



HAL
open science

Etude du transport miscible en milieux poreux hétérogènes: Prise en compte du non-équilibre

Fabien Cherblanc

► **To cite this version:**

Fabien Cherblanc. Etude du transport miscible en milieux poreux hétérogènes: Prise en compte du non-équilibre. Hydrologie. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 1999. Français. NNT : . tel-00106971

HAL Id: tel-00106971

<https://theses.hal.science/tel-00106971>

Submitted on 16 Oct 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

PRÉSENTÉE A

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MÉCANIQUE

Par **Fabien CHERBLANC**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

Spécialité : MÉCANIQUE

**ETUDE DU TRANSPORT MISCIBLE
EN MILIEUX POREUX HÉTÉROGÈNES:
PRISE EN COMPTE DU NON-ÉQUILIBRE**

Soutenue le 2 Juillet 1999

après avis de :

MM. **P. ACKERER**, *Directeur de Recherche CNRS, Strasbourg*..... Rapporteurs
J.P. HULIN, *Directeur de Recherche CNRS, Orsay*.....

devant la commission d'examen formée de :

M. **J.C. BATSALE**, *Professeur, Bordeaux* Président
Mmes **A. AHMADI**, *Maître de Conférences, Bordeaux*..... Rapporteur
S. DIDIERJEAN, *Maître de Conférences, Nancy*..... Examineurs
MM. **P. ACKERER**, *Directeur de Recherche CNRS, Strasbourg*.....
E. ARQUIS, *Professeur, Bordeaux*.....
J.P. HULIN, *Directeur de Recherche CNRS, Orsay*.....
M. QUINTARD, *Directeur de Recherche CNRS, Toulouse*.....
S. WHITAKER, *Professeur, Davis (USA)*

Ce travail a été réalisé au "Laboratoire Energétique et Phénomènes de Transfert", unité mixte de recherche associée au CNRS, à l'université Bordeaux I et à L'ENSAM - Centre de Bordeaux, grâce à un financement du Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la Recherche.

L'INSU/PNRH (Programme National de Recherche en Hydrologie) est vivement remercié pour son support financier.

Je souhaite tout d'abord remercier **Michel Quintard** pour m'avoir accueilli au laboratoire et avoir encadré ce travail. J'ai pu profiter de son niveau scientifique, de ses conseils, de son soutien permanent. J'ai aussi énormément apprécié la confiance qu'il m'a accordée tout au long de ces quatre années.

Messieurs **Philippe Ackerer** et **Jean-Pierre Hulin** m'ont fait l'honneur de juger ce travail. Je leur exprime mes sincères remerciements pour leurs remarques pertinentes, et pour le temps qu'ils y ont consacré.

Je remercie aussi **Jean-Christophe Batsale** pour avoir accepté de présider le jury de thèse. Nos (trop rares !!!) discussions dans le couloir ont été fructueuses.

Je remercie également **Sophie Didierjean** et **Eric Arquis** qui m'ont fait le plaisir de se joindre au jury. Un grand merci aussi à **Stephen Whitaker** qui a bien voulu traverser l'Atlantique afin de participer au jury.

Je désire enfin (et surtout !!!) remercier **Azita Ahmadi** qui a également encadré et suivi de près ce travail. Ces quatre années de cohabitation ont été extrêmement agréables, les nombreuses discussions scientifiques (et toutes les autres) m'ont beaucoup apporté. Quelques lignes ne suffisent pas pour exprimer toute ma reconnaissance. Ces remerciements s'adressent aussi à **Didier Lasseux** (le troisième colocataire) pour cette dernière année fort sympathique.

Toutes les autres personnes qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de ce travail, qui ont su me changer les idées de différentes manières, qui m'ont soutenu au bon moment, qui m'ont fait rager parfois, ou qui m'ont aidé à chercher mon chemin savent déjà que je les remercie.

Les gens que je ne remercie pas le savent aussi (si il y en a !!!).

Testis unus, testis nullus
P. D.

Table des matières

1	Introduction	3
1.1	Présentation du problème	3
1.2	Hétérogénéités et échelles	6
1.2.1	Les différentes échelles	6
1.2.2	Le problème de changement d'échelle	7
1.2.3	Structure à distribution bi-modale	9
1.3	Etude bibliographique	10
1.3.1	Théorie non-locale	10
1.3.2	Approche stochastique	10
1.3.3	Méthode de prise de moyenne volumique	12
1.3.4	Méthode d'homogénéisation	13
1.3.5	Cas des systèmes à deux régions	13
1.4	Objectifs de l'étude	16
2	Ecoulements miscibles en milieux hétérogènes : systèmes à deux régions	19
2.1	Equations à l'échelle locale	19
2.2	Prise de moyenne à grande échelle	20
2.3	Problèmes de fermeture	22
2.4	Les équations à grande échelle	26
2.5	Comportement asymptotique	28
2.6	Modèle à une équation	33
2.7	Un exemple simple : le milieu stratifié bi-couche	36
2.8	Modèle à une équation et comportement asymptotique	40
3	Méthodes numériques	45
3.1	Résolution des problèmes de fermeture	45
3.1.1	Intégration du terme diffusif	48
3.1.2	Intégration du terme convectif	52
3.1.3	Calcul des propriétés macroscopiques	54
3.1.4	Adimensionnement des équations	54
3.1.5	Résolution analytique pour des géométries simples : Validation des codes de calcul	58
3.2	Simulation avec le modèle à deux équations	63

TABLE DES MATIÈRES

4 Etude des milieux nodulaires	65
4.1 Choix de la représentation géométrique	65
4.2 Etude des propriétés effectives à grande échelle	66
4.2.1 Comparaison entre le modèle à une équation et le modèle asymptotique	68
4.2.2 Influence du nombre de Péclet	69
4.2.3 Influence des dispersivités locales	73
4.2.4 Influence du rapport de perméabilité	74
4.2.5 Influence de la géométrie	77
4.3 Comparaison avec les résultats de la littérature	78
4.3.1 Système "Mobile-Immobile"	78
4.3.2 Système "Mobile-Mobile"	81
4.4 Expériences numériques	82
4.4.1 Méthodes numériques	83
4.4.2 Interprétation des champs de concentration	84
4.5 Comparaison entre les résultats expérimentaux et théoriques	86
4.6 Condition de non-équilibre local	87
5 Application aux milieux aléatoires	93
5.1 Introduction	93
5.2 Milieu stratifié aléatoire	94
5.2.1 Présentation du problème	94
5.2.2 Résolution des problèmes de fermeture	96
5.2.3 Influence de la topologie sur le comportement à grande échelle . . .	98
5.2.4 Comparaison avec les expériences numériques	102
5.2.5 Modèle à n équations	106
5.3 Milieu aléatoire bi-dimensionnel	114
5.3.1 Génération des cellules unitaires aléatoires	114
5.3.2 Influence de la taille de la cellule de prise de moyenne	115
5.3.3 Comparaison avec les expériences numériques	119
5.3.4 Identification des régions	121
5.4 Conclusions	123
6 Conclusions et perspectives	127
7 Nomenclature	131

Chapitre 1

Introduction

1.1 Présentation du problème

Les transports miscibles en milieux poreux concernent de nombreux domaines, un secteur d'application important dans le contexte environnemental est l'étude du transport d'un polluant miscible dans l'eau au travers d'une structure poreuse naturelle. Les sources de pollution sont d'origines diverses et souvent provoquées par les activités humaines :

- les rejets industriels souvent très toxiques (huiles, solvants organiques, sulfates, phosphates, chromates, cyanures, métaux lourds, ...), ne sont pas toujours traités correctement,
- les décharges "sauvages" de déchets toxiques sont découvertes souvent trop tard et représentent une source mal estimée,
- l'agriculture fait appel à de grandes quantités d'engrais azotés et introduit des nitrates dans les eaux souterraines,
- l'exploitation des nappes d'eau douce communiquant avec des eaux salées peut entraîner la pénétration de l'eau salée et rendre les eaux non potables.

Un scénario possible de pollution est présenté sur la figure 1.1. La source étant généralement en surface, le polluant migre sous l'effet des forces gravitaires à travers la zone non-saturée (présence d'eau et d'air dans les pores correspondant à un système diphasique). Il atteint ensuite la nappe de l'aquifère et se dissout dans la phase aqueuse. Tous les polluants ne sont pas totalement miscibles dans l'eau, mais font toujours l'objet d'une dissolution partielle. En particulier, une importante classe est constituée par les NAPL (Non Aqueous Phase Liquid). Ces composés, une fois piégés dans la structure porale, jouent le rôle de source de pollution au coeur même du milieu. Seul le déplacement de la phase dissoute est étudié ici.

Dans la zone saturée, plusieurs mécanismes sont responsables du transport du soluté :

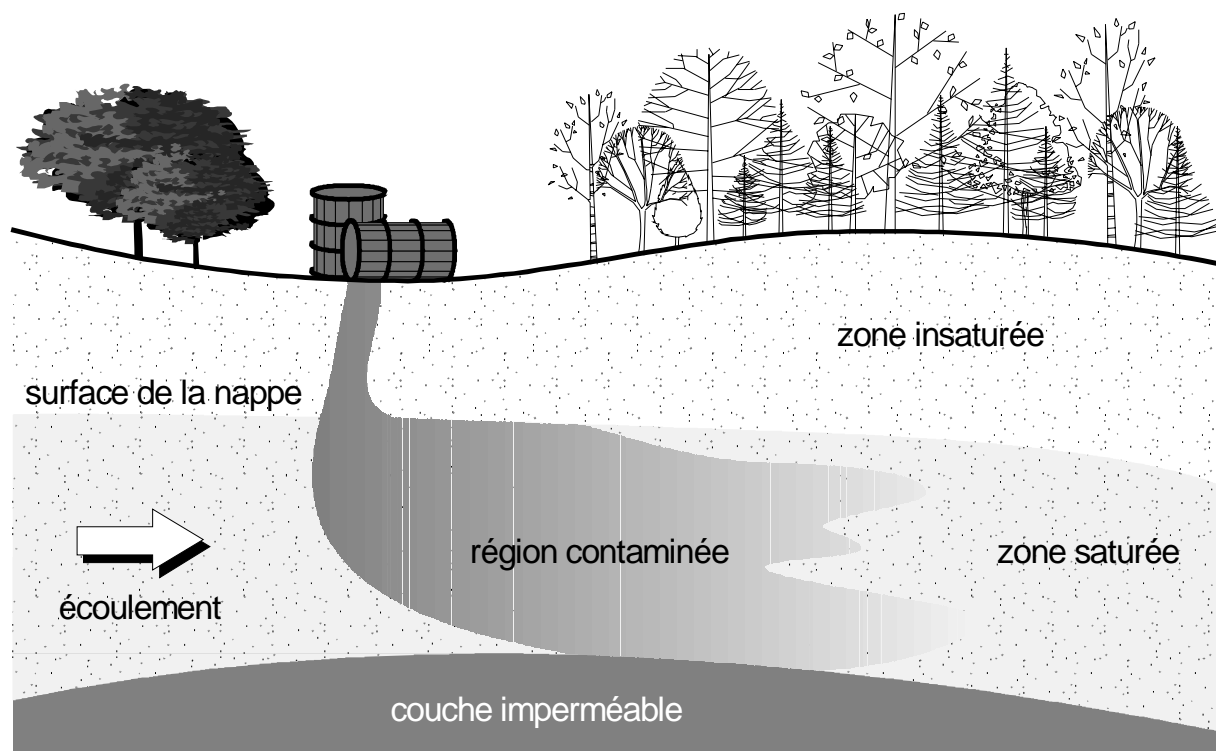


FIG. 1.1: Scénario possible de pollution de la nappe phréatique

- la *convection*, due à l’entraînement des éléments en solution dans le mouvement du fluide.
- la *diffusion moléculaire*, liée à l’agitation moléculaire.
- la *dispersion hydrodynamique*. C’est un phénomène de mélange essentiellement lié à l’hétérogénéité des vitesses microscopiques au sein du milieu poreux, quelle que soit l’échelle d’observation. Ce mécanisme est caractérisé par un coefficient de dispersion qui sera introduit de manière plus exhaustive plus tard dans le document.

L’hypothèse du traceur consiste à considérer que la présence d’une espèce dissoute ne modifie ni la masse volumique, ni la viscosité du fluide. Dès lors, l’écoulement est indépendant de la concentration, et il est possible de découpler les équations de conservation de la masse et les équations de conservation de la quantité de mouvement. Cette situation correspond à des concentrations faibles, ce qui est généralement le cas dans les problèmes de pollution.

On peut citer encore d’autres secteurs d’application des écoulements miscibles. Le premier vise à déterminer les caractéristiques d’un aquifère. Un traceur est injecté dans un forage au cœur d’un aquifère, puis la réponse en concentration est enregistrée au niveau d’un ensemble de puits d’observation répartis sur la zone d’étude. L’interprétation des différentes courbes de traçage révèle des informations sur les directions principales d’écoulement, les hétérogénéités présentes, la structuration générale de l’aquifère, etc. Le deuxième secteur

1.1. Présentation du problème

concerne l'exploitation d'un réservoir pétrolier. Une des techniques de récupération tertiaire utilise la miscibilité de certains fluides avec l'huile et l'eau pour s'affranchir des problèmes rencontrés lors des écoulements diphasiques (instabilité du front de déplacement). Enfin, ces déplacements miscibles se rencontrent très fréquemment dans les domaines du Génie Chimique.

Les premières études théoriques et expérimentales du transport par convection-dispersion remontent aux années 50 [Aris 1956, De Josselin de Jong 1958, Saffman 1959]. Ces essais réalisés sur des colonnes de laboratoire (de 0.1 à 1 mètre), avaient pour objectif de mesurer les caractéristiques dispersives de certains matériaux naturels. En particulier, des efforts importants ont été consacrés à l'étude de l'évolution du coefficient de dispersion en fonction du nombre de Péclet de pore défini par

$$Pe_{pore} = \frac{vd_p}{\mathcal{D}} \quad (1.1)$$

qui traduit l'importance des effets convectifs par rapport aux effets diffusifs à l'échelle du pore. Ces travaux, conjugués à des analyses théoriques et numériques, ont permis de mettre en évidence les mécanismes responsables de la dispersion et de proposer des modèles de représentation. Ces modèles ont fait ressortir des propriétés définies à l'échelle de Darcy comme le coefficient de diffusion effectif ou les dispersivités. Cette formulation (diffusion plus dispersion) a l'intérêt de distinguer les causes de chaque processus. La diffusion est d'origine chimique liée à la substance considérée, alors que la dispersion est un mécanisme hydrodynamique qui peut être perçu comme une caractéristique intrinsèque du milieu. Ces comportements sont maintenant bien connus et de nombreuses études permettent d'estimer les propriétés liées à un composé et à un type de milieu poreux.

Afin d'élargir le champ d'application de ces modèles et, bien sûr, d'établir un lien entre les travaux réalisés à l'échelle du laboratoire et les préoccupations liées aux problèmes de pollution de formations géologiques, des expérimentations sur site ont été mises en place [Gelhar et al. 1992]. L'analyse des résultats des expériences de traçage a révélé deux comportements principaux.

- Les coefficients de dispersion estimés sont beaucoup plus importants que ceux mesurés sur le même type de roche sur des colonnes de laboratoire. De plus ils ne sont pas toujours constants, mais augmentent avec la longueur de parcours et le temps de résidence dans la structure poreuse [Dagan 1986].
- Dans certains cas, des courbes d'élution asymétriques sont rencontrées. On observe généralement une percée précoce et une longue traînée. Ce comportement est défini par l'adjectif *non-idéal* ou *anormal* dans le sens où il ne peut pas être représenté par une équation de convection-dispersion utilisée couramment à l'échelle de Darcy [Brusseau 1994].

Le transport miscible peut être étudié à différentes échelles (de la taille du pore à la taille de l'aquifère). Le coefficient de dispersion associé à une échelle d'observation est fonction de tous les processus diffusifs et dispersifs intervenant à des échelles inférieures. On amalgame sous le mot générique "dispersion" un ensemble de phénomènes mécaniques, chimiques,

etc. opérant à des échelles complètement différentes. A l'échelle du terrain, la dispersion devient alors *anormale*, car la distribution de concentration ne suit plus une loi Gaussienne pour des conditions d'injection classiques. Il est clair aujourd'hui, que les causes de cette non-idéalité de la dispersion sont les hétérogénéités. Ces hétérogénéités sont de différentes natures [Brusseau et Rao 1989], on peut citer les hétérogénéités de perméabilité, de réaction chimique, de cinétique d'adsorption, de caractéristiques dispersives, de structuration, ...

Une notion fondamentale liée aux problèmes d'hétérogénéités est la notion de *non-équilibre*. Les nombreux processus de transport intervenant à toutes les échelles exhibent des constantes de temps caractéristique si différentes, que, localement, la concentration n'est jamais à l'équilibre. Autrement dit, en un point de l'espace, on peut définir plusieurs concentrations, aux échelles inférieures, ces concentrations sont associées à des zones distinctes. Si ces différentes concentrations ne sont pas égales, on est en présence de non-équilibre. L'hypothèse d'équilibre local simplifie énormément la physique, cependant elle est rarement validée dans la réalité. Il faut donc veiller à caractériser le non-équilibre et le prendre en compte dans la modélisation.

1.2 Hétérogénéités et échelles

1.2.1 Les différentes échelles

Il est à présent reconnu que toutes les formations géologiques sont hétérogènes et possèdent des propriétés qui varient suivant l'échelle d'observation. Par exemple, la porosité est définie comme étant le rapport entre le volume poral sur le volume total. Un milieu poreux est un milieu binaire, on lui associe une fonction indicatrice de phase par

$$\gamma_\beta = 1 \quad \text{dans les pores} \quad (1.2)$$

$$\gamma_\beta = 0 \quad \text{dans la phase solide} \quad (1.3)$$

La porosité locale s'écrit comme une moyenne volumique de la fonction indicatrice de phase

$$\epsilon = \langle \gamma_\beta \rangle = \frac{1}{V} \int_V \gamma_\beta dV \quad (1.4)$$

V étant le volume d'une sphère de rayon r . Sur un milieu poreux, la variation de la porosité ϵ en fonction du rayon du volume de prise de moyenne est représentée sur la figure 1.2. On voit apparaître les différentes échelles de représentation possibles, et surtout la notion de V.E.R. (Volume Élémentaire Représentatif) liée à la définition de grandeurs continues sur le domaine.

Un milieu poreux peut donc être observé à différentes échelles en partant de l'échelle du pore jusqu'à l'échelle régionale. Trois échelles principales (Fig. 1.3) sont distinguées.

- *L'échelle du pore* (échelle microscopique) où l'écoulement des fluides est décrit par l'équation de Stokes. Cette échelle est représentée par un système binaire (phase fluide ou phase liquide). On admet généralement comme longueur caractéristique, le

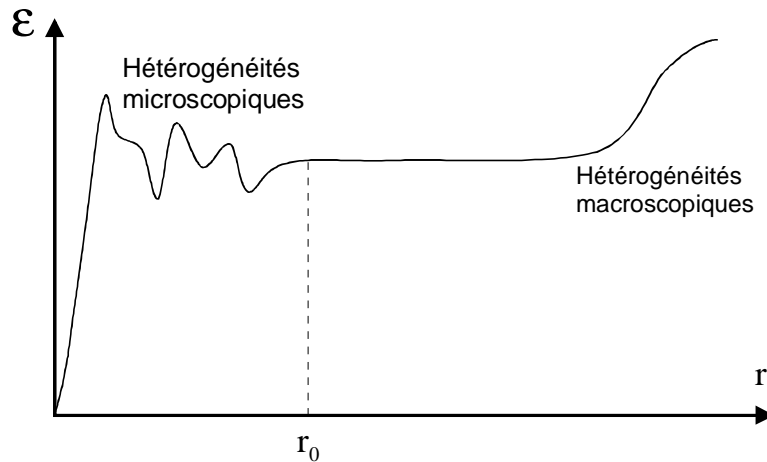


FIG. 1.2: Evolution de la porosité en fonction du rayon du volume de prise de moyenne

diamètre moyen des pores ou le diamètre moyen des grains dans le cas d'un milieu non consolidé.

- L'*échelle locale* (échelle de Darcy) qui correspond à un bloc de milieu poreux suffisamment grand par rapport à la taille des pores pour pouvoir l'assimiler à un milieu continu. Des propriétés locales telles que la porosité ou la perméabilité, sont alors définies en tout point de l'espace. On peut voir à cette échelle apparaître des hétérogénéités de perméabilité.
- La *grande échelle* (échelle macroscopique) qui englobe un grand nombre d'hétérogénéités.

A l'échelle de l'aquifère (grande échelle), les hétérogénéités ont un caractère complexe. Les informations obtenues sur la structure à partir de carottages sont ponctuelles, et les études sismiques donnent des idées grossières sur les stratifications et les tailles des hétérogénéités. La construction d'une image d'une formation géologique, et l'affectation de propriétés physiques en tout point du domaine est accompagnée d'incertitudes. Ce sont ces incertitudes qui ont conduit certains auteurs à caractériser les hétérogénéités d'un point de vue statistique [Matheron 1967, Dagan 1989]. En effet, les techniques géostatistiques sont à présent couramment utilisées pour construire une image à partir des propriétés statistiques et des données ponctuelles [Deutsch et Journel 1998, Hamed et al. 1996, Journel et Alabert 1988, Wen et Gomez-Hernandez 1998]. Notons qu'avec les données, l'image construite n'est pas unique et qu'une infinité de solutions satisfait les conditions du problème.

