

Objectif

Rflow est un logiciel dédié à la modélisation des panaches de substances organiques. Il peut simuler le transport, le retard, la dissolution d'un mélange organique à la source et la biodégradation. Nous avons souhaité que l'interface soit simple. Rflow est limité à certaines situations :

- le domaine de travail est à 2 dimensions
- l'écoulement est supposé permanent
- un seul panache de composés organiques est présent dans un milieu de composition chimique homogène
- les réactions sont ordonnées selon les lois de la thermodynamique, mais en tenant compte de cette contrainte, il est possible de fixer des cinétiques de dégradation

Le module d'écoulement utilise Modflow 2000. Pour le transport et les réactions, Rflow utilise des approches semi-analytiques qui ont l'avantage de donner des résultats instantanément, mais qui peuvent être approximatives dans des situations spécifiques (souvent en présence d'hétérogénéités importantes).

Les logiciels RT3D et PHT3D sont inclus dans l'interface, ce qui permet, après le calage effectué par la méthode rapide Rflow, de valider la simulation avec RT3D ou PHT3D.

Fonctionnement

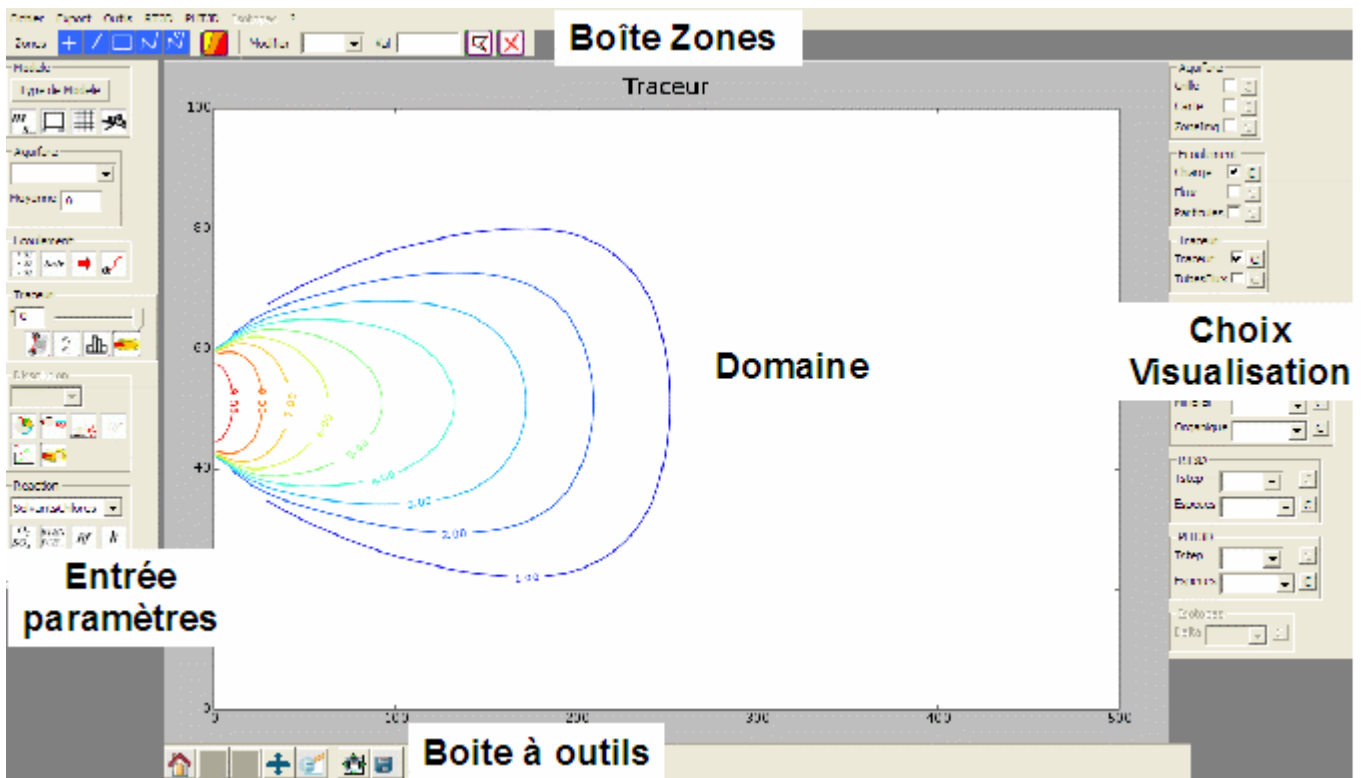
L'entrée de données est originale : à tous les paramètres on attribue une valeur moyenne sur l'ensemble du domaine éventuellement complétée par des zones spécifiques au sein desquelles la valeur de ce paramètre est différente de la valeur moyenne. Ceci permet de conserver toutes les données lors d'une éventuelle modification de la grille.

La plupart des opérations sont réalisées en remplissant des boîtes de dialogues, ordonnées par les boîtes Modèle, Aquifère... sur le panneau de gauche. Le panneau central représente le domaine de travail avec les données d'entrée ou les résultats de simulation. Le panneau de droite permet de choisir les données à représenter.

la boîte à outils du haut permet de créer et de manipuler des zones, et enfin la boîte à outil du bas permet de zoomer, sauver l'image...

La progression dans le calcul fait apparaître des boîtes qui étaient auparavant grisées. Les boîtes disponibles sont fonction des options choisies.

Dans Rflow2D chaque paramètre ne peut être renseigné qu'à un seul endroit de l'interface. Il n'y a pas pour l'instant de bouton qui permette de revenir en arrière. Cependant il est toujours possible de re-modifier une valeur et comme les calculs sont instantanés une erreur sur un paramètre est vite rattrapée. Il est cependant conseillé de créer des copies du modèle lors des étapes de calcul afin de bien enregistrer les différents tests effectués.



Installation

Il suffit d'installer VisualRflow.exe en double-cliquant dessus. Vous pouvez le mettre dans n'importe quel répertoire. Si vous avez des problèmes pour faire fonctionner modflow une fois Rflow installé, il est possible qu'il y ait des problèmes de droit sur le répertoire d'installation ou sur le répertoire ou est votre exemple. Dans ce cas, installez les deux dans un répertoire où vous êtes sûr d'avoir le droit d'écrire des fichiers (notamment si vous avez une installation réseau).

Une fois installé il y a un répertoire exemple qui contient les cas décrits dans le livre et un répertoire documentation qui contient cet aide en pdf, mais aussi les documentations de modflow, de Rt3d et de Pht3d.

Licence

Lorsque vous téléchargez Rflow, il est en mode démo, c'est à dire que les fonctionnalités d'enregistrement sont désactivées, toutes les autres fonctionnalités sont présentes. Pour passer en mode complet, il vous faut procéder de la façon suivante :

En cliquant dans le menu Aide sur licence, vous verrez apparaître l'écran de gauche. Copiez le numéro situé dans la première ligne et envoyez-le à l'éditeur qui vous renverra un autre numéro que vous copierez dans la deuxième ligne, puis cliquez sur OK.

Ceci active votre licence et toutes les fonctionnalités. Cette licence n'est valable QUE pour l'ordinateur sur lequel vous avez installé Rflow, il vous faut faire la même démarche pour un autre ordinateur et donc demander une autre licence.

Menus

Fichier : ouvrir

Permet d'ouvrir un modèle de type .rflow qui a été sauvegardé précédemment ; vous pouvez chercher ce modèle dans n'importe quel répertoire.

Fichier : enregistrer et enregistrer sous

Sauver un fichier au format .rflow : le fichier Rflow est en format xml, il est donc lisible avec un simple éditeur de texte, si vous voulez retrouver les données contenues dans un modèle sans avoir à ouvrir toutes les boîtes de dialogue.

Avec *enregistrer sous* on peut sauvegarder le fichier sous un autre nom, pratique conseillée lorsque l'on teste différentes hypothèses. Lorsque vous lancez Modflow puis Rt3D, Rflow produit de très nombreux fichiers qui ont le même nom de départ que le fichier Rflow mais avec des extensions différentes.

Quand vous faites *enregistrer sous*, Rflow n'enregistre que le fichier .rflow, les autres fichiers (modflow et rt3d) doivent être re-crées en lançant modflow et Rt3D.

Conseil : comme l'exécution de Rt3d et surtout Pht3d demandent un certain temps, lorsque vous avez fait une simulation créez un nouveau fichier rflow pour tester de nouveaux paramètres (sinon il écrasera la simulation précédente). Créez ce fichier dans un répertoire différent pour vous y retrouver.

Export

Le bouton export permet d'exporter la concentration du traceur ou des réactifs. Il y a plusieurs sous-menus.

TraceurI : (I pour irrégulier) les valeurs exportées sont situées sur la grille matérialisée par les tubes de flux. Le bouton exporter fournit ainsi plusieurs fichiers qui sont tous construit à partir du « nom du modèle » puis XP, YP qui sont les coordonnées des points de la grille irrégulière, TP qui est le temps pour atteindre ce point depuis la source, CU1 qui est l'abscisse curviligne depuis la source au point considéré et enfin Ct qui est la concentration du traceur.

TraceurR exporte une seule matrice qui a la taille de votre grille et qui contient les valeurs du traceur extrapolées sur cette grille.

Les sous-menus *ReactionI* et *ReactionR* permettent d'exporter les concentrations de toutes les espèces sur la grille irrégulière ou régulière décrites ci-dessus. Le nom contient le nom du modèle complété de celui de chaque espèce. Si vous désirez exploiter les données sur la grille irrégulière, il est intéressant d'avoir les données de position des points (XP, YP) , fournies lors de l'export de traceurI.

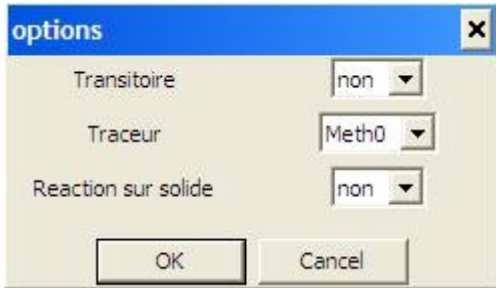
Les sous-menus RT3D et PHT3D donnent la possibilité d'exporter la variable et le pas de temps actuellement visualisés, sous forme d'une matrice en fichier texte dont le nom est construit à partir du nom du modèle, de la variable et du pas de temps.

Pour exporter directement sous forme d'image, il faut utiliser l'icône disquette dans la boîte à outils du bas.

Outils : Profil

Cet outil permet de faire un profil des valeurs sur n'importe quelle ligne traversant le panache. Après avoir cliqué sur ce sous-menu, utilisez l'outil zone pour tracer une ligne sur le domaine. Lorsque la ligne est tracée vous voyez apparaître un graphique représentant les valeurs de la variable représentée le long de la ligne que vous venez de tracer. Vous pouvez exporter ces valeurs à l'aide du bouton exporter. Le fichier créé sera nommé du nom de votre exemple suivi de profil.

Outils : Options calcul



Ici il est possible de sélectionner certaines options du modèle. Le mode transitoire permet d'afficher les boutons de calcul transitoire dans traceur et réaction.

Le mot clé traceur offre trois choix : Meth0, Meth1, Meth2 correspondant aux méthodes dites FT1, Craig et FT2 décrites dans la partie théorique du transport.

La réaction sur le solide concerne les solvants chlorés qui peuvent être dégradés soit uniquement en phase dissoute (par défaut) soit en phase dissoute et aussi sur le solide (mettre oui).

Outils : import données

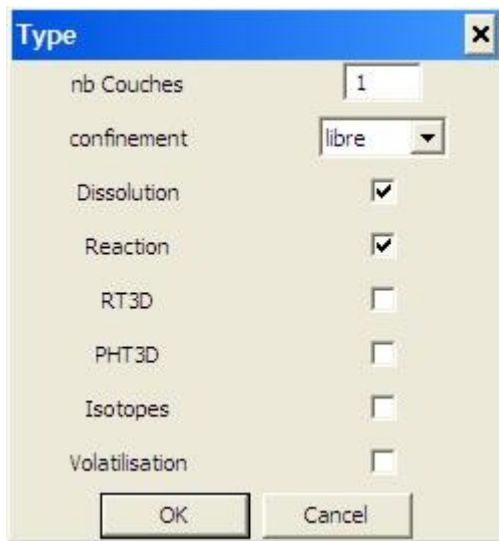
Il est possible d'importer des données mesurées dans les forages présents sur votre domaine. Pour cela constituez un fichier texte séparé par des tabulations (type txt exporté par excel) comprenant une ligne de titre et autant de lignes que de forages. Chaque ligne doit commencer par le nom du forage et être suivie par les données correspondant aux colonnes. Les noms de colonnes doivent correspondre exactement aux noms des résultats qui peuvent être calculés par Rflow2D (Charge, Traceur, BTEX...). Lorsque le fichier est importé et que la case Data est cochée dans le menu visualisation les données correspondant aux forages s'afficheront lorsque vous représenterez un type de résultat.

Outils : graphe XY

Lorsque des données ont été importées et qu'une simulation a été réalisée vous pouvez aussi comparer directement les données et les résultats du modèle à l'aide d'un graphique XY. Ces données peuvent être exportées à l'aide du bouton export du graphique.

Modèle

Modèle : Type



Ici vous pouvez choisir le type de modèle (confiné ou libre). Mais aussi le nombre de couches (conserver 1 tant que le 3D n'est pas encore disponible dans le modèle). Vous pouvez aussi déterminer le type de modèle que vous aller utiliser : réactif, permanent ou transitoire. Vous pouvez aussi choisir des options (RT3D, PHT3D, Isotopes, ...). Selon les options activées, vous verrez ou non le contenu des boîtes de dialogue de l'onglet "VUE" (à droite) et les mesures correspondantes.



Modèle : unités

Il faut choisir les unités du modèle, elles resteront valables tout le temps, vous pouvez cependant les changer en cours de simulation cela n'affecte pas les résultats ; restez cependant cohérent dans tous les onglets du modèle, en particulier entre les perméabilités et les temps de calcul pour le transport. Il est conseillé de travailler en m/an ou m/j car les simulations du transport seront le plus souvent en années, voire en jours.



Modèle : carte

En cliquant sur l'icône carte, on peut rajouter un fichier carte en fond d'écran, c'est obligatoirement un fichier .gif. La carte s'ajuste automatiquement aux dimensions du domaine, préparez donc bien votre carte. Si vous utilisez plusieurs cartes elles doivent toutes avoir les mêmes dimensions. Vous pouvez aussi utiliser cette icône pour ajouter une image représentant vos résultats (contours de données par exemple) afin d'ajuster le modèle.



Modèle : domaine

Permet de choisir les dimensions du domaine. Si vous modifiez ces dimensions alors que des zones ont été définies pour certaines variables, vous devrez les reconstruire, donc définissez les au début et ne les changez plus par la suite. Le direction horizontale du domaine est orienté est-ouest. Si vous souhaitez simuler un domaine dont l'axe principal fait un angle avec l'axe est-ouest, il faut réaliser une image à partir d'un rectangle incliné sur votre plan d'origine.



Modèle : grille

Dimension de la grille : largeur des cellules (axe horizontal) et hauteur des cellules (axe vertical). La dimension de la grille peut-être modifiée tout au long du processus de modélisation car les zones sont

indépendantes de celle-ci.

Taille des mailles

L'intérêt majeur de l'interface de Rflow réside dans le concept de zones. En effet, avec cette approche il est possible d'effectuer un changement de taille de grille avec adaptation instantanée des zones de perméabilité (ou d'autres variables). Il est donc possible d'affiner la grille avec les mêmes données de base. Ceci est très utile pour le transport en différences finies qui nécessite souvent une grille fine pour RT3D. Pour Rflow, qui calcule en semi analytique, une bonne grille pour l'écoulement suffit.

Modèle : variables



La liste de choix permet de choisir la variable sur laquelle on travaille.

La valeur du bouton de dessous est la valeur de la variable sur l'ensemble du domaine., elle peut être modifiée en cliquant sur le bouton

les variables sont la base de la définition du modèle d'écoulement. La valeur moyenne de chaque variable doit être renseignée dans le rectangle situé en dessous du nom de la variable, et sera valide sur l'ensemble du domaine hormis dans les éventuelles zones liées à cette variable. On doit définir le **mur** (base de l'aquifère) et le **toit** (sommet). Le toit doit évidemment être plus haut que le mur en tous points. Les hauteurs sont définies avec l'unité de distance du modèle. Il est possible de définir des zones de profondeur différentes sur des parties du domaine ; prenez garde à ne pas affecter les considérées de discontinuités trop brutales.

Potentiel : à l'aide de l'outil "zone" on peut définir des zones de *potentiel imposé* sur le domaine. La valeur de base sera utilisée pour les conditions initiales du calcul. Si vous ne définissez aucune condition aux limites de potentiel, modflow ne donnera aucun écoulement aux bornes du domaine.

L'approche la plus classique consiste à imposer une droite de potentiel imposé à l'entrée et une autre à la sortie de l'aquifère. Ces droites peuvent correspondre à des mesures en ces points ou à des estimations si on a créé un domaine beaucoup plus grand que la zone d'étude.

Il n'est pas possible d'imposer des limites de flux, sauf en utilisant des forages.

Cellules inactives : permet de déclarer des zones inactives, c.à.d qui ne seront pas utilisées par modflow. Pour cela prenez garde de bien attribuer pour chaque zone de cellule inactives la valeur 0. La valeur par défaut de cette variable est fixée à 1 pour que le modèle puisse calculer.

Perméabilité : données en $L.T^{-1}$ selon les unités du modèle utilisées, p.ex. en m/an (l'unité est indiquée). C'est dans cette partie que l'on devra faire un important travail de zonage. Il est cependant conseillé de démarrer avec une valeur homogène et de créer des zones progressivement.

Il est possible d'implanter des **forages** avec l'outil *point*. Pour chaque forage on donnera un nom et la valeur du flux pompé (-) ou injecté (+) dans l'unité choisie au départ ($L^3.T^{-1}$)

La valeur de la **porosité** peut aussi être précisée sur la zone

La **recharge** en $L.T^{-1}$ peut être imposée sur toute la région ou sur des zones particulières comme pour les autres variables, elle correspond à l'infiltration vers la nappe.

Les autres variables : **rivière** et **general head** ne sont pas encore implémentées.

Modèle : Maniement des zones

Les zones sont de type point, ligne droite, rectangle, polygone et ligne variable (icône avec un v au dessus).



Pour le **point**, un seul clic conduit à la création d'un point.

Pour la **ligne droite**, deux points suffisent, vous pouvez libérer le bouton de la souris entre les deux points

Pour un **rectangle**, cliquer le point de départ et cliquer de nouveau lorsque la taille du rectangle voulu est atteinte.

Un **polygone** est dessiné en cliquant les points successifs avec le bouton gauche de la souris, son dessin est terminé avec le **bouton droit**. Attention un polygone ne se ferme pas automatiquement, il appartient à l'utilisateur de positionner le point final superposé à celui du départ (avec la précision de la grille)

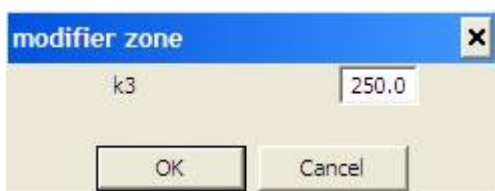
Il existe une option intéressante qui permet de dessiner des **lignes variables**, c.à.d que la valeur varie linéairement entre chaque point cliqué. A chaque point apparaît une boîte de dialogue qui demande la valeur de la variable en ce point. Le polygone se termine, comme précédemment avec un clic droit. La boîte de dialogue ouvert à la fin permet de donner un nom à la zone et de fixer la valeur du dernier point. Cette option est particulièrement utile pour les conditions de potentiel de type rivière.

Lorsque vous dessinez une zone les autres menus sont désactivés : il est nécessaire de terminer la zone avant d'effectuer une nouvelle action.

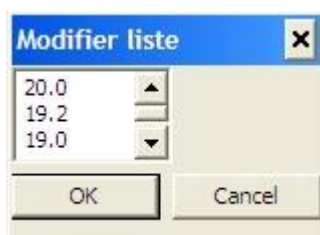
Apparition-disparition des zones : en changeant de variable, apparaissent les zones correspondant à cette variable qui ne peuvent être modifiées qu'à ce moment.

Modification d'une zone

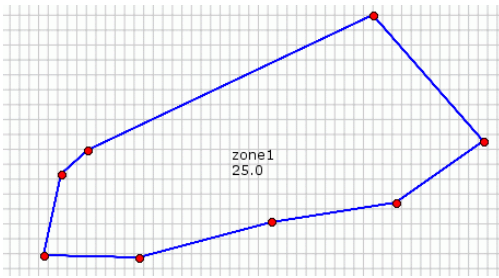
Les zones peuvent être modifiées. Après avoir sélectionné le nom de la zone dans la boîte de choix, la valeur associée à cette zone apparaît dans la boîte située à droite de la boîte zone et permet d'en modifier la valeur (la modification est effective lorsqu'on clique sur un autre bouton).



lorsqu'il s'agit d'une liste, le dialogue ci-dessous apparaît et vous pouvez modifier les valeurs de chaque point



Il est aussi possible de détruire une zone en cliquant sur la croix rouge, ou de modifier son contour en cliquant sur le polygone.



Lorsque le bouton polygone est activé, les points relatifs à la forme apparaissent en rouge et peuvent être déplacés à volonté. Il est possible d'insérer un point (avec la touche 'i') et de détruire un point (avec la touche 'd').

Pour finir de modifier une zone, il faut cliquer de nouveau sur le bouton polygone dans la boîte zone.

En ce qui concerne les lignes variables il n'est possible de modifier que la position de chaque point et non la valeur de la variable en celui-ci. Si vous n'avez pas mis la bonne valeur, il faut détruire la zone et la reconstruire.



Interpolation

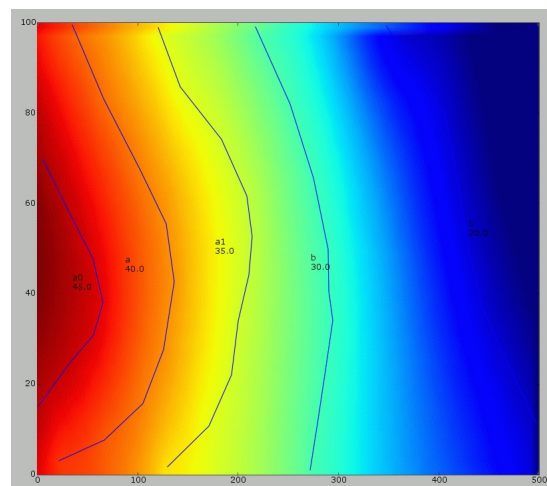
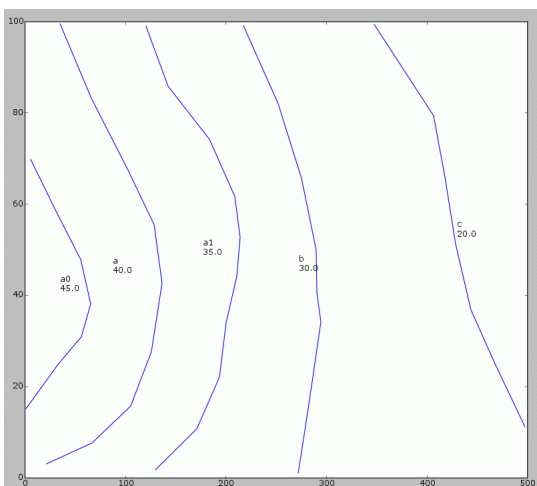


Un outil d'interpolation rapide est offert par Rflow. Il s'agit d'une interpolation de type gaussienne : le poids est égal à un au point considéré et diminue selon une gaussienne en fonction de la distance à ce point. Pour utiliser cette option, vous devez avoir coché la case interpoler (cf image de gauche) pour la variable que vous voulez interpoler.

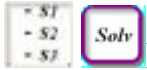
Pour voir le résultat, cliquez sur zoneImg.

Lorsque la case *interpoler* est cochée le même calcul sera fait avant de lancer modflow et la variable en question sera donc interpolée. Pour revenir à des valeurs par zone, il suffit de décocher la case interpoler (les zones sont conservées)

L'interpolation est assez simple afin de donner un résultat instantané ; si il y a des zones un peu irrégulières après interpolation, ajouter selon le cas, des points sur une ligne (cf maniement des zones) ou une nouvelle ligne intermédiaire. Vous pouvez bien évidemment déplacer à tout moment un point sur une ligne et modifier ainsi l'interpolation.



Écoulement



Écoulement : Solveur

Permet de choisir le type de solveur de Modflow. 4 solveurs sont disponibles dans Modflow et pour chaque solveur, une fenêtre avec les paramètres relatifs au solveur choisi apparaît. Pour modifier ces paramètres, il faut se référer au mode d'emploi de Modflow. Si vous n'êtes pas spécialiste, laissez les paramètres d'origine. Par contre si Modflow s'arrête en cours de simulation (p.ex. Pour un nombre d'itérations..) il faut alors modifier les paramètres du solveur.



Écoulement : Lancer Modflow

Ici Rflow écrit les fichiers nécessaires à modflow dans le répertoire qui contient le fichier rflow. Ensuite il lance Modflow 2000 et affiche la fenêtre de sortie de la fin de simulation.

Attention : il est nécessaire que dans la fenêtre modflow soit affiché NORMAL TERMINATION OF MODFLOW. Sinon il y a un problème (en général relatif aux conditions aux limites).

Pour valider votre simulation, il faut que vous alliez dans le fichier .lst dans lequel vous pourrez valider le bilan de masse (en fin de fichier). Vous pouvez aussi valider la qualité de l'écoulement en affichant la direction des écoulement avec l'outil flux (écran de droite dans l'onglet écoulement)

Dans Rflow, on utilise Modflow2000 version 1.10. nous avons conservé cette version, car les sorties de modflow qui sont utilisées pour la représentation changent de format selon les versions de Modflow : comme ces formats ne sont pas indiqués, les retrouver prend du temps .



Écoulement : Particules

Il est possible de simuler des trajectoires de particules lorsque modflow a fonctionné correctement. Pour cela, cliquez sur le bouton particules, et ensuite cliquez sur un point dans la fenêtre graphique. Vous verrez apparaître en rouge la trajectoire de la particule (la méthode utilisée est la même que celle de Pmpath : approche de pollock). Chaque fois que vous cliquez en un point, la trajectoire de la particule correspondante est dessinée. Le temps depuis le départ de la particule apparaît aussi.

Pour finir de tracer des trajectoires de particules, faites un clic droit. Si vous cliquez à l'extérieur de la fenêtre de visualisation, le tracé de particules n'est plus actif.

Par ailleurs, vous pouvez faire apparaître ou disparaître les particules de la fenêtre de visualisation en cliquant dans l'écran de droite dans l'onglet Écoulement en cochant Particules.

Lorsque vous cliquez de nouveau sur le bouton particules, les particules précédentes sont éliminées.

Traceur



Mode de calcul spécifique à Rflow2D ; le calcul du panache de traceur est instantané et correspond à une seule source. Le calcul peut aussi être effectué pour une source transitoire.



Traceur : placer la source

Ce bouton permet de placer la source de pollution en utilisant la boîte à outils "zones". Rflow fonctionne avec une solution analytique basée sur une source plane verticale (type solution de Domenico) comme le modèle est en 2D, le dessin de la source est une ligne. Ce bouton sert aussi à faire apparaître une zone source déjà tracée.

Attention, Rflow ne peut utiliser qu'une ligne source.

Si vous voulez modifier la position de la source, comme il s'agit d'une zone, utilisez l'outil de modification de zone dans la barre d'outil du haut. Afin d'être précis vous pouvez utiliser le zoom (barre d'outils du bas). Attention il peut y avoir des interactions car le zoom et la modification de zone dépendent tous deux basés de clic souris. Il est donc conseillé de régler le zoom en premier, de sortir de l'outil zoom (en cliquant une nouvelle fois dessus) et de modifier la zone ensuite. N'oubliez pas de cliquer à nouveau sur le bouton polygone pour que votre modification soit enregistrée.



Traceur : paramètres

C'est ici que vous choisissez les paramètres du transport : dispersivités, temps de simulation et éventuellement facteur de retard. Les dispersivités sont exprimées dans les unités du modèle.

La dispersivité longitudinale est souvent fixée à une dimension proche dixième du domaine de simulation et la dispersivité latérale à $1/10^{\circ}$ de la longitudinale. Les données de terrain sont cependant extrêmement variables. Il s'agit de paramètres de calage. La dispersivité longitudinale a un rôle secondaire sur la forme du panache. Par contre, il est conseillé de tester plusieurs valeurs pour la dispersivité latérale, une faible variation de celle-ci pouvant notablement modifier le panache..

Le temps à renseigner est le temps final de simulation, c.à.d le temps depuis le début de la contamination. Attention si vous avez activé le transport transitoire, vérifiez bien que votre temps final n'est pas supérieur à la durée que vous avez introduite dans le calcul transitoire. Par exemple si vous calculez avec un temps final de 5 ans, et que, dans le dialogue transitoire, des concentrations ne sont données que sur les deux premières années, le nuage de pollution sera peut-être sorti de la zone et vous ne verrez rien.

Le facteur de retard permet de représenter le panache avec un retard (en général lié à la sorption). Ce facteur de retard n'est pas repris dans le calcul des retard des substances réactives.



Traceur : temps

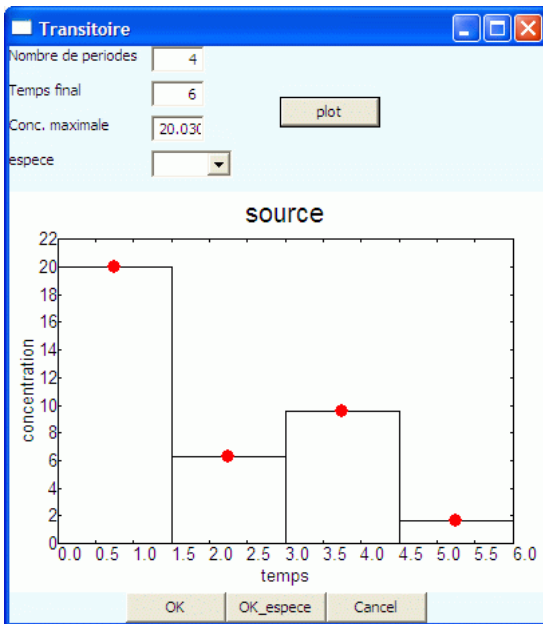
Ce bouton permet de faire varier le temps de la simulation avec un affichage direct du résultat. Le temps affiché dans cette boîte sera utilisé tout au long de la simulation, pour la dissolution ou les réactions par exemple.



Traceur : historique

Il est possible de faire du transport en conditions transitoires, l'écoulement restant permanent. On considère alors que l'écoulement est stable mais que les concentrations à la source varient. Ce bouton n'est visible que si vous avez coché la boîte transitoire dans le menu Outils/options.

Pour faire du transport en régime transitoire, vous devez cliquer le bouton historique



Pour établir une source transitoire il faut choisir le nombre de périodes, le temps final d'émission de la source ainsi que la concentration maximale à la source. Quand vous avez fait ces choix, cliquez sur OK et, dans le graphe du bas apparaissent autant de points que de périodes choisies. Vous pouvez ensuite déplacer les points de haut en bas afin de fixer la bonne valeur de concentration à la source.

Les périodes ont des durées égales, si vous voulez allonger certaines périodes mettez simplement deux ou plusieurs périodes à la même valeur.

En appuyant sur OK_ESPECES les périodes sont fixées pour la durée de la simulation.

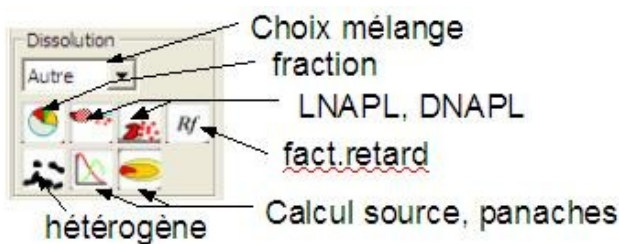
Attention, le résultat peut apparaître un peu contradictoire au début, en effet, dans l'historique, la première période de concentration est celle qui est au front du panache, donc le plus en avant, alors qu'elle est, sur le graphe ci-contre située au début (à gauche donc).



Traceur : lancer le calcul

En cliquant sur ce bouton, on lance le calcul du traceur, et le résultat s'affiche instantanément à l'écran. Le résultat correspond au temps qui s'affiche dans la boîte temps.

Dissolution



Cet onglet permet de calculer la dissolution de phases organiques présentes dans la nappe ou au toit de celle-ci, en tenant compte du type de sol, du type de substance et d'éventuels facteurs de retard. Les résultats sont exprimées sous forme de concentrations ou de masse à la source et sous forme de panaches

Dissolution : choix du mélange

La dissolution se fait à partir d'une phase organique qui est un mélange de composés organiques. Plusieurs compositions typiques sont données : essence, diesel, fuel lourd. Par la suite, l'onglet fraction permet de modifier éventuellement le pourcentage de chaque substance dans le mélange.

Par ailleurs, il est possible de créer des mélanges différents en utilisant le choix "Autre", qui ouvre une

boîte de dialogue contenant les composés présents en base de donnée. Il suffit de cliquer sur les composés présents dans la phase les uns après les autres.



Dissolution : fraction

Avec ce bouton on obtient un dialogue permettant voir ou de modifier la fraction molaire de chaque substance dans le mélange. Ici, on ne tient compte que de la fraction des substances solubles, dans le cas des hydrocarbures ; les alcanes sont considérés comme très faiblement soluble par rapport aux BTEX + MTBE et Naphtalène. *Attention* pour modifier les valeurs tenez compte du fait que ces données sont des fractions molaires ; si vous avez des données de fraction massique ou volumique celles-ci doivent être transformées en fractions molaires.



Dissolution : LNAPL

Paramètre	Valeur
sol	sable_grossier
Largeur (m)	1.0
Longueur (m)	1.0
Hauteur (m)	0.5
t_max	1.0

Ces boutons permettent de préciser les caractéristiques des sources de LNAPL. On doit choisir le type de sol, qui influence fortement la saturation en polluant dans la nappe. Par ailleurs, il faut entrer les dimensions de la zone source. La largeur est considérée dans le sens perpendiculaire à l'écoulement et la longueur, dans le sens de l'écoulement. La hauteur est celle de phase pure mesurée sur le forage.

On définit aussi le temps de calcul du phénomène de dissolution (t_{max}) en unités de temps du modèle (rappelées en haut du dialogue). Ce temps peut-être différent de celui qui est utilisé pour représenter le traceur car la source peut durer très longtemps.



Dissolution : DNAPL

Paramètre	Valeur
sol	sable_grossier
Largeur (m)	1.5
Longueur (m)	0.5
Hauteur (m)	1.0
Porosite	0.33
Saturation	0.06
Krelatif	0.65
t_max	10000

Comme pour les LNAPL, il faut ici renseigner le type de sol et les dimensions de la zone source. Il est possible de préciser les valeurs de la porosité et la perméabilité relative de la zone source car celle-ci peut être différente de celle du sédiment non contaminé ($K_{relatif}$ est le ratio de la perméabilité locale par rapport à la valeur moyenne du domaine). Dans ce cas il faut aussi définir, en outre, la saturation du milieu.

On définit aussi le temps de calcul du phénomène de dissolution (t_{max}) en unités de temps du modèle (rappelées en haut du dialogue). Ce temps peut-être différent de celui qui est utilisé pur représenter le traceur car la source peut durer très longtemps.



Dissolution : facteurs de retard

Un dialogue s'ouvre avec tous les composés présents dans le mélange et permet de régler les valeurs des facteurs de retard. *Attention*, le facteur de retard doit tenir compte du K_{oc} de la substance, mais aussi de la densité apparente du milieu et de la teneur en matière organique (voir partie théorique).



Dissolution : hétérogène

Ce dialogue permet de considérer une distribution hétérogène de la phase organique dans le cas des DNAPL. L'explication est donnée dans la partie théorique.

Paramètre	Valeur
Ratio	1.0
Ec_type	0.0

Le ratio correspond au rapport de la concentration de la substance organique juste à l'aval de la zone source sur la solubilité de la substance. Par exemple pour le TCE qui a dans la base de donnée une solubilité de 1270 mg/L, si on met un ratio de 0,5 la concentration en sortie de la zone source sera de 635 mg/L. Ceci implique que la source durera deux fois plus longtemps. Ce paramètre correspond au paramètre μ des distributions proposées par Jawitz (cf partie théorique)

Le paramètre Ec_{type} qui correspond au paramètre σ de Jawitz implique, s'il est différent de 0, que

lorsque la saturation en phase organique diminue, la concentration à l'aval de la source diminue aussi. Par rapport à l'exemple précédent, la concentration sera de 635 mg/L à l'aval lorsque la saturation sera élevée mais sera bien plus faible si la saturation devient proche de quelques %. Plus la valeur de σ est élevée, plus la diminution de la concentration sera lisse. Cependant le bilan de matière est conservé : en augmentant σ on aura donc aussi une durée de la zone source plus longue.



Dissolution : calcul de l'évolution de la source

Ce bouton permet de déterminer l'évolution des concentrations dans l'eau présente dans la source. Lorsque le calcul a fonctionné, un message indiquant qu'il a été effectué apparaît. *Attention* : pour que ce calcul fonctionne, vous devez avoir défini une source de pollution dans la boîte transport (pour obtenir les vitesses dans l'aquifère en ce point là).

La largeur de source LNAPL ou DNAPL considérée est celle que vous avez fixé dans le dialogue NAPL et non celle que vous avez représenté comme zone source. En effet, les zones sources NAPL sont parfois très petites et elles peuvent être difficiles à représenter correctement sur le plan du site.

Lorsque le calcul est terminé, on voit apparaître dans l'onglet de droite une liste de choix dans la boîte dissolution.

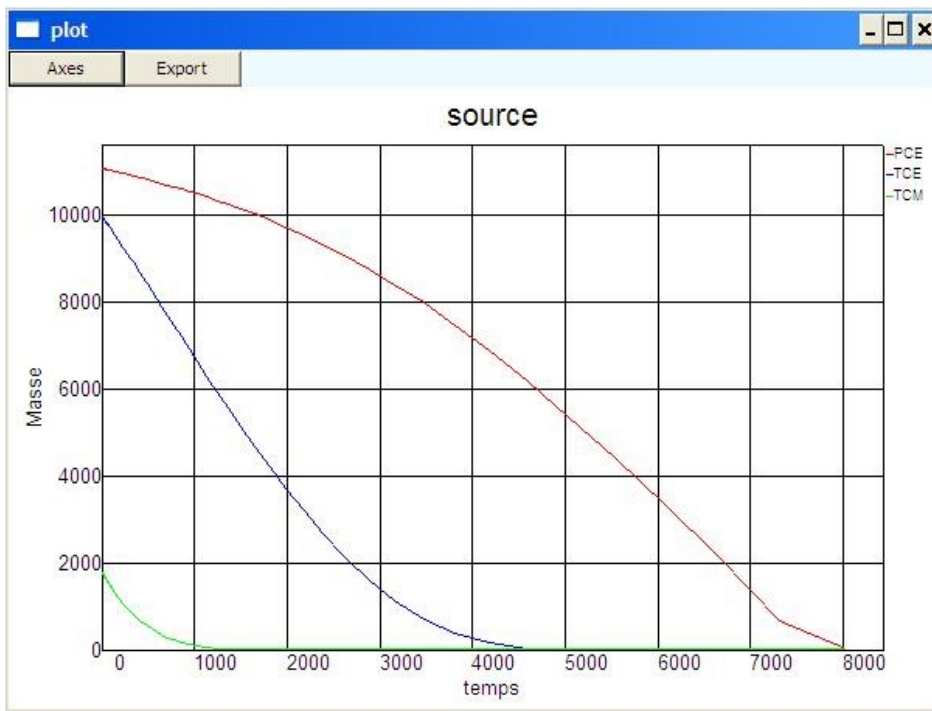
La saturation, représente, pour les LNAPL, la saturation en fonction de la profondeur dans le sol aux abords du piézomètre représentatif de la zone source, c.à.d correspondant à la hauteur de LNAPL introduite dans les caractéristiques de la source. Pour les DNAPL on suppose que leur distribution est homogène sur la verticale et la saturation est donc la moyenne donnée en fonction du temps.

La masse est celle du mélange dans la zone source (cf image ci-dessous). Dans le cas des LNAPL, cette masse ne représente que la masse des substances solubles, les substances très peu solubles du mélange (telles que les alcanes p.ex.) sont considérées comme restant dans le milieu.

La concentration maximale est celle qui va être observée dans l'eau au sein de la source.

La concentration moyenne est obtenue à partir de la concentration maximale répartie sur la hauteur de l'aquifère. Ainsi l'on peut tenir compte du fait que des piézomètre classiques mélangent l'eau sur toute la hauteur prélevée. Les deux valeurs sont très différentes. La concentration moyenne est utilisée pour calculer les panaches par la suite.

Le premier bouton en haut de la fenêtre permet de modifier les axes du graphique.



Ici vous pouvez modifier les limites des axes x et y. Il est aussi possible de choisir des axes x ou y logarithmiques. Dans ce cas, les axes donnent le log de la valeur et non 10^x . Ainsi pour réaliser des graphiques mieux présentés, utilisez le bouton Export et ouvrez le fichier crée dans un tableur.



Dissolution : lancer le calcul des panaches

En cliquant sur ce bouton, on lance le calcul des panaches de dissolution, et le résultat peut-être affiché à l'aide du panneau de droite (visualisation) en choisissant le composé.

Les paramètres sont calculés pour le temps donné par le traceur. Attention

Les panaches obtenus tiennent compte de la dissolution différentielle des composés calculée précédemment. Ceci explique que le composé le plus soluble puisse être plus concentré au front du panache qu'à la source.

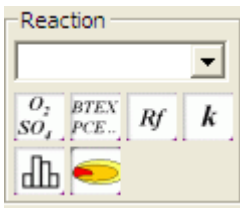
Le calcul il tient compte (de façon simplifiée) du fait que la source est moins perméable et donc que le flux d'eau qui la traverse est plus faible que celui qui traverse une même section en un autre point de l'aquifère (perméabilité relative).

Les valeurs des solubilités sont données dans le fichier Composes.txt présent dans le dossier de base de Rflow et qui peut être édité (il doit rester sous forme de fichier texte séparé par des tabulations comme un export txt depuis excel ou openoffice, ne pas changer les titres de colonnes)..

Réaction

C'est ici qu'il faut choisir les espèces que nous utiliserons pour la chimie (BTEX ou solvants chlorés)

L'onglet réaction est le cœur de Rflow, il inclut beaucoup de possibilités, mais, ici aussi, il est conseillé de respecter l'ordonnancement des menus si l'on veut obtenir des résultats pertinents.



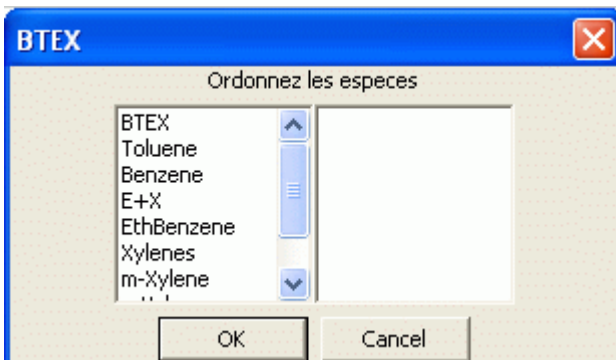
O₂ : Concentrations des accepteurs d'électrons
BTEX, PCE.. Concentrations des espèces organiques
Rf : Facteurs de retard
k Cinétiques
Historique des concentrations à la source
Lancer le calcul

Ici il s'agit de réactions de biodégradation comprenant un substrat organique et un accepteur ou un donneur d'électrons minéral (O₂, NO₃...) présent dans l'eau souterraine.

Reactions : Espèces

Le bouton de choix des espèces permet actuellement de choisir entre deux groupes : les BTEX et les solvants chlorés.

Après avoir choisi les BTEX, l'écran suivant apparaît.



Il est possible de travailler avec des espèces seules, ou des groupes d'espèces. En cliquant du côté gauche vous faites passer une espèce du côté droit et vice-versa. Ceci vous permet à la fois de choisir mais aussi d'ordonner les espèces. Le modèle traitera ces espèces dans l'ordre que vous aurez spécifié.

Si vous avez fait la simulation de la dissolution d'une source organique vous pouvez utiliser les données provenant de cette simulation. Ainsi, si une source contenant de l'essence se dissout, les concentrations variables de MTBE, benzène et autres seront utilisées comme concentrations de départ pour calculer les réactions avec les accepteurs d'électrons.

Ordonner les espèces

Ainsi si vous ne connaissez pas du tout l'ordre de dégradation ou que vous considérez que toutes les espèces se dégradent pareillement mettez BTEX. Si vous savez qu'il n'y a que du toluène et du benzène et que le toluène est dégradé en premier, mettez toluène puis benzène. Vous pouvez ainsi faire tous les choix possibles.

Solvants chlorés

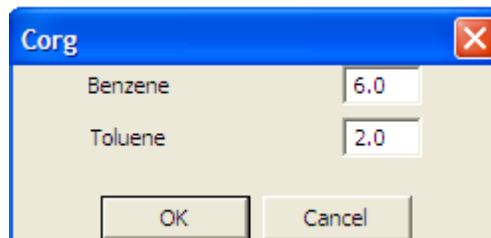
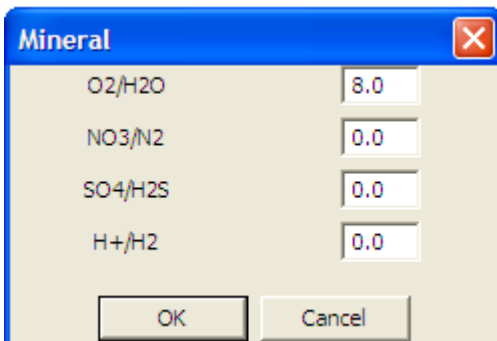


En ce qui concerne les solvants chlorés, il faut choisir les espèces qui sont présentes sur le site. Si vous voulez modéliser la biodégradation par déchloration réductrice (la seule présente dans le modèle), il faut inclure de la matière organique (Corg) afin que les conditions du milieu puissent devenir réductrices. Si vous choisissez du TCE et du CV il est indispensable de choisir aussi le DCE, sinon le modèle ne fonctionnera pas correctement.

!!ATTENTION !! lorsque vous actionnez le menu du choix des espèces, ceci détruit les concentrations en polluants et les cinétiques. Il ne faut faire cela que quand vous êtes sûrs de vouloir changer d'espèce. Par exemple les solvants chlorés sont traités dans l'exemple test, mais lors du travail sur cet exemple, n'actionnez pas le menu déroulant de choix des espèces chlorées sinon vous devrez réintroduire les concentrations.

Reactions : Concentrations

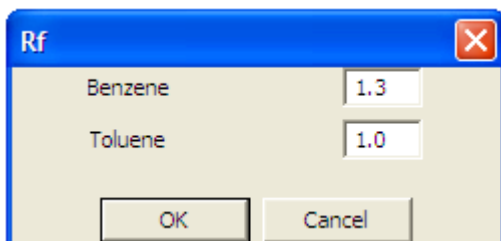
Les boutons BTEX/PCE... permettent de déterminer des concentrations à la source si vous avez choisi des concentrations constantes à la source. En ce qui concerne les accepteurs d'électrons, on considère que leur concentration est constante et homogène à l'amont de la pollution ; elle est fixée à l'aide du bouton O₂, SO₄ ...



!!! toutes les concentrations sont toujours en mg/L

Reaction : Facteurs de retard

Il est possible de choisir les facteurs de retard des espèces organiques (à calculer vous même). Ces facteurs de retard sont supposés constants sur tout le domaine.



Cinétiques

Lorsque vous cliquez le bouton « cinétiques », la fenêtre suivante apparaît :

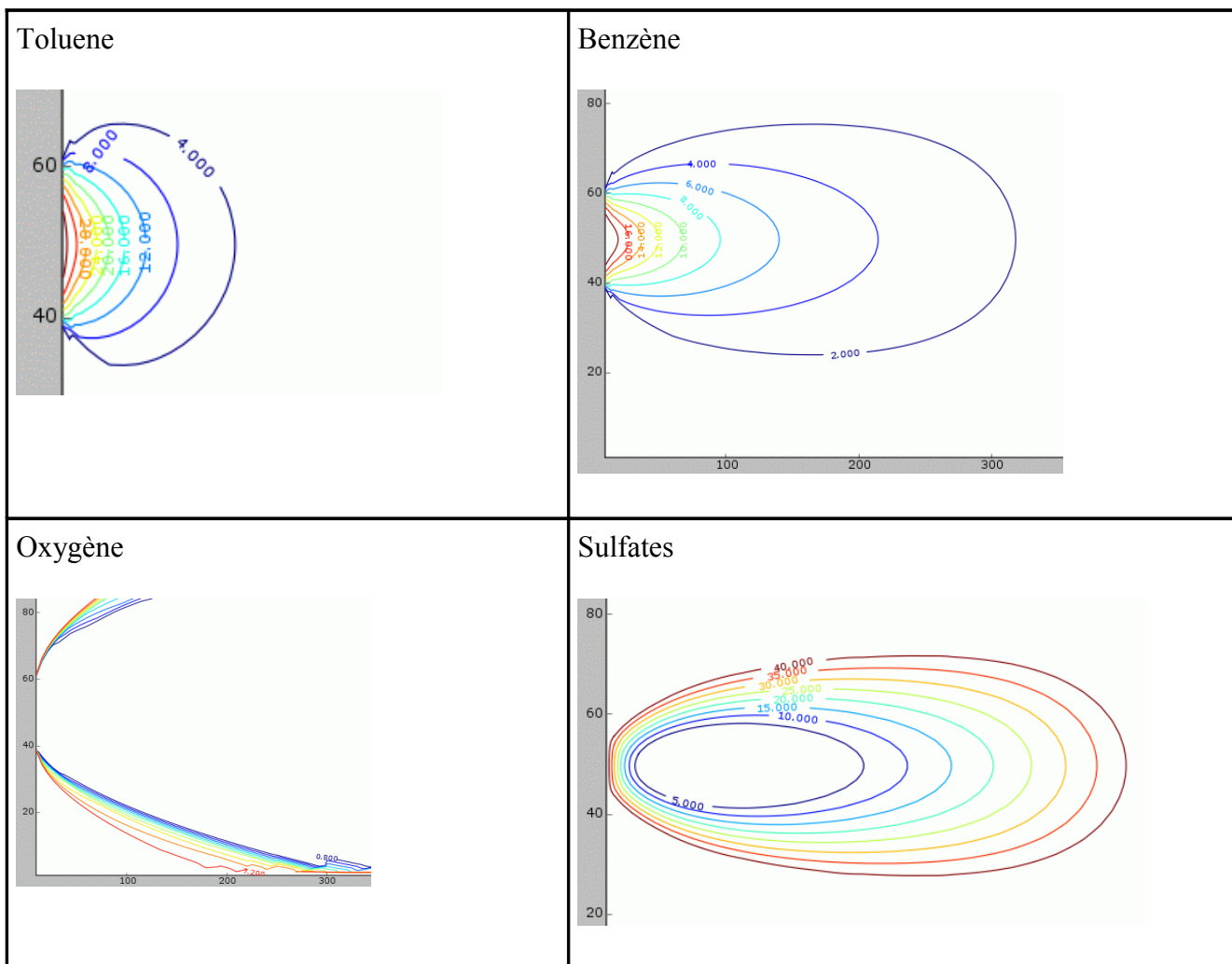
	Toluene	Benzene
O2/H2O	100.0	1.0
NO3/N2	0.0	0.0
SO4/H2S	100.0	0.0
H+/H2	0.0	0.0

OK Cancel

Cet écran comprend les constantes de réaction exprimées en t^{-1} , t étant l'unité de temps du modèle. Notons que les dégradations sont limitées par les réactifs : la matière organique ne se dégrade pas s'il n'y a pas assez d'accepteurs d'électrons.

A l'intersection de chaque colonne-polluant avec une ligne-AE, on trouve la valeur d'une constante cinétique du premier ordre, qui est celle de la réaction entre ces deux espèces. La cinétique est donnée dans les unités de temps⁻¹ du modèle. Lorsque l'on impose une valeur de 100, ou plus, la réaction est considérée comme instantanée. A l'inverse, pour une valeur zéro, il n'y a pas de réaction du tout.

L'exemple ci-dessous correspond à une dégradation préférentielle du toluène en présence d'oxygène (réaction instantanée) et de sulfates (réaction cinétique) suivie de celle du benzène (après que la réaction du toluène ait eu lieu). Nous constatons que le panache de toluène est très court, alors que celui de benzène est beaucoup plus étendu. L'oxygène a presque totalement disparu de la zone et les sulfates sont consommés par réaction avec le toluène dans le centre du panache.



Pour les **solvants chlorés**, le principe est le même que pour les BTEX, la lecture de l'écran peut être un peu plus compliqué

On a en effet ici la matière organique nécessaire pour créer un milieu rédox (toujours mettre une valeur de Corg) et les concentrations de toutes les espèces chlorées. On suit la matrice de gauche à droite et de haut en bas. Ainsi on a d'abord la matière organique (Corg) qui va être dégradée en présence d'oxygène puis de sulfates (on a décidé ici que les nitrates ne pouvaient pas être utilisés comme AE) ; quand il n'y a plus de sulfates la fermentation commence et l'on produit du H_2 . Il faut accorder une attention particulière au couple H^+/H_2 ; en effet les solvants chlorés ne sont dégradés qu'en présence d' H_2 , qui a été produit lors de la fermentation de la matière organique. Néanmoins comme cet H_2 provient de H^+ , il y en a toujours dans le milieu, on entre donc arbitrairement une valeur élevée (5 à 20 mg/L). Pour DCE et VC, il est possible d'avoir des constantes en milieu réducteur (avec H_2) c'est à dire dans le panache et en milieu oxydant (O_2) aux frontières du panache. Ici la constante de dégradation du TCE en présence de H_2 est de 2 an^{-1} , celle du DCE de 1 an^{-1} . Le DCE et le VC se dégradent en présence d' O_2 , avec des constantes de 1,5 et 1 an^{-1} respectivement.

	Corg	TCE	DCE	VC
O2/H2O	100.0	0.0	0.0	0.0
NO3/N2	0.0	0.0	0.0	0.0
SO4/H2S	100.0	0.0	0.0	0.0
H+/H2	25.0	5.0	1.5	0.0

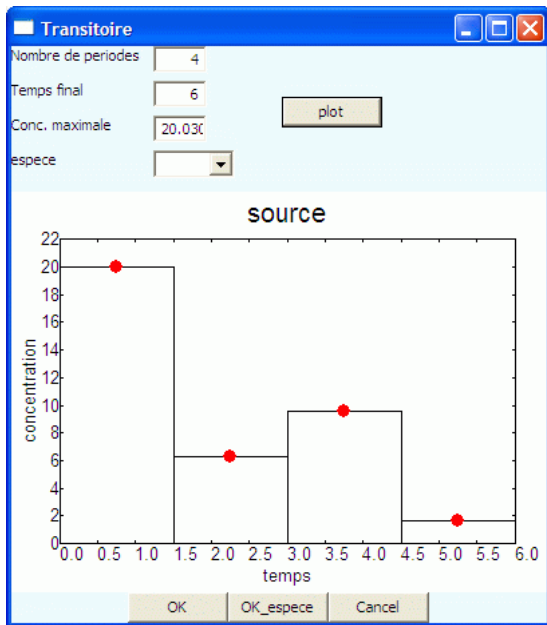
Le H_2 produit ici est fictif car la dégradation de Corg ne produit pas que du H_2 il faut considérer que la quantité de matière organique dégradable est la proportion qui donne naissance à du H_2 (que l'on doit toujours ajuster).

Si l'on considère que la dégradation peut avoir lieu en présence de sulfates et sans concurrence avec ceux-ci, il est possible de supprimer la réaction avec les sulfates car leur concentration n'a pas d'influence. Dans Rflow2D il n'y a pas de seuil : si une espèce réagit, celle-ci peut être consommée en totalité. Si le devenir d'une espèce n'a aucun lien avec le phénomène de dégradation envisagé il faut imposer une concentration ou une cinétique de dégradation nulle pour cette espèce.



Réaction : historique

Il est possible d'utiliser une source de pollution transitoire, l'écoulement restant permanent. On considère que l'écoulement est stable mais que les concentrations à la source varient. Ce bouton n'est visible que si vous avez coché la boîte transitoire dans le menu Outils/options.



Comme pour le traceur le nombre de périodes, la concentration maximale et le temps final sont fixés dans la partie supérieure du dialogue. Puis en cliquant sur le bouton plot apparaissent les périodes dans l'écran du bas. Il est alors possible d'ajuster les valeurs de concentration en déplaçant les ronds rouges.

Cette opération doit être réalisée pour chaque espèce présente à la source (même celles dont la concentration est nulle) en choisissant l'espèce dans la liste du haut. Lorsque les valeurs de l'espèce sont ajustées, cliquer sur le bouton OK_espece. Lorsque toutes les espèces ont été ajustées, cliquer sur le bouton OK.

Cette option est à utiliser avec prudence car toutes les possibilités n'ont pas été testées et les résultats, même justes, peuvent être surprenants.



Réaction : lancer le calcul

En cliquant sur ce bouton, on lance le calcul de la réaction, si tout se passe bien, apparaît un message indiquant que la réaction a fonctionné. Afin de visualiser les résultats utilisez l'écran de visualisation à droite.

Les possibilités sont ici très nombreuses et les résultats peuvent être très complexes en raison des interactions entre les différentes réactions. Il est donc conseillé de créer des cas de complexité progressive afin de bien comprendre les résultats des réactions envisagées.

Visualisation

The image shows a software interface for visualization options, organized into several sections:

- Aquifere:** Contains three checkboxes, each with a 'C' button to its right: Grille, Carte, and ZoneImg.
- Ecoulement:** Contains three checkboxes, each with a 'C' button to its right: Charge, Flux, and Particules.
- Traceur:** Contains two checkboxes, each with a 'C' button to its right: Traceur and TubesFlux.
- Reaction:** Contains two dropdown menus, each with a 'C' button to its right: Mineral and Organique.

Le panneau de droite permet de visualiser les résultats. En cochant ou en décochant une case, la variable listée apparaît dans l'écran central. Ceci permet de superposer plusieurs informations : une carte, la grille, des zones et des contours de certaines valeurs. Cependant pour des raisons de clarté, un seul contour apparaît. Selon les options choisies dans le modèle, des blocs de visualisation apparaîtront ou seront grisés (p.ex. pour la dissolution ou le calcul de RT3D ou PHT3D)

ZoneImg

les zones dessinées préalablement avec l'outil zone sont transformées en données sur une grille avant d'être injectées dans Modflow. Si vous voulez voir la distribution des valeurs sur le domaine avant de lancer le calcul, sélectionnez une variable dans la boîte "Aquifère" et cochez ensuite ZoneImg, ce qui vous donnera une image de votre variable. Utilisez aussi cette case pour visualiser les résultats d'une interpolation. Lorsque vous faites apparaître l'image ZoneImg, la carte de fond disparaît, pour la faire revenir cochez simplement la case carte.

Charge

permet de visualiser la carte piézométrique simulée à l'aide de Modflow.

Flux

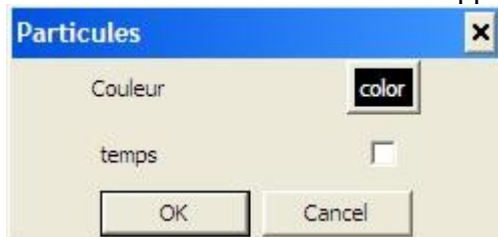
Cette case permet de visualiser le flux, c'est à dire les vecteurs vitesses au sein de chaque cellule. Il est aussi possible en cliquant sur le bouton à droite de la case à cocher (marqué C), de modifier la couleur ou de changer l'échelle des vecteurs (cf dialogue ci-dessous). Le dialogue de changement de couleur apparaît ci-dessous à droite.

The image shows two overlapping dialog boxes:

- Flux Dialog (Left):** Has a title bar with 'Flux' and a close button. It contains a 'Couleur' field with a 'color' button, an 'Echelle' field with the value '1.0', and 'OK' and 'Cancel' buttons.
- Color Selection Dialog (Right):** Has a title bar with a help icon and a close button. It features a grid of 'Couleurs de base' (basic colors), a 'Couleurs personnalisées' (custom colors) section with empty slots, and a large color wheel. Below the wheel are input fields for 'Teinte' (160), 'Rouge' (0), 'Satur.' (0), 'Vert' (0), 'Lum.' (0), and 'Bleu' (0). There are 'OK', 'Annuler', and 'Ajouter aux couleurs personnalisées' buttons.

Particules

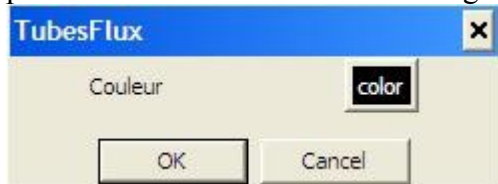
Cette case permet de faire apparaître ou disparaître les trajectoires de particules que vous avez lancé dans la boîte écoulement. Il est aussi possible en cliquant sur le bouton à droite de la case à cocher (marqué C), de modifier la couleur ou de faire apparaître ou disparaître les temps associés aux particules.



TubesFlux

Le calcul de Rflow est basé sur le principe des tubes de flux (voir partie théorique). Vous pouvez visualiser leur trajectoires avec cette case.

En cliquant sur le bouton à droite de la case à cocher (marqué C), apparaît une boîte de dialogue qui permet de modifier la couleur des lignes



Data

permet de faire apparaître les valeurs des données rentrées dans le menu import données sur les graphiques appropriés. Ainsi si cette case est cochée et que le tableau de données contenait une colonne PCE par exemple, les valeurs de PCE aux points mesurés vont apparaître sur le graphique en même temps que le contour du PCE lorsque celui-ci est choisi.

Modifier les contours



A droite de chaque case contour, un [C] apparaît ; en cliquant sur ce bouton il est possible de modifier les contours : minimum et maximum, nombre de contours et nombre de décimales apparaissant sur le chiffre représenté. Il est aussi possible de représenter les contours avec une échelle logarithmique.

Le choix des valeurs définies pour les contours peut être fixée en cliquant sur la boîte "liste valeurs" qui conduit à un dialogue où l'on peut définir les valeurs. !!! *Attention* les concentrations sont toujours en mg/L. Pour revenir aux contours réguliers, il faut remplacer cette liste par [,].

Par ailleurs, il est possible de choisir les couleurs des différents contours la couleur basse, la couleur haute et une intermédiaire.

Si vous avez choisi une échelle de contour et que vous modifiez des paramètres de calcul il peut arriver que les contours n'apparaissent pas car ils sont hors d'échelle.

Si vous voulez comparer des contours avec vos données vous devez avoir importé des données (cf menus)

Barre d'outils



En bas de l'écran se trouve une barre d'outils, elle permet de se déplacer sur l'écran (bouton gauche après avoir cliqué sur la croix), de zoomer sur certaines parties du modèle (loupe ou bouton droit après avoir cliqué sur la croix). Il est aussi possible de sauvegarder la vue actuelle dans un fichier au format .png (lisible par tout éditeur d'image ou à inclure dans votre texte) à l'aide de l'icône disquette. En appuyant sur l'icône maison, on retrouve la vue d'ensemble.

Lorsque vous souhaitez modifier une zone de petite taille, zoomez d'abord de façon à avoir toute la zone que vous souhaitez réaliser sur votre écran, désactivez le zoom, et modifiez le positionnement des points.

RT3D (version 2.5)

Pour utiliser Rt3d, vous devez avoir coché la case correspondante dans le type de modèle

Le modèle Rt3d reprend les données du modèle hydrodynamique et les caractéristiques du transport ou des réactions entrées dans les boîtes de dialogue de Rflow. On doit cependant compléter ces informations en ajoutant quelques éléments :

- le type de simulation : traceur, BTEX ou solvants chlorés
- temps de départ de la simulation, pas de temps et temps final

La deuxième boîte de dialogue permet de préciser la méthode utilisée : voir les détails dans le mode d'emploi de Rt3d

Le bouton particules permet de renseigner des données pour le calcul par les méthodes utilisant des particules (MOC, HMOC...)

Et enfin le fichier solver permet de régler les différents paramètres de celui-ci, toujours en reprenant les noms de variables utilisées dans le manuel de Rt3d

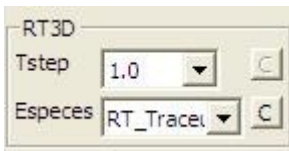
Le bouton fichier permet d'écrire les fichiers de base Rt3d

Lancer Rt3d

En raison du temps de calcul de Rt3d, il nous a paru plus utile de le lancer dans une fenêtre à part. Lorsque vous cliquez sur Run, une fenêtre MSDOS s'ouvre, le modèle Rt3d est lancé. Au prompt, donnez le nom du fichier : test1rt.rts (ou un autre nom selon le nom de votre fichier , mais n'oubliez pas d'ajouter rt.rts à la fin du nom)

Les fichiers Rt3d ont été écrits en mode texte, vous pouvez donc les modifier (attention conservez le formatage, c'est du fortran, c'est sensible...). Après le lancement vous devez voir défiler rapidement de nombreuses lignes (pour accélérer minimiser la fenêtre) et à la fin la phrase "normal termination of RT3D doit apparaître).

Visualisation, export



Vous pouvez visualiser les données de Rt3d sous forme de contour, comme celle de Rflow2D. Comme il y a plusieurs pas de temps, il y a une boîte de choix pour le temps dans le dossier Rt3d. Dans le menu export vous pouvez exporter la valeur de la variable Rt3d représentée, ceci conduit à un fichier sous forme de matrice sans titre représentant directement chaque cellule du modèle.

Potentialités de calcul de Rt3d

Rt3d, comme de nombreux modèles numériques, applique un flux nul sur les bords du domaine. Ainsi le traceur arrivant au bord va donc se heurter aux limites et rester dans le domaine. A l'inverse une solution analytique comme dans Rflow2D considère que le traceur peut sortir du domaine (ce qui correspond mieux à la réalité), il convient donc de tenir compte de ces différences pour effectuer des comparaisons.

Rt3d offre plus de possibilités que Rflow2D concernant la sorption, mais moins sur l'aspect réactionnel. En effet dans Rt3d, il n'y a pas de vrai calcul réactionnel entre deux espèces, il y a simplement une dégradation cinétique de l'espèce choisie. Ainsi, lorsque le toluène se dégrade en premier suivi par le benzène, le schéma ne peut être réalisé en mode standard, on ne peut faire que de la dégradation d'une espèce BTEX. *Attention*, nous avons montré dans la partie théorique que Rt3d donnait des résultats erronés pour les concentrations des accepteurs d'électrons lorsqu'il y en a plusieurs.

La dégradation séquentielle des solvants chlorés est réalisée de la même manière mais il n'y a pas de modélisation des conditions oxydo-réductrices. Ainsi la dégradation du TCE se fait partout, même si il y a de l'oxygène, De même la dégradation du DCE en conditions oxydantes même si elle est décrite dans le manuel est réalisée dès la source de polluant, or il n'y a pas d'oxygène en ce point (sinon le TCE ne se dégrade pas).

Il est possible, dans Rt3d de définir des zones réactionnelles, on pourrait donc définir un cœur du panache comme zone réduite et le reste comme zone oxydée. Il y a cependant un inconvénient majeur à ceci : dans la réalité, la zone réduite est bien plus petite au début du panache et grandit plus ou moins vite avec celui-ci. Ceci ne peut pas être modélisé avec Rt3d. Dans ce cas là, il vaut mieux utiliser PHT3D (qui est plus lent)

Lorsque vous comparez Rt3d à Rflow tenez compte de ces éléments.

PHT3D (version 1.46)

Pour utiliser Pht3d, vous devez avoir coché la case correspondante dans le type de modèle

L'utilisation de Pht3d reprend les données du modèle hydrodynamique et les caractéristiques du transport ou des réactions entrées dans les boîtes de dialogue de Rflow2D. On doit cependant préciser par quelques éléments complémentaires :

le type de simulation : traceur, BTEX, solvants chlorés1 ou solvants chlorés2. En choisissant solvants chlorés 1, on suppose que la réaction a lieu partout, alors qu'en choisissant Solvants chlorés 2, on considère que les solvants chlorés ne seront dégradés que lorsque du H₂ est présent (H₂ produit par la dégradation de la matière organique) comme dans Rflow2D.

les pas de temps : temps de départ de la simulation, pas de temps et temps final

La deuxième boîte de dialogue permet de renseigner la méthode utilisée : voir les détails dans le mode d'emploi de Pht3d

Le bouton particules permet de définir des données pour le calcul au moyen de méthodes utilisant des particules (MOC, HMOC...)

Et enfin le fichier solver permet de régler les différents paramètres de celui-ci, toujours en reprenant les noms de variables utilisées dans le manuel de Pht3d

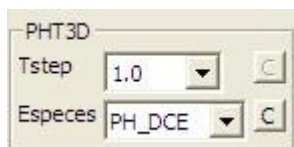
Le bouton fichier permet d'écrire les fichiers de base Pht3d

Lancer Pht3d

En raison du temps de calcul de Pht3d, il nous a paru plus utile de le lancer dans une fenêtre à part. Lorsque vous cliquez sur Run, une fenêtre MSDOS s'ouvre, le fichier Pht3d est lancé. Pour vérifier que le modèle a bien fonctionné

Les fichiers Pht3d ont été écrits en mode texte, vous pouvez donc les modifier (attention conservez le formatage, c'est du fortran, c'est sensible...).

Visualisation



Vous pouvez visualiser les données de Pht3d sous forme de contour, comme celle de Rflow. Comme il y a plusieurs pas de temps, il y a une boîte de choix pour le temps dans le dossier Pht3d. Comme pour Rt3d vous pouvez exporter les données depuis le menu export.

Potentialités de calcul de Pht3d

Pht3d peut modéliser à peu près tout type de réaction. Ici nous n'avons implémenté que les réactions qui sont présentes dans Rflow2D, c'est à dire la dégradation de BTEX et de solvants chlorés. Nous avons implémenté les réactions de dégradation comme dans Rflow2D, c'est à dire avec une dégradation séquentielle de la matière organique puis une utilisation du H₂ pour réduire les solvants chlorés. Si vous connaissez le fonctionnement de Pht3d, vous pouvez cependant modifier les fichiers de bases de données et le pht3d_ph mais ceci peut fournir des résultats erronés.

Attention la version actuelle de Pht3D ne pouvant pas modéliser d'adsorption de surface : il ne peut y avoir de retard. Si vous avez implémenté un modèle avec des facteurs de retard la simulation avec Pht3d sera effectuée pour des facteurs de retard égaux à 1.

Comme Pht3d est assez lent, il est conseillé, soit de ne lancer le programme qu'après avoir calibré les paramètres avec Rflow2D, soit de commencer avec une grille assez lâche et de raffiner la grille ensuite.

Isotopes

Le calcul des isotopes n'est disponible que lorsque la case correspondante a été cochée dans le type de modèle.

Rflow2D permet de calculer les rapports isotopiques des composés organiques lors de dégradation du premier ordre. La réaction a donc du être calculée auparavant.

Pour cela il vous suffit de rentrer les données de delta du départ (dans la source en p.mille), les valeurs des coefficients d'enrichissement (epsilon en p.mille) et de cliquer sur Run.

Attention la valeur de l'epsilon dépend de la réaction, cette valeur est donc rentrée dans la même matrice que celle des cinétiques. Notons que les cinétiques sont celles qui ont été entrées dans l'onglet réaction.

Les valeurs de delta sont alors calculées sur l'ensemble des panaches et peuvent être visualisées selon le même principe que toutes les autres variables. Dans les zones de fortes variation de concentration les valeurs de delta isotopiques peuvent être légèrement erronées.

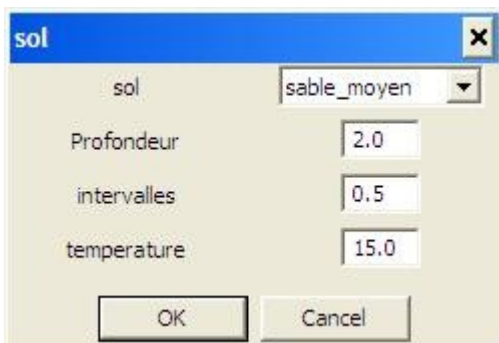
Les évolutions isotopiques ont été validées pour des dégradation du premier ordre pour les solvants chlorés mais pas pour les BTEX ni pour les réactions instantanées ; soyez donc prudent.

Volatilisation

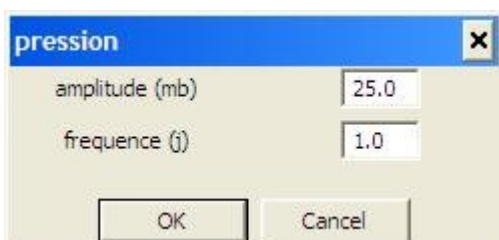
A l'aide de ce menu il est possible de calculer la volatilisation de composés depuis la nappe. Pour avoir accès au menu, cette option a du être cochée dans le type de modèle.

A l'aide de ce menu, il est possible de calculer le flux de substance sortant à la surface du sol et la concentration du composé en phase gazeuse à une profondeur donnée.

Les données d'entrée complémentaires aux données de Rflow2D sont



- la profondeur de la nappe par rapport au sol (le sol est considéré comme horizontal)
- le type de sol qui va déterminer les paramètres de Van Genuchten (VG) pour ce sol. Ce type de sol n'est pas obligatoirement le même que celui qui est choisi dans 'type de sol' pour la dissolution des LNAPL.
- La température moyenne du sol (qui a un effet sur la constante de Henry des composés)



Les propriétés physiques des composés sont présentes dans le fichier Composés.txt qui se trouve dans le dossier de Rflow2D. Vous pouvez les modifier. De même que les paramètres VG des sols qui sont présents dans le fichier solVG.txt se trouve au même endroit.

Le sous-menu Run permet de lancer le calcul qui est automatique.

Les valeurs de concentration et de flux sont calculées pour un sol homogène sur tout le domaine, à partir des panaches calculés dans la partie Dissolution ou Réaction pour le temps donné dans la boîte traceur. Si vous désirez modifier le temps, il faut refaire les calculs pour le traceur, la réaction et la volatilisation.

Dans la boîte volatilisat du panneau VUE deux listes sont présentes : la profondeur depuis la surface (profondeurs choisies par l'utilisateur) et la liste des polluants renseignés dans le menu Dissolution ou Réaction. Il faut choisir la profondeur et la substance à représenter. Les concentrations sont données en mg/L d'air. Dans la liste des profondeurs, un item donne le flux sortant donné en $\mu\text{g}/\text{m}^2/\text{j}$.

Exemples

Plusieurs exemples sont fournis avec la documentation. Ils sont pour la plupart détaillés dans les différents chapitres du livre.

Ici nous ne donneront que quelques indications sur le type d'exemple.

Borden

Site canadien sur lequel des solvants chlorés ont été injectés dans la nappe. L'écoulement est simple dans un milieu quasi homogène. Le phénomène étudié est la dissolution de la phase organique. La composition du mélange est connue et donnée dans l'onglet fraction organique. Les panaches de polluants (PCE, TCE et TCM) sont donnés sous forme de figures et peuvent être superposés aux résultats. Attention les contours sont en progression log.

Bordes

Plaine alluviale du sud de la France, ce site est présenté pour l'aspect échange nappe-rivière. La rivière est ici représentée comme une ligne de potentiel imposé. La valeur du potentiel imposé varie en fonction du niveau de la rivière.

Dover

Site américain pollué aux solvants chlorés. L'écoulement simulé ici est relativement homogène, l'injection de polluant est considérée comme continue. Le principal objectif de cet exemple et le test de l'aspect isotope, les mesures ayant été effectuées sur ce site (voir chapitre isotopes)

Plattsburgh

Une autre base de l'armée américaine, avec pollution aux BTEX et aux solvants chlorés. Une partie des BTEX servant à réduire le milieu, ici comme les données des accepteurs d'électrons sont présentes il est possible de bien caler les réactions.

Sampson

Site contaminé aux hydrocarbures avec une faible anaérobie (seul O₂ est consommé). comportement très différent du MTBE (pas dégradé), du benzène (peu dégradé) et du toluène (très dégradé). autre particularité, le panache s'élargit notablement à l'aval de la source puis rétrécit.

Seymour

Site de production chimique utilisé pour le calage du transport. L'écoulement est assez intéressant et un peu difficile à simuler; Le panache de polluant (considéré ici comme un traceur) semble tourner de façon importante au milieu du site.

Transpol

Site Espagnol utilisé pour l'exercice d'intercomparaison lancé par l'Ineris. On a ici une source mal localisée de PCE et un panache de PCE et de DCE principalement. Le site est en nappe alluviale avec des limites marquées par un domaine très peu perméable. il semble qu'il n'y ait d'échange nappe rivière qu'à l'amont du site.

Foire aux Questions

Nous avons répertorié quelques difficultés qui se sont présentées au cours du développement du logiciel. Nous en livrons une liste avec solutions possibles.

- *Modflow ne tourne pas* : deux explications les plus courantes : il n'y a pas de zones de potentiel, ou alors vous essayer de faire tourner modflow sur un répertoire sur lequel vous n'avez pas les droits en écriture. Il est aussi possible que vous ayez mis le mur supérieur au toi ou une perméabilité irréaliste.
- Après plusieurs simulations les *contours* d'une variable deviennent invisibles. Vous avez peut-être

modifié les valeurs min et max des contours et la nouvelle simulation sort de ces valeurs.

- *Des boîtes sont grisées* alors que vous venez de faire un calcul. Le grisage des boîtes se fait automatiquement si vous venez de modifier un paramètre qui invalide la simulation précédente. Si toutes les boîtes sont grisées appuyer sur les unités, ou le domaine dans la première boîte et normalement la suivante devrait s'allumer, puis faites Run dans chaque boîte et elles s'allument.
- La fonction *export* ne fonctionne pas si vous avez déjà ouvert le fichier exporté précédemment avec un autre programme
- si le temps est égal à 0, la simulation du traceur peut donner une erreur. Si le panache de traceur traverse une zone avec de forts pompages les résultats de Rflow2D peuvent être erronés.
- si une *ligne bleue* apparaît lorsque vous cliquez dans le domaine sans que vous ayez commencé une zone, l'application a pu se bloquer car vous n'avez pas fini une zone précédente. Dans ce cas il faut fermer l'application (parfois à l'aide de Ctrl+Alt+Suppr), les données précédentes sont perdues (sauvegardez de temps en temps!!)