transport equation with distance-dependent coefficients. *J. Hydrol.*, 390 (2010) 5765.
- Paladino, O., Moranda, A., Massabò, M. and Robbins, G. A. (2018). Analytical Solutions of Three-Dimensional Contaminant Transport Models with Exponential Source Decay. *Groundwater*, 2018 56; 6-108..

- Sanskritayn, A. and Kumar, N. (2016). Analytical solution of advection-diffusion equation in heterogeneous infinite medium using Green's function method. *J. Earth Syst Sci.*, 125(8); 1713-1723.
- Sanskritayn, A., Suk, H. and Kumar, N. (2017). Analytical solutions for solute transport in groundwater and riverine flow using Green's Function Method and pertinent coordinate transformation method. *J. Hydrol.*, 2017, 547; 517-533.
- Sanskritayn, A., Singh, V. P., Bharati, V. K. and Kumar, N. (2018). Analytical solution of two-dimensional advection-dispersion equation with spatio-temporal coefficients for point sources in an infinite medium using Green's function method. *Environ. Fluid Mech.*, 18; 739-757.
- Serrano, S. E. (1992). The form of the dispersion equation under recharge and variable velocity, and its analytical solution. *Water Resour. Res.*, 28(7); 1801-1808.
- Sim, Y. and Chrysikopoulos, C. V. (1996). One-dimensional virus transport in porous media with time-dependent inactivation rate coefficients. *Water Resour. Res.*, 32(8); 2607-2611.
- Singh, M. K. and Kumari, P. (2014). Contaminant concentration prediction along unsteady groundwater flow. In: Basu SK, Kumar N (eds) *Modelling and simulation of diffusive processes*. Springer, Cham, 257-275.
- Singh, M. K. and Das, P. (2015). Scale dependent solute dispersion with linear isotherm in heterogeneous medium. *J. Hydrol.*, 520; 289-299.
- Skaggs, T. H. and Leij, F. J. (2002). Solute Transport: Theoretical Background. In J. H., Dane, C. G. Topp (Eds), *Method of soil analysis, Part 4 Physical methods*, SSSA Books series, 5; 1353-1380, SSSA Madison, WI (Chapter 6.3).
- Skaggs, T. H., Jarvis, N. J., Pontedeiro, E. M., van Genuchten, M. Th. and Cotta, R. M. (2007). Analytical advection-dispersion model for transport and plant uptake of contaminants in the root zone. *Vadose Zone J.*, 6(1).
- Su, N., Sander, G. C., Liu, F. and Anh, Barry, D. A. (2005). Similarity solutions for solute transport in fractal porous media using a time- and scale-dependent dispersivity. *Applied Mathematical Modelling*, 29(9); 852-870.
- Suk, H. (2013). Developing semi-analytical solutions for multispecies transport coupled with a sequential first-order reaction network under variable flow velocities and dispersion coefficients. *Water Resour. Research*, 49; 3044-3048.
- Thakur, C. K., Chaudhary, M., van der Zee S. E. A. T. M. and Singh, M. K. (2019). Two-dimensional solute transport with exponential initial concentration distribution and varying flow velocity. *Pollution*, 5(4); 721-737.
- Van Genuchten, M. Th. (1981). Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay. *J. Hydrol.*, 49(3-4); 213-233.
- Van Genuchten, M. Th. and Alves, W. J. (1982). Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. *US Dept. Ag. Tech. Bull. N°*. 1661; 1-51.
- Van Genuchten, M. Th. (1985). Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions. *Comput. Geosci.*, 11; 129-147.
- Yadav, R. R. and Kumar, L. K. (2019). Solute transport for pulse type input point source along temporally and spatially dependent flow. *Pollution*, 5(1); 53-70, Winter 2019.
- Yates, S. R. (1992). An analytical solution for one-dimensional transport in porous media with an experimental dispersion function. *Water Resources Research*, 28(8); 2149-2154.
- Yu, C., Zhou, M., Ma, J., Cai, X. and Fang, D. (2019). Application of the homotopy analysis method to multispecies reactive transport equations with general initial conditions. *Hydrogeology Journal*, <https://doi.org/10.1007/s10040-019-01948-7>.
- Zhan, H., Wen, Z., Huang, G. and Sun, D. (2009). Analytical solution of two dimensional solute transports in an aquifer-aquitard system. *J. Contaminant Hydrol.*, 107; 162-174.
- Zoppou, C. and Knight, J. H. (1997). Analytical solutions for advection and advection diffusion equation with spatially variable coefficients. *Journal of Hydraulic Engineering*, 123; 144-148.





Application of the Multilayer Analysis to Contaminant Transport along Porous Media Flow with Variable Coefficients and two-input Sources

Thomas Tjock-Mbaga^{1✉*} | Ali Zarma² | Patrice Ele Abiama^{1,3} | Jean-Marie Ema'a Ema'a⁴ | Germain Hubert Ben-Bolie¹

1. Laboratory of Nuclear Physics, Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaounde I, P.O. Box 812, Cameroon
2. Department of physics, University of Maroua, P.O. Box 814, Maroua Cameroon
3. Nuclear Technology Section, Energy Research Laboratory, Institute of Geological and Mining Research, Yaounde, Cameroon
4. Higher Teacher Training College, Department of physics, University of Bertoua, P.O. Box 652, Cameroon.

Article Info

Article type:
Research Article

Article history:
Received: 26.06.2022
Revised: 10.09.2022
Accepted: 22.10.2022

Keywords:
Advection-dispersion
Multilayer model
Laplace transform
Two sources
Finite domain

ABSTRACT

This study presents a new approach to solve the one-dimensional solute transport equation with variable coefficients and two input sources in a finite porous media. The medium is divided into m-layers porous media with constant averages coefficients in each transport problem. The transport equations in layer $i-1$ and i are coupled by imposing the continuity of solute concentration and the dispersive flux at the interfaces of the layers. Unknown functions representing the dispersive flux at the interfaces between adjacent layers are introduced allowing the multilayer problem to be solved separately on each layer in the Laplace domain before being numerical inverted back to the time domain. The obtained solution was compared with the Generalized Integral Transform Technique (GITT) and numerical solutions for some problems of solute transport with variables coefficients in porous medium present in the literature. The results show a good agreement between both solutions for each of the studied problem. An example of application considering an advective-dispersive transport problem with a sinusoidal time-dependent emitting rate at the boundary was study in order to illustrate the effect of sinusoidal frequency on solute concentration.

Cite this article: Tjock-Mbaga, T., Zarma, A., Ele Abiama, P., Ema'a Ema'a, J. M., & Hubert Ben-Bolie, G. (2023). *Application of the Multilayer Analysis to Contaminant Transport along Porous Media Flow with Variable Coefficients and two-input Sources*. *Pollution*, 9(1): 222-242.
<http://doi.org/10.22059/poll.2022.345098.1520>



© The Author(s).

Publisher: University of Tehran Press.

DOI: <http://doi.org/10.22059/poll.2022.345098.1520>

INTRODUCTION

Human activities and industrialization have considerably increased the numbers of pollutant sources in water, soil, air and specially in groundwater. Many of them are subject of studies due to their importance or the damage they can cause to living organisms. Hence there is a need to provide fast contaminant remediation and quality monitoring of the groundwater system. The transport of a solute in porous media is traditionally modeled by the advection-dispersion equation (ADE). The ADE can be solved numerically or analytically. Analytical solutions are still pursued by many scientists because they are relatively transparent with respect to model inputs and outputs, and they can provide better physical insights into the problems (Park & Zhan, 2001).

*Corresponding Author Email: tjockmbaga@yahoo.fr

Analytical solutions of ADE with variable coefficients in semi-infinite porous media abound recent years in the literature (Kumar et al., 2010; Jaiswal et al., 2011; Djordjevic & Savovic, 2013; Singh et al., 2015; Sanskrityay et al., 2016; Das et al., 2017; Sanskrityay et al., 2018; Yadav & Kumar, 2018; Thakur et al., 2019; Chaudhary et al., 2020; Chaudhary & Sink, 2020). The solutions are obtained using change of variables and techniques such as the Laplace transform, Green function method. Alternatively, literature contains several analytical solutions of ADEs in finite porous media with constants or variables coefficients. Liu et al. (2000) presented how to implement the GITT to solve the one-dimensional (1-D) ADE in heterogeneous porous media with source/sink term, coupled with either linear or nonlinear sorption and decay. The GITT coupled with the LTT were used by Chen & Liu (2011) to solve analytically a 1-D ADE in a finite spatial domain with an arbitrary time-dependent inlet boundary condition. For a finite spatial domain, the 1-D ADE considering the sorption and desorption of solute, with arbitrary space dependent coefficients was solved analytically using the GITT (Skaggs et al., 2007). Pérez Guerrero et al. (2009) presented a new analytical method to solve a 3-D ADE in a finite domain with time varying boundary condition for both transient and steady-state regimes using change of variables in combination with the Classic Integral Transform technique (CITT). Pérez Guerrero & Skaggs (2010) presented a general analytical solution for linear 1-D solute transport in heterogeneous porous media. They employed the integrating factor to obtain a transport equation that has a self-adjoint differential operator, and the solution was found using the GITT. Chen et al. (2011) presented an analytical solution of two-dimensional ADE in cylindrical coordinates using a combination of the second kind finite transform method and the GITT. Recently, Bharati et al. (2017); Bharati et al. (2018) and Bharati et al. (2019) presented an analytical solution of solute transport with distance depending coefficients without source term using the GITT with a new regular Sturm-Liouville problem (SLP) with a self-adjoint operator to derive analytical solutions in a finite domain. Although the studies proposed novel approaches to solve the ADE, they have some limitations and difficulties to be applied in complex problems.

Analytical solutions for layer media are not left out on the literature. The LLT was used by Al-Niami & Rushton (1979) to obtain analytical solutions of solute transport in finite layered media with constant boundary conditions. Leij et al. (1991) also applied the Laplace transform to derive an analytical solution to the 1-D ADE (without decay term) on a semi-infinite two-layer medium with continuity of concentration and dispersive flux at the interfaces between adjacent layers. Moreover, Leij & van Genuchten (1995) used the LTT to obtain an approximate analytical solution to the 1-D ADE in semi-infinite two-layer medium. In each layer, solute concentration in the Laplace domain was approximated by an infinite series before the analytical inversion. Later Liu et al. (1998) used the GITT to solve a 1-D multi-layer for conservative solute transport problem in finite media with arbitrary time-varying inlet concentration. Their analytical solution was found to be easily applied for an arbitrary number of layers. A few years later Pérez Guerrero et al. (2013) used the method of Liu et al. (1998) to obtain analytical solution of ADE for a non-conservative solute transport with constant inlet boundary. One of the difficulties encountered when applying the integral transform to this type of problem is the determination of the eigen-functions and the resolution of the transcendental equation.

To overcome the difficulties encountered when solving multilayer problem using the GITT, some authors have had the idea of reutilizing the Laplace transform while introducing unknown functions at each interface. The consequence of this approach is the transformation of the multi-layer problem into several isolated layer problems which can be solve easily with the help of Laplace transform. Among these recent works, we can cite (Carr & Turner, 2016; Rodrigo & Worthy, 2016; Zimmerman et al., 2016; Carr, 2020; Carr, 2021).

The aim of this study is to extend the work of Carr (2020) to solve the 1-D ADE of conservative and reactive solute with space and time dependent coefficients and two inputs localized at the boundaries of the domain. More precisely, we intend to show that the multilayer model can

reproduce the concentration profiles for this type of problems whatever the expressions of the coefficients in the ADE and the forms of the boundary and initial conditions. This will allow in the future to solve the ADE problems in a finite porous media with variables coefficients without many difficulties like those related to the transcendental equation. To our knowledge, no other study in the literature has ever been conducted on this issue. This approach is all the more innovative in that it circumvents the difficulties encountered when using conventional approaches and also overcomes their limitations.

MATERIALS AND METHODS

In this paper, we consider a 1-D pollutant transport problem in space and time dependent transport velocity and dispersion coefficient in heterogeneous structure. The mathematical formulation of the ADE for solute transport in 1-D flow under linear equilibrium sorption can be written in general form as:

$$R(x) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x,t) \frac{\partial C}{\partial x} - v(x,t)C \right] - \mu(x)C + \gamma(x,t) \quad (1)$$

which describes processes of advection, dispersion, equilibrium sorption, and decay. In Eq. (1), $R(x)$ is the linear retardation factor, $C(x,t)$ [ML^{-3}] is the aqueous solute concentration of the dispersing pollutant mass at a position $x[L]$ of the medium and at a time $t[T]$, $\mu(x)$ is the first order decay rate per volume of aqueous solution under linear sorption [T^{-1}], the non-homogeneous term $\gamma(x,t)$ represents an arbitrary space and time variable zero-order production. The left-hand side of Eq. (1) represents change in solute concentration in liquid with time in linear equilibrium sorption. The right-hand side of the Eq. (1) represents the influence of the dispersion on the solute concentration distribution by the first term and the change of the solute concentration due to advective solute transport by the second term. The third term of the right-hand represents the first-order decay of solute in the medium. The fifth term represent the zero-order production ($\gamma(x,t) > 0$) or sink ($\gamma(x,t) < 0$) for solute which represents internal/external production or sink of the solute in the medium.

Two phenomena are responsible to solute spreading, the mechanical dispersion and the diffusion. Generally, both $D(x,t)$ and $v(x,t)$ are assumed to be functions of space and time. The expression of each parameter depends on the properties of the geological formation. For study, many theories are used for the spatio-temporal dependence of the velocity and dispersion coefficient (e.g. Scheidegger 1957; Rumer 1962; Freeze & Cherry 1979). The velocity and dispersion coefficient are expressed by single function on space and time-dependent as follow:

$$v(x,t) = v_0 h_2(x) \varphi_2(pt) \quad D(x,t) = (D_0 + D^* \tau) h_1(x) \varphi_1(pt) \quad (2)$$

where τ is the tortuosity, $D_0[L^2T^{-1}]$, $D^*[L^2T^{-1}]$ and $v_0[LT^{-1}]$ are respectively constant mechanical dispersion coefficient, molecular diffusion coefficient and velocity in a steady flow domain through a homogeneous porous medium. $h_1(x)$ and $h_2(x)$ are the non-dimensional space dependent functions for velocity and dispersion, respectively. $p[T^{-1}]$ is a coefficient whose dimension is inverse of the time variable, it represents the unsteady parameter. The unsteady functions $\varphi_1(pt)$ and $\varphi_2(pt)$ are expressions in non-dimensional variable (pt). $P=0$ corresponds to the temporally independent parameters. Generally, the expressions of unsteady functions are chosen such that $\varphi_j(pt) = 0$ for $p = 0$ or $t = 0$. The former case represents the steady flow and the latter case represents the initial state.

The source/sink is also expressed by single function on space and time-dependent as that

proposed by Chen et al. (2017) and Kumar et al., (2019):

$$\gamma(x, t) = \gamma_0 P(x) q(t) \quad (3)$$

where γ_0 is the uniform zero-first order production coefficient [$ML^{-3}T^{-1}$].
Using Eqs. (2) and (3) in Eq. (1) leads to the following transport equation:

$$R(x) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} h_1(x) \varphi_1(pt) \frac{\partial C}{\partial x} - v_0 h_2(x) \varphi_2(pt) C \right] - \mu(x) C + \gamma_0 P(x) q(t) \quad (4)$$

The formulation of our problem to be complete by assuming a set of initial and boundary conditions. Initially, the porous medium is supposed to contain a background pollutant concentration with arbitrary distribution which can be expressed as a linear combination of some input contaminant concentration in liquid phase and solid phase, respectively. The initial concentration may be written in general form as:

$$C(0, t) = f_l(x) + f_s(x) = f(x) \quad (5)$$

In this study, we consider the solute transport to be affected at the two ends of the domain (two pollutants sources). A general robin boundary condition with flexible input source distribution are taken into consideration at the porous medium. Thus, boundary conditions are written in general form as follow:

$$a_0 C(0, t) - b_0 \frac{\partial C(0, t)}{\partial x} = g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (6)$$

$$a_L C(L, t) - b_L \frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (7)$$

where L is the length of the porous medium.

In the boundary conditions Equations (6) and (7), a_0 , b_0 , a_L and b_L are constants and $g_0(t)$ and $g_L(t)$ are arbitrary specified functions of time with the subscripts 0 and L denoting the inlet ($x = 0$) and outlet ($x = L$), respectively (Figure 1). It is important to note that b_0 and b_L must be both nonnegative, at least one of a_0 or b_0 must be nonzero and at least one of a_L and b_L must be nonzero.

The multi-layer analysis is performed in the advection-dispersion transport problem with variable parameters formulated in Eqs. (4)-(7). The solution method begins with transforming the transport problem with variable coefficients into m-transports problems with time dependent coefficients. For this aim, the porous medium is divided into m-layers porous media partitioned as $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{m-1} < x_m = L$ (Figure 1). The pollutant concentration in layer i is denoted by $C_i(x, t)$ ($i = 1, \dots, m$) where $x \in [x_{i-1}, x_i]$ represents the distance from the inlet at $x = 0$. The

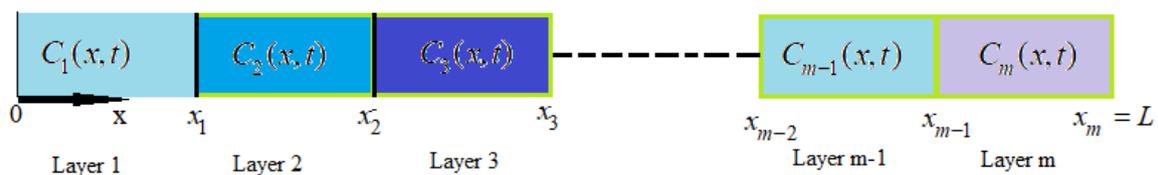


Fig. 1. Partitioning of heterogeneous medium into m-layers media with constant coefficients.

governing solute transport equation in Eq. (4) may be expressed in the i th-layer as:

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \varphi_1(pt) \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - v_i \varphi_2(pt) \frac{\partial C_i}{\partial x} - \mu_i C_i + \gamma_i q(t), \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (8)$$

where the coefficients $D_i [L^2 T^{-1}]$, $v_i [L T^{-1}]$, $\mu_i [T^{-1}]$ and $\gamma_i [ML^{-3} T^{-1}]$ are the constant average value of coefficient for in the layer i (Moreira et al., 2006; Moreira et al., 2009; Moreira et al., 2010; Ema'a Ema'a et al., 2015), defined in general form by:

$$\eta_i = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \eta(x) dx \quad (9)$$

The solute transport Eqs. (8) are subject to the following initial and boundary conditions in each layer:

$$C_i(x, 0) = f_i; \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (10)$$

$$a_0 C_1(0, t) - b_0 \frac{\partial C_1(0, t)}{\partial x} = g_0(t), \quad t \geq 0 \quad (11)$$

$$a_L C_m(0, t) - b_L \frac{\partial C_m(0, t)}{\partial x} = g_L(t), \quad t \geq 0 \quad (12)$$

$$\text{where } f_i = \frac{1}{x_i - x_{i-1}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

In order to relate the concentration of layer i to that of layer $i+1$, we assume the continuity of the concentration and dispersive flux at the interfaces between adjacent layers:

$$C_i(x_i, t) = C_{i+1}(x_i, t) \quad (13)$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}(x_i, t) = \theta_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial x}(x_i, t) \quad (14)$$

Let us introduce a new space and time variables, X and T , respectively, defined as Kumar et al. (2011):

$$X = \int \frac{\varphi_2(pt)}{\varphi_1(pt)} dx = \frac{\varphi_2(pt)}{\varphi_1(pt)} x \quad (15)$$

$$T = \int \frac{\varphi_2^2(pt)}{\varphi_1(pt)} dt \quad (16)$$

Since $\varphi_1(pt)$ and $\varphi_2(pt)$ are dimensionless functions, T as the same dimension of that of

time variable t . Moreover, the selection criteria for $\varphi_j(pt)$ verify that $T = 0$ at $t = 0$. So the nature of the initial condition does not change in the new time domain. The advection-diffusion problem in Eq. (8) reduces to one with constant coefficients which is:

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial T} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial X} - k_i C_i + \gamma_i(T) \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i \quad (17)$$

$$\text{where } k_i = \mu_i \frac{\varphi_2^2(pt)}{\varphi_1(pt)}$$

The conditions in Eqs. (11) - (15) may be written in terms of new independent variables as:

$$C_i(X, 0) = f_i; \quad l_{i-1} \leq X \leq l_i. \quad (18)$$

$$a_0 C_1(0, T) - b_0 \frac{\partial C_1(0, T)}{\partial X} = g_0(T), \quad T > 0 \quad (19)$$

$$a_L C_m(0, T) - b_L \frac{\partial C_m(0, T)}{\partial X} = g_L(T), \quad T > 0 \quad (20)$$

$$C_i(l_i, T) = C_{i+1}(l_i, T) \quad (21)$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(l_i, T) = \theta_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}}{\partial X}(l_i, T) \quad (22)$$

Following the generalized semi-analytical method for solving multilayer transport model proposed by Carr (2020) as detailed in Appendix A, the pollutant concentration in layer i in the Laplace domain can be expressed as:

$$\bar{C}_1(X, s) = A_1(X, s)G_0(s) + B_1(X, s)G_1(s) + P_1(X, s), \quad (23)$$

$$\bar{C}_i(X, s) = A_i(X, s)G_{i-1}(s) + B_i(X, s)G_i(s) + P_i(X, s), \quad i = 2, \dots, m-1 \quad (24)$$

$$\bar{C}_m(X, s) = A_m(X, s)G_{m-1}(s) + B_m(X, s)G_L(s) + P_m(X, s) \quad (25)$$

where the functions $P_i(X, s)$, $A_i(X, s)$ and $B_i(X, s)$ ($i = 1, \dots, m$) are defined in Table 1 of Carr (2020).

The determination of unknown interface functions $G_i(s)$ ($i = 1, \dots, m-1$) becomes possible by imposing continuity of concentration in the Laplace domain ($\bar{C}_i(X, s)$) in each interface layers (Carr and Turner 2016; Rodrigo and Worthy 2016; Carr and March 2018, Carr 2020, Carr 2021):

$$\bar{C}_i(l_i, s) = \bar{C}_{i+1}(l_i, s) \quad (26)$$

Substituting Eqs. (23)–(25) into the system of Eqs. (26), the result is a linear system which

can be expressed in matrix form as:

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b} \quad (27)$$

where \mathbf{y} is a column matrix with elements $G_i(s)$, elements of $(m-1) \times (m-1)$ tridiagonal matrix $\mathbf{A} (\{a_{ij}\} \in \mathbb{C}^{(m-1) \times (m-1)})$ and $(m-1)$ -length vector $\mathbf{b} (b_i \in \mathbb{C}^{(m-1)}) (i=1, \dots, m-1)$, are given by:

$$a_{1,1} = B_1(l_1, s) - A_2(l_1, s),$$

$$a_{1,2} = -B_2(l_1, s),$$

$$a_{i,i-1} = A_i(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{i,i} = B_i(l_i, s) - A_{i+1}(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{i,i+1} = B_{i+1}(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$a_{m-1,m-2} = A_{m-1}(l_{m-1}, s),$$

$$a_{m-1,m-1} = B_{m-1}(l_{m-1}, s) - A_m(l_{m-1}, s),$$

$$b_1 = P_2(l_1, s) - P_1(l_1, s) - A_1(l_1, s)G_0(s),$$

$$b_i = P_{i+1}(l_i, s) - P_i(l_i, s), \quad i = 2, \dots, m-2,$$

$$b_{m-1} = P_m(l_{m-1}, s) - P_{m-1}(l_{m-1}, s) - B_m(l_{m-1}, s)G_L(s),$$

The solution of solute concentration for i th-layer ($C_i(X, T)$) in the time is obtain using the inversion Laplace transform $\bar{C}_i(X, s)$ given by:

$$C_i(X, T) = L^{-1} \{ \bar{C}_i(X, s) \} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{st} \bar{C}_i(X, s) ds \quad (28)$$

where Γ represents a Hankel contour that begins $-\infty - i0$, winds around the origin and terminates at $-\infty + i0$ (Trefethen et al. 2006). The integration of Equation (28) in the complex domain is obtained by introducing the complex variable $z = st$, and using residue calculus approach described by Trefethen (see Trefethen et al. (2006) for full details) to numerically invert the Laplace transform:

$$C_i(X, T) = L^{-1} \{ \bar{C}_i(X, s) \} = -\frac{2}{T} R_e \left\{ \sum_{k \in \mathcal{O}_N} w_k \bar{C}_i(X, s_k) \right\} \quad (29)$$

where N is even, is the set of positive odd integers less than N , $s_k = z_k / t$ and $w_k, z_k \in \mathbb{C}$ are the residues and poles of the best (N, N) rational approximation to e^z on the negative real line. Both w_k and z_k are constants, which are independent of x and t and computed using a supplied MATLAB function (Trefethen et al. 2006, Fig 4.1).

RESULTS AND DISCUSSION

Validation of the multilayer model

We now demonstrate the capabilities of multilayer analysis to produce the correct results using tests cases problems selected in the literature. The input boundaries conditions in each end of the domain can be a robin type or a Dirichlet type. There for, four combinations of input boundary are considered. A MATLAB code implementing our semi-analytical solution and producing the results in this section is an adaptation of MATLAB code download from github b.com/elliottcarr /Carr2020a.

• Case 1: Dirichlet- Dirichlet (D-D) boundaries

For this combination of input boundary, the following advection dispersion problem in groundwater reservoir with steady flow is considered:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (1+ax)^n \frac{\partial C}{\partial x} - u_0(1+ax)C \right] - \mu C + \gamma_0 \exp(-(x-\beta)) \exp(-\lambda t) \quad (30)$$

obtained by setting $h_1(x) = (1+ax)^n$, $h_2(x) = (1+ax)$, $\varphi_1(pt) = \varphi_2(pt) = 1$, $q(t) = \exp(-\lambda t)$ and $p(x) = \exp(-(x-\beta))$.

The time-dependent linear equilibrium between the solute substance in the solid-liquid phase given by Sim & Chrysikopoulos (1996) and Singh & Das (2015) is considered for this problem:

$$S = Fk_d C \quad (31)$$

where F represents the mass fraction of sorption particles where sorption is instantaneous, K_d is referred to as the distribution coefficient [$L^3 M^{-1}$].

$R = \theta + \frac{FK_d f \rho_b}{\eta}$ (Chaudhary et al., 2020) and $a[L^{-1}]$ represents the heterogeneity parameter, $S(x,t)$ [ML^{-3}] is the solid phase concentration, θ is the volumetric water content, ρ_b is the bulk density of porous media [ML^{-3}], η is the porosity of the porous media, $\mu = \mu_l + \mu_s \rho_b Fk_d$ (μ_l and μ_s are the first order decay rate of the liquid and solid phases concentration respectively [T^{-1}]).

The expressions of groundwater velocity and the dispersion coefficient follow the dispersion theory according to which the dispersion is proportional to the n^{th} -power of the space velocity ($D \propto u^n$) (Freeze & Cherry, 1979), where n is considered as 1.0, 1.5, and 2.0, respectively.

In this problem, if the solute distribution coefficient K_d is negligible (i.e. $K_d \approx 0$), the retardation factor R becomes equal to water content θ . Since water content (θ) is less than 1, so the retardation factor R becomes less than 1 for the case mentioned above, this indicates that only a fraction of liquid phase concentration participates in the transport mechanism.

For short special domain, Chaudhary et al. (2020) proposed to use $\exp(-\sec(\lambda x))$ as distribution of background concentration in the liquid phase because, its decreasing rate is much slower than exponential and could well represent slow movement of groundwater. Therefore, the following initial condition is considered:

$$C(0,t) = f(x) = C_l^0 \exp(-\sinh(\lambda x)) + K_i^s \quad (32)$$

where $C_l^0 [ML^{-3}]$ is the uniform solute distribution in the liquid phase and $K_i^s [ML^{-3}]$ is the solute distribution in the solid phase.

The input parameters values used are given by Singh & Kumari (2014), $C_l^0 = 0.01 \text{ mg/L}$, $K_i^s = 0.01 \text{ mg/L}$, $u_0 = 0.01 \text{ m/year}$, $D_0 = 0.01 \text{ m}^2/\text{year}$, $D^* = 0.002 \text{ m}^2/\text{year}$, $f = 0.8$, $F = 0.5$, $K_d = 0.01$, $\mu_s = 0.13 \text{ /year}$, $\mu_l = 0.0027 \text{ /year}$, $a = 0.5 \text{ /m}$. $\beta = 3 \text{ m}$ and the

uniform source term $q_0 = 0.02 \text{ mg} / \text{L} \cdot \text{year}$. The gravel and sandstone geological formations are considered here with average porosity η and bulk density as follows (Manger, 1963; Freeze & Cherry, 1979): $\eta = 0.3$ (sandstone), 0.5 (gravel); $\rho_b = 2.49$ (sandstone), 2.68 (gravel).

The medium is divided into four layers and the constants average values are calculated for each coefficient with the formula in Eq. 10. The transport parameters in each layer, initial conditions and boundary conditions for each are provided in Tables 1 and 5.

Figures 2 and 3 illustrate the comparison of pollutant concentration for the multilayer

Table 1. Transport parameters, geometry and initial conditions for problem 1.

L [m]	i	x_i [m]	n	D_i [m^2 / year]	u_i [m / year]	γ_i [m / Lyear]	θ_i [-]	f_i [mg / L]
1	1	0.3	1.5	0.00224	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
	2			0.00264	0.0132	0.01813	0.4	0.0036788
	3			0.00296	0.0148	0.014841	0.4	0.0036789
	4			0.00336	0.0168	0.01158	0.4	0.0036789
	1	0.5	2	0.002374	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788
	2	0.003034		0.0132	0.01813	0.4	0.0036788	
	3	0.003602		0.0148	0.014841	0.4	0.0036789	
	4	0.004358		0.0168	0.01158	0.4	0.0036789	
1	1	1	0.002518	0.0112	0.02332	0.4	0.0036788	
2	0.003489		0.0132	0.01813	0.4	0.0036788		
3	0.004385		0.0148	0.014841	0.4	0.0036789		
4	0.005654		0.0168	0.01158	0.4	0.0036789		

Table 2. Transport parameters, geometry and initial conditions for problem 2.

L [km]	i	x_i [km]	$Pe = 0.845$		$Pe = 1.833$		R_i	γ_i	θ_i [-]	μ_i [day^{-1}]	f_i [mg / ml]
			D_i [$\text{km}^2 / \text{year}$]	u_i [km / year]	D_i [$\text{km}^2 / \text{year}$]	u_i [km / year]					
1	1	0.1	0.720685	0.6060	0.6060	0.71710	1	0	0.4	0	0
	2	0.25	0.747619	0.6210	0.6210	0.73485	1	0	0.4	0	0
	3	0.5	0.791408	0.6450	0.6450	0.76325	1	0	0.4	0	0
	4	0.75	0.8472546	0.6750	0.6750	0.79875	1	0	0.4	0	0
	5	0.9	0.892804	0.6990	0.6990	0.82715	1	0	0.4	0	0
	6	1	0.9216852	0.7140	0.7140	0.8449	1	0	0.4	0	0

Table 3. Transport parameters, geometry and initial conditions for problem 3.

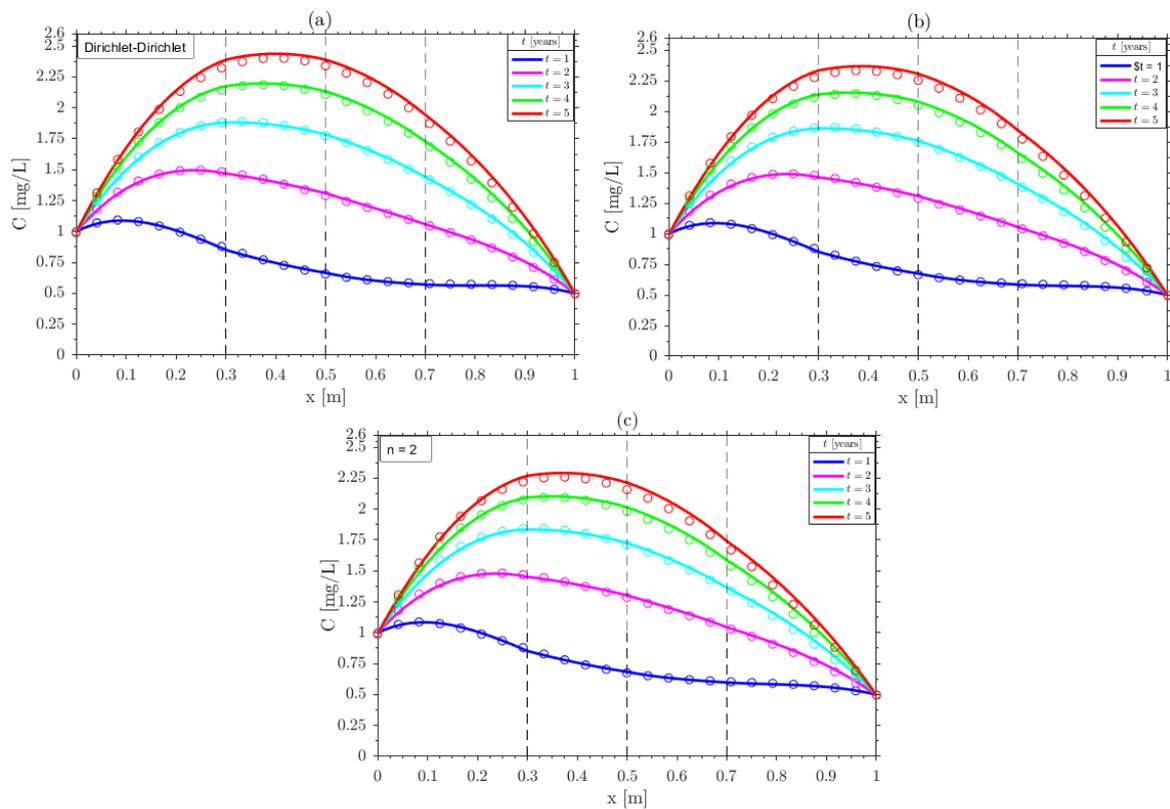
L [m]	i	x_i [m]	m	D_i [m^2 / day]	u_i [m / day]	R_i	γ_i	θ_i [-]	μ_i [day^{-1}]	f_i [mg / ml]
60	1	10	6	2.050	1.025	1	0.0	0.4	0.002	0
	2	20		2.150	1.075	1	0.0	0.4	0.002	0
	3	30		2.250	1.125	1	0.0	0.4	0.002	0
	4	40		2.350	1.175	1	0.0	0.4	0.002	0
	5	50		2.450	1.225	1	0.0	0.4	0.002	0
	6	60		2.550	1.275	1	0.0	0.4	0.002	0

Table 4. Transport parameters, geometry and initial conditions for example of application.

L [m]	i	x_i [m]	m	D_i [m ² /day]	u_i [m/day]	R_i	γ_i	θ_i [-]	μ_i [day ⁻¹]	f_i [mg/ml]
60	1	10	6	2.050	1.025	1	0.0	0.4	0.002	0
	2	20		2.150	1.075	1	0.0	0.4	0.002	0
	3	30		2.250	1.125	1	0.0	0.4	0.002	0
	4	40		2.350	1.175	1	0.0	0.4	0.002	0
	5	50		2.450	1.225	1	0.0	0.4	0.002	0
	6	60		2.550	1.275	1	0.0	0.4	0.002	0

Table 5. Boundary values parameters for each problem.

Problems	a_0	b_0	a_L	b_L	$g_0(t)$	$g_L(t)$
1 Dirichlet-Dirichlet	1	0	1	0	$C_0 \exp(-0.002t)$	$0.5C_0 \exp(-0.002t)$
2 Robin-Dirichlet	v_1	D_1	1	0	C_0	$0.5C_0$
Dirichlet-Robin	1	0	v_m	D_m	C_0	$0.5C_0$
3 Robin-Robin	v_1	D_1	v_m	D_m	$C_a + C_b \exp(-t)$	$0.5[C_a + C_b \exp(-t)]$
Example of application	v_1	D_1	1	0	$C_0(1 + \sin(\omega t))$	$0.25C_0(1 + \sin(\omega t))$

**Fig. 2.** Comparison of the multilayer solution and the GITT solution for problem 1, in sandstone geological formation, for different values of n .

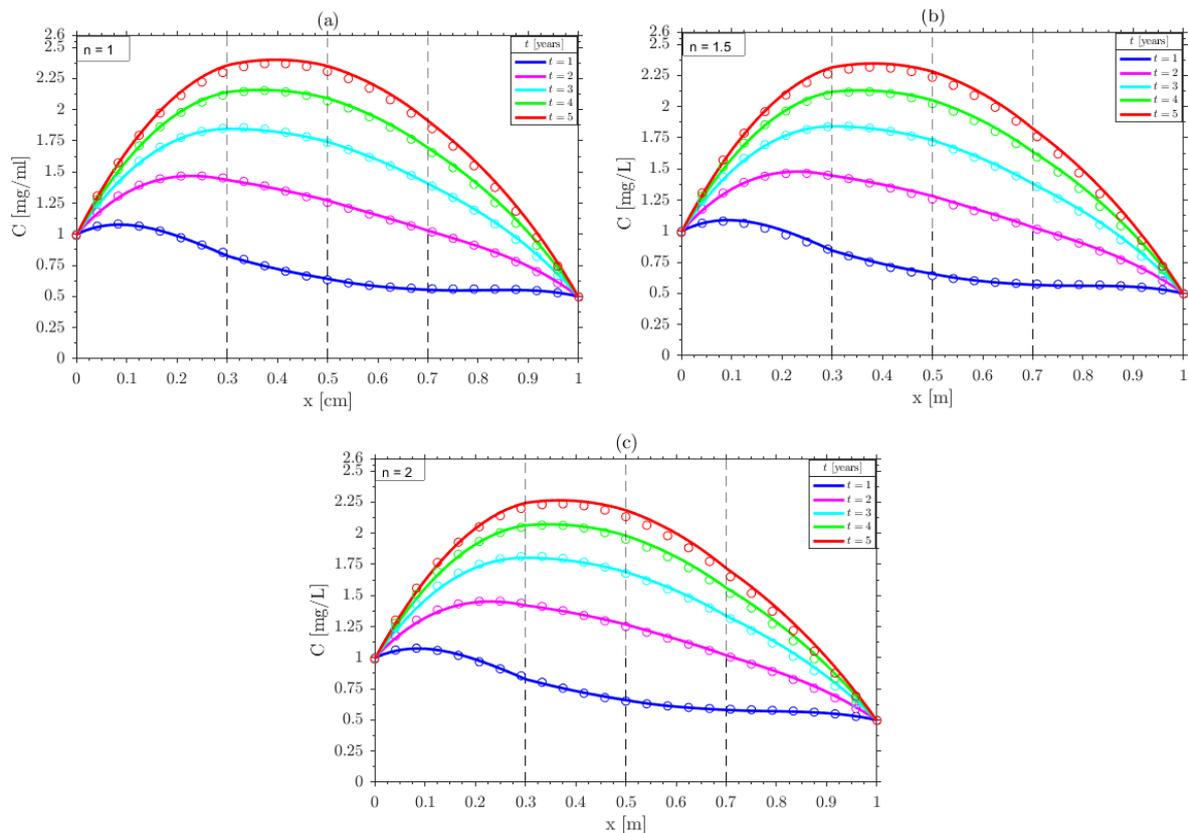


Fig. 3. Comparison of the multilayer solution and the GITT solution for problem 1, in gravel geological formation, for different values of n .

solution and the GITT solution (Bharati et al., 2017; 2018; 2019). The solid lines represent the concentration for the multilayer solution and the circles symbols represent the concentration for the GITT solution. The curves show that, for each value of n and both geological formations, the solute concentration in the reservoir at each time increases with traveling distance from approximate value of 1.0 mg/L at $x=0 \text{ m}$ to a maximum value of concentration, then decreases back to 0.5 mg/L at the end of the domain. This build-up of concentration is due to the concentration effect of the additional source term in the reservoir that decreases with distance. The solute build-up depends on the geological formation and on the value of n , for a fixed time. The distance concerned by the solute build-up is very important due to the presence of two contaminant sources, each acting separately at the boundary of the reservoir. The comparison between the multilayer solution and the GITT solution show that, both solutions are in good agreement as shown by the higher value of maximum error between both solutions in Table 6.

- *Case 2: Robin-Dirichlet (R-D) or Dirichlet-Robin (D-R) boundaries*

For this combination of inputs boundary, the following Problem of solute transport in groundwater with spatio-temporal dependent coefficients, without adsorption is considered:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{x_0} (1+ax)^n \varphi(pt) \frac{\partial C}{\partial x} - u_0 (1+ax) \varphi(pt) C \right] \quad (33)$$

Table 6. Maximum errors.

Problem 1						
	Sandstone			Gravel		
	$n = 1$	$n = 1.5$	$n = 2$	$n = 1$	$n = 1.5$	$n = 2$
$t = 1$ year	0.0038	0.0034	0.0028	0.0034	0.0032	0.0028
$t = 2$ years	0.0074	0.0068	0.0075	0.0067	0.0067	0.0083
$t = 3$ years	0.0119	0.0118	0.0125	0.0102	0.0108	0.0135
$t = 4$ years	0.0184	0.0179	0.0196	0.0153	0.0167	0.0204
$t = 5$ years	0.0342	0.0356	0.0364	0.0328	0.0352	0.0356

Problem 2				
	(a)	(b)	(c)	(d)
$t = 0.05$ day	0.008	0.0072	0.00302	0.0027
$t = 0.1$ day	0.00557	0.00554	0.0067	0.00183
$t = 0.15$ day	0.0083	0.0084	0.0083	0.00153
$t = 0.25$ day	0.0112	0.0106	0.0076	0.00201
$t = 0.5$ day	0.0124	0.0114	0.0054	0.00323

Problem 3				
$t = 0.5$ day	$t = 1$ day	$t = 2$ days	$t = 3$ days	$t = 4$ days
0.0023	0.0082	0.0056	0.0032	0.0033

corresponding to $h_1(x) = (1 + ax)^n$, $h_2(x) = (1 + ax)$, $\varphi_1(pt) = \varphi_2(pt) = \varphi(pt) = \exp(-0.01t)$ and $R = 1$. The same problem was studied by Bharati et al. (2018) in case of steady flow. For those choice of unsteady functions, $X = x$ and $T = 100(1 - \exp(-0.01t))$.

This problem considers solute transport along porous media flow with spatial dispersivity in fractal & Euclidean framework. For the illustration, only the fractal framework of dispersivity is considered ($n = 1.5$). Initially, the porous medium is considered solute free, the decay rate and zero order production are considered to be zero. We consider also two cases of problem studied by Bharati et al. (2018) concerning Peclet number greater than one and Peclet number less than one. Recall that the Peclet number is defined as follow $Pe = \frac{v_0 L}{D_0}$. For $Pe > 1$, it represents advection dominated solute transport while for $Pe < 1$ it represents dispersion dominated solute transport. The input parameters used for this problem are (Bharati, 2018): $a = 0.2 \text{ km}^{-1}$, $v_0 = 0.6 \text{ km/year}$, $D_0 = 0.71 \text{ km}^2/\text{year}$ (for Peclet number less than 1) and $u_0 = 0.71 \text{ km/year}$, $D_0 = 0.6 \text{ km}^2/\text{year}$ (for Peclet number greater than 1).

The medium is divided into six layers and the constants average values are calculated for each coefficient with the formula in Eq. 10. The transport parameters for each layer are shown in Table 2 and the conditions in Table 5. Figure 4 (a, b, c and d) compares the multilayer solution obtained for six layer and the MATLAB solver *pdepe* numerical solution for the original problem, for Robin-Dirichlet boundaries (a, b) and Dirichlet-Robin boundaries (c, d), respectively. The curves are obtained for two values of the Peclet number representing the two descriptions of transport mentioned above. The common values for Figures (4.a) and (4.c) are $v_0 = 0.71 \text{ km/year}$ and $D_0 = 0.6 \text{ km}^2/\text{year}$ and for Figures (4.b) and (4.d) $u_0 = 0.6 \text{ km/year}$ and $D_0 = 0.71 \text{ km}^2/\text{year}$. The curves illustrate that for the Robin-Dirichlet boundaries,

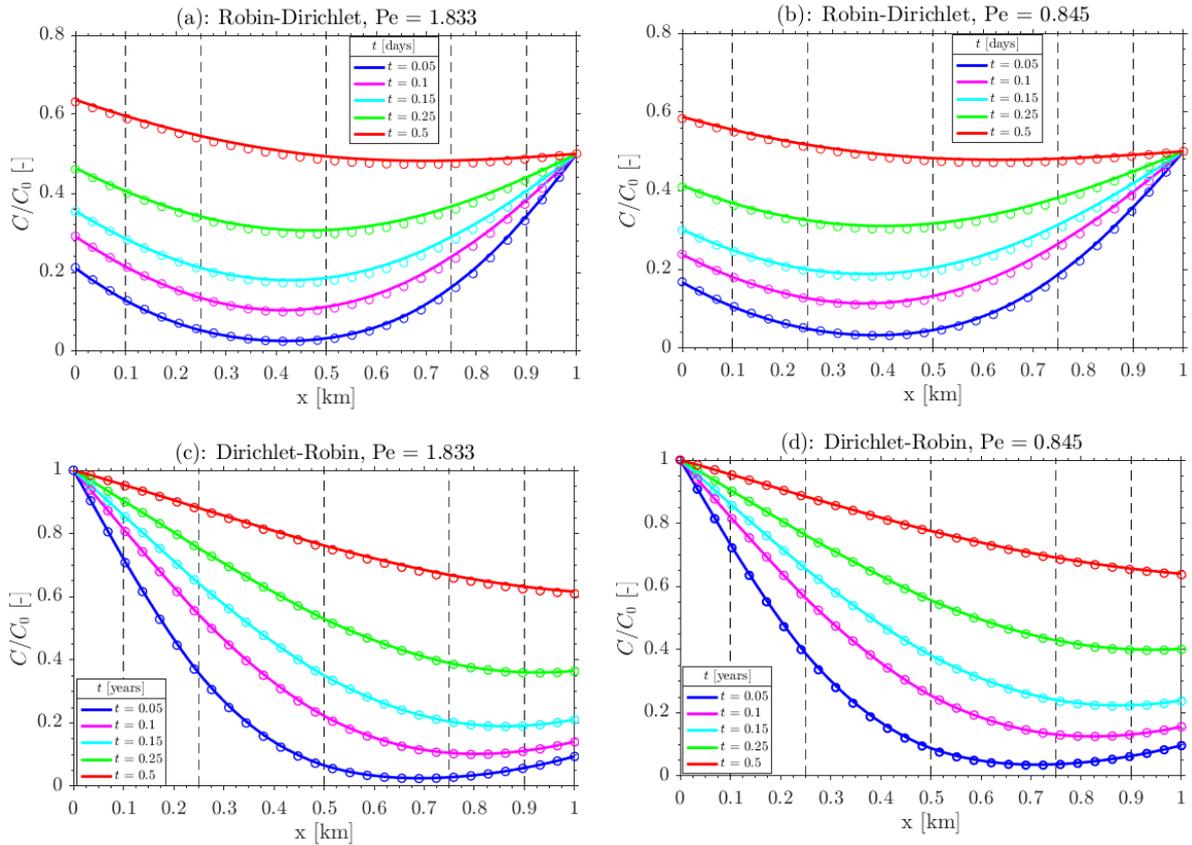


Fig. 4. Comparison of the multilayer solution and the GITT solution for Problem 2.

the solute concentration decreases slightly with traveling distance from a value imposed by the boundary condition at $x = 0 \text{ m}$ to a minimum value of concentration, then increases to 0.5 value at the end of the domain. While for the Dirichlet-Robin boundaries, the pollutant concentration decreases with traveling distance from a value of 1.0 at $x = 0 \text{ m}$ to a minimum value of concentration, then increases to a concentration value at the end of the domain given by the outlet input boundary. These pollutant concentration strengths in both boundaries combination is due to the presence of the two input sources localized at the boundaries of the domain. The curves also demonstrate that both solutions are in excellent agreement for each choice of the pairs of values u_0 and D_0 , as shown by the higher value of maximum error between both solutions in Table 6. These results verify that the multilayer model reproduces well the original model in heterogeneous medium.

• Case 3: Robin- Robin (R-R) boundaries

In this case, we consider the following steady state flow transport problem with space variable dispersion coefficient, velocity, decay coefficient and retardation factor studied by Liu et al. (2000):

$$R(x) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C}{\partial x} - v(x)C \right) - \mu(x)C + \gamma(x) \tag{34}$$

For this problem, the studied porous medium of length $L = 20 \text{ cm}$ has the following properties,

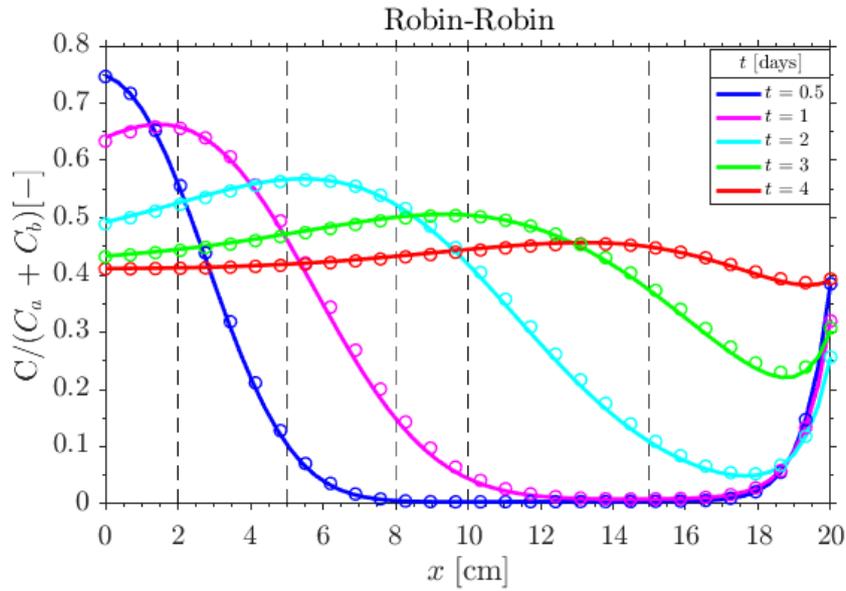


Fig. 5. Comparison of the multilayer solution and the GITT solution for Problem 3.

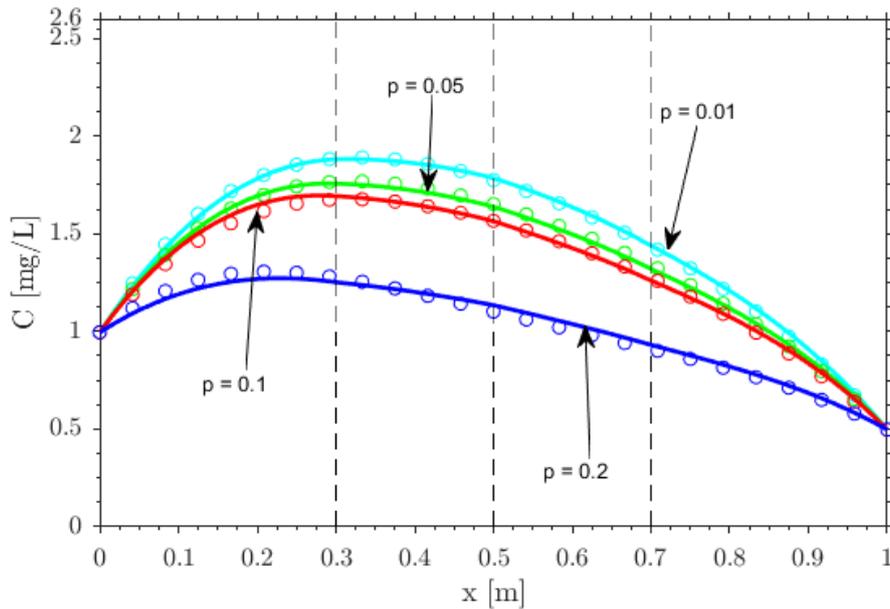


Fig. 6. Effect of unsteady parameter on solute concentration obtained with multilayer model.

$R(x) = 2.4 + 0.04x$, $v(x) = 14 - 0.2x \text{ cm} / d$, $D(x) = 10 - 0.1x \text{ cm}^2 / d$, $\mu(x) = -(0.1 + 0.01x) \text{ day}^{-1}$ and $\gamma(x) = 0.001x + 0.01$. A Robin type concentration with time variable input concentration are imposed at the boundaries ($g_{0,L}(t) = C_a^{0,L} + C_b^{0,L} 0.6 \exp(-t)$). The parameters $C_a^{0,L}$ and $C_b^{0,L}$ are chosen such that the input concentration must be equal to 1 at $t = 0$ at the inlet ($C_a^0 = 0.4$ and $C_b^0 = 0.6$) and 0.5 at the outlet ($C_a^L = 0.2$ and $C_b^L = 0.3$). A zero-initial pollutant concentration is assumed. The porous medium is divided into six layers, the parameters values obtained for each layer are shown in Table 3. The numerical solution using the MATLAB solver *pdepe* and the multilayer solution obtain six layers are compared in Fig. 5. It emerges for the curves that both solutions are in good agreement at all the time at all the positions. Thus, the multilayer is able

to reproduce the solute concentration in heterogeneous porous media for this type of problem.

As illustrated in Figs. (2) and (3), the accuracy of the multilayer model depends to the observed time in the case of time dependent production term. Now we investigate the effect of unsteady parameter to the multilayer model.

Fig. 6 illustrates the effect of unsteady parameter on solute concentration pattern in case 1 for a fractal dispersivity at $t = 3 \text{ years}$. For the illustration, the gravel geological formation is considered. The concentrations are plotted for four values of unsteady parameter ($p = 0.01, 0.05, 0.1$ and 0.2 yr^{-1}). The figure elucidates that the concentration level at all the positions decreases with the increasing value of unsteady parameter for this type of time production function. We also observe that the accuracy of the multilayer model decreases with the increasing value of p . However, whatever the value of p , the RMSE remains in an acceptable zone such that the multilayer model can be used in the case of time dependent production term.

Example of application

An example of application that is rarely noted in the literature but has many real world hydrological applications are discussed below. Special attention is paid to periodically time-dependent boundary at the source. This example considers an advective-dispersive transport problem with a sinusoidal time-dependent emitting rate at the boundary $g_{0,L}(t) = C_{0,L}(1 + \sin(\omega t))$. Where $\omega[T^{-1}]$ is the frequency of the sinusoidal boundary input. In this application we do not consider the zero-order production and initial distribution. Such example application can be used for the prediction of biochemical oxygen demand (BOD) concentration in groundwater with two input sources, resulting from waste leachate of periodical landfills discharge concentration. We consider a combination of Robin-Dirichlet boundaries. Also, we consider a medium in which the dispersion coefficient is proportional to the velocity ($n = 1$). The following transport parameters are used for this application example (Chen et al., 2017) $v_0 = 1 \text{ m day}^{-1}$, $D_0 = 2 \text{ m}^2 \text{ day}^{-1}$, $a_1 = 1$, $a = 0.005 \text{ m}^{-1}$. The value of a is chosen such that the groundwater velocity remains less than 2 m day^{-1} , which is the highest value of groundwater velocity (Bharati, 2017). The medium is devised into six layers as shown in Table 4. Fig. 7.a and 7.b depicts the temporal evolution of the spatial concentration profiles for frequency of the sinusoidal periodic input function $\omega = 0.5$ and 0.25 day^{-1} respectively. For $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$, $g(t)$ has the maxima at $\omega t = 4k\pi - 3\pi$, inflection point (from positive to negative) at $\omega t = 4k\pi - 2\pi$, minima at $\omega t = 4k\pi - \pi$, and inflection point (from negative to positive) at $\omega t = 4k\pi$, respectively. While, for $\omega = 0.25 \text{ day}^{-1}$ $g(t)$ has the maxima at $\omega t = 8k\pi - 6\pi$, inflection point (from positive to negative) at $\omega t = 8k\pi - 4\pi$, minima at $\omega t = 8k\pi - 2\pi$, and inflection point (from negative to positive) at $\omega t = 8k\pi$, respectively. Figure 7.a clearly demonstrates that, the pollutant concentration exhibits four different strength corresponding to the four particular points of the input function. Also, the periodic boundary input affects only the concentration profile near the inlet boundary. The periodic amplitudes of the concentration profile are quickly attenuated due to the heterogeneity of the medium causing a higher dispersion process which result is the mitigation of the concentration wave.

Figure 7.b illustrate the pollutant concentration distribution profiles at the same time used in Figure 7.a. The curves shown that for the time corresponding to the particular points on input function i.e. ($\omega t = 2\pi, 4\pi, 6\pi$ and 8π), the concentration profiles are similar to those of Figure 7.a for corresponding times. But the pollutant concentration level at these times is higher for $\omega = 0.25 \text{ day}^{-1}$ in comparison to $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$. Each of the other time has its own pollute concentration distribution. However, the concentration wave mitigates far to the inlet boundary for $\omega = 0.25 \text{ day}^{-1}$ in comparison to $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$.

Figures 7.c and 7.d show the concentration breakthrough curves at different locations for $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$ and $\omega = 0.25 \text{ day}^{-1}$ respectively. These curves clearly illustrate that for intermediate positions, the periodic time-dependent concentration wave only presents near

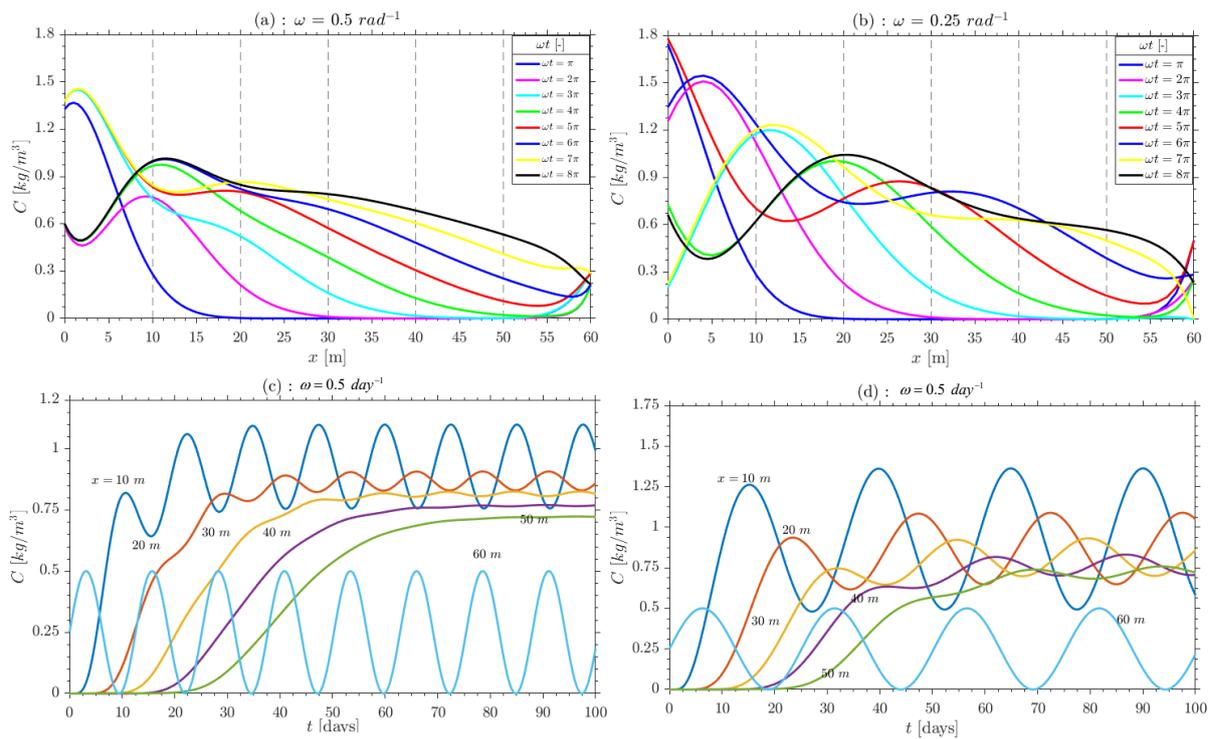


Fig. 7. Pollutant concentration trend (a) and (b) and breakthrough curves (c) and (d) for biochemical oxygen demand (BOD) concentration in groundwater with two input sources involving a sinusoidal time-dependent emitting rate.

the inlet boundary for $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$. While for $\omega = 0.25 \text{ day}^{-1}$, the periodic time-dependent concentration wave presents in each of intermediate positions. However, at the far end of the domain ($x = 60 \text{ m}$), the concentration for both values of ω presents the periodic time-dependent concentration wave given by the input function at this point. Over all, figures 7.c and 7.d also illustrate the amplitude of the periodic time dependent concentration is quickly attenuate in the case of $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$ than $\omega = 0.5 \text{ day}^{-1}$.

In summarize, the frequency of the periodic boundary input at the inlet and the location influences the effect of the dispersion process on the propagation of the periodic concentration wave. But, the second input concentration at the outlet of the domain does not influence this process, it just influences the concentration pollutant level.

CONCLUSION

In this paper, the multilayer model was applied to solve a 1-D ADE with variable coefficients under general initial and boundary conditions. The ADE with variable coefficients is transformed into a set of m-equations with time dependent coefficients, coupled by the continuity of the concentration and the flux in the interfaces of layer adjacent. After introducing novel space and time variables, analytical solution is obtained in each separately layer in the Laplace domain before being numerically inverted in the original time domain. Analytical solution for this hypothetical scenario, based on the assumption of two input sources localized at the boundary was verified with using three tests cases of advection-dispersion problems with combination of two type of input boundaries. The accuracy of the methodology used is checked by comparing the results from the derived semi-analytical solutions the with those predicted by the previous analytical

methods as the GITT and those predicted by using numerical solution. Results show that for the four combination of input boundary, the multilayer analysis reproduces perfectly the solute distribution for the original transport problem in heterogeneous media. It accomplishes the validation of the mathematical formulations and analytical procedures obtaining the solutions. This approach is innovative and is all the more interesting because it can solve complex ADE without any difficulties. The prediction of the method to BOD demand show that the frequency of the sinusoidal input distribution considerably affects the solute distribution pattern. Our derived solution is quite general in that it can be applied to problems with variable coefficient involving an arbitrary time-varying boundary conditions. The obtained solution can be used as a preliminary tool for analytical analyses and may helpful to predict the pollutant concentration distribution in the real case of two input contaminants sources. In future works, the methodology will be extended to one-dimensional multispecies transport problem with variable coefficients.

Appendix : Analytical Solution of the multilayer transport problem in the Laplace domain

In order to solve the multilayer transport model Eqs. (12)–(16), the model is reformulated into m isolated single-layer problems (Carr and Turner 2016; Rodrigo and Worthy 2016; Zimmerman et al. 2016, Carr 2020, Carr 2021). After, unknown functions of time, $g_i(t) (i = 1, \dots, m - 1)$ are introduced, to denote the following scalar multiple of the (negative) dispersive flux at the layer interfaces (Carr and Turner 2016; Rodrigo and Worthy 2016, Carr 2020, Carr 2021):

$$g_i(T) = \theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(l_i, T) \quad (\text{A1})$$

yields Eqs. (12)–(16) for the multilayer transport to be written in the following equivalent model in each layer:

· First layer ($i = 1$)

$$R_1 \frac{\partial C_1}{\partial T} = D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_1}{\partial X} - k_1 C_1 + \gamma_1(T), \quad 0 \leq X \leq l_1 \quad (\text{A2a})$$

$$C_1(X, T = 0) = f_1; \quad 0 < X < l_1 \quad (\text{A2b})$$

$$a_0 C_1(X = 0, T) - b_0 \frac{\partial C_1(X = 0, T)}{\partial X} = g_0(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A2c})$$

$$\theta_1 D_1 \frac{\partial C_1(X = l_1, T)}{\partial X} = g_1(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A2d})$$

· Intermediary layer ($i = 1, \dots, i = m - 1$)

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial T} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial X^2} - v_i \frac{\partial C_i}{\partial X} - k_i C_i + \gamma_i(X), \quad l_i \leq X \leq l_{i-1} \quad (\text{A3a})$$

$$C_i(X, T = 0) = f_i; \quad l_i < X < l_{i-1} \quad (\text{A3b})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial X}(X = l_{i-1}, T) = g_{i-1}(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A3c})$$

$$\theta_i D_i \frac{\partial C_i(X=l_i, T)}{\partial X} = g_i(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A3d})$$

· Last layer ($i = m$)

$$R_m \frac{\partial C_m}{\partial T} = D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial X^2} - v_m \frac{\partial C_m}{\partial X} - k_m C_m + \gamma_m(T), \quad l_{m-1} \leq X \leq l_m \quad (\text{A4a})$$

$$C_i(X, T=0) = f_i; \quad l_i < X < l_{i-1} \quad (\text{A4b})$$

$$\theta_m D_m \frac{\partial C_m}{\partial X}(X=l_{m-1}, T) = g_{i-1}(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A4c})$$

$$a_L C(X=L, T) + b_L \frac{\partial C_m}{\partial X}(X=L, T) = g_L(T), \quad T \geq 0 \quad (\text{A4d})$$

with each problem coupled together by imposing continuity of concentration at the interfaces between adjacent layers (Carr and Turner 2016; Rodrigo and Worthy 2016; Carr and March 2018, Carr 2020, Carr 2021).

Taking the Laplace transform of transport problem in each isolated single-layer Eqs. (A2a)-(A2d), (A3a)-(A3d), (A4a)-(A4d) yield:

$$D_1 \frac{d^2 \bar{C}_1}{dX^2} - v_1 \frac{d\bar{C}_1}{dX} - (k_1 + sR_1) \bar{C}_1 + R_1 f_1 + \gamma_1(s), \quad 0 \leq X \leq l_1 \quad (\text{A5a})$$

$$a_0 \bar{C}_1(X=0, s) - b_0 \frac{d\bar{C}_1(X=0, s)}{dX} = G_0(s) \quad (\text{A5b})$$

$$\theta_1 D_1 \frac{d\bar{C}_1(X=l_1, s)}{dX} = G_1(s) \quad (\text{A5c})$$

$$D_i \frac{d^2 \bar{C}_i}{dX^2} - v_i \frac{d\bar{C}_i}{dX} - (k + sR_i) \bar{C}_i + \bar{\gamma}_i(s) + R_i f_i, \quad l_i \leq X \leq l_{i-1} \quad (\text{A6a})$$

$$\theta_i D_i \frac{d\bar{C}_i}{dX}(X=l_{i-1}, s) = G_{i-1}(s) \quad (\text{A6b})$$

$$\theta_i D_i \frac{d\bar{C}_i(X=l_i, s)}{dX} = G_i(s) \quad (\text{A6c})$$

$$D_m \frac{d^2 \bar{C}_m}{dX^2} - v_m \frac{d\bar{C}_m}{dX} - (k_m + sR_m) \bar{C}_m = -\bar{\gamma}_m(s) - R_m f_i, \quad l_{m-1} \leq X \leq l_m \quad (\text{A7a})$$

$$\theta_m D_m \frac{d\bar{C}_m}{dX}(X = l_{m-1}, s) = G_{i-1}(s) \quad (\text{A7b})$$

$$a_L \bar{C}_m(X = L, s) + b_L \frac{d\bar{C}_m}{dX}(L = L, s) = G_L(s) \quad (\text{A7c})$$

ACKNOWLEDGMENTS

The first author acknowledges support by the Center of Excellence of Information and Communication Technologies (C.E.T.I.C) and the Department of Physics of the University of Yaoundé 1. The content of this manuscript does not reflect the views of the agencies and no official endorsement should be inferred.

GRANT SUPPORT DETAILS

The present research did not receive any financial support.

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare that there is not any conflict of interests regarding the publication of this manuscript.

LIFE SCIENCE REPORTING

No life science threat was practiced in this research.

REFERENCES

- Al-Niami, A. N. S and Rushton K. R. (1979). Dispersion in stratified porous media. *Water Resour. Res.*, 15 (5); 1044-1048.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2017). Analytical solution of advection diffusion equation with spatially dependent dispersivity. *J. Eng. Mech.*, 143(11); 1–11.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2018). Analytical solutions for solute transport from varying pulse source along porous media flow with spatial dispersivity in fractal & Euclidean framework. *Eur. J. Mech. B Fluids*, 72; 410–421.
- Bharati, V. K., Singh, V. P., Sanskrityayn, A. and Kumar, N. (2019). Analytical solution for solute transport from a pulse point source along a medium having concave/convex spatial dispersivity within fractal and Euclidean framework. *J. Earth Syst. Sci.*, 128(203).
- Carr, E. J., Turner, I. W. (2016). A semi-analytical solution for multilayer diffusion in a composite medium consisting of a large number of layers. *Appl. Math. Model.*, 40; 7034-7050.
- Carr, E. J. (2020). New semi-analytical solutions for advection-dispersion equations in multilayer porous media. *Transp. Porous Med.*, 135; 39–58.
- Carr, E. J. (2021). Generalized semi-analytical solution for coupled multispecies advection-dispersion equations in multilayer porous media. arXiv: 2006.15793v2 [Physics-Comp-Ph] 27 Jan 2021.
- Chaudhary, M., Kumar, Thakur, C. and Singh, M. K. (2020). Analysis of 1-D pollutant transport in semi-infinite groundwater reservoir. *Environmental Earth Sciences* (2020) 79(24).
- Chaudhary M. and Singh, M. K. (2020). Study of multispecies convection-dispersion transport equation with variable parameters. *J. Hydrol.* 591 (2020) 125562
- Chen, J. S., Li, L. Y., Laia, K. H. and Liang, C. P. (2017). Analytical model for advective-dispersive transport involving flexible boundary inputs, initial distributions and zero-order productions.

- S0022-1694(17)30587-5 DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhydrol.2017.08.050>.
- Das, P., Begam, S. and Singh, M. K. (2017). Mathematical modeling of groundwater contamination with varying velocity field. *J. Hydrol. Hydromech.*, 65 (2); 192-204.
- Djordjevich, A. and Savovic, S. (2013). Solute transport with longitudinal and transverse diffusion in temporally and spatially dependent flow from a pulse type source. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 65; 321-326.
- Ema'a Ema'a, J. M., Ben-Bolie, G. H., Ele Abiama, P., Ali Zarma, Owono Ateba, P. (2015). A three-dimensional analytical solution for the study of air pollutant dispersion in a finite layer, *Boundary-Layer Meteorol.* DOI 10.1007/s10546-014-9997-0
- Freeze, R. A. and Cherry, J. A. (1979). *Groundwater*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Jaiswal, D. K., Kumar, A., Kumar, N., Singh, M. K. (2011). Solute transport along temporally and spatially dependent flows through horizontal semi-infinite media: dispersion proportional to square of velocity. *J. Hydrol. Eng.*, 16 (3); 228-238.
- Kumar, A., Jaiswal, D. K. and Kumar, N. (2010). Analytical solutions to one-dimensional advection-diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite media. *J. Hydrol.*, 380; 330-337.
- Kumar, R., Chatterjee, A., Singh, M.K. and Singh, V.P. (2019). Study of solute dispersion with source/sink impact in semi-infinite porous medium. *Pollution* 6(1); 87-98.
- Leij, F. J., Dane, J. H., and van Genuchten, M. Th. (1991). Mathematical analysis of one-dimensional solute transport in a layered soil profile. *Soil Sci. Soc. Am.*, J. 55; 944-953.
- Leij, F. J., van Genuchten, M. Th. (1995). Approximate analytical solutions for solute transport in two-layer porous media. *Transp. Porous Med.*, 18; 65-85.
- Liu, C., Ball, W. P., and Ellis, J. H. (1998). An analytical solution to the one-dimensional solute advection-diffusion equation in multi-layer porous media. *Transp. Porous Med.*, 30; 25-43.
- Liu, C., Szecsody, J. E., Zachara, J. M. and Ball, W. P. (2000). Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. *Adv. Water Resour.*, 23; 483-492.
- Manger, G. E. (1963). Porosity and bulk density of sedimentary rocks. U.S. Atomic Energy Commission USGPO, Washington, D.C.
- Moreira, D. M., Tirabassi, T., Vilhena, M. T., and Goulart, A. G. (2010). A multi-layer model for pollutant dispersion with dry deposition to the ground. *Atmospheric Environ.* 44; 1859-1865.
- Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Costa, C., and Bodmann, B. (2006). Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. *Water, Air and Soil Pollution*, 177; 411-439.
- Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Buske, D (2009). On the GILTT formulation for pollutant dispersion simulation in the atmospheric boundary layer. *Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications*, CRC Press, Boca Raton - Florida (USA), 179-202.
- Park, E. and Zhan, H. (2001). Analytical solution of contaminant transport from one-, two-, and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 53; 41-61.
- Pérez, Guerrero, J. S., Pimentel, L. C. G., Skaggs, T. H., and van Genuchten, M. Th. (2009). Analytical solution of the advection-diffusion transport equation using a change-of-variable and integral transform technique. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 52(1314); 3297-3304.
- Pérez, Guerrero, J. S., and Skaggs, T. H. (2010). Analytical solution for one-dimensional advection-diffusion transport equation with distance dependent coefficients. *J. Hydrol.*, 390 (2010) 57-65.
- Pérez Guerrero, J. S., Pimentel, L. C. G., and Skaggs, T. H. (2010). Analytical solution for the advection-diffusion transport equation in layered media. *Int. Journal of Heat and mass transfert*, 56(2013); 274-282.
- Rodrigo, M. R., and Worthy, A. L. (2016). Solution of multilayer diffusion problems via the Laplace transform. *J. Math. Anal. Appl.*, 444; 475-502.
- Rumer, R. R. (1962). Longitudinal dispersion in steady and unsteady flow. *J Hydraul. Div.* 88(HY4); 147-172.
- Sanskritayn, A., Bharati, V. K., and Kumar, N. (2016). Analytical solution of advection-dispersion equation with spatiotemporal dependence of dispersion coefficient and velocity using Green's function method. *J. Groundwater Res.* 5(1); 24-31.
- Sanskritayn, A., Bharati, V. K., and Kumar, N. (2018). Solute transport due to spatio-temporally dependent dispersion coefficient and velocity: analytical solutions. *J. Hydrologic Engineering*, 23(4); 04018009.
- Scheidegger, A. E. (19957). *The physics of flow through porous media*. University of Toronto Press,

Toronto.

- Serrano, S. E. (1992). The form of the dispersion equation under recharge and variable velocity, and its analytical solution. *Water Resour. Res.*, 28(7); 1801-1808.
- Sim, Y. and Chrysikopoulos, C.V. (1996). One-dimensional virus transport in porous media with time-dependent inactivation rate coefficients. *Water Resour. Res.* 32(8); 2607–2611.
- Singh, M. K. and Das, P. (2015). Scale dependent solute dispersion with linear isotherm in heterogeneous medium. *J. Hydrol.*, 520; 289–299.
- Singh, M. K. and Kumari, P. (2014). Contaminant concentration prediction along unsteady groundwater flow. In: Basu SK, Kumar N (eds) *Modelling and simulation of diffusive processes*. Springer, Cham, 257–275.
- Thakur, C. K., Chaudhary, M., van der Zee, S. E. A. T. M. and Singh, M. K. (2019). Two-Dimensional solute transport with exponential initial concentration distribution and varying flow velocity. *Pollution*, 5(4); 721-737, Autumn 2019.
- Trefethen, L. N., Weideman, J. A. C., Schmelzer, T. (2006). Talbot quadratures and rational approximations. *BIT Numer. Math.*, 46, 653–670.
- Yadav, R. R., Kumar, L. K. (2018). Two-dimensional conservative solute transport with temporal and scale-dependent dispersion: analytical solution. *International Journal of Advance in Mathematics*, 2018 (2), 90-111.
- Zimmerman, R. A., Jankowski, T. A., Tartakovsky, D. M. (2016). Analytical models of axisymmetric reaction-diffusion phenomena in composite media. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 99, 425-431.