1.2.2 Le problème de changement d'échelle

Les modèles géologiques ou géophysiques utilisés pour représenter la structure interne d'un réservoir ou d'un aquifère donnent une discrétisation fine constituée d'un nombre

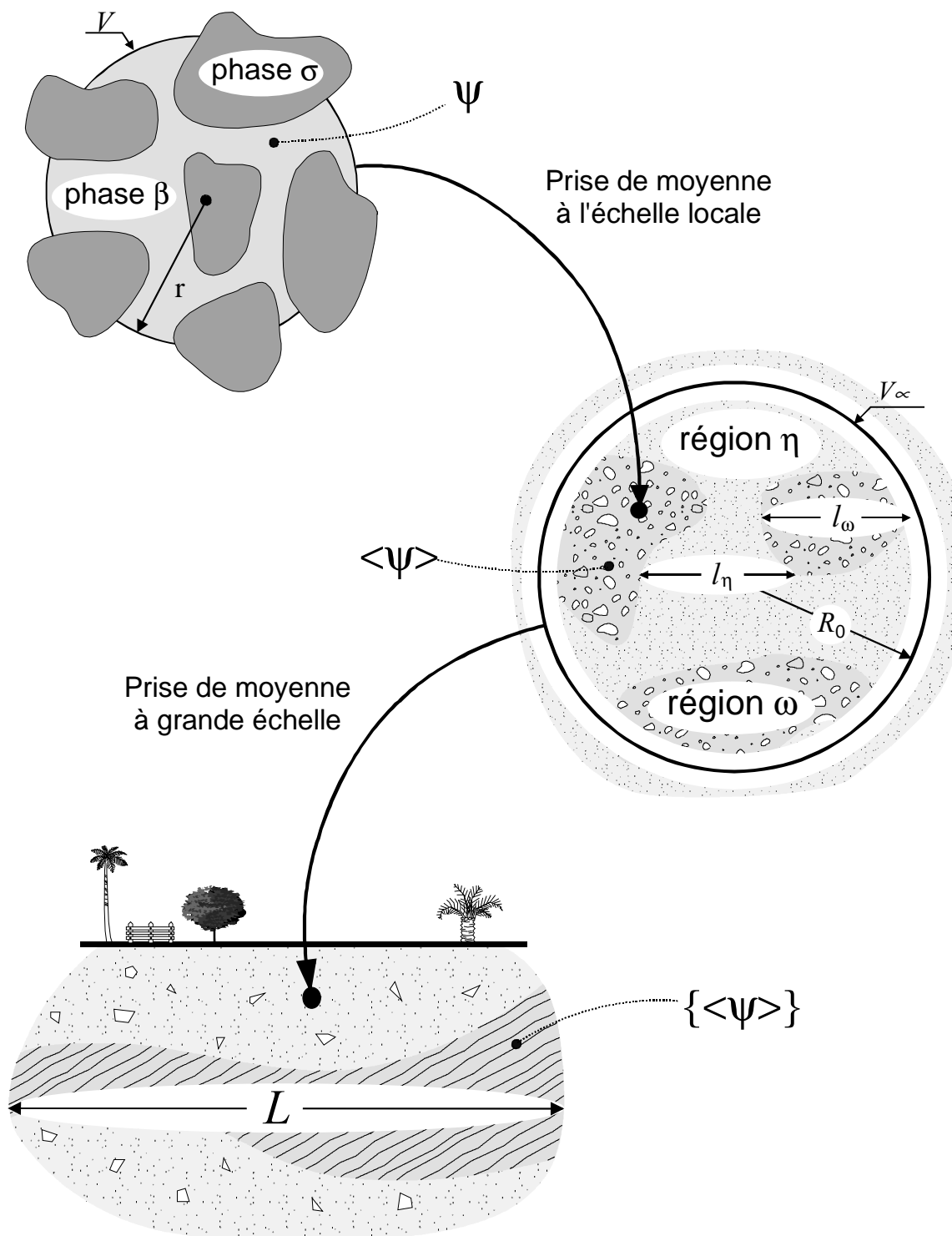


FIG. 1.3: Représentation des trois échelles du problème

important de mailles. La puissance actuelle des ordinateurs ne rend pas envisageable la simulation numérique des équations de transport à l'échelle des paramètres générés. Il existe donc un décalage important entre la taille des mailles des modèles et l'échelle de mesure des propriétés. Il est donc nécessaire de réduire le nombre de mailles.

Ce problème de changement d'échelle n'est pas spécifique aux écoulements en milieu poreux. Il est propre à la modélisation de phénomènes faisant intervenir plusieurs échelles de description. Un exemple est la modélisation du climat à l'échelle globale. Comment affecter des propriétés physiques à des mailles de plusieurs centaines de kilomètres carrés à partir de mesures quasi ponctuelles ?

Si on désire réduire le nombre de mailles dans la simulation numérique, donc adopter des mailles plus grandes, il faut pouvoir affecter des propriétés physiques sur la maille prenant en compte les hétérogénéités à plus petite échelle. L'objectif du changement d'échelle n'est donc pas de donner un outil de représentation de l'aquifère en entier, mais plutôt de développer des modèles macroscopiques du comportement de la maille de simulation et définir à cette échelle les nouvelles propriétés physiques qui gouvernent le transport.

1.2.3 Structure à distribution bi-modale

Une campagne de caractérisation d'un réservoir pétrolier (Provost Upper Mannville B Pool, Canada), a mis en évidence des structures particulières composées de blocs d'argile inclus dans une matrice de sable [Bachu et Cuthiell 1990, Kramers et al. 1989]. Ces inclusions ont des tailles de quelques centimètres à quelques mètres, et constituent une barrière significative vis à vis de l'écoulement vertical. Ces séquences argilo-sableuses modifient complètement le comportement macroscopique et les possibilités d'extraction pétrolière. Dans ce type de milieu, les contrastes de perméabilité sont de l'ordre de 10^4 à 10^5 . Ces structures s'approchent de milieux binaires, cependant des situations beaucoup plus complexes sont rencontrées dans la nature comme des distributions bi-modales de rayon de pore [Durner 1994, Zurmühl et Durner 1996], ou de perméabilité [Desbarats et Srivastava 1991].

Le transport dans de telles structures est contrôlé principalement par les chemins préférentiels d'écoulement ou les zones de rétention provoquant des retards à la dispersion [Desbarats 1990]. La connectivité spatiale des valeurs extrêmes (maximum et minimum) de la perméabilité est une caractéristique primordiale pour décrire une formation géologique. Malheureusement, la plupart des outils de génération stochastique de milieux aléatoires sont basés sur une distribution Gaussienne des propriétés, et ne peuvent représenter des structurations plus complexes. Ces connectivités ont été négligées jusqu'alors car elles ne représentent pas un volume important par rapport au domaine total. Une fracture dans le sens de l'écoulement modifie complètement le comportement vis à vis du transport, mais sur l'histogramme des perméabilités, elle est à peine représentée [Wen et Gomez-Hernandez 1998]. Il est donc nécessaire dans certaines situations, d'utiliser des techniques de génération plus évoluées capables de prendre en compte le maximum d'informations spatiales. La méthode géostatistique choisie doit correspondre au processus physique que l'on veut modéliser [Journel et Alabert 1988]. Si les connectivités spatiales des valeurs extrêmes de perméabilité jouent un rôle essentiel par rapport au problème de transport, il

faut s'attacher à les représenter correctement, alors qu'elles peuvent être négligées pour d'autres problèmes.

1.3 Etude bibliographique

Nous allons dans cette partie, rappeler les différentes approches utilisées jusqu'alors pour modéliser le transport miscible dans les formations hétérogènes.

1.3.1 Théorie non-locale

Si, pour la définition de la variable considérée, des informations venant des régions d'espace et de temps différentes du voisinage du point où la variable est évaluée sont nécessaires, alors la théorie est dite non-locale. Dans ce cas, on ne peut pas définir de propriétés intrinsèques attachées à un point de l'espace. Lorsque les échelles ne sont pas séparées, par exemple pour un milieu fractal [Cushman 1991], l'homogénéisation fait obligatoirement apparaître des variables non-locales. Des études numériques [Hu et al. 1997] et expérimentales [Ding et Candela 1996, Sternberg et al. 1996] ont réussi à mettre en évidence la non-localité de la dispersion macroscopique pour des milieux hétérogènes particuliers.

Le développement de théories non-locales s'appuie sur une intégration de l'histoire du déplacement du fluide à travers une structure hétérogène. On recherche principalement l'influence des fluctuations de vitesses vues de manière probabiliste [Koch et Brady 1987, Koch et Brady 1988]. Le tenseur de dispersion macroscopique est obtenu à partir d'une convolution spatio-temporelle faisant intervenir une fonction mémoire qui prend en compte la complexité du champ de vitesse local [Cushman 1990, Cushman et Ginn 1993]. Ces théories purement advectives négligent la dispersion local en jugeant son effet secondaire. Ce point a été discuté à maintes reprises, et des extensions ont été proposées [Zhang 1995, Zhang et Neuman 1996]. L'inconvénient majeur est la difficulté d'utiliser pratiquement de tels modèles, à cause de la définition complexe du tenseur de dispersion macroscopique.

1.3.2 Approche stochastique

La détermination de la structure du sous-sol ou d'un aquifère est une tâche périlleuse. Les techniques expérimentales (mesure sur carotte, sismique, mesure électrique, ...) ne permettent pas de dresser une cartographie complète d'une formation géologique, mais donnent plutôt des informations globales et qualitatives ou précises et localisées. L'analyse de toutes ces données conduit à définir des grandeurs statistiques liées aux hétérogénéités (moyenne, variance, longueur de corrélation, ...). A cause du peu de renseignements accessibles dans les milieux naturels, les théories stochastiques ont vu le jour. Ces approches consistent à dire que le milieu poreux étudié est une réalisation d'un phénomène aléatoire. Le mot "aléatoire" veut simplement dire que la configuration, l'arrangement, ou les propriétés vont varier d'une réalisation à l'autre, et que l'outil le plus approprié pour étudier ces variations est le langage probabiliste. Cependant, dans la pratique, on ne dispose que

d'une seule réalisation. Pour pouvoir utiliser ces notions probabilistes, on leur adjoint deux hypothèses fondamentales :

- l'*hypothèse de stationnarité* : on suppose en général que la loi de probabilité de la propriété étudiée, sur l'ensemble des réalisations, est stationnaire dans l'espace, c'est à dire invariante par translation.
- l'*hypothèse d'ergodicité* : on suppose que la réalisation unique déploie dans l'espace la loi de distribution stationnaire invoquée. Il est donc possible, à partir de l'observation des variations des propriétés définies sur une réalisation unique, d'en déduire les lois de distribution et de corrélation inconnues valables dans l'ensemble des réalisations possibles (mais absentes).

Une grandeur (porosité, perméabilité, position, vitesse, ...) à l'échelle de Darcy est définie par sa valeur moyenne plus une fluctuation aléatoire décrite uniquement en terme de moments statistiques (espérance, variance, ...). Plusieurs hypothèses sur la statistique des propriétés locales sont faites de façon à rendre possible le développement théorique des équations macroscopiques. Tout d'abord, des travaux ont montré que les effets de la variation de porosité [Warren et Skiba 1964] ou de la variation du coefficient de dispersion local [Gelhar et al. 1979] étaient secondaires devant les effets des hétérogénéités de perméabilité. La porosité est prise constante, la dispersion est considérée soit nulle dans le cas des théories purement convectives [Dagan 1984, Dagan 1988, Glimm et al. 1993, Rubin 1991], soit constante [Fiori 1998, Gelhar et Axness 1983, Neuman et al. 1987, Matheron et de Marsily 1980]. Ensuite, une analyse des données d'un grand nombre d'aquifère [Freeze 1975] a montré que le logarithme de la perméabilité suivait une distribution normale. Une répartition Gaussienne est donc choisie pour la fonction aléatoire représentant le logarithme de la perméabilité, sa fonction d'autocorrélation associée est exponentielle [Dagan 1984]. Par contre les développements proposés ne sont valables que pour une variance faible de la distribution de perméabilité, c'est à dire pour des milieux pas trop hétérogènes. Si les variations de perméabilité deviennent trop importantes, on voit apparaître des phénomènes de retard ou de cheminement préférentiel difficiles à prendre en compte de manière statistique.

Ces analyses théoriques ont conduit à des modèles de prédiction des macrodispersivités (longitudinale et transversale), même pour des milieux anisotropes. Plusieurs résultats importants ont été mis en évidence. D'une part, la concentration moyenne ne satisfait pas nécessairement à grande échelle une équation de convection-dispersion classique. D'autre part, le coefficient de dispersion n'est généralement pas constant, mais augmente avec le temps de parcours jusqu'à atteindre, dans certains cas, une valeur asymptotique.

Des comparaisons avec des études numériques sur des milieux hétérogènes aléatoires [Bosma et Van der Zee 1995, Burr et al. 1994, Tompson et Gelhar 1990] ont contribué à l'essor de l'approche stochastique. Entre autres, les données expérimentales recueillies sur le site de Borden (Ontario), ont validé avec succès un modèle stochastique [Graham et McLaughlin 1991]. L'inconvénient majeur de ces équations de transport stochastiques, est que la plupart sont basées sur des hypothèses trop restrictives afin de rendre le problème mathématique solvable, et ne reflètent pas assez les conditions physiques réelles [Serrano 1997].

1.3.3 Méthode de prise de moyenne volumique

La méthode de prise de moyenne est basée sur la définition d'un opérateur de moyenne volumique appliqué aux équations de transferts à une échelle donnée. L'objectif est de définir les équations gouvernant le transport à une échelle supérieure et les propriétés associées. Elle offre un outil mathématique général qui a permis de couvrir un large spectre d'application (écoulement monophasique ou diphasique, transport, thermique, ...) depuis sa première mise en forme [Slattery 1967, Whitaker 1967, Marle 1967]. Cette méthode est basée sur les deux idées suivantes :

- la longueur caractéristique d'une échelle est très petite devant la longueur caractéristique de l'échelle suivante,
- le rayon du volume de prise de moyenne est grand par rapport à la longueur caractéristique de la première échelle, et petit par rapport à la longueur caractéristique de l'échelle supérieure.

Dans le cas du passage de l'échelle locale à la grande échelle (Fig. 1.3), ces idées sont formalisées par

$$l_\eta, l_\omega \ll R_0 \ll L \quad (1.5)$$

et traduites par la contrainte de *séparation des échelles*. L'application de la méthode aux cas de milieux à porosité variable, par exemple dans les "mushy zones", montre que ces contraintes ne sont pas aussi sévères dans beaucoup de situations pratiques [Goyeau et al. 1997]. La technique de prise de moyenne a un objectif double, d'une part, elle permet, sous certaines hypothèses, d'aboutir à une représentation macroscopique du phénomène étudié, d'autre part, elle relie explicitement les deux échelles considérées afin de définir complètement les nouvelles propriétés macroscopiques apparaissant lors du changement d'échelle.

Le premier changement d'échelle (de l'échelle du pore à l'échelle de Darcy) a été extensivement traité, concernant l'écoulement monophasique [Whitaker 1986a], l'écoulement diphasique [Whitaker 1986b] ou le problème de transport [Eidsath et al. 1983, Quintard et Whitaker 1993b, Quintard 1993]. Ces études ont permis de retrouver par une approche théorique les équations de conservation de la masse ou de la quantité de mouvement à l'échelle de Darcy qui avaient été écrites intuitivement. Ainsi, un lien explicite a pu être établi entre la micro-géométrie d'un milieu poreux et les propriétés locales (perméabilité, tenseur de dispersion, ...). Dans ce travail, nous nous intéressons au passage de l'échelle locale (échelle de Darcy) à la grande échelle (échelle de la maille de simulation).

La théorie de la prise de moyenne à grande échelle (de l'échelle locale à la grande échelle) a été formalisée pour proposer une loi de Darcy généralisée tenant compte des hétérogénéités [Quintard et Whitaker 1987] et pour décrire l'écoulement diphasique à grande échelle [Quintard et Whitaker 1988]. Les premiers travaux visant à modéliser la dispersion macroscopique ont choisi une approche à une équation [Plumb et Whitaker 1988a]. Des termes faisant intervenir des dérivés secondes temporelles ou spatiales sont conservés dans

l'équation à grande échelle, ce qui rend son interprétation difficile. La simplification éventuelle de ces termes supplémentaires est discutée dans le cas d'un milieu stratifié [Plumb et Whitaker 1988b]. Dans le cas de milieux poreux présentant des zones de fluide stagnant, la méthode de prise de moyenne a permis la formalisation du modèle intuitif de "Coats & Smith" [Piquemal 1992]. Les concepts liés à une approche à deux équations ont été abordés la première fois pour représenter le transfert de chaleur en milieux poreux [Quintard et Whitaker 1993a, Quintard 1995], puis pour donner une formulation générale des modèles du type "Barenblatt & Zheltov" gouvernant l'évolution de la pression dans les milieux fracturés [Quintard et Whitaker 1996a, Quintard et Whitaker 1996b]. Le principe d'une approche à deux équations est d'associer deux concentrations à un même point de l'espace, afin de prendre en compte le non-équilibre massique pouvant apparaître localement. Ces idées ont été reprises dans le cas du transport miscible dans les structures à double-perméabilité [Quintard et Whitaker 1998, Ahmadi et al. 1998], les grandes étapes du développement sont rappelées dans les parties 2.2 et 2.3.

1.3.4 Méthode d'homogénéisation

La mise en oeuvre de la technique d'homogénéisation nécessite la définition de deux échelles de description définies par les variables d'espace \mathbf{x} et \mathbf{y} , relatives à la grande échelle L et à l'échelle des variations locales l_η, l_ω . Au changement d'échelle est associée la grandeur $\varepsilon = l_\eta/L$, qui conduit à la relation

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (1.6)$$

Les variables \mathbf{x} et \mathbf{y} sont considérées indépendantes, traduisant ainsi la notion de séparation des échelles. Toute grandeur locale peut être exprimée sous la forme d'un développement asymptotique dont chaque terme est associé à un ordre du petit paramètre ε , traduisant les variations à des échelles de plus en plus fines. Le processus d'homogénéisation conduit à un système d'équations différentielles, dont la résolution donne les propriétés homogénéisées [Arbogast et al. 1990, Saez et al. 1989]. Certaines similitudes peuvent être soulignées entre la méthode d'homogénéisation et la technique de prise de moyenne (séparation des échelles, cellule représentative périodique, lien entre les échelles, ...) [Bourgeat et al. 1988], cependant les grandeurs macroscopiques n'ont pas la même signification physique. L'étude du transport miscible a été abordé avec la méthode d'homogénéisation dans le cas de systèmes "mobile-immobile" [Hornung 1997].

1.3.5 Cas des systèmes à deux régions

Système "mobile-immobile"

Nous avons vu dans la partie 1.2.3 que certaines formations géologiques ont des structures bi-modales, ou exhibent des géométries à double-région. Sur ce type de milieu, dans certaines zones, en principe les plus perméables, les vitesses d'écoulement sont plus

importantes que dans le reste du milieu, moins perméable. Intuitivement, les régions "rapides" ont été nommées "mobiles", alors que l'adjectif "immobile" a été associé aux régions plus "lentes". Lorsque le contraste de perméabilité devient important, le fluide présent dans les régions moins perméables peut être considéré immobile devant le fluide s'écoulant dans le reste du milieu. Cette distinction est bien sûr associée à des suppositions sur les mécanismes de transport prédominant dans chaque zone. Dans la région "mobile", convection et dispersion sont pris en compte, alors que dans la région "immobile" le transport est essentiellement diffusif. Le composé dissout pénètre dans la région "immobile" depuis l'interface avec la région "mobile" uniquement sous l'effet de la diffusion moléculaire. Macroscopiquement, cet échange entre les deux zones est modélisé par une cinétique au premier ordre. Le premier modèle écrit pour un cas purement convectif [Deans 1963], a été étendu afin de prendre en compte le transport dispersif [Coats et Smith 1964]

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = f \frac{\partial C}{\partial t} + (1 - f) \frac{\partial C^*}{\partial t} \quad (1.7)$$

$$(1 - f) \frac{\partial C^*}{\partial t} = K (C - C^*) \quad (1.8)$$

où C et C^* sont respectivement les concentrations dans les zones mobiles et stagnantes, f est la fraction volumique de région mobile et K est un coefficient d'échange de masse. Avec une approche à deux équations, le milieu poreux hétérogène est modélisé par deux milieux continus homogènes en parallèle qui interagissent par échange de masse. A travers cette formulation du problème, l'objectif est de donner une signification physique et mathématique à des phénomènes observés sur des courbes d'élution expérimentales tels que les percées précoces ou les longues traînées.

Les modèles à deux équations pour des systèmes "mobile-immobile" connaissent un succès croissant. Beaucoup de travaux ont conservé cette formulation avec une cinétique d'échange au premier ordre caractérisée par un coefficient d'échange de masse α^* [Brusseau et al. 1989, Van Genuchten et Wierenga 1976, Gvirtzham et al. 1988, Goltz et Roberts 1986b, De Smedt et Wierenga 1979, Zurmühl et Durner 1996]. Des travaux récents [Souadnia 1999] ont montré que cette démarche était très efficace pour modéliser les transports miscibles, même dans des milieux relativement simples et bien structurés. Ces modèles s'écrivent :

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \epsilon_m \varphi_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \varphi_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \varphi_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (1.9)$$

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha^* (C_m - C_{im}) \quad (1.10)$$

où les indices m et im sont respectivement associés aux zones "mobiles" et "immobiles", ϵ désigne la porosité et φ la fraction volumique. La difficulté majeure rencontrée avec ce type de modèle est la détermination des propriétés macroscopiques. La démarche intuitive employée ne permet pas de donner des relations explicites afin de définir les coefficients du modèle. En particulier, de nombreux auteurs se sont penchés sur la caractérisation du coefficient d'échange. L'idée retenue, est de décrire finement le transport diffusif dans la région "immobile". Cette démarche a été adoptée en assimilant la région "immobile" à une

zone rectangulaire [Corrêa et al. 1990, Goltz et Oxley 1991], cylindrique [Van Genuchten et al. 1984, Goltz et Roberts 1988], ou sphérique [Parker et Valocchi 1986, Rao et al. 1980]. L'usage de géométries simples autorise une résolution analytique des phénomènes, et permet, après un processus de moyenne et une identification, de proposer une expression explicite du coefficient de transfert de masse. Ces résultats n'ont pas un caractère général, mais mettent en évidence les facteurs contrôlant l'échange entre les deux régions. Ces différentes méthodes sont détaillées dans la partie 4.3.

Dans les situations réelles, les conditions d'écoulement, la géométrie, etc. sont beaucoup plus complexes, et les propriétés macroscopiques sont estimées par approche inverse à partir de courbes expérimentales. Cependant il est très difficile d'estimer indépendamment les différents paramètres intervenant dans le modèle à deux équations [Lafolie et al. 1997, Rao et al. 1980]. Par contre, la modélisation à l'aide d'un nombre plus important de coefficients a l'avantage d'augmenter les degrés de liberté, et ainsi de pouvoir capturer des comportements anormaux. Pour cette raison, les modèles à deux équations ont permis dans beaucoup de situations, de représenter correctement des résultats expérimentaux obtenus sur colonne de laboratoire [Brusseau et Rao 1989, Herr et al. 1989, Hu et Brusseau 1996, Huang et al. 1995, Gaudet et al. 1977, Magnico et al. 1993, De Smedt et Wierenga 1979], sur site [Goltz et Roberts 1986a, Goltz et Roberts 1988], ou à partir de simulations numériques [Bajracharya et Barry 1997, Grisak et Pickens 1980].

Système "mobile-mobile"

Les modèles développés pour les systèmes "mobile-immobile" s'appuient sur des hypothèses relativement fortes. Entre autres, il faut que la vitesse d'écoulement dans la région moins perméable soit négligeable devant les vitesses de diffusion du soluté. Cette situation correspond à des structures hétérogènes où les propriétés sont très contrastées (par exemple des inclusions d'argile dans une matrice de sable). Ce n'est pas toujours le cas dans la nature, de plus, les courbes d'élution les plus anormales (escaliers) sont souvent observées quand *le rapport de perméabilité entre les deux zones n'est pas trop élevé*.

Quelques travaux proposent des généralisations des modèles à deux équations valables pour des systèmes "mobile-mobile" [Dykhuizen 1990, Gerke et Van Genuchten 1993a, Gerke et Van Genuchten 1996, Skopp et al. 1981]. Dans les deux régions, le transport convectif et dispersif est pris en compte en écrivant

$$\epsilon_m \varphi_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \varphi_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \varphi_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} - \Gamma_s \quad (1.11)$$

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \varphi_{im} D_{im} \frac{\partial^2 C_{im}}{\partial x^2} - \varphi_{im} V_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial x} + \Gamma_s \quad (1.12)$$

Le terme d'échange de masse Γ_s est défini comme la somme du flux diffusif $\alpha^* (C_m - C_{im})$ décrit précédemment, plus un flux massique convectif provenant d'un déséquilibre de pression entre les deux régions. Ces modèles sont étudiés et discutés plus en détail dans la partie 4.3.

1.4 Objectifs de l'étude

L'objectif du présent travail n'est pas de fournir un modèle de représentation du comportement de l'aquifère complet, mais plutôt de proposer une modélisation macroscopique du transport dans une maille de simulation et de développer les outils pour déterminer les nouvelles propriétés physiques à cette échelle d'observation. Ainsi, le caractère hétérogène de la simulation à grande échelle est conservé sur le maillage grossier utilisé pour modéliser l'aquifère. De ce fait, le comportement anormal observé à l'échelle de l'aquifère est la conséquence des hétérogénéités entre les mailles de simulation d'une part, et des hétérogénéités prise en compte dans le modèle de représentation d'une maille d'autre part.

Différentes approches doivent être comparées, et principalement les modèles à deux équations et les modèles à une équation. Les critères sous-jacents sont en fait la qualité de la représentation souhaitée et surtout la présence ou non de non-équilibre massique à grande échelle au sein du milieu étudié. Les procédures développées ici peuvent être perçues comme des outils d'analyse des hétérogénéités permettant de prévoir le comportement global et de faire un choix sur le type de modélisation à utiliser. Afin de remplir ces objectifs, le plan suivant est adopté.

Après la mise en place des équations décrivant le transport à l'échelle de Darcy et des conditions aux limites associées, nous nous intéressons dans le chapitre 2, au développement d'un modèle macroscopique en utilisant la méthode de prise de moyenne à grande échelle. Une approche à deux équations conduit à une généralisation des modèles à double-régions présentés dans l'étude bibliographique. Ensuite deux modèles à une équation prenant en compte le non-équilibre sont dérivés, l'un par une analyse asymptotique du modèle à deux équations, l'autre en appliquant la technique de prise de moyenne volumique. Avec les outils mis en place, une étude complète est menée sur un milieu stratifié bi-couche, et, dans ce cas, les deux modèles à une équation sont comparés.

La partie 3 est consacrée au développement des outils numériques permettant la résolution des problèmes de fermeture et la simulation du transport à grande échelle à l'aide du modèle à deux équations. Un effort particulier est fait lors de la discrétisation des opérateurs diffusif et convectif. Ces codes de calcul sont ensuite validés par une comparaison avec des solutions analytiques obtenues sur des géométries simples.

Une étude approfondie d'un milieu nodulaire est conduite dans la partie 4. Les évolutions des propriétés effectives à grande échelle en fonction des paramètres locaux (perméabilité, nombre de Péclet, ...) sont discutées et comparées aux résultats proposés dans la littérature. Des simulations à grande échelle sont validées à partir de solutions de référence obtenues par une description fine des hétérogénéités et des processus de transport. Enfin, le non-équilibre massique à grande échelle présent dans ce type de milieu hétérogène et le comportement asymptotique sont analysés.

Un des objectifs de ce travail est d'explorer la possibilité d'utiliser le modèle à deux équations et les problèmes de fermeture associés en relation avec une définition géostatistique des hétérogénéités. Nous traiterons, dans la partie 5, le problème de transport macroscopique dans des milieux stratifiés aléatoires. L'influence de la topologie locale est étudiée, puis différentes configurations sont choisies pour discuter la validité d'une approche

1.4. Objectifs de l'étude

à deux équations. Dans un deuxième temps, des milieux aléatoires bidimensionnels sont générés, afin d'analyser les relations possibles entre les paramètres statistiques caractérisant le milieu et les propriétés macroscopiques associées. Des comparaisons avec des simulations de référence permettent de juger sur la capacité du modèle à deux équations à représenter le transport à grande échelle.

Chapitre 1. Introduction

Chapitre 2

Écoulements miscibles en milieux hétérogènes : systèmes à deux régions

2.1 Equations à l'échelle locale

A l'échelle locale (échelle de Darcy), le transport d'un constituant miscible dans un écoulement monophasique est modélisé par une équation de convection-dispersion [Bear 1961, Combarous et Fried 1971, Passioura 1971]. Dans le cas d'une structure à deux régions, une équation par région est écrite (Fig. 1.3).

$$\epsilon_\eta \frac{\partial \langle c \rangle_\eta^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \langle c \rangle_\eta^\beta) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \langle c \rangle_\eta^\beta) \quad \text{dans la région } \eta \quad (2.1)$$

$$\epsilon_\omega \frac{\partial \langle c \rangle_\omega^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \langle c \rangle_\omega^\beta) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \langle c \rangle_\omega^\beta) \quad \text{dans la région } \omega \quad (2.2)$$

où les grandeurs entre crochets ($\langle c \rangle_\eta^\beta$, $\langle \mathbf{v} \rangle_\omega$, ...) sont des grandeurs définies à l'échelle de Darcy issues du premier changement d'échelle (de l'échelle du pore à l'échelle de Darcy). A l'interface entre les deux régions, la concentration est continue et le flux massique est conservé. Les conditions aux limites sont donc

$$\langle c \rangle_\eta^\beta = \langle c \rangle_\omega^\beta \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \langle c \rangle_\eta^\beta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \langle c \rangle_\eta^\beta) = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \langle c \rangle_\omega^\beta - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \langle c \rangle_\omega^\beta) \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.4)$$

De plus les équations de continuité à l'échelle de Darcy sont données par

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle_\eta = 0 \quad \text{dans la région } \eta \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle_\omega = 0 \quad \text{dans la région } \omega \quad (2.6)$$

La condition aux limites associée est

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle_{\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.7)$$

Le champ de vitesses est affecté par les hétérogénéités du système, et il peut être déterminé indépendamment du problème de transport (hypothèse du traceur). Dans tout le développement qui suit, nous supposons le champ de vitesse connu. Le tenseur de dispersion local peut prendre la forme souhaitée, en principe, il dépend de la position et de la vitesse locale. Le problème mathématique du changement d'échelle est indépendant de la définition locale choisie pour les différents termes des équations de transport (Eq. 2.1 et 2.2).

2.2 Prise de moyenne à grande échelle

Le volume de prise de moyenne est indiqué dans la figure 1.3. Pour tout paramètre à l'échelle locale $\langle \psi \rangle_{\eta}$ associé à la région η , nous définissons sur le volume V_{∞} , deux moyennes spatiales. La première est la moyenne régionale superficielle

$$\left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} = \frac{1}{V_{\infty}} \int_{V_{\eta}} \langle \psi \rangle_{\eta} dV \quad (2.8)$$

La deuxième est la moyenne régionale intrinsèque exprimée par

$$\left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\}^{\eta} = \frac{1}{V_{\eta}} \int_{V_{\eta}} \langle \psi \rangle_{\eta} dV \quad (2.9)$$

Ces deux moyennes étant reliées par la relation

$$\left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} = \varphi_{\eta} \left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\}^{\eta} \quad (2.10)$$

où $\varphi_{\eta} = V_{\eta}/V_{\infty}$ représente la fraction volumique de la région η .

En plus de ces relations, nous avons besoin des théorèmes de prise de moyenne [Howes et Whitaker 1985]

$$\left\{ \nabla \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} = \nabla \left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} + \frac{1}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \langle \psi \rangle_{\eta} dS \quad (2.11)$$

$$\left\{ \nabla \cdot \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} = \nabla \cdot \left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\} + \frac{1}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \langle \psi \rangle_{\eta} dS \quad (2.12)$$

$$\left\{ \frac{\partial \langle \psi \rangle_{\eta}}{\partial t} \right\} = \frac{\partial \left\{ \langle \psi \rangle_{\eta} \right\}}{\partial t} \quad (2.13)$$

car l'interface $A_{\eta\omega}$ est fixe.

2.2. Prise de moyenne à grande échelle

Le principe de base est d'utiliser la décomposition spatiale de Gray [1975], qui consiste à écrire les grandeurs locales en fonction de leur quantité moyenne et d'une déviation spatiale. Cette déviation spatiale (ou fluctuation) représente la différence entre des quantités observées à des échelles différentes.

$$\langle \psi \rangle = \{ \langle \psi \rangle \} + \tilde{\psi} \quad (2.14)$$

Sous la condition $r_0^2 \ll L_{\langle \psi \rangle}^2$ (le volume de prise de moyenne est très petit devant une longueur caractéristique de variation du paramètre $\langle \psi \rangle$) [Quintard et Whitaker 1994b], il est raisonnable de considérer que

$$\{ \tilde{\psi} \} = 0 \quad \text{équivalent à} \quad \{ \{ \langle \psi \rangle \} \} = \{ \langle \psi \rangle \} \quad (2.15)$$

Cette approximation permet ainsi de sortir les termes à grande échelle des opérateurs de prise de moyenne. Dans ce travail, les déviations spatiales des différentes grandeurs sont données par

$$\langle c \rangle_\eta^\beta = \{ \langle c \rangle_\eta^\beta \}^\eta + \tilde{c}_\eta \quad \langle c \rangle_\omega^\beta = \{ \langle c \rangle_\omega^\beta \}^\omega + \tilde{c}_\omega \quad (2.16)$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle_\eta = \{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \}^\eta + \tilde{\mathbf{v}}_\eta \quad \langle \mathbf{v} \rangle_\omega = \{ \langle \mathbf{v} \rangle_\omega \}^\omega + \tilde{\mathbf{v}}_\omega \quad (2.17)$$

$$\mathbf{D}_\eta^* = \{ \mathbf{D}_\eta^* \}^\eta + \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \quad \mathbf{D}_\omega^* = \{ \mathbf{D}_\omega^* \}^\omega + \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \quad (2.18)$$

Les grandes étapes de la technique de prise moyenne sont décrites dans cette partie ; de plus amples détails sur le développement des équations correspondant au problème de transport sont donnés dans la littérature [Quintard et Whitaker 1998, Ahmadi et al. 1998]. L'utilisation des théorèmes de prise de moyenne et l'application de l'opérateur de prise de moyenne (Eq. 2.8) aux équations de transport à l'échelle de Darcy (Eq. 2.1 et 2.2) conduit aux équations à grande échelle suivantes

dans la région η :

$$\begin{aligned} & \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \{ \langle c \rangle_\eta^\beta \}^\eta}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\varphi_\eta \{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \}^\eta \{ \langle c \rangle_\eta^\beta \}^\eta \right] \\ & = \nabla \cdot \left[\{ \mathbf{D}_\eta^* \}^\eta \cdot \left(\varphi_\eta \nabla \{ \langle c \rangle_\eta^\beta \}^\eta + \frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \tilde{c}_\eta dA \right) + \{ \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta \} \right] \\ & - \nabla \cdot (\varphi_\eta \{ \tilde{\mathbf{v}}_\eta \tilde{c}_\eta \}^\eta) - \frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta - \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \{ \langle c \rangle_\eta^\beta \}^\eta \right) dA \quad (2.19) \end{aligned}$$

dans la région ω :

$$\begin{aligned}
 & \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\varphi_\omega \left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\omega \right\}^\omega \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right] \\
 & = \nabla \cdot \left[\left\{ \mathbf{D}_\omega^* \right\}^\omega \cdot \left(\varphi_\omega \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega + \frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \tilde{c}_\omega dA \right) + \left\{ \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \cdot \nabla \tilde{c}_\omega \right\} \right] \\
 & - \nabla \cdot (\varphi_\omega \left\{ \tilde{\mathbf{v}}_\omega \tilde{c}_\omega \right\}^\omega) - \frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \tilde{c}_\omega - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \tilde{c}_\omega - \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) dA \quad (2.20)
 \end{aligned}$$

Ces équations mettent en évidence différents regroupements qui peuvent être identifiés dans les termes suivants

- accumulation $\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t}$
- convection à grande échelle $\nabla \cdot \left[\varphi_\eta \left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \right\}^\eta \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right]$
- diffusion à grande échelle $\nabla \cdot \left[\left\{ \mathbf{D}_\eta^* \right\}^\eta \cdot \left(\varphi_\eta \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + \frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \tilde{c}_\eta dA \right) + \left\{ \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta \right\} \right]$
- dispersion à grande échelle $-\nabla \cdot (\varphi_\eta \left\{ \tilde{\mathbf{v}}_\eta \tilde{c}_\eta \right\}^\eta)$
- échange inter-régions $-\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta - \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) dA$

Ces équations font intervenir des grandeurs macroscopiques et leur déviations spatiales. Par rapport aux autres problèmes de diffusion, notamment ceux traités pour le passage de l'échelle du pore à l'échelle de Darcy, on voit apparaître des termes nouveaux comme la déviation du tenseur de dispersion. Dans la partie suivante, des problèmes de fermeture sont mis en place, afin d'identifier les termes faisant intervenir des déviations spatiales.

2.3 Problèmes de fermeture

A ce stade de l'analyse, il est important de noter que les déviations obéissent aux équations locales. La soustraction des équations à l'échelle de Darcy (Eq. 2.1 et 2.2) aux

équations à grande échelle (Eq. 2.19 et 2.20) conduit à, dans la région η

$$\begin{aligned} \epsilon_\eta \frac{\partial \tilde{c}_\eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta) + \tilde{\mathbf{v}}_\eta \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \nabla \cdot \{ \tilde{\mathbf{v}}_\eta \tilde{c}_\eta \}^\eta \\ = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta) + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta) - \nabla \cdot \{ \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta \}^\eta \\ + \frac{\varphi_\eta^{-1}}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta - \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) dA \end{aligned} \quad (2.21)$$

Il est possible d'estimer les ordres de grandeur de chaque terme [Whitaker 1988], en particulier, les termes d'accumulation et de diffusion sont estimés par

$$\epsilon_\eta \frac{\partial \tilde{c}_\eta}{\partial t} = \mathbf{O} \left[\frac{\epsilon_\eta \tilde{c}_\eta}{t} \right] \quad (2.22)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta) = \mathbf{O} \left[\frac{D_\eta^* \tilde{c}_\eta}{l_\eta^2} \right] \quad (2.23)$$

L'équation contrôlant la déviation \tilde{c}_η peut être considérée comme évoluant quasi-stationnairement par rapport aux grandeurs à grande échelle si la contrainte suivante est vérifiée

$$\frac{D_\eta^* t}{\epsilon_\eta l_\eta^2} \gg 1 \quad (2.24)$$

L'hypothèse de quasi-stationnarité revient à négliger les variations temporelles des déviations, ce qui simplifie considérablement le problème aux limites. Ce type de contrainte a déjà été imposé à la petite échelle et à l'échelle de Darcy [Quintard et Whitaker 1993b, Quintard et Whitaker 1994a], l'étude à posteriori montre que cette approximation est raisonnable. Par contre cette hypothèse est très contraignante, car le développement présenté ne serait valable que pour des temps longs. En pratique la condition quasi-statique est vérifiée pour [Plumb et Whitaker 1988b]

$$\frac{D_\eta^* t}{\epsilon_\eta l_\eta^2} \geq 1 \quad (2.25)$$

Sur la base de ces simplifications, l'équation 2.21 pour la région η devient

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta) + \tilde{\mathbf{v}}_\eta \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta) + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta) \\ + \frac{\varphi_\eta^{-1}}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \tilde{c}_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta - \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) dA \end{aligned} \quad (2.26)$$

Le problème complet est obtenu en introduisant les décompositions spatiales (Eq. 2.16 à 2.18) dans les conditions aux limites (Eq. 2.3 et 2.4)

$$\tilde{c}_\eta = \tilde{c}_\omega + \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \tilde{c}_\eta + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \tilde{c}_\omega + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Un raisonnement similaire dans la région ω permet d'écrire

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \tilde{c}_\omega) + \tilde{\mathbf{v}}_\omega \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega &= \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \tilde{c}_\omega) + \nabla \cdot \left(\tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \\ &+ \frac{\varphi_\omega^{-1}}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \tilde{c}_\omega - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \tilde{c}_\omega - \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) dA \end{aligned} \quad (2.29)$$

Le volume de prise de moyenne doit contenir toutes les informations relatives à la structure complète, pour cela le milieu poreux est considéré périodique et entièrement représenté par une cellule unitaire. Les conditions de périodicité sont formulées par

$$\tilde{c}_\eta(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_\eta(\mathbf{r}), \quad \tilde{c}_\omega(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_\omega(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.30)$$

où les vecteurs \mathbf{l}_i sont les vecteurs de périodicité dans les trois directions de l'espace. De plus, les déviations spatiales sont à moyennes nulles sur le volume de prise de moyenne (Eq. 2.15).

$$\{\tilde{c}_\eta\}^\eta = 0, \quad \{\tilde{c}_\omega\}^\omega = 0 \quad (2.31)$$

Dès lors, pour résoudre le problème à grande échelle, il est nécessaire de résoudre un système d'équations composé des équations à grande échelle (Eq. 2.19 et 2.20) et du problème de fermeture local (Eq. 2.26 à 2.31), ce qui représente une tâche particulièrement difficile. Dans le problème de fermeture gouvernant les déviations (Eq. 2.26 à 2.31), on voit apparaître des termes sources responsables des fluctuations des déviations

$$\nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta, \quad \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega, \quad \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \quad (2.32)$$

La méthode de prise de moyenne a pour objectif de proposer une solution approchée. En reprenant les idées développées par Zanotti et Carbonell [1984], Quintard [1995], Quintard et Whitaker [1995], Quintard et Whitaker [1996a], on recherche une solution sous la forme

$$\tilde{c}_\eta = \mathbf{b}_{\eta\eta} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + \mathbf{b}_{\eta\omega} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega + r_\eta \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \quad (2.33)$$

$$\tilde{c}_\omega = \mathbf{b}_{\omega\omega} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega + \mathbf{b}_{\omega\eta} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + r_\omega \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \quad (2.34)$$

Avec ces représentations, les variables de fermeture ($\mathbf{b}_{\eta\eta}$, $\mathbf{b}_{\eta\omega}$, $\mathbf{b}_{\omega\omega}$, $\mathbf{b}_{\omega\eta}$, r_η , r_ω) doivent satisfaire les problèmes suivants

Problème I

Problème de fermeture relatif à $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta$

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \mathbf{b}_{\eta\eta} \right) + \tilde{\mathbf{v}}_\eta = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta}) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}_\eta^* - \varphi_\eta^{-1} \mathbf{c}_{\eta\eta} \quad (2.35a)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{b}_{\eta\eta} = \mathbf{b}_{\omega\eta} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.35b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta} + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\eta} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.35c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \mathbf{b}_{\omega\eta}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\eta}) - \varphi_\omega^{-1} \mathbf{c}_{\omega\eta} \quad (2.35d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \mathbf{b}_{\eta\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\eta\eta}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{b}_{\omega\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\omega\eta}(\mathbf{r}) \quad (2.35e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{\mathbf{b}_{\eta\eta}\}^\eta = 0 \quad \{\mathbf{b}_{\omega\eta}\}^\omega = 0 \quad (2.35f)$$

Nous avons utilisé les vecteurs $\mathbf{c}_{\eta\eta}$ et $\mathbf{c}_{\omega\eta}$ pour représenter les termes de flux inter-régions, leur expression est

$$\mathbf{c}_{\eta\eta} = -\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \mathbf{b}_{\eta\eta} - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta} - \mathbf{D}_\eta^* \right) dA \quad (2.36)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\eta} = +\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \mathbf{b}_{\omega\eta} - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\eta} \right) dA \quad (2.37)$$

Ils sont liés par

$$\mathbf{c}_{\eta\eta} = -\mathbf{c}_{\omega\eta} \quad (2.38)$$

Problème II

Problème de fermeture relatif à $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega$

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \mathbf{b}_{\eta\omega} \right) = \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\omega} \right) - \varphi_\eta^{-1} \mathbf{c}_{\eta\omega} \quad (2.39a)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{b}_{\eta\omega} = \mathbf{b}_{\omega\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.39b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\omega} + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.39c)$$

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \mathbf{b}_{\omega\omega} \right) + \tilde{\mathbf{v}}_\omega = \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega} \right) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* - \varphi_\omega^{-1} \mathbf{c}_{\omega\omega} \quad (2.39d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \mathbf{b}_{\eta\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\eta\omega}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{b}_{\omega\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\omega\omega}(\mathbf{r}) \quad (2.39e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{ \mathbf{b}_{\eta\omega} \}^\eta = 0 \quad \{ \mathbf{b}_{\omega\omega} \}^\omega = 0 \quad (2.39f)$$

Pour ce problème, les deux vecteurs constants sont définis par

$$\mathbf{c}_{\eta\omega} = -\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \mathbf{b}_{\eta\omega} - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\omega} \right) dA \quad (2.40)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = +\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \mathbf{b}_{\omega\omega} - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega} - \mathbf{D}_\omega^* \right) dA \quad (2.41)$$

ils sont liés entre eux par

$$\mathbf{c}_{\eta\omega} = -\mathbf{c}_{\omega\omega} \quad (2.42)$$

Problème III

Problème de fermeture relatif à $\left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right)$

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta r_\eta \right) = \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla r_\eta \right) - \varphi_\eta^{-1} \alpha^* \quad (2.43a)$$

$$\text{C.L.1} \quad r_\eta = r_\omega + 1 \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.43b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla r_\eta = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla r_\omega \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.43c)$$

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega r_\omega \right) = \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla r_\omega \right) + \varphi_\omega^{-1} \alpha^* \quad (2.43d)$$

$$\text{Périodicité} \quad r_\eta(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = r_\eta(\mathbf{r}) \quad r_\omega(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = r_\omega(\mathbf{r}) \quad (2.43e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{ r_\eta \}^\eta = 0 \quad \{ r_\omega \}^\omega = 0 \quad (2.43f)$$

avec les relations

$$\begin{aligned}\alpha^* &= -\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta r_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla r_\eta \right) dA \\ &= +\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega r_\omega - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla r_\omega \right) dA\end{aligned}\quad (2.44)$$

Plutôt que de travailler directement avec les variables r_η et r_ω , il est préférable de définir de nouvelles inconnues pour s'affranchir de la condition aux limites discontinue donnée par l'équation 2.43b

$$s_\eta = r_\eta \quad s_\omega = r_\omega + 1 \quad (2.45)$$

Le dernier problème de fermeture est transformé en

Problème III

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta s_\eta) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_\eta) - \varphi_\eta^{-1} \alpha^* \quad (2.46a)$$

$$\text{C.L.1} \quad s_\eta = s_\omega \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.46b)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_\eta = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_\omega \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (2.46c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega s_\omega) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_\omega) + \varphi_\omega^{-1} \alpha^* \quad (2.46d)$$

$$\text{Périodicité} \quad s_\eta(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_\eta(\mathbf{r}) \quad s_\omega(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_\omega(\mathbf{r}) \quad (2.46e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{s_\eta\}^\eta = 0 \quad \{s_\omega\}^\omega = 1 \quad (2.46f)$$

avec

$$\begin{aligned}\alpha^* &= -\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta s_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_\eta \right) dA \\ &= +\frac{1}{V_\infty} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega s_\omega - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_\omega \right) dA\end{aligned}\quad (2.47)$$

2.4 Les équations à grande échelle

En substituant les déviations spatiales des concentrations par les représentations proposées (Eq. 2.33 et 2.34) dans les équations macroscopiques obtenues par les théorèmes de prise de moyenne (Eq. 2.19 et 2.20), nous obtenons dans la région η

$$\begin{aligned}\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t} &+ \varphi_\eta \left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \right\}^\eta \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ &- \nabla \cdot \left[\mathbf{d}_\eta \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \right] - \mathbf{u}_{\eta\eta} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \mathbf{u}_{\eta\omega} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \\ &= \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right] + \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right] - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right)\end{aligned}\quad (2.48)$$

et dans la région ω

$$\begin{aligned}
 & \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial t} + \varphi_\omega \left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\omega \right\}^\omega \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \\
 & \quad - \nabla \cdot \left[\mathbf{d}_\omega \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \right] - \mathbf{u}_{\omega\omega} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \mathbf{u}_{\omega\eta} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\
 & = \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right] + \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right] - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \quad (2.49)
 \end{aligned}$$

Les propriétés effectives à grande échelle intervenant dans les équations précédentes sont données explicitement en fonction des variables de fermeture par

$$\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} = \varphi_\eta \left\{ \mathbf{D}_\eta^* \cdot (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta}) - \tilde{\mathbf{v}}_\eta \mathbf{b}_{\eta\eta} \right\}^\eta \quad (2.50)$$

$$\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**} = \varphi_\eta \left\{ \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\omega} - \tilde{\mathbf{v}}_\eta \mathbf{b}_{\eta\omega} \right\}^\eta \quad (2.51)$$

$$\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**} = \varphi_\omega \left\{ \mathbf{D}_\omega^* \cdot (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega}) - \tilde{\mathbf{v}}_\omega \mathbf{b}_{\omega\omega} \right\}^\omega \quad (2.52)$$

$$\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**} = \varphi_\omega \left\{ \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\omega\eta} - \tilde{\mathbf{v}}_\omega \mathbf{b}_{\omega\eta} \right\}^\omega \quad (2.53)$$

$$\mathbf{u}_{\eta\eta} = -\mathbf{u}_{\omega\eta} = \mathbf{c}_{\eta\eta} \quad (2.54)$$

$$\mathbf{u}_{\omega\omega} = -\mathbf{u}_{\eta\omega} = \mathbf{c}_{\omega\omega} \quad (2.55)$$

$$\mathbf{d}_\eta = \varphi_\eta \left\{ \tilde{\mathbf{v}}_\eta s_\eta - \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_\eta \right\}^\eta \quad (2.56)$$

$$\mathbf{d}_\omega = \varphi_\omega \left\{ \tilde{\mathbf{v}}_\omega s_\omega - \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_\omega \right\}^\omega \quad (2.57)$$

L'ensemble des trois problèmes de fermeture et des définitions précédentes (Eq. 2.50 à 2.57) propose une méthode de calcul direct des propriétés effectives à grande échelle. L'intérêt de la technique de prise de moyenne volumique est en effet d'aboutir à un modèle macroscopique et à des relations explicites permettant de passer d'une échelle à l'autre. Cette approche déterministe est basée sur une définition locale des hétérogénéités entièrement décrites par une cellule unitaire périodique. Cette hypothèse de périodicité peut paraître assez restrictive si on s'intéresse à des formations géologiques naturelles. Pour d'autres processus physiques, la méthode de prise de moyenne a donné d'excellents résultats même pour des milieux désordonnés (milieux non périodiques) [Ahmadi et Quintard 1996]. Dans ces situations, la cellule unitaire doit être représentative du milieu réel, c'est à dire contenir le maximum d'information topographique (fraction massique, histogramme des propriétés, longueur de corrélation, arrangements, ...).

Le modèle à deux équations proposé dans ce travail (Eq. 2.48 et 2.49) a la même structure que les modèles existant jusqu'alors (modèle type "Coats & Smith", modèle "mobile-immobile" ou modèle "mobile-mobile"). On retrouve bien deux équations de convection-dispersion pour chaque région faisant intervenir un terme d'échange décrit par une cinétique au premier ordre. Ce modèle peut donc être vu comme une généralisation de tous les modèles à double-porosité décrits dans la littérature. Par contre, on voit apparaître certains coefficients supplémentaires (termes de couplage convectif, termes de couplage dispersif). Le prix à payer pour obtenir une représentation plus précise est un nombre élevé de paramètres dans le modèle macroscopique. Nous verrons par la suite dans quelles conditions certains termes peuvent être négligés.

La théorie de prise de moyenne volumique n'est pas limitée au cas des variations discrètes des propriétés physiques du milieu considéré, mais s'applique également aux variations continues. Cet aspect a été documenté lors de l'étude de l'écoulement monophasique dans un milieu hétérogène [Quintard et Whitaker 1987].

2.5 Comportement asymptotique

Une analyse tri-dimensionnelle complète des moments associés à un modèle à deux équations a déjà été proposée [Zanotti et Carbonell 1984]. Il est montré qu'un modèle à deux équations converge asymptotiquement vers un modèle à une équation, et il est possible d'obtenir une expression du coefficient de dispersion asymptotique global. Une analyse similaire a été présentée dans le cas du transport miscible [Ahmadi et al. 1998] dans une structure stratifiée, dans ce cas, certains coefficients à grande échelle sont nuls. Nous proposons ici de reprendre ce résultat préliminaire en considérant cette fois-ci le modèle complet (tous les coefficients du modèle à deux équations).

Un problème mono-dimensionnel de transport est étudié, le modèle à deux équations s'écrit alors

$$\begin{aligned} \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t} + (v_\eta - u_{\eta\eta} - d_\eta) \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial x} + (u_{\omega\omega} + d_\eta) \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial x} \\ = D_{\eta\eta}^{**} \frac{\partial^2 \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial x^2} + D_{\eta\omega}^{**} \frac{\partial^2 \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial x^2} - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial t} + (v_\omega - u_{\omega\omega} - d_\omega) \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial x} + (u_{\eta\eta} + d_\omega) \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial x} \\ = D_{\omega\omega}^{**} \frac{\partial^2 \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial x^2} + D_{\omega\eta}^{**} \frac{\partial^2 \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial x^2} - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \end{aligned} \quad (2.59)$$

où ne sont pris en compte que les composantes longitudinales de chaque tenseur ou vecteur ($v_\omega = (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega)_x, \dots$).

Une impulsion de concentration, représentée mathématiquement par une fonction Dirac, est injecté à $t = 0$ dans un milieu infini. Les conditions aux limites sont les suivantes

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta = 0 \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega = 0 \quad (2.60)$$

Afin de suivre le déplacement du traceur dans un repère mobile, le changement de variable suivant est considéré

$$X = x - \frac{v_r t}{\{\epsilon\}} \quad (2.61)$$

les équations à grande échelle deviennent

$$\begin{aligned} \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t} + \left(v_\eta - \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\eta\eta} - d_\eta \right) \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + (u_{\omega\omega} + d_\eta) \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \\ = D_{\eta\eta}^{**} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + D_{\eta\omega}^{**} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\partial t} + \left(v_\omega - \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\omega\omega} - d_\omega \right) \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega + (u_{\eta\eta} + d_\omega) \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ = D_{\omega\omega}^{**} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega + D_{\omega\eta}^{**} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega - \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Les moments spatiaux d'ordre n correspondant aux champs de concentration macroscopiques sont définis par

$$\mu_{\eta,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} X^n \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta dX \quad (2.64)$$

$$\mu_{\omega,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} X^n \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega dX \quad (2.65)$$

L'intérêt de la méthode des moments est de supprimer la variable d'espace en intégrant les équations sur tout le domaine. Ainsi, en multipliant par X^n les équations 2.62 et 2.63, et en intégrant par parties, les différents moments apparaissent

$$\begin{aligned} \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \mu_{\eta,n}}{\partial t} = n \left(v_\eta - \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\eta\eta} - d_\eta \right) \mu_{\eta,n-1} + n (u_{\omega\omega} + d_\eta) \mu_{\omega,n-1} \\ + n(n-1) D_{\eta\eta}^{**} \mu_{\eta,n-2} + n(n-1) D_{\eta\omega}^{**} \mu_{\omega,n-2} - \alpha^* (\mu_{\eta,n} - \mu_{\omega,n}) \end{aligned} \quad (2.66)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \mu_{\omega,n}}{\partial t} = n \left(v_\omega - \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\omega\omega} - d_\omega \right) \mu_{\omega,n-1} + n (u_{\eta\eta} + d_\omega) \mu_{\eta,n-1} \\ + n(n-1) D_{\omega\omega}^{**} \mu_{\omega,n-2} + n(n-1) D_{\omega\eta}^{**} \mu_{\eta,n-2} - \alpha^* (\mu_{\omega,n} - \mu_{\eta,n}) \end{aligned} \quad (2.67)$$

Ces équations doivent être résolues de manière récursive en partant de l'ordre zéro.

Moments d'ordre 0

Le moment d'ordre zéro peut être interprété comme la quantité totale de traceur présent dans une région du système. Pour $n = 0$, le système précédent est simplifié en

$$\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \mu_{\eta,0}}{\partial t} = -\alpha^* (\mu_{\eta,0} - \mu_{\omega,0}) \quad (2.68)$$

$$\epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \mu_{\omega,0}}{\partial t} = -\alpha^* (\mu_{\omega,0} - \mu_{\eta,0}) \quad (2.69)$$

La solution générale de ce système différentiel est donnée par

$$\{\epsilon\} \mu_{\eta,0} = \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} g_{\eta,0} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} g_{\omega,0} + \exp\left(-\alpha^* t \frac{\{\epsilon\}}{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega}}\right) \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} (g_{\eta,0} - g_{\omega,0}) \quad (2.70)$$

$$\{\epsilon\} \mu_{\omega,0} = \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} g_{\eta,0} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} g_{\omega,0} + \exp\left(-\alpha^* t \frac{\{\epsilon\}}{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega}}\right) \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} (g_{\omega,0} - g_{\eta,0}) \quad (2.71)$$

où $g_{\eta,0}$ et $g_{\omega,0}$, sont les conditions initiales. L'addition de ces deux équations conduit à

$$\{\epsilon\} \mu_0 = \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \mu_{\eta,0} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} \mu_{\omega,0} \quad (2.72)$$

$$= \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} g_{\eta,0} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} g_{\omega,0} = Cte \quad (2.73)$$

où la porosité à grande échelle est définie par

$$\{\epsilon\} = \varphi_{\eta} \epsilon_{\eta} + \varphi_{\omega} \epsilon_{\omega} \quad (2.74)$$

Alors, les limites des deux premiers moments sont égales

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_{\eta,0} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mu_{\omega,0} = \frac{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \mu_{\eta,0} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} \mu_{\omega,0}}{\{\epsilon\}} = \mu_0 \quad (2.75)$$

C'est à dire pour des temps assez longs

$$t \gg \frac{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega}}{\alpha^* \{\epsilon\}} \quad (2.76)$$

les quantités totales de traceur dans chaque région sont égales, ce qui ne correspond pas forcément à un équilibre des deux concentrations en tout point. Cette condition temporelle définit le début du régime asymptotique. Donc, lorsque l'échange massique entre les deux régions est faible (α^* petit), un temps plus important est nécessaire pour atteindre le régime asymptotique.

Moments d'ordre 1

Les positions moyennes des deux fronts de concentration sont obtenues en analysant les moments d'ordre un. Pour $n = 1$, les termes convectifs interviennent

$$\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \frac{\partial \mu_{\eta,1}}{\partial t} = \left(v_{\eta} - \frac{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\eta\eta} - d_{\eta} \right) \mu_{\eta,0} + (u_{\omega\omega} + d_{\eta}) \mu_{\omega,0} - \alpha^* (\mu_{\eta,1} - \mu_{\omega,1}) \quad (2.77)$$

$$\epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} \frac{\partial \mu_{\omega,1}}{\partial t} = \left(v_{\omega} - \frac{\epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\omega\omega} - d_{\omega} \right) \mu_{\omega,0} + (u_{\eta\eta} + d_{\omega}) \mu_{\eta,0} - \alpha^* (\mu_{\omega,1} - \mu_{\eta,1}) \quad (2.78)$$

L'addition de ces deux équations conduit à

$$\{\epsilon\} \frac{\partial \mu_1}{\partial t} = \epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \frac{\partial \mu_{\eta,1}}{\partial t} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} \frac{\partial \mu_{\omega,1}}{\partial t} \quad (2.79)$$

$$= \left(v_{\eta} - \frac{\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} v_r}{\{\epsilon\}} + d_{\omega} - d_{\eta} \right) \mu_{\eta,0} + \left(v_{\omega} - \frac{\epsilon_{\omega} \varphi_{\omega} v_r}{\{\epsilon\}} + d_{\eta} - d_{\omega} \right) \mu_{\omega,0} \quad (2.80)$$

Le comportement asymptotique est tel que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\{\epsilon\} \frac{\partial \mu_1}{\partial t} \right) = (v_\eta + v_\omega - v_r) \mu_0 \quad (2.81)$$

Le repère mobile mis en place (se déplaçant à la vitesse V_r) doit permettre de suivre le déplacement des fronts. Il faut donc qu'asymptotiquement, le moment moyen d'ordre un soit nul. La vitesse de référence qui satisfait cette condition est

$$v_r = v_\eta + v_\omega \quad (2.82)$$

$$\left(v_\eta - \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta v_r}{\{\epsilon\}} \right) = - \left(v_\omega - \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_r}{\{\epsilon\}} \right) = \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} \quad (2.83)$$

En conséquent, le système différentiel gouvernant les moments d'ordre un admet comme solution générale dans le domaine asymptotique

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_{\eta,1} = \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta f_\eta + \epsilon_\omega \varphi_\omega f_\omega}{\{\epsilon\}} + \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega \mu_0}{\alpha^* \{\epsilon\}} \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (u_{\omega\omega} - u_{\eta\eta}) \right) \quad (2.84)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu_{\omega,1} = \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta f_\eta + \epsilon_\omega \varphi_\omega f_\omega}{\{\epsilon\}} - \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta \mu_0}{\alpha^* \{\epsilon\}} \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (u_{\omega\omega} - u_{\eta\eta}) \right) \quad (2.85)$$

En soustrayant ces deux dernières relations, une remarque intéressante peut être faite.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\mu_{\eta,1} - \mu_{\omega,1}) = \frac{\mu_0}{\alpha^*} \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega V_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta V_\omega}{\{\epsilon\}} + (u_{\omega\omega} - u_{\eta\eta}) \right) = Cte \quad (2.86)$$

La différence entre la position des deux fronts dans chaque région tend vers une valeur constante. C'est à dire, dans le régime asymptotique, les deux fronts se déplacent à des vitesses égales, et sont décalés spatialement. On voit que ce décalage, caractérisant en un sens le non-équilibre, est fonction bien sûr de la différence de vitesse dans chaque région, mais aussi du coefficient d'échange de masse α^* . L'écart entre les deux fronts est d'autant plus important que l'échange est faible.

Moments d'ordre 2

Les moments d'ordre deux traduisent l'étalement du traceur. L'objectif à ce stade est donc de regarder si il est possible de caractériser simplement l'étalement moyen des deux fronts. Pour $n = 2$, les équations contrôlant les moments deviennent

$$\begin{aligned} \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \mu_{\eta,2}}{\partial t} + 2 \left(v_\eta - \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\eta\eta} - d_\eta \right) \mu_{\eta,1} + 2 (u_{\omega\omega} + d_\eta) \mu_{\omega,1} \\ = 2D_{\eta\eta}^{**} \mu_{\eta,0} + 2D_{\eta\omega}^{**} \mu_{\omega,0} - \alpha^* (\mu_{\eta,2} - \mu_{\omega,2}) \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_\omega \varphi_\omega \frac{\partial \mu_{\omega,2}}{\partial t} + 2 \left(v_\omega - \frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_r}{\{\epsilon\}} - u_{\omega\omega} - d_\omega \right) \mu_{\omega,1} + 2 (u_{\eta\eta} + d_\omega) \mu_{\eta,1} \\ = 2D_{\omega\omega}^{**} \mu_{\omega,0} + 2D_{\omega\eta}^{**} \mu_{\eta,0} - \alpha^* (\mu_{\omega,2} - \mu_{\eta,2}) \end{aligned} \quad (2.88)$$

L'addition de ces deux équations permet de supprimer le terme d'échange où interviennent les moments d'ordre deux. Ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \{\epsilon\} \frac{\partial \mu_2}{\partial t} = & 2 \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (d_\omega - d_\eta) \right) \mu_{\eta,1} \\ & - 2 \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (d_\omega - d_\eta) \right) \mu_{\omega,1} \\ & + 2 (D_{\eta\eta}^{**} + D_{\omega\eta}^{**}) \mu_{\eta,0} + 2 (D_{\omega\omega}^{**} + D_{\eta\omega}^{**}) \mu_{\omega,0} \end{aligned} \quad (2.89)$$

En utilisant les limites des deux premiers moments déterminées précédemment, il est possible d'obtenir simplement

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\{\epsilon\} \frac{\partial \mu_2}{\partial t} \right) = & 2\mu_0 [D_{\eta\eta}^{**} + D_{\omega\eta}^{**} + D_{\omega\omega}^{**} + D_{\eta\omega}^{**}] \\ & + \frac{2\mu_0}{\alpha^*} \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (d_\omega - d_\eta) \right) \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (u_{\omega\omega} - u_{\eta\eta}) \right) \end{aligned} \quad (2.90)$$

La dérivée temporelle du moment d'ordre 2 est une mesure de l'étalement relativement à la position moyenne du front, et correspond à la définition du coefficient de dispersion.

$$\frac{D_\infty^{**}}{\{\epsilon\}} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mu'_2}{\partial t} \quad \text{avec } \mu'_2 = \frac{\mu_2}{\mu_0} \quad (2.91)$$

Donc, l'écriture d'un modèle à une équation est possible sous la forme

$$\{\epsilon\} \frac{\partial \{\langle c \rangle\}}{\partial t} + \{\langle v \rangle\} \frac{\partial \{\langle c \rangle\}}{\partial x} = D_\infty^{**} \frac{\partial^2 \{\langle c \rangle\}}{\partial x^2} \quad (2.92)$$

avec

$$\{\langle v \rangle\} = v_\eta + v_\omega = \left(\{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\} \right)_x + \left(\{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\} \right)_x \quad (2.93)$$

$$\begin{aligned} D_\infty^{**} = & D_{\eta\eta}^{**} + D_{\omega\omega}^{**} + D_{\eta\omega}^{**} + D_{\omega\eta}^{**} + \\ & \frac{1}{\alpha^*} \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (d_\omega - d_\eta) \right) \left(\frac{\epsilon_\omega \varphi_\omega v_\eta - \epsilon_\eta \varphi_\eta v_\omega}{\{\epsilon\}} + (u_{\omega\omega} - u_{\eta\eta}) \right) \end{aligned} \quad (2.94)$$

Nous avons donc montré dans cette partie que, pour des temps assez longs (Eq. 2.76), le modèle à deux équations converge vers un modèle à une équation prenant en compte le non-équilibre. Associé à ce modèle, une expression explicite du coefficient de dispersion asymptotique est proposée. Dans la partie suivante d'autres approches sont étudiées afin de construire des modèles à une équation.

2.6 Modèle à une équation

Dans le développement du modèle à deux équations, nous avons tenu compte de la condition de non-équilibre massique à grande échelle écrite sous la forme

$$\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \neq \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \quad (2.95)$$

Sous certaines conditions (échange très rapide entre les deux régions), les deux concentrations associées à chaque zone sont toujours égales. Cette situation particulière correspond à l'*hypothèse d'équilibre local*, elle est caractérisée par

$$\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta = \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega = \left\{ \langle c \rangle^\beta \right\} \quad (2.96)$$

Dès lors, les deux équations du modèle (Eq. 2.48 et 2.49) peuvent être simplifiées en les ajoutant, afin d'obtenir un modèle à une équation à *équilibre local*

$$\{\epsilon\} \frac{\partial \{\langle c \rangle\}}{\partial t} + \{\langle \mathbf{v} \rangle\} \cdot \nabla \{\langle c \rangle\} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eq}^{**} \cdot \nabla \{\langle c \rangle\}) \quad (2.97)$$

avec

$$\mathbf{D}_{eq}^{**} = \mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} + \mathbf{D}_{\omega\omega}^{**} + \mathbf{D}_{\eta\omega}^{**} + \mathbf{D}_{\omega\eta}^{**} \quad (2.98)$$

$$\{\langle \mathbf{v} \rangle\} = \varphi_\omega \{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\}^\omega + \varphi_\eta \{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\}^\eta \quad (2.99)$$

$$\{\epsilon\} = \varphi_\omega \epsilon_\omega + \varphi_\eta \epsilon_\eta \quad (2.100)$$

Ce modèle à une équation est obtenu très simplement à partir du modèle à deux équations, mais fait appel à une hypothèse très forte (*hypothèse d'équilibre local*). Par la suite, nous verrons, dans le cas du milieu stratifié (partie 2.7) et dans le cas du milieu nodulaire (partie 4.6), que l'équilibre local est rarement satisfait. Notre objectif, à ce stade, est d'utiliser la méthode de prise moyenne pour développer un modèle à une équation qui ne fait pas appel à l'hypothèse d'équilibre local.

Le volume de prise de moyenne V_∞ est hétérogène, et ne correspond pas nécessairement à un système à double-région, des variations continues des propriétés locales sont acceptées. A l'échelle de Darcy, une équation de convection-dispersion valable dans tout le domaine est écrite, où la vitesse $\langle \mathbf{v} \rangle$ et le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* dépendent de la position

$$\epsilon \frac{\partial \langle c \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle \langle c \rangle^\beta) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \langle c \rangle^\beta) \quad (2.101)$$

Les grandeurs à grande échelle sont définies sur le volume V_∞ . La porosité à grande échelle est donnée par

$$\{\epsilon\} = \frac{1}{V_\infty} \int_{V_\infty} \epsilon dV \quad (2.102)$$

Sur un volume hétérogène, la concentration macroscopique C^* est obtenue à l'aide d'une moyenne pondérée par la porosité. L'intérêt de cette nouvelle définition est de pouvoir tenir compte des variations de porosité existant à l'intérieur du volume de prise de moyenne, la notation adoptée suit celle utilisée dans le cas d'un déplacement multiphasique en milieu hétérogène [Quintard et Whitaker 1988, Quintard et Whitaker 1990]. Généralement, les effets des variations de porosité sont considérés secondaires par rapport aux conséquences des hétérogénéités de perméabilité [Dagan 1984, Gelhar et Axness 1983, Güven et Molz 1986]. Nous pensons que cette simplification est trop forte, le modèle développé ici autorise des variations quelconques de porosité dans le domaine. Nous rappelons que le modèle à deux équations proposé dans ce chapitre, n'est valable que pour un système à double-milieu dans lequel chaque région est homogène.

$$\left\{ \epsilon \langle c \rangle^\beta \right\} = \frac{1}{V_\infty} \int_{V_\infty} \epsilon \langle c \rangle^\beta dV = \{ \epsilon \} C^* \quad (2.103)$$

D'une manière similaire, une vitesse interstitielle à grande échelle est définie par

$$\left\{ \epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \right\} = \{ \epsilon \} \mathbf{U}^* \quad (2.104)$$

Afin d'appliquer la technique de prise de moyenne, nous introduisons les déviations spatiales associées aux grandeurs moyennes

$$\langle c \rangle^\beta = C^* + \tilde{C} \quad (2.105)$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle^\beta = \mathbf{U}^* + \tilde{\mathbf{U}} \quad (2.106)$$

Alors en utilisant les équations 2.103 et 2.105, nous avons

$$\left\{ \epsilon \langle c \rangle^\beta \right\} = \left\{ \epsilon \left(C^* + \tilde{C} \right) \right\} = \{ \epsilon \} C^* \quad (2.107)$$

Une approximation au premier ordre permet d'extraire les grandeurs à grande échelle (telle que C^*) de l'opérateur de prise de moyenne. Ce type de simplification est discuté en détail par Quintard et Whitaker [1994c], Quintard et Whitaker [1994d], Quintard et Whitaker [1994b], Quintard et Whitaker [1994e], Quintard et Whitaker [1994f]. Nous obtenons donc

$$\left\{ \epsilon \tilde{C} \right\} = 0 \quad (2.108)$$

$$\left\{ \epsilon \tilde{\mathbf{U}} \right\} = 0 \quad (2.109)$$

On trouve ici une caractéristique des problèmes de fermeture qui se retrouve dans d'autres situations, par exemple le traitement du transfert de chaleur proposé par Moyne et al. [1999]. La prise de moyenne à grande échelle de l'équation de transport à l'échelle locale conduit à

$$\frac{\partial (\{ \epsilon \} C^*)}{\partial t} + \nabla \cdot (\{ \epsilon \} \mathbf{U}^* C^*) + \nabla \cdot \left\{ \epsilon \tilde{\mathbf{U}} \tilde{C} \right\} = \nabla \cdot \left(\{ \mathbf{D}^* \} \cdot \nabla C^* + \left\{ \mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C} \right\} \right) \quad (2.110)$$

L'équation gouvernant la déviation de la concentration est obtenue en introduisant les déviations spatiales dans l'équation de transport écrite à l'échelle de Darcy, nous avons

$$\epsilon \frac{\partial C^*}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta C^* + \epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \tilde{C} \right) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla C^*) + \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}) \quad (2.111)$$

La moyenne à grande échelle de la porosité $\{\epsilon\}$ est supposée constante. La soustraction de l'équation 2.110 à l'équation 2.101 aboutit à

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\epsilon}{\{\epsilon\}} \left(\nabla \cdot \left(\{\mathbf{D}^*\} \cdot \nabla C^* + \{\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}\} \right) - \{\epsilon\} \mathbf{U}^* \cdot \nabla C^* - \nabla \cdot \{\epsilon \tilde{\mathbf{U}} \tilde{C}\} \right) \\ + \epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla (C^* + \tilde{C}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla C^*) + \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}) \end{aligned}$$

Cette équation est réécrite sous la forme

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} + \epsilon \tilde{\mathbf{U}} \cdot \nabla C^* + \epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \tilde{C} - \frac{\epsilon}{\{\epsilon\}} \nabla \cdot \{\epsilon \tilde{\mathbf{U}} \tilde{C}\} \\ = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}) + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla C^*) + \left(1 - \frac{\epsilon}{\{\epsilon\}} \right) \nabla \cdot (\{\mathbf{D}^*\} \cdot \nabla C^*) - \frac{\epsilon}{\{\epsilon\}} \nabla \cdot (\{\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}\}) \end{aligned} \quad (2.112)$$

où la déviation spatiale du tenseur de dispersion est définie par

$$\tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{D}^* - \{\mathbf{D}^*\} \quad (2.113)$$

Les équations 2.110 et 2.112 doivent être résolues simultanément pour fournir une solution complète du problème, cependant ceci représente une tâche difficile. Les mêmes hypothèses que celles énoncées dans la partie 2.3 (séparation des échelles, quasi-staticité des déviations) permettent de simplifier le problème local qui devient

$$\epsilon \tilde{\mathbf{U}} \cdot \nabla C^* + \epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \tilde{C} = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{C}) + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla C^*) \quad (2.114)$$

La fermeture du problème est obtenue en cherchant une solution sous la forme

$$\tilde{C} = \mathbf{b}^* \cdot \nabla C^* \quad (2.115)$$

La variable \mathbf{b}^* doit alors satisfaire le problème de fermeture suivant

Problème de fermeture

$$\epsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \mathbf{b}^* + \epsilon \tilde{\mathbf{U}} = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \mathbf{b}^*) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} \quad (2.116)$$

$$\text{Périodicité} \quad \mathbf{b}^*(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}^*(\mathbf{r}) \quad (2.117)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{\epsilon \mathbf{b}^*\} = 0 \quad (2.118)$$

Les deux termes sources dispersifs sont les fluctuations de vitesses et les variations locales du tenseur de dispersion. Le milieu est bien sûr toujours représenté par une cellule unitaire périodique. En introduisant la représentation de la déviation choisie dans l'équation 2.110, l'équation à grande échelle suivante est obtenue

$$\{\epsilon\} \frac{\partial C^*}{\partial t} + \{\langle \mathbf{v} \rangle\} \cdot \nabla \{C\} = \nabla \cdot (\mathbf{D}^{**} \cdot \nabla C^*) \quad (2.119)$$

dans laquelle le tenseur de dispersion à grande échelle est donné par

$$\mathbf{D}^{**} = \left\{ \mathbf{D}^* \cdot (\nabla \mathbf{b}^* + \mathbf{I}) - \epsilon \tilde{\mathbf{U}} \mathbf{b}^* \right\} \quad (2.120)$$

La forme générale du modèle à une équation obtenue ici est identique à celles dérivées par l'analyse asymptotique d'une part (Eq. 2.92), et par l'hypothèse d'équilibre local d'autre part (Eq. 2.97). Les grandes différences résident dans les expressions des tenseurs de dispersion associés, et la physique sous-jacente. Dans les parties suivantes, ces différentes expressions sont comparées.

2.7 Un exemple simple : le milieu stratifié bi-couche

Dans cette partie, nous présentons une analyse complète d'un système stratifié bi-couche présenté figure 2.1. Cette géométrie est la plus simple représentation des hétérogénéités existant en milieu naturel, cependant son comportement macroscopique est caractéristique d'un système à double-porosité. Nous verrons en effet que les systèmes stratifiés, où les régions lentes et rapides sont connectées d'un bout à l'autre de la cellule, mettent en évidence les comportements les plus anormaux. De plus, la simplicité géométrique de ce système offre la possibilité de mener des développements analytiques et d'obtenir des caractéristiques macroscopiques de manière exacte. Pour ces raisons, les milieux stratifiés ont été très souvent étudiés d'un point de vue expérimental [Leroy et al. 1992, Pickens et Grisak 1981, Sternberg et Greenkorn 1994, Thorbjarnarson et Mackay 1997], numérique [Chin 1987, Lake et Hirasaki 1981], ou théorique [Dagan 1990, Gelhar et al. 1979, Gupta et Bhattacharya 1986, Güven et Molz 1986, Marle et al. 1967, Plumb et Whitaker 1988b, Valocchi 1989].

La première étape consiste à réaliser des simulations numériques du transport à l'échelle locale sur un maillage fin. Ces expériences numériques servent ensuite de référence afin de contrôler la qualité des solutions à grande échelle obtenues avec le modèle à deux équations. Ces simulations locales ont été effectuées à l'aide des codes MODFLOW et MT3D [Zheng 1994]. Les méthodes numériques employées sont détaillées dans la partie 4.4. Les caractéristiques locales du milieu poreux étudié sont données dans le tableau 2.1, les dispersivités sont égales dans les deux régions. Un exemple de champs de concentration bi-dimensionnel pour $t = 3 \cdot 10^6$ s est présenté dans la figure 2.2. Cette figure montre que le mode de transport prédominant dans chaque strate est la convection. La dispersion longitudinale ne joue pas un rôle très important, par contre la dispersion transversale est

2.7. Un exemple simple : le milieu stratifié bi-couche

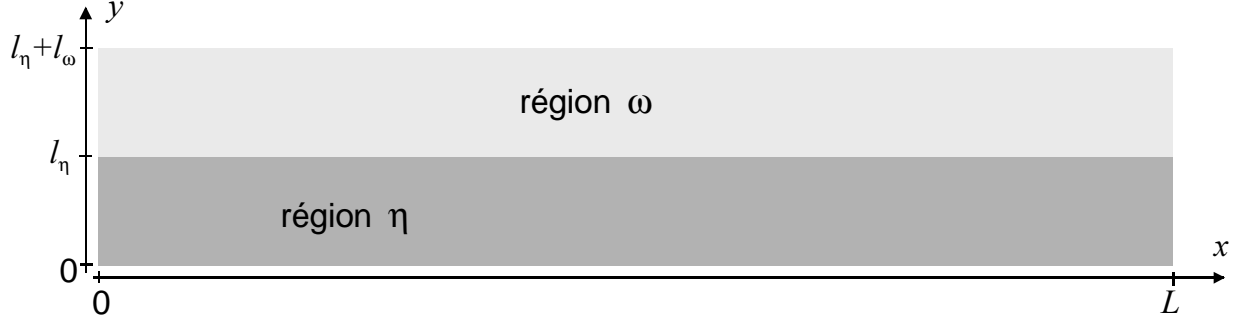


FIG. 2.1: Milieu stratifié bi-couche

le seul vecteur d'échange entre les deux régions. A partir de ces champs de concentration locaux, un processus de moyenne spatiale (par section verticale) donne les champs de concentration expérimentaux à grande échelle.

Dimensions	$l_\eta = l_\omega$ (m)	$L/l_\eta = L/l_\omega$
	1	10
Propriétés locales	K_η (10^{-12} m ²)	K_ω (10^{-12} m ²)
	10	0.1
	ϵ_η	ϵ_ω
	0.4	0.25
	α_L (m)	α_T (m)
	0.1	0.01
Écoulements	$\left(\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\right\}^\eta\right)_x$ (10^{-6} m/s)	$\left(\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\right\}^\omega\right)_x$ (10^{-6} m/s)
	1	0.1

Tableau 2.1 : Propriétés locales du milieu stratifié

Ensuite, les problèmes de fermeture pour le modèle à deux équations sont résolus analytiquement (voir partie 3.1.5), les expressions explicites des propriétés macroscopiques sont alors

$$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx} = \varphi_\eta (\mathbf{D}_\eta^*)_{xx} \quad (2.121)$$

$$(\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**})_{xx} = \varphi_\omega (\mathbf{D}_\omega^*)_{xx} \quad (2.122)$$

$$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{xx} = (\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**})_{xx} = 0 \quad (2.123)$$

$$\alpha^* = \frac{12}{(l_\eta + l_\omega)^2} \left(\frac{(\mathbf{D}_\eta^*)_{yy} (\mathbf{D}_\omega^*)_{yy}}{\varphi_\omega (\mathbf{D}_\eta^*)_{yy} + \varphi_\eta (\mathbf{D}_\omega^*)_{yy}} \right) \quad (2.124)$$

Le système d'équations décrivant le transport macroscopique est donné par les équations 2.62 et 2.63. Les méthodes numériques associées à la résolution de ces équations sont décrites dans la partie 3.2.


 FIG. 2.2: Champ de concentration dans le milieu stratifié à $t = 3.10^6$ s

Les champs de concentration à grande échelle issus du modèle théorique sont confrontés aux résultats des expériences numériques sur la figure 2.3. Nous obtenons un très bon accord avec une erreur relative inférieure à 10%. La courbe correspondant au comportement d'une représentation à une équation est calculée comme une moyenne des concentrations dans chaque région pondérée par les porosités (Eq. 2.103)

$$C^* = \frac{\epsilon_\eta \varphi_\eta \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + \epsilon_\omega \varphi_\omega \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega}{\{\epsilon\}} \quad (2.125)$$

Cette courbe est caractéristique de la réponse anormale d'un milieu hétérogène, et ne peut pas être obtenue à l'aide d'une équation classique de convection-dispersion. La prise en compte du non-équilibre de masse dans la modélisation macroscopique est indispensable, une approche à deux équations semble être le bon compromis pour décrire le transport dans un milieu aux propriétés contrastées. Généralement, dans les structures stratifiées, le mécanisme de transport prioritaire est la convection. Un modèle type "Coats & Smith" ou "mobile-immobile" ne peut pas représenter correctement le comportement macroscopique dans cette situation.

L'analyse de ces résultats met en évidence le fait que le coefficient de transfert de masse α^* est en principe sous-estimé par le modèle théorique. Les approximations numériques ne peuvent pas expliquer le décalage observé. Par contre, sur des problèmes similaires [Grangeot et al. 1994], il a déjà été observé que le modèle théorique obtenu par la méthode de prise de moyenne volumique sous-estimait le flux inter-régions aux temps courts. L'hypothèse de quasi-staticité (Eq. 2.25) prise en compte lors du développement des problèmes de fermeture correspond à un processus de transport établi, donc à des temps longs. Ce n'est pas le cas ici, et la déviation observée s'estompe lorsque le temps augmente. Bien que les conditions d'application ne soient pas rigoureusement respectées, le modèle à deux équations propose une bonne description du transport macroscopique, acceptable dans la plupart des situations pratiques.

Le comportement asymptotique d'un système stratifié bi-couche a été extensivement étudié. L'application de la méthode des moments [Aris 1956] sur les équations de transport à l'échelle locale permet de montrer que, pour un temps suffisamment long, la concentration moyenne peut être décrite par une équation de convection-dispersion de la forme [Güven et al. 1984, Lake et Hirasaki 1981, Marle et al. 1967, Valocchi 1989].

$$\{\epsilon\} \frac{\partial \{\langle c \rangle\}}{\partial t} + \{\langle \mathbf{v} \rangle\} \frac{\partial \{\langle c \rangle\}}{\partial x} = D_\infty^{**} \frac{\partial^2 \{\langle c \rangle\}}{\partial x^2} \quad (2.126)$$

2.7. Un exemple simple : le milieu stratifié bi-couche

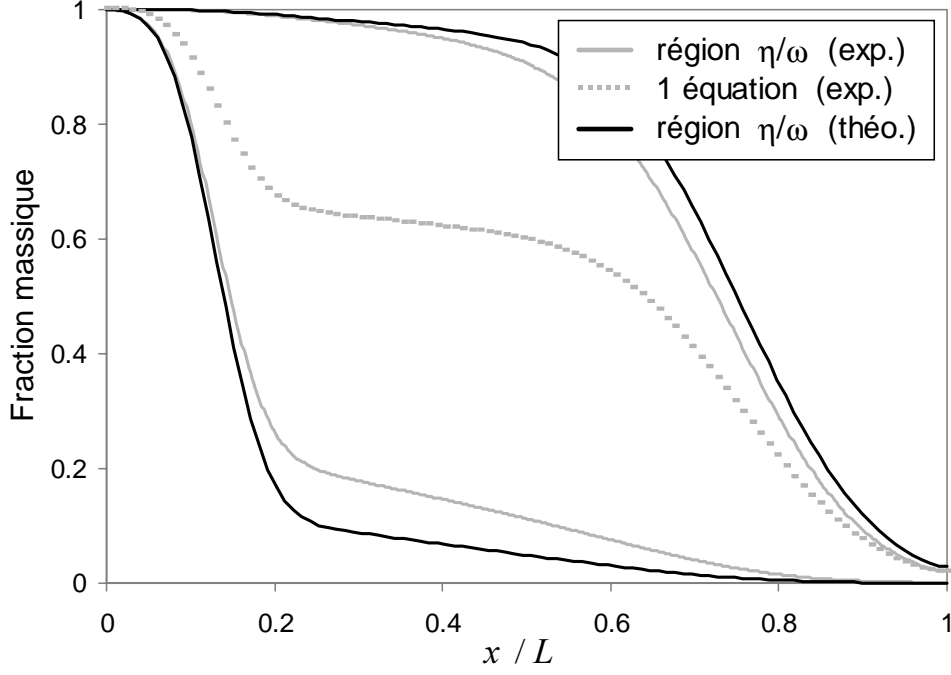


FIG. 2.3: Champs de concentration à grande échelle dans le milieu stratifié à $t = 3.10^6 s$

Le coefficient de dispersion asymptotique est donné par

$$D_{\infty}^{**} = \varphi_{\eta} (\mathbf{D}_{\eta}^*)_{xx} + \varphi_{\omega} (\mathbf{D}_{\omega}^*)_{xx} \quad (2.127)$$

$$+ \frac{(l_{\eta} + l_{\omega})^2}{12} \frac{(\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega})^2}{(\epsilon_{\eta} \varphi_{\eta} + \epsilon_{\omega} \varphi_{\omega})^2} \left[\frac{\varphi_{\eta}}{(\mathbf{D}_{\eta}^*)_{yy}} + \frac{\varphi_{\omega}}{(\mathbf{D}_{\omega}^*)_{yy}} \right] \left[\left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta}^{\beta} \right)_x - \left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\omega}^{\beta} \right)_x \right]^2 \quad (2.128)$$

Des expérimentations réalisées dans le régime asymptotique sont en très bon accord avec le modèle proposé ci-dessus [Marle et al. 1967]. Notre objectif est de comparer le comportement asymptotique du modèle à deux équations à ces résultats. Le système retenu est identique au précédent, seul sa longueur est modifiée ($L/l_{\eta} = L/l_{\omega} = 1000$), de façon à augmenter le temps de résidence du traceur. Sur la figure 2.4 sont dessinées les dérivées par rapport au temps de la concentration d'effluent à la sortie du milieu. Les deux modèles (moyenne du modèle à deux équations, modèle à une équation de Marle et al. [1967]) coïncident exactement pour des temps longs. Le modèle à une équation à équilibre local donne une très mauvaise représentation de l'étalement du front de concentration. La différence des vitesses de transport convectif et le faible échange de masse entre les deux régions sont responsables du non-équilibre, les résultats présentés ici montrent que ces deux processus physiques sont les principales causes de dispersion à grande échelle.

En reprenant l'analyse directe du comportement asymptotique du modèle à deux équations développée dans la partie 2.5, le coefficient de dispersion longitudinal asymptotique

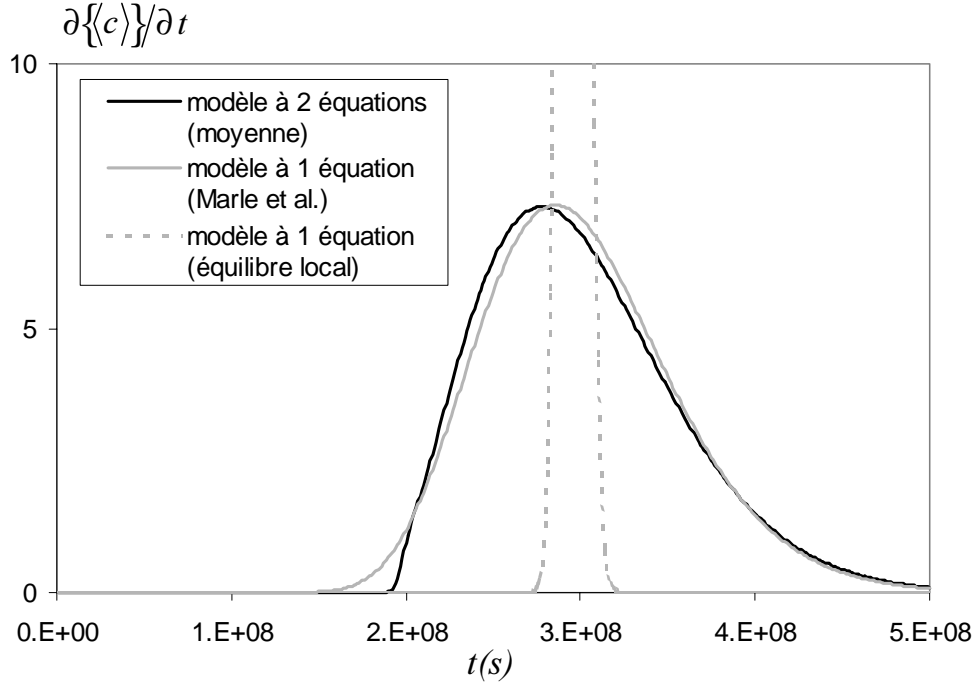


FIG. 2.4: Comportement asymptotique de différents modèles macroscopiques

dans le cas d'un système stratifié bi-couche est

$$D_{\infty}^{**} = (\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx} + (\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**})_{xx} + \frac{1}{\alpha^*} \left(\frac{\epsilon_{\omega}\varphi_{\omega}v_{\eta} - \epsilon_{\eta}\varphi_{\eta}v_{\omega}}{\{\epsilon\}} \right)^2 \quad (2.129)$$

En introduisant les expressions des propriétés macroscopiques (Eq. 2.121, 2.122 et 2.124), nous obtenons une expression analytique identique à celle proposée par des travaux antérieurs [Marle et al. 1967, Güven et al. 1984, Valocchi 1989]. Ainsi, le modèle à deux équations donne asymptotiquement exactement le comportement déduit d'une analyse directe à l'échelle de Darcy. De plus, le coefficient de dispersion asymptotique dépend du coefficient d'échange α^* . En conséquence, la présente comparaison avec les résultats de Marle et al. [1967] sert de validation du modèle à deux équations, et montre que l'expression explicite du coefficient de transfert de masse (Eq. 2.124) proposée par la théorie de prise de moyenne est exacte.

2.8 Modèle à une équation et comportement asymptotique

Nous avons vu dans les parties précédentes que différentes approches (prise de moyenne, comportement asymptotique, ...) conduisent à des modèles à une équation. Pour chacun, la

2.8. Modèle à une équation et comportement asymptotique

même définition est utilisée pour la porosité macroscopique $\{\epsilon\}$, et la vitesse macroscopique $\{\langle \mathbf{v} \rangle\}$. Par contre, trois expressions différentes du coefficient de dispersion à grande échelle sont obtenues (Eq. 2.92, 2.97 et 2.119). En premier lieu, le modèle à une équation obtenu par l'intermédiaire de la condition d'équilibre local donne comme coefficient de dispersion

$$(\mathbf{D}_{eq}^{**})_{xx} = \varphi_\eta (\mathbf{D}_\eta^*)_{xx} + \varphi_\omega (\mathbf{D}_\omega^*)_{xx} \quad (2.130)$$

Ce coefficient peut être obtenu à partir du coefficient de dispersion D_∞^{**} en supposant α^* très grand, ce qui est cohérent avec l'hypothèse d'équilibre local qui suppose les échanges entre strates très rapides. L'étude réalisée dans la partie précédente montre que ce modèle donne une très mauvaise représentation dans les situations de non-équilibre. On compare ci-dessous les deux modèles à non-équilibre afin de préciser leurs domaines d'application.

La résolution analytique du problème de fermeture associé au modèle à une équation à non-équilibre (voir partie 3.1.5) conduit à l'expression explicite du coefficient de dispersion longitudinal dans le cas d'une géométrie stratifiée (Fig. 2.1)

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}^{**})_{xx} &= \varphi_\eta (\mathbf{D}_\eta^*)_{xx} + \varphi_\omega (\mathbf{D}_\omega^*)_{xx} \\ &+ \frac{(l_\eta + l_\omega)^2}{12} \frac{(\epsilon_\eta \varphi_\eta \epsilon_\omega \varphi_\omega)^2}{(\epsilon_\eta \varphi_\eta + \epsilon_\omega \varphi_\omega)^2} \left[\frac{\varphi_\eta}{(\mathbf{D}_\eta^*)_{yy}} + \frac{\varphi_\omega}{(\mathbf{D}_\omega^*)_{yy}} \right] \left[\left(\langle \mathbf{v} \rangle_\eta^\beta \right)_x - \left(\langle \mathbf{v} \rangle_\omega^\beta \right)_x \right]^2 \end{aligned} \quad (2.131)$$

Cette expression correspond *exactement* au coefficient de dispersion obtenu par une analyse asymptotique à l'échelle de Darcy (Eq. 2.128) et à celui tiré du comportement asymptotique du modèle à deux équations. Ce premier résultat semble indiquer que le modèle à une équation à non-équilibre présenté dans ce travail permet d'obtenir directement le comportement asymptotique du modèle à deux équations. Ceci est confirmé par des études numériques sur des milieux à double-perméabilité quelconques (voir partie 4.2.1). Les deux modèles à une équation obtenus par la méthode de prise de moyenne à grande échelle sont équivalents. La conséquence pratique importante est qu'il n'est pas nécessaire de résoudre tous les problèmes de fermeture du modèle à deux équations si l'on n'est intéressé que par le comportement asymptotique.

Afin d'argumenter et d'étendre cette première conclusion, d'autres comparaisons sont présentées ici. Dans un travail de Güven et al. [1984], l'analyse asymptotique développée par Marle et al. [1967] est élargie à des géométries stratifiées plus complexes. Les milieux choisis sont invariants suivant la direction de l'écoulement, la perméabilité évolue dans la direction perpendiculaire selon un loi linéaire ou parabolique (Fig. 2.5). La dispersion à l'échelle de Darcy est prise soit constante

$$\text{cas n}^\circ 1 \quad D_L = Cte \quad D_T = Cte \quad (2.132)$$

soit proportionnelle à la vitesse par l'intermédiaire de deux dispersivités α_L, α_T

$$\text{cas n}^\circ 2 \quad D_L = \alpha_L v_x \quad D_T = \alpha_T v_x \quad (2.133)$$

Le coefficient de dispersion longitudinal macroscopique est écrit sous la forme

$$(\mathbf{D}^{**})_{xx} = \{D_L\} + \alpha_L^{**} \{v_x\}$$

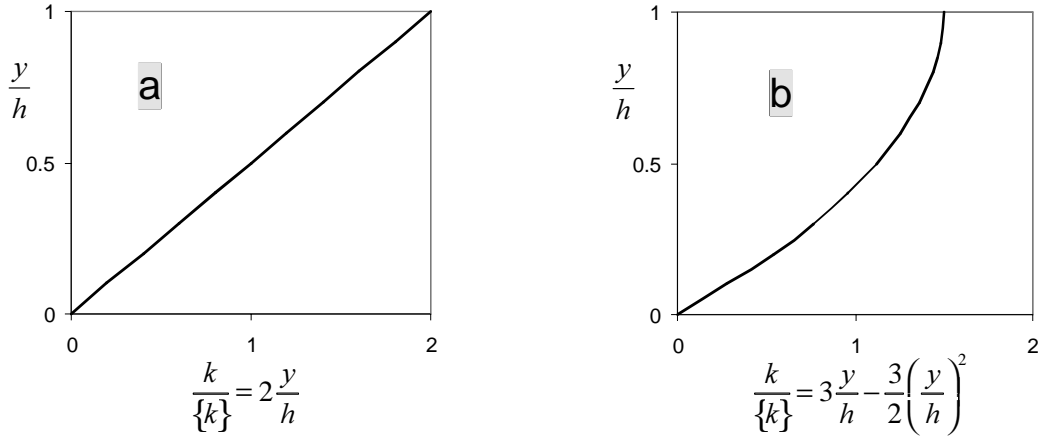


FIG. 2.5: Profils de perméabilité étudiés : (a) profil linéaire (b) profil parabolique

afin de distinguer l'influence de la dispersion à l'échelle de Darcy ($\{D^*\} = \{D_L\}$) et un terme de dispersion supplémentaire ($\alpha_L^{**} \{V_x\}$) provoqué par les fluctuations du champ de vitesse. Cette écriture a l'avantage de faire ressortir une dispersivité macroscopique α_L^{**} , conséquence des hétérogénéités.

Sur les mêmes profils de perméabilité, le problème de fermeture associé au modèle à une équation à non-équilibre est résolu analytiquement. La prise en compte des simplifications apportées par une géométrie stratifiée conduit au problème suivant

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(D_T \frac{\partial}{\partial y} b_x \right) = (v_x - \{v_x\})$$

La porosité est prise constante. Pour les deux profils de perméabilité étudiés, le champ de vitesse est déduit immédiatement. La valeur de V_x suivra une évolution linéaire ou parabolique en fonction de la coordonnée y . Ensuite l'expression du coefficient de dispersion longitudinal à grande échelle (Eq. 2.119) est transformée en

$$(\mathbf{D}^{**})_{xx} = \{D^*\} + \{v_x b_x\}$$

Donc la dispersivité macroscopique peut être exprimée sous la forme

$$\alpha_L^{**} = \frac{\{v_x b_x\}}{\{v_x\}} \quad (2.134)$$

Les dispersivités macroscopiques α_L^{**} correspondant aux différentes situations sont présentées ci-dessous

	$D_T = Cte$	$D_T = \alpha_T v_x$
profil linéaire	$\frac{1}{30} \frac{h^2 \{v_x\}}{D_T}$	$\frac{1}{24} \frac{h^2 \alpha_T}{\alpha_T}$
profil parabolique	$\frac{2}{105} \frac{h^2 \{v_x\}}{D_T}$	$\frac{1}{45} \frac{h^2 \alpha_T}{\alpha_T}$

2.8. Modèle à une équation et comportement asymptotique

Ces résultats sont identiques à ceux présentés par Güven et al. [1984]. Ces études préliminaires suggèrent que le modèle à une équation à non-équilibre offre la possibilité d'obtenir directement le comportement asymptotique d'un problème général de transport miscible à travers une structure poreuse hétérogène quelconque.

Deux résultats importants sont présentés dans ce chapitre. Bien sûr, aucune démonstration n'est proposée, mais d'après les études analytiques et numériques effectuées, il semblerait que ces conclusions soient justes.

- Le modèle à une équation déduit du comportement asymptotique du modèle à deux équations (partie 2.5) et le modèle à une équation à non-équilibre (partie 2.6) sont identiques.
- Le modèle à une équation à non-équilibre permet d'obtenir le coefficient de dispersion asymptotique associé à un milieu hétérogène quelconque.

Chapitre 2. Ecoulements miscibles en milieux hétérogènes : systèmes à deux régions

Chapitre 3

Méthodes numériques

3.1 Résolution des problèmes de fermeture

Dans le but de calculer les coefficients de transport macroscopiques associés à un milieu hétérogène, les trois problèmes de fermeture présentés dans la partie 2.3 doivent être résolus numériquement sur une cellule unitaire périodique représentative de la structure considérée. Des intégrales des solutions apparaissent comme des termes sources dans les équations de conservation (Eq. 2.35a, 2.39a et 2.43a). Ces problèmes intégréo-différentiels peuvent être évités en introduisant un changement de variable. Par exemple, pour le problème I, la décomposition suivante est utilisée

$$\mathbf{b}_{\eta\eta} = \mathbf{b}_{I\eta} + B_{I\eta}\mathbf{c}_{\omega\eta} \quad \mathbf{b}_{\omega\eta} = \mathbf{b}_{I\omega} + B_{I\omega}\mathbf{c}_{\omega\eta} \quad (3.1)$$

L'intérêt principal de cette décomposition est d'utiliser la propriété de périodicité des variables de fermeture et le fait que le terme intégral $\mathbf{c}_{\omega\eta}$ est constant sur la cellule unitaire. Les deux nouveaux problèmes de fermeture obtenus sont similaires aux problèmes de départ, cependant, dans ce cas, les termes sources sont des constantes connues. Ici, les vecteurs $\mathbf{b}_{I\eta}$ et $\mathbf{b}_{I\omega}$ doivent satisfaire

Problème Ia

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} \mathbf{b}_{I\eta}) + \tilde{\mathbf{v}}_{\eta} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{I\eta}) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}_{\eta}^* \quad (3.2a)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{b}_{I\eta} = \mathbf{b}_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.2b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{I\eta} + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_{\eta}^* = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_{\omega}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.2c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_{\omega} \mathbf{b}_{I\omega}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{\omega}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{I\omega}) \quad (3.2d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \mathbf{b}_{I\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{I\eta}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{b}_{I\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{I\omega}(\mathbf{r}) \quad (3.2e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad 0 = \{\mathbf{b}_{I\eta}\} + \{\mathbf{b}_{I\omega}\} \quad (3.2f)$$

Ensuite $B_{I\eta}$ et $B_{I\omega}$ sont solutions du problème suivant

Problème Ib

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta B_{I\eta}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla B_{I\eta}) + \varphi_\eta^{-1} \quad (3.3a)$$

$$\text{C.L.1} \quad B_{I\eta} = B_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.3b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla B_{I\eta} = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla B_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.3c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega B_{I\omega}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla B_{I\omega}) - \varphi_\omega^{-1} \quad (3.3d)$$

$$\text{Périodicité} \quad B_{I\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = B_{I\eta}(\mathbf{r}) \quad B_{I\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = B_{I\omega}(\mathbf{r}) \quad (3.3e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad 0 = \{B_{I\eta}\} + \{B_{I\omega}\} \quad (3.3f)$$

Finalement les conditions de moyenne nulle sur les variables $\mathbf{b}_{\eta\eta}$ et $\mathbf{b}_{\omega\eta}$ (Eq. 2.35f) permettent de déterminer $\mathbf{c}_{\omega\eta}$ par la relation

$$\mathbf{c}_{\omega\eta} = -\frac{\{\mathbf{b}_{I\eta}\}^\eta}{\{B_{I\eta}\}^\eta} = -\frac{\{\mathbf{b}_{I\omega}\}^\omega}{\{B_{I\omega}\}^\omega} \quad (3.4)$$

Une décomposition similaire est introduite pour le problème II

$$\mathbf{b}_{\eta\omega} = \mathbf{b}_{II\eta} + B_{II\eta} \mathbf{c}_{\eta\omega} \quad \mathbf{b}_{\omega\omega} = \mathbf{b}_{II\omega} + B_{II\omega} \mathbf{c}_{\eta\omega} \quad (3.5)$$

Problème IIa

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta \mathbf{b}_{II\eta}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{II\eta}) \quad (3.6a)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{b}_{II\eta} = \mathbf{b}_{II\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.6b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{II\eta} = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{II\omega} + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.6c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega \mathbf{b}_{II\omega}) + \tilde{\mathbf{v}}_\omega = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{II\omega}) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}_\omega^* \quad (3.6d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \mathbf{b}_{II\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{II\eta}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{b}_{II\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{II\omega}(\mathbf{r}) \quad (3.6e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad 0 = \{\mathbf{b}_{II\eta}\} + \{\mathbf{b}_{II\omega}\} \quad (3.6f)$$

Problème IIb

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta B_{II\eta}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla B_{II\eta}) - \varphi_\eta^{-1} \quad (3.7a)$$

$$\text{C.L.1} \quad B_{II\eta} = B_{II\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.7b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla B_{II\eta} = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla B_{II\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.7c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega B_{II\omega}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla B_{II\omega}) + \varphi_\omega^{-1} \quad (3.7d)$$

$$\text{Périodicité} \quad B_{II\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = B_{II\eta}(\mathbf{r}) \quad B_{II\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = B_{II\omega}(\mathbf{r}) \quad (3.7e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad 0 = \{B_{II\eta}\} + \{B_{II\omega}\} \quad (3.7f)$$

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

De même, les relations sur $\mathbf{b}_{\eta\omega}$ et $\mathbf{b}_{\omega\omega}$ (Eq. 2.39f) imposent

$$\mathbf{c}_{\eta\omega} = -\frac{\{\mathbf{b}_{II\omega}\}^\omega}{\{B_{II\omega}\}^\omega} = -\frac{\{\mathbf{b}_{II\eta}\}^\eta}{\{B_{II\eta}\}^\eta} \quad (3.8)$$

Dans le cas du problème III, un nouveau changement de variable sur s_η et s_ω conduit à

$$s_\eta = s_{I\eta} \cdot \alpha^* \quad s_\omega = s_{I\omega} \cdot \alpha^* \quad (3.9)$$

Le problème de fermeture associé est

Problème IIIa

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\eta s_{I\eta}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_{I\eta}) - \varphi_\eta^{-1} \quad (3.10a)$$

$$\text{C.L.1} \quad s_{I\eta} = s_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.10b)$$

$$\text{C.L.2} \quad \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\eta^* \cdot \nabla s_{I\eta} = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_{I\omega} \quad \text{sur } A_{\eta\omega} \quad (3.10c)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_\omega s_\omega) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_\omega^* \cdot \nabla s_\omega) + \varphi_\omega^{-1} \quad (3.10d)$$

$$\text{Périodicité} \quad s_{I\eta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{I\eta}(\mathbf{r}) \quad s_{I\omega}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{I\omega}(\mathbf{r}) \quad (3.10e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \{s_{I\eta}\}^\eta = 0 \quad (3.10f)$$

L'obtention de ces champs scalaires modifiés $s_{I\eta}$ et $s_{I\omega}$, donne la possibilité de déterminer directement le coefficient de transfert de masse avec la relation

$$\alpha^* = \frac{1}{\{s_{I\omega}\}^\omega} \quad (3.11)$$

Suite aux décompositions effectuées, les problèmes Ib, IIb, IIIa sont identiques. Les champs scalaires $B_{I\eta}$, $B_{I\omega}$, $B_{II\eta}$ et $B_{II\omega}$ peuvent être déduit explicitement à partir de la résolution numérique du problème IIIa. Finalement, pour déterminer l'ensemble des coefficients effectifs à grande échelle associés à une cellule donnée, seulement trois problèmes différentiels classiques doivent être résolus (Problèmes Ia, IIa, IIIa).

Les trois problèmes sont similaires, faisant intervenir un terme convectif et un terme diffusif. On recense différentes méthodes de résolution des équations aux dérivées partielles (différences finis, volumes finis, éléments finis). La méthode de discrétisation doit vérifier deux exigences principales [Urgelli 1998] :

- le respect local du principe de conservation de la masse par la méthode ;
- la bonne précision du calcul des flux, même pour des milieux fortement hétérogènes présentant des discontinuités importantes des propriétés physiques.

Les deux parties suivantes détaillent l'intégration numérique de chacun de ces deux termes.

3.1.1 Intégration du terme diffusif

Pour représenter physiquement la dispersion hydrodynamique à l'échelle de Darcy, la formulation de Bear [Bear 1961] a été adoptée

$$D_{ij}^* = (\alpha_T |\mathbf{v}| + D^{eff}) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|} \quad (3.12)$$

où D_{ij}^* est un coefficient du tenseur de dispersion \mathbf{D}^* , v_i est une composante du vecteur vitesse \mathbf{v} . Dans cette définition, la dispersion locale \mathbf{D}^* dépend non-linéairement de la vitesse locale \mathbf{v} par l'intermédiaire de deux dispersivités α_L et α_T , et d'un coefficient de diffusion effective D^{eff} . Ce coefficient représente le phénomène de diffusion moléculaire isotrope et prend en compte la tortuosité du milieu à l'échelle du pore. Cette formulation conduit à un tenseur de dispersion complet. Dans ce cas, un schéma classique à 5 points (7 points en 3-D) ne peut pas prendre en compte l'effet des termes extra-diagonaux du tenseur de dispersion. Pour obtenir une bonne approximation de l'opérateur diffusif, 9 points de discrétisation (27 points en 3-D) sont nécessaires. De plus, les schémas à 9 points accroissent généralement la précision et réduisent les effets d'orientation du maillage. Uggelli [Uggelli 1998] compare deux schémas différents sur deux maillages (diagonal et parallèle), et met en évidence un effet d'orientation du maillage très net avec un schéma à 5 points, qui est supprimé avec un schéma à 9 points.

En conséquence, un nouveau schéma numérique localement conservatif, respectant la continuité du flux est implémenté ici. Cette méthode, basée sur une formulation aux volumes finis, a été présentée pour la première fois par Edwards et Rogers [1994] pour la prise en compte des tenseurs de perméabilité complets dans la résolution des équations de Darcy. Dans le but d'expliquer clairement les différentes étapes pour parvenir au schéma final, un développement en deux dimensions est présenté ici.

Pour obtenir un problème continu d'une seule inconnue sur toute la cellule, on s'intéresse à la variable de fermeture s , définie par

$$s = \begin{cases} s_{I\eta} & \text{dans } \eta \\ s_{I\omega} & \text{dans } \omega \end{cases} \quad (3.13)$$

La formulation aux volumes finis de l'opérateur diffusif $\nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla s)$ s'écrit sous la forme de l'intégrale de ce terme sur le volume de contrôle V correspondant à une maille. La frontière

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

de cette maille est notée ∂V .

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V} \int_V (\nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla s)) dV &= \frac{1}{V} \oint_{\partial V} (\mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla s)) dS = \\
&\frac{1}{\delta x} (D_{xx}^* (i+1/2, j) \frac{\partial s}{\partial x} (i+1/2, j) - D_{xx}^* (i-1/2, j) \frac{\partial s}{\partial x} (i-1/2, j) \\
&\quad + D_{xy}^* (i+1/2, j) \frac{\partial s}{\partial y} (i+1/2, j) - D_{xy}^* (i-1/2, j) \frac{\partial s}{\partial y} (i-1/2, j)) \\
&+ \frac{1}{\delta y} (D_{yx}^* (i, j+1/2) \frac{\partial s}{\partial x} (i, j+1/2) - D_{yx}^* (i, j-1/2) \frac{\partial s}{\partial x} (i, j-1/2) \\
&\quad + D_{yy}^* (i, j+1/2) \frac{\partial s}{\partial y} (i, j+1/2) - D_{yy}^* (i, j-1/2) \frac{\partial s}{\partial y} (i, j-1/2)) \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Un maillage cartésien régulier est utilisé, les inconnues scalaires s sont positionnées au centre des mailles. Les coefficients de dispersion sont supposés continus à l'intérieur de chaque maille, et peuvent varier de façon importante aux interfaces à cause des hétérogénéités. La difficulté engendrée par la discrétisation d'un tenseur complet est la nécessité de connaître le gradient de s suivant les deux directions aux interfaces. Pour parvenir à cet objectif, chaque maille est subdivisée en quatre parties (Fig. 3.1), sur lesquelles on impose une variation linéaire de l'inconnue s . C'est à dire, sur chaque quart de maille, des gradients constants de la variable recherchée sont définis par

$$s = A.x + B.y + C \quad (3.15)$$

$$A = \frac{\partial s}{\partial x} \quad B = \frac{\partial s}{\partial y} \quad (3.16)$$

Ces gradients peuvent être explicités à l'aide des inconnues au centre des mailles $s_{i,j}$, et des inconnues aux interfaces s_{1N} , s_{1E} , s_{3S} , ... Dans la zone 1 de la maille dessinée dans la figure 3.1, nous avons

$$A = \frac{\partial s}{\partial x} = \frac{4 s_{i,j} + s_{1E} - 2s_{1N}}{3 dx} \quad (3.17)$$

$$B = \frac{\partial s}{\partial y} = \frac{4 s_{i,j} - 2s_{1E} + s_{1N}}{3 dy} \quad (3.18)$$

Avec ces expressions générales du gradient (Eq. 3.17 et 3.18), les conditions aux limites (Eq. 3.10b et 3.10c) sont explicitées aux interfaces pour un groupe de quatre mailles (Fig. 3.2). La première condition aux limites (3.10b) (continuité de la variable de fermeture aux interfaces) est prise en compte implicitement en introduisant la même inconnue à l'interface de deux mailles adjacentes (s_N , s_S , s_E , s_W).

La deuxième condition aux limites (3.10c) est écrite

$$\text{au point N et S :} \quad D_{xx} \frac{\partial s}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial s}{\partial y} = D_{xx} \frac{\partial s}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial s}{\partial y} \quad (3.19)$$

$$\text{au point E et W :} \quad D_{yx} \frac{\partial s}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial s}{\partial y} = D_{yx} \frac{\partial s}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial s}{\partial y} \quad (3.20)$$

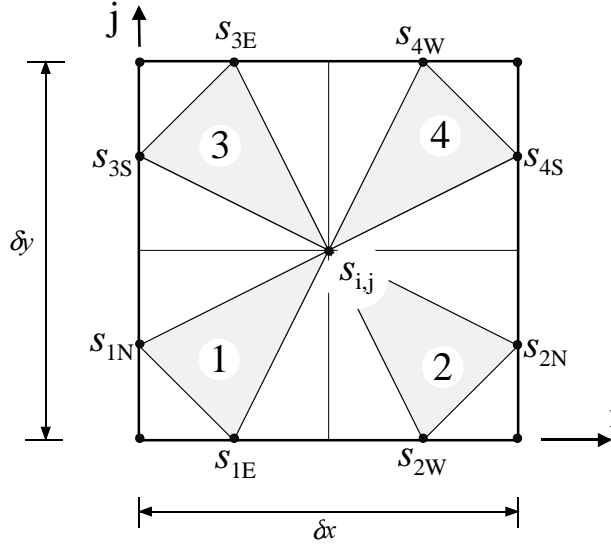


FIG. 3.1: Positionnement des inconnues sur une maille

En utilisant les formulations du gradient (Eq. 3.17 et 3.18) et une expression de la dispersion locale valable en tout point, les quatre conditions aux limites précédentes deviennent (la quantité ϵ est choisie très petite, elle a pour rôle d'indiquer de quel côté de l'interface est calculé le coefficient de dispersion)

au point N :

$$\begin{aligned}
 D_{xx} \left(i - \frac{1}{2} - \epsilon, j - \frac{1}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{2s_N - s_W - s_{i-1,j}}{dx} + D_{xy} \left(i - \frac{1}{2} - \epsilon, j - \frac{1}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{s_N + s_{i-1,j} - 2s_W}{dy} \\
 = D_{xx} \left(i - \frac{1}{2} + \epsilon, j - \frac{1}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{s_E + s_{i,j} - 2s_N}{dx} + D_{xy} \left(i - \frac{1}{2} + \epsilon, j - \frac{1}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{s_N + s_{i,j} - 2s_E}{dy}
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

au point S :

$$\begin{aligned}
 D_{xx} \left(i - \frac{1}{2} - \epsilon, j - \frac{3}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{2s_S - s_W - s_{i-1,j-1}}{dx} + D_{xy} \left(i - \frac{1}{2} - \epsilon, j - \frac{3}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{2s_W - s_S - s_{i-1,j-1}}{dy} \\
 = D_{xx} \left(i - \frac{1}{2} + \epsilon, j - \frac{3}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{s_E + s_{i,j-1} - 2s_S}{dx} + D_{xy} \left(i - \frac{1}{2} + \epsilon, j - \frac{3}{4} \right) \frac{4}{3} \frac{2s_E - s_S - s_{i,j-1}}{dy}
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

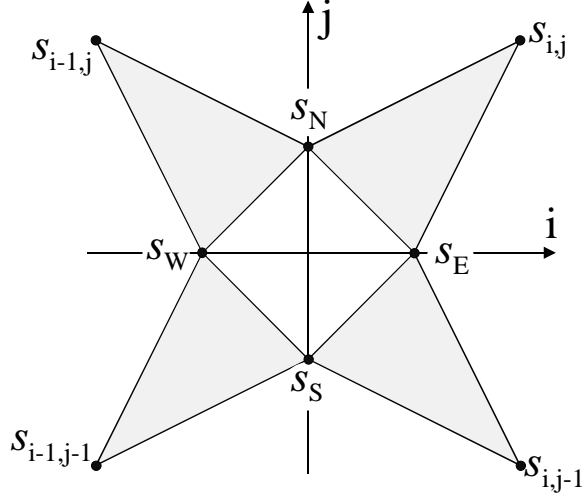


FIG. 3.2: Positionnement des inconnues pour l'écriture des conditions aux limites

au point E :

$$\begin{aligned}
 & D_{yx} \left(i - \frac{1}{4}, j - \frac{1}{2} - \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{s_E + s_{i,j-1} - 2s_S}{dx} + D_{yy} \left(i - \frac{1}{4}, j - \frac{1}{2} - \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{2s_E - s_S - s_{i,j-1}}{dy} \\
 & = D_{yx} \left(i - \frac{1}{4}, j - \frac{1}{2} + \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{s_E + s_{i,j} - 2s_N}{dx} + D_{yy} \left(i - \frac{1}{4}, j - \frac{1}{2} + \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{s_N + s_{i,j} - 2s_E}{dy}
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

au point W :

$$\begin{aligned}
 & D_{yx} \left(i - \frac{3}{4}, j - \frac{1}{2} - \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{2s_S - s_W - s_{i-1,j-1}}{dx} + D_{yy} \left(i - \frac{3}{4}, j - \frac{1}{2} - \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{2s_W - s_S - s_{i-1,j-1}}{dy} \\
 & = D_{yx} \left(i - \frac{3}{4}, j - \frac{1}{2} + \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{2s_N - s_W - s_{i-1,j}}{dx} + D_{yy} \left(i - \frac{3}{4}, j - \frac{1}{2} + \epsilon \right) \frac{4}{3} \frac{s_N + s_{i-1,j} - 2s_W}{dy}
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Ce système de quatre équations met en relation les quatre inconnues aux interfaces (s_N , s_S , s_E , s_W), avec les quatre inconnues aux centres des mailles ($s_{i,j}$, $s_{i-1,j}$, $s_{i,j-1}$, $s_{i-1,j-1}$). L'ensemble des conditions aux limites pour les quatre mailles concernées peut être mis sous la forme matricielle suivante

$$\mathbf{S}_c = \begin{bmatrix} s_{i,j} \\ s_{i-1,j} \\ s_{i,j-1} \\ s_{i-1,j-1} \end{bmatrix} \quad \mathbf{S}_I = \begin{bmatrix} s_N \\ s_S \\ s_E \\ s_W \end{bmatrix} \tag{3.25}$$

$$\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{S}_I = \mathbf{M}_C \cdot \mathbf{S}_C \tag{3.26}$$

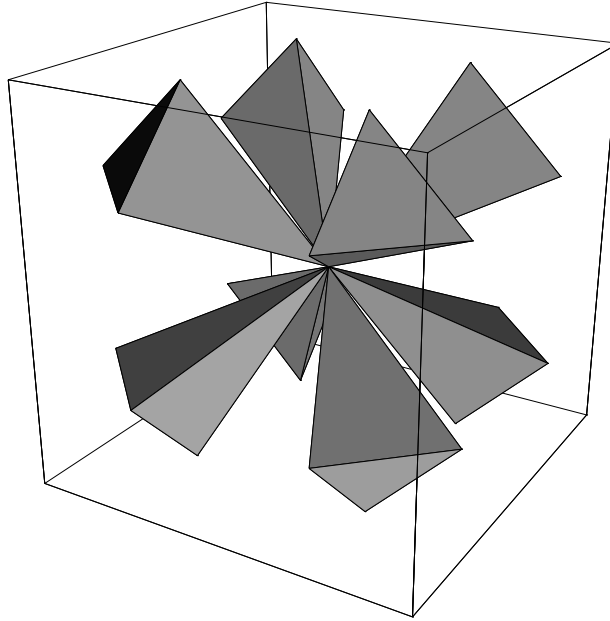


FIG. 3.3: Découpage d'une maille pour un problème tri-dimensionnel

Une inversion analytique de ce système d'équations donne la possibilité d'exprimer directement les inconnues aux interfaces en fonction des inconnues aux centres des mailles

$$\mathbf{S}_I = \mathbf{A} \cdot \mathbf{S}_C \quad \text{avec} \quad \mathbf{A} = (\mathbf{M}_I)^{-1} \cdot \mathbf{M}_C \quad (3.27)$$

Ces relations sont ensuite utilisées pour expliciter les gradients (Eq. 3.17 et 3.18), qui interviennent dans la formulation aux volumes finis de l'opérateur diffusif (Eq. 3.14). Finalement, 9 mailles (la maille correspondant au volume de contrôle, et les 8 mailles adjacentes) sont nécessaires pour discrétiser correctement le terme diffusif.

$$f(s_{i,j}, s_{i-1,j}, s_{i+1,j}, s_{i,j-1}, s_{i-1,j-1}, s_{i+1,j-1}, s_{i,j+1}, s_{i-1,j+1}, s_{i+1,j+1}) = k \quad (3.28)$$

Une démarche similaire peut être extrapolée aux systèmes tridimensionnels. Les cellules du maillage sont partagées en huit régions (Fig. 3.3). L'écriture des conditions aux limites conduit à un système à 12 équations (Eq. 3.26), qui doit, dans ce cas, être résolu numériquement.

3.1.2 Intégration du terme convectif

La seconde difficulté rencontrée dans la résolution des problèmes de fermeture repose sur l'approximation du terme de convection. Lorsque la convection est importante (grand nombre de Péclet), les différents schémas numériques existants ont pour particularité d'introduire soit de la diffusion numérique, soit des oscillations. La diffusion numérique modifie la forme de la solution tandis que les oscillations génèrent des solutions non physiques (par

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

exemple une solution négative pour la concentration dans le cas du déplacement d'un front). La discrétisation du terme de convection

$$v \frac{\partial s}{\partial x} \quad (3.29)$$

par un schéma d'ordre un correspond à la discrétisation d'un schéma centré du deuxième ordre du terme [Bruneau 1989]

$$v \frac{\partial s}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\delta x}{2} |v| \frac{\partial s}{\partial x} \right] \quad (3.30)$$

Pour annuler la diffusion numérique introduite par un schéma décentré du premier ordre, un terme de correction locale est ajouté dans l'équation initiale. Le nouveau schéma obtenu est du deuxième ordre et correspond à la discrétisation de l'équation

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle s) + \nabla \cdot (\mathbf{E} \cdot \nabla s) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla s) \quad (3.31)$$

où

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x |\langle \mathbf{v} \rangle_x| & 0 \\ 0 & \varepsilon_y |\langle \mathbf{v} \rangle_y| \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

Lorsque la dispersion physique est assez importante, ε_x prend la valeur $\frac{\delta x}{2}$ ($\frac{\delta y}{2}$ pour ε_y), ce qui correspond exactement à la dispersion artificielle du schéma initial. Au contraire, lorsque la dispersion physique du problème devient faible, il faut veiller à conserver une équation globale elliptique (ou parabolique). Pour vérifier cette condition, les valeurs propres du tenseur de dispersion final (Eq. 3.33) doivent être positives ou nulles (Eq. 3.34 et 3.35).

$$\mathbf{D}^* - \mathbf{E} = \begin{bmatrix} D_{xx} - \varepsilon_x |\langle \mathbf{v} \rangle_x| & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} - \varepsilon_y |\langle \mathbf{v} \rangle_y| \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

Ce qui conduit aux inégalités suivantes

$$(D_{xx} - \varepsilon_x |\langle \mathbf{v} \rangle_x|) + (D_{yy} - \varepsilon_y |\langle \mathbf{v} \rangle_y|) \geq 0 \quad (3.34)$$

$$(D_{xx} - \varepsilon_x |\langle \mathbf{v} \rangle_x|) (D_{yy} - \varepsilon_y |\langle \mathbf{v} \rangle_y|) - D_{xy} D_{yx} \geq 0 \quad (3.35)$$

Ces deux relations ne sont pas suffisantes pour déterminer un couple de coefficients correctifs (ε_x , ε_y). Nous avons choisi de maximiser le produit $\varepsilon_x \times \varepsilon_y$, pour contraindre la solution. Une recherche dichotomique simple permet, pour chaque cellule du maillage, de déterminer la correction locale à ajouter aux équations de conservation des problèmes de fermeture.

Finalement, la discrétisation du terme convectif avec un schéma décentré amont anti-diffusé conduit à

$$\frac{1}{V} \int_V v \frac{\partial s}{\partial x} dx = \frac{1}{\delta x} \left\{ \begin{array}{l} +v_{i+1/2,j} \left\{ \begin{array}{ll} s_{i,j} & \text{si } v_{i+1/2,j} > 0 \\ s_{i+1,j} & \text{si } v_{i+1/2,j} < 0 \end{array} \right. \\ -v_{i-1/2,j} \left\{ \begin{array}{ll} s_{i,j} & \text{si } v_{i-1/2,j} < 0 \\ s_{i+1,j} & \text{si } v_{i-1/2,j} > 0 \end{array} \right. \end{array} \right. \\ + \frac{\varepsilon_x}{(\delta x)^2} \left[|v_{i+1/2,j}| (s_{i+1,j} - s_{i,j}) - |v_{i-1/2,j}| (s_{i,j} - s_{i-1,j}) \right] \quad (3.36)$$

Une écriture équivalente est possible dans les autres directions de l'espace.

3.1.3 Calcul des propriétés macroscopiques

Le système linéaire final est résolu avec une méthode itérative de relaxation (méthode SOR : Successive Over Relaxation) qui a été choisie à cause de sa compacité, notamment en 3D. Globalement, le schéma présenté ici est d'ordre deux lorsque la correction de la diffusion numérique est maximale, ce qui correspond à un nombre de Péclet de maille inférieur à deux. En pratique, avec la formulation de la dispersion locale en fonction de la vitesse proposée (Eq. 3.12), nous obtenons de bons résultats même pour des nombres de Péclet de cellule (Eq. 4.2) élevés.

La deuxième étape consiste à calculer les propriétés effectives à grande échelle à partir des champs scalaires et vectoriels des variables de fermeture. En utilisant les relations entre les inconnues aux interfaces et les inconnues aux centres des mailles (Eq. 3.27), et les formulations des gradients locaux (Eq. 3.17 et 3.18) définies au paragraphe précédent, il est possible de calculer en tout point du milieu considéré les gradients des variables de fermeture. Les coefficients macroscopiques du modèle à deux équations (Eq. 2.50 à 2.57) sont alors obtenus directement à partir de moyennes spatiales faisant intervenir les variables de fermeture.

3.1.4 Adimensionnement des équations

Dans la suite du travail, les équations et les résultats présentés sont adimensionnés. L'intérêt d'une telle démarche est de mettre en évidence les nombres sans dimension qui contrôlent le transport macroscopique et de dégager ainsi les caractéristiques locales indépendantes. Par exemple, pour une étude de sensibilité (voir partie 4.2), il est indispensable de connaître les paramètres à l'échelle locale qui ont une influence sur les propriétés à grande échelle. Dans un premier temps, l'adimensionnement des problèmes de fermeture est détaillée ici. Le point de départ est l'équation gouvernant la variable de fermeture $\mathbf{b}_{I\eta}$ du problème Ia (Eq. 3.2a)

$$\nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} \mathbf{b}_{I\eta} \right) + \tilde{\mathbf{v}}_{\eta} = \nabla \cdot \left(\mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{I\eta} \right) + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}_{\eta}^* \quad (3.37)$$

L'adimensionnement est réalisé à l'aide du coefficient de diffusion effective D^{eff} , de la taille de la cellule périodique représentative du milieu hétérogène l , de la vitesse de référence V_m calculée étant la norme de la vitesse moyenne à grande échelle

$$v_m = |\{ \langle \mathbf{v} \rangle \}| \quad (3.38)$$

Afin de rendre la cellule unitaire, un changement de variable d'espace est pris de la forme

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{l} \quad (3.39)$$

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

Donc les opérateurs de dérivations par rapport à la variable d'espace initiale \mathbf{x} s'écrivent maintenant

$$\nabla_{\mathbf{x}} = \frac{1}{l} \nabla_{\mathbf{y}} \quad (3.40)$$

L'équation 3.37 devient

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \right) + \tilde{\mathbf{v}}_{\eta} = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left(\frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{l} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \right) + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \frac{\tilde{\mathbf{D}}_{\eta}^*}{l} - \varphi_{\eta}^{-1} \mathbf{c}_{\eta\eta} \quad (3.41a)$$

Il est ensuite possible de faire apparaître le coefficient de diffusion D^{eff} et la vitesse de référence U en multipliant l'équation précédente par l/D^{eff}

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta}}{v_m} \frac{v_m l}{D^{eff}} \frac{\mathbf{b}_{I\eta}}{l} \right) + \frac{\tilde{\mathbf{v}}_{\eta}}{v_m} \frac{v_m l}{D^{eff}} = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left(\frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \cdot \nabla \frac{\mathbf{b}_{I\eta}}{l} \right) + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \frac{\tilde{\mathbf{D}}_{\eta}^*}{D^{eff}} \quad (3.42)$$

Dès lors tous les termes de cette équation sont des quantités sans dimension, on identifie ainsi

- Une vitesse adimensionnée $\frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{v_m}$
- Un nombre de Péclet à grande échelle ou nombre de Péclet de cellule

$$Pe = \frac{v_m l}{D^{eff}} \quad (3.43)$$

- Un tenseur de dispersion adimensionnée $\frac{\mathbf{D}^*}{D^{eff}}$. En utilisant la formulation de la dispersion à l'échelle locale donnée par l'équation 3.12

$$\mathbf{D}_{ij}^* = (\alpha_T |\mathbf{v}| + D^{eff}) \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|} \quad (3.44)$$

nous obtenons

$$\frac{\mathbf{D}_{ij}^*}{D^{eff}} = \left(\frac{\alpha_T}{l} \left| \frac{\mathbf{v}}{v_m} \right| \frac{v_m l}{D^{eff}} + 1 \right) \delta_{ij} + \left(\frac{\alpha_L}{l} - \frac{\alpha_T}{l} \right) \frac{\frac{v_i}{v_m} \frac{v_j}{v_m}}{\left| \frac{\mathbf{v}}{v_m} \right|} \frac{v_m l}{D^{eff}} \quad (3.45)$$

donc

$$\frac{\mathbf{D}_{ij}^*}{D^{eff}} = \left(\frac{\alpha_T}{l} \left| \frac{\mathbf{v}}{v_m} \right| Pe + 1 \right) \delta_{ij} + \left(\frac{\alpha_L}{l} - \frac{\alpha_T}{l} \right) \frac{\frac{v_i}{v_m} \frac{v_j}{v_m}}{\left| \frac{\mathbf{v}}{v_m} \right|} Pe \quad (3.46)$$

Cette écriture fait ressortir des dispersivités adimensionnées $\frac{\alpha_L}{l}$ et $\frac{\alpha_T}{l}$.

L'objectif de l'adimensionnement est de dégager des nombres caractéristiques et les paramètres indépendants. Ainsi, dans notre cas, les problèmes de fermeture sont contrôlés par le nombre de Péclet à grande échelle, les dispersivités adimensionnées et le champ de vitesse normalisé. Un traitement similaire est appliqué aux équations du problème Ib. Finalement la solution globale du problème I est elle aussi donnée sous forme adimensionnée par

$$\frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \quad \text{et} \quad \frac{\mathbf{b}_{\omega\eta}}{l} \quad (3.47)$$

A partir de ces champs de variable de fermeture, les propriétés effectives à grande échelle sont calculées explicitement. Par exemple, le tenseur de dispersion principal pour la région η est écrit

$$\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} = \varphi_{\eta} \left\{ \mathbf{D}_{\eta}^* \cdot (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta}) - \tilde{\mathbf{v}}_{\eta} \mathbf{b}_{\eta\eta} \right\}^{\eta} \quad (3.48)$$

L'opérateur de prise de moyenne ne fait pas intervenir la taille de la cellule, par contre l'opérateur gradient devient

$$\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} = \varphi_{\eta} \left\{ \mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \left(\mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \right) - \tilde{\mathbf{v}}_{\eta} \mathbf{b}_{\eta\eta} \right\}^{\eta} \quad (3.49)$$

Cette expression est transformée en

$$\frac{\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**}}{D^{eff}} = \varphi_{\eta} \left\{ \frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \cdot \left(\mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \right) - \frac{\tilde{\mathbf{v}}_{\eta}}{v_m} Pe \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} \right\}^{\eta} \quad (3.50)$$

où tous les termes participant dans cette relation sont adimensionnés.

De même le coefficient convectif $\mathbf{u}_{\eta\eta}$ est donné par

$$\mathbf{u}_{\eta\eta} = -\frac{1}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} \mathbf{b}_{\eta\eta} - \mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_{\eta\eta} - \mathbf{D}_{\eta}^* \right) dA \quad (3.51)$$

puis mis sous la forme

$$\mathbf{u}_{\eta\eta} = -\frac{l^3}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta} \mathbf{b}_{\eta\eta} - \mathbf{D}_{\eta}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} - \mathbf{D}_{\eta}^* \right) \frac{1}{l} \frac{dA}{l^2} \quad (3.52)$$

ensuite

$$\mathbf{u}_{\eta\eta} = -\frac{D^{eff}}{l} \frac{l^3}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta}}{v_m} \frac{v_m l}{D^{eff}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} - \frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} - \frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \right) \frac{dA}{l^2} \quad (3.53)$$

L'expression final de $\mathbf{u}_{\eta\eta}$ est

$$\frac{\mathbf{u}_{\eta\eta}}{v_m} = -\frac{1}{Pe} \frac{l^3}{V_{\infty}} \int_{A_{\eta\omega}} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{v} \rangle_{\eta}}{v_m} Pe \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} - \frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{b}_{\eta\eta}}{l} - \frac{\mathbf{D}_{\eta}^*}{D^{eff}} \right) \frac{dA}{l^2} \quad (3.54)$$

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

D'une manière analogue, tous les coefficients intervenant dans le modèle à deux équations sont mis sous forme adimensionnelle. Ainsi les propriétés effectives à grande échelle sont écrites

$$\frac{\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**}}{D^{eff}} \quad \frac{\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**}}{D^{eff}} \quad \frac{\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**}}{D^{eff}} \quad \frac{\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**}}{D^{eff}} \quad (3.55)$$

$$\frac{\mathbf{u}_{\eta\eta}}{v_m} Pe \quad \frac{\mathbf{u}_{\omega\eta}}{v_m} Pe \quad \frac{\mathbf{u}_{\eta\omega}}{v_m} Pe \quad \frac{\mathbf{u}_{\omega\omega}}{v_m} Pe \quad (3.56)$$

$$\frac{\alpha^* l^2}{D^{eff}} \quad \frac{\mathbf{d}_\eta}{v_m} Pe \quad \frac{\mathbf{d}_\omega}{v_m} Pe \quad (3.57)$$

Par la suite, on a tout intérêt à effectuer le même type de transformation vis à vis des équations de transport à grande échelle. Le but est de retrouver dans le modèle à deux équations, les coefficients adimensionnés présentés ci-dessus. L'équation macroscopique décrivant le transport dans la région η est

$$\begin{aligned} & \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t} + \varphi_\eta \left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \right\}^\eta \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ & \quad - \nabla \cdot \left[\mathbf{d}_\eta \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \right] - \mathbf{u}_{\eta\eta} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \mathbf{u}_{\eta\omega} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \\ & = \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right] + \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**} \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right] - \alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \end{aligned} \quad (3.58)$$

Le changement de variable est introduit dans les opérateurs de dérivation, puis l'équation est multipliée par l^2/D^{eff}

$$\begin{aligned} & \epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{l^2}{D^{eff}} \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta}{\partial t} + \varphi_\eta \frac{\left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \right\}^\eta}{v_m} Pe \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ & \quad - \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left[\frac{\mathbf{d}_\eta}{v_m} Pe \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \right] - \frac{\mathbf{u}_{\eta\eta}}{v_m} Pe \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \frac{\mathbf{u}_{\eta\omega}}{v_m} Pe \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \\ & = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left[\frac{\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**}}{D^{eff}} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \right] + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \left[\frac{\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**}}{D^{eff}} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right] - \frac{\alpha^* l^2}{D^{eff}} \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Ainsi, on voit apparaître un temps adimensionné défini par

$$t^* = \frac{t D^{eff}}{l^2} \quad (3.60)$$

Dans la suite du travail, nous ne travaillerons qu'avec des quantités adimensionnées, car les résultats présentés ont ainsi un caractère plus général. De même, les simulations locales et macroscopiques sont effectuées dans le nouvel espace temporel défini précédemment.

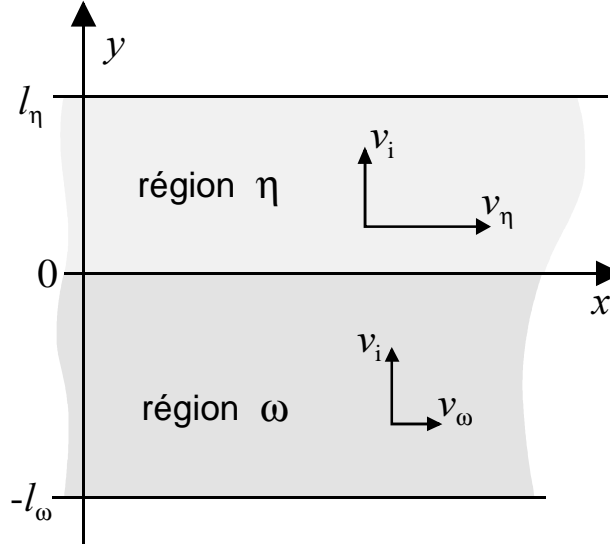


FIG. 3.4: Milieu stratifié bi-couche

3.1.5 Résolution analytique pour des géométries simples : Validation des codes de calcul

Dans le but de valider les codes de calcul mis en place, une résolution analytique des problèmes de fermeture sur une géométrie simple est proposée dans cette partie. Vu la complexité des équations, seules des géométries stratifiées peuvent être abordées. Nous considérons un système bi-dimensionnel périodique suivant la direction y , et uniforme suivant x (Fig. 3.4). Afin de faire apparaître les termes extra-diagonaux du tenseur de dispersion, la direction de l'écoulement est quelconque par rapport à la stratification. Le rapport des vitesses parallèles à la stratification v_η/v_ω (selon la direction x) est proportionnel au rapport des perméabilités dans chaque région, la composante normale à la stratification v_i de la vitesse est identique dans chaque strate. Les épaisseurs de chaque strate sont notées l_η , l_ω .

Seules les étapes de calcul du problème IIIa (Eq. 3.10a à 3.10f) sont présentées ici, le traitement des autres problèmes étant similaire. L'uniformité de la cellule suivant la direction x , impose qu'aucune grandeur ne dépende de la variable x . Dans ces conditions les variables de fermeture peuvent s'écrire

$$s_{I\eta} = f(y) \quad s_{I\omega} = g(y) \quad (3.61)$$

Les deux équations de continuité dans chaque région (Eq. 3.10a et 3.10d) sont alors simplifiées sous la forme

$$v_i \frac{\partial f}{\partial y} = (\mathbf{D}_\eta^*)_{yy} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \frac{1}{l_\eta} \quad (3.62)$$

$$v_i \frac{\partial g}{\partial y} = (\mathbf{D}_\omega^*)_{yy} \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \frac{1}{l_\omega} \quad (3.63)$$

3.1. Résolution des problèmes de fermeture

En posant

$$Pe_\eta = \frac{v_i l_\eta}{(\mathbf{D}_\eta^*)_{yy}} \quad \text{et} \quad Pe_\omega = \frac{v_i l_\omega}{(\mathbf{D}_\omega^*)_{yy}} \quad (3.64)$$

ces deux équations différentielles admettent des solutions simples dépendantes de deux constantes

$$f(y) = \frac{1}{V_i} \left(\frac{1}{Pe_\eta} - \frac{y}{l_\eta} + A_\eta + B_\eta \exp\left(\frac{y}{l_\eta} \frac{1}{Pe_\eta}\right) \right) \quad (3.65)$$

$$g(y) = \frac{1}{V_i} \left(\frac{1}{Pe_\omega} + \frac{y}{l_\omega} + A_\omega + B_\omega \exp\left(\frac{y}{l_\omega} \frac{1}{Pe_\omega}\right) \right) \quad (3.66)$$

La prise en compte des conditions aux limites (Eq. 3.10b et 3.10b) et de la condition de moyenne nulle (Eq. 3.10f) permet la détermination des quatre constantes A_η , A_ω , B_η , B_ω . Sur une cellule stratifiée, ces conditions supplémentaires sont données par

$$\text{B.C.1} \quad f(y=0) = g(y=0) \quad (3.67)$$

$$\text{B.C.1} \quad f(y=l_\eta) = g(y=-l_\omega) \quad (3.68)$$

$$\text{B.C.2} \quad (\mathbf{D}_\eta^*)_{yy} \frac{\partial f}{\partial y}(y=0) = (\mathbf{D}_\omega^*)_{yy} \frac{\partial g}{\partial y}(y=0) \quad (3.69)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \int_{y=0}^{y=l_\eta} f(y) dy = 0 \quad (3.70)$$

Sur la base des équations 3.65 et 3.66, les quatre relations précédentes sont mises sous forme matricielle

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & \exp(Pe_\eta) & -1 & -\exp(-Pe_\omega) \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & \frac{1}{Pe_\eta} (\exp(Pe_\eta) - 1) & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_\eta \\ B_\eta \\ A_\omega \\ B_\omega \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{Pe_\eta} + \frac{1}{Pe_\omega} \\ \frac{1}{Pe_\eta} + \frac{1}{Pe_\omega} \\ \frac{1}{Pe_\eta} + \frac{1}{Pe_\omega} \\ \frac{1}{Pe_\eta} + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (3.71)$$

Les quatre coefficients $(A_\eta, B_\eta, A_\omega, B_\omega)$ sont déterminés en inversant numériquement ce système linéaire. Même si cette étape est réalisée numériquement, la démarche globale est analytique car elle donne les variations exactes des variables de fermeture. L'obtention des expressions explicites des propriétés macroscopiques en fonction des paramètres locaux est possible mais complexe. Lorsque la composante de vitesse perpendiculaire aux strates v_i est nulle (cas du milieu stratifié étudié dans la partie 2.7), une inversion analytique autorise l'écriture explicite des coefficients à grande échelle (Eq. 2.121 à 2.124).

Connaissant les variables de fermeture (Eq. 3.65 et 3.66), il est possible de calculer les propriétés effectives à grande échelle associées au problème III données par

$$\alpha^* = \frac{1}{\int_{y=-l_\omega}^{y=0} g(y)dy} \quad (3.72)$$

$$(\mathbf{d}_\eta)_x = \alpha^* (\mathbf{D}_\eta^*)_{xy} \int_{y=0}^{y=l_\eta} \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (\mathbf{d}_\eta)_y = \alpha^* (\mathbf{D}_\eta^*)_{yy} \int_{y=0}^{y=l_\eta} \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (3.73)$$

$$(\mathbf{d}_\omega)_x = \alpha^* (\mathbf{D}_\omega^*)_{xy} \int_{y=-l_\omega}^{y=0} \frac{\partial g}{\partial y} dy \quad (\mathbf{d}_\omega)_y = \alpha^* (\mathbf{D}_\omega^*)_{yy} \int_{y=-l_\omega}^{y=0} \frac{\partial g}{\partial y} dy \quad (3.74)$$

Pour la comparaison avec les solutions numériques des problèmes de fermeture, le choix des paramètres locaux est (les dispersivités sont identiques dans les deux régions)

$$l_\eta = 0.3 \quad l_\omega = 0.7 \quad (3.75)$$

$$v_\eta = 100 \quad v_\omega = 1 \quad v_i = 10 \quad (3.76)$$

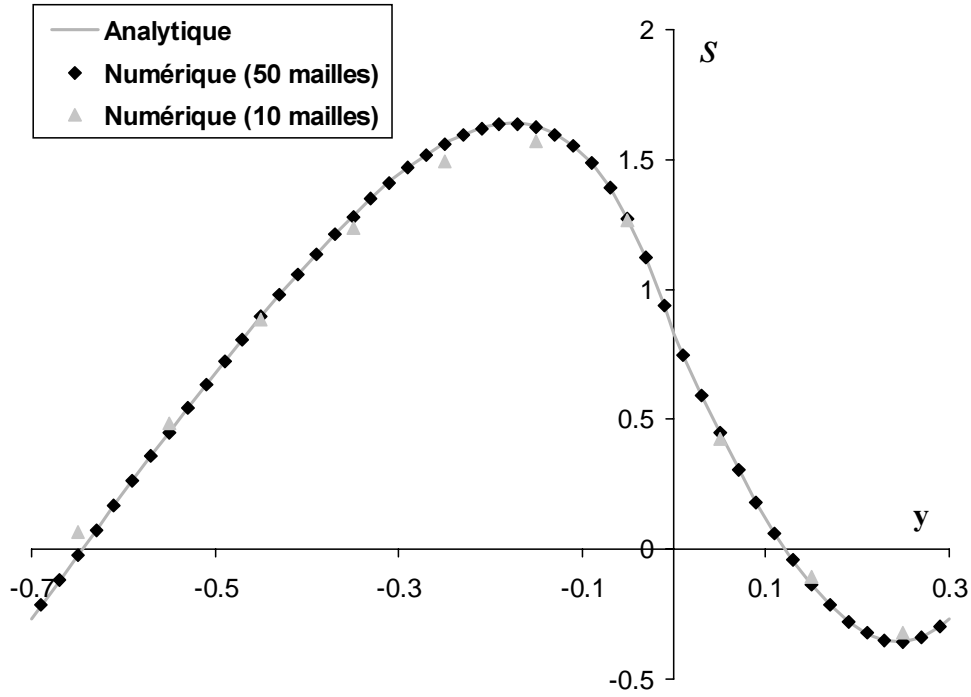
$$\alpha_L = 0.1 \quad \alpha_T = 0.01 \quad D_\eta^{eff} = 1 \quad D_\omega^{eff} = 0.5 \quad (3.77)$$

La résolution numérique a été effectuée pour deux raffinements différents du maillage dans la direction y (l'un avec 50 mailles, l'autre avec 10 mailles). Les figures 3.5, 3.6, 3.7 présentent les confrontations entre solutions analytiques et solutions numériques pour les problèmes I et III. Avec une discrétisation suffisante, l'erreur générée par la résolution numérique est quasiment nulle (écart maximum inférieur à 0.5%). Même avec un raffinement médiocre (10 mailles), les variations de chaque variable sont assez bien représentées.

L'étude des propriétés macroscopiques calculées (Tableaux 3.1 et 3.2) fait ressortir la différence entre les deux maillages. Sur certains coefficients (par exemple $(\mathbf{d}_\eta)_x$ ou $(\mathbf{u}_{\eta\eta})_y$), les écarts observés sur les courbes précédentes sont amplifiés.

	Analytique	Numérique (50mailles)	Numérique (10 mailles)
α^*	35.29	32.29	31.14
$(\mathbf{d}_\eta)_x$	0.9821	1.034	2.116
$(\mathbf{d}_\eta)_y$	2.297	2.288	2.090
$(\mathbf{d}_\omega)_x$	-0.09821	-0.09839	-.1018
$(\mathbf{d}_\omega)_y$	-1.641	-1.639	-1.581

Tableau 3.1 : Propriétés effectives à grande échelle issues du problème III

FIG. 3.5: Evolution de s dans l'épaisseur du milieu

	Analytique	Numérique (50 mailles)	Numérique (10 mailles)
$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$	3.200	3.200	3.195
$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{yy}$	0.1473	0.1473	0.1495
$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xy}$	0.06296	0.06280	0.05072
$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{yx}$	0.06296	0.06302	0.06396
$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{xx}$	0.008795	0.008797	0.008813
$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{yy}$	0.3436	0.3437	0.3430
$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{xy}$	0.02057	0.02057	0.02061
$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{yx}$	0.1469	0.1470	0.1467
$(\mathbf{u}_{\eta\eta})_x$	0.9821	0.9761	0.8393
$(\mathbf{u}_{\eta\eta})_y$	2.297	2.282	1.962

Tableau 3.2 : Propriétés effectives à grande échelle issues du problème I

Malgré ces quelques remarques, cette comparaison montre que les méthodes de résolution mises en place donnent, en quelques secondes, de très bonnes valeurs approchées des propriétés effectives à grande échelle. La structure étudiée dans cet exemple est simple, cependant les résultats présentés montrent que 50 mailles dans une direction suffisent pour représenter correctement les variations des variables de fermeture au travers d'une hétérogénéité.

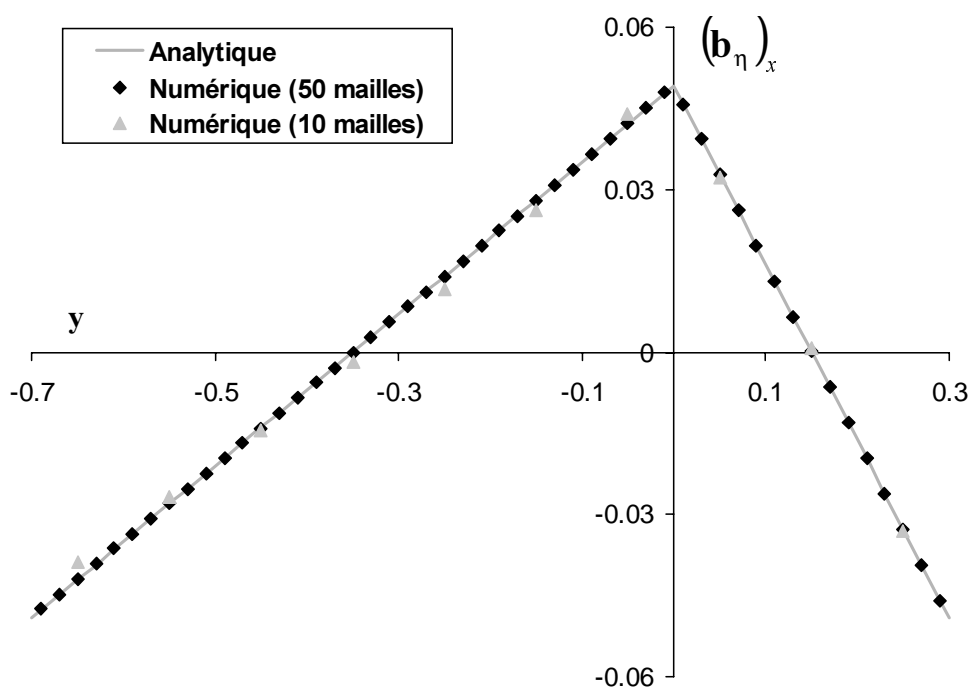


FIG. 3.6: Evolution de $(b_\eta)_x$ dans l'épaisseur du milieu

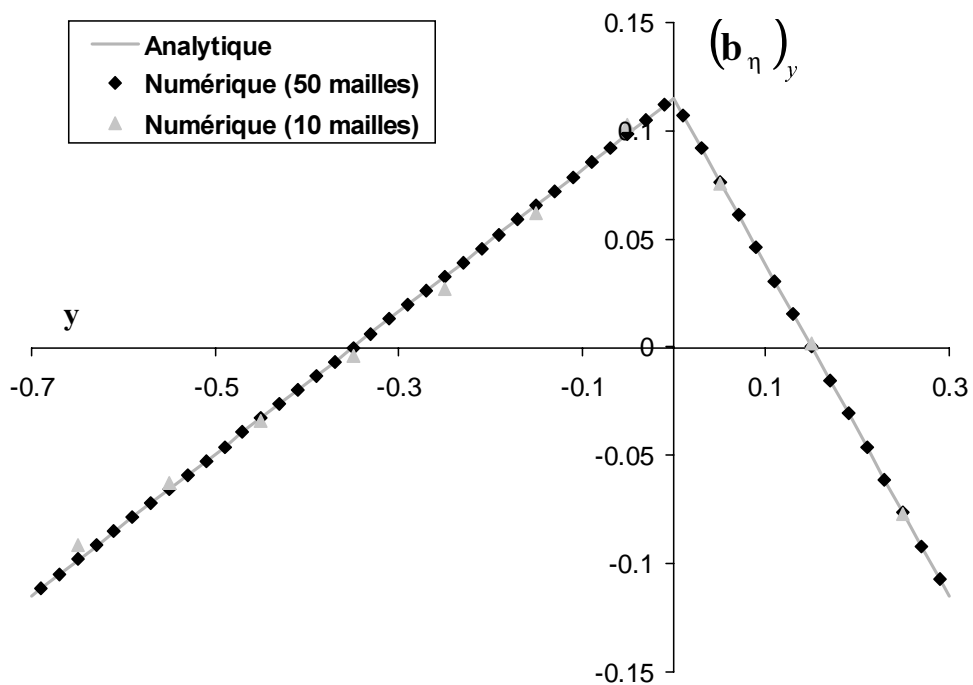


FIG. 3.7: Evolution de $(b_\eta)_y$ dans l'épaisseur du milieu

3.2 Simulation avec le modèle à deux équations

Afin de simuler le transport à grande échelle à l'aide du modèle à deux équations (Eq. 2.48 et 2.49), nous avons développé une procédure numérique résolvant les équations à grande échelle, sur un milieu homogénéisé. Cette partie présente brièvement les techniques employées.

En premier lieu l'opérateur de transport complet est décomposé en trois opérateurs indépendants. Pour la région η , nous avons

$$\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + [\varphi_\eta v_\eta - u_{\eta\eta} - d_\eta] \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + [d_\eta - u_{\eta\omega}] \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega = 0 \quad (3.78)$$

$$\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}_\eta = D_{\eta\eta}^{**} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta + D_{\eta\omega}^{**} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \quad (3.79)$$

$$\epsilon_\eta \varphi_\eta \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}_\eta = -\alpha^* \left(\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta - \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \right) \quad (3.80)$$

Les deux équations convectives dans chaque région (Eq. 3.78 pour la région η) sont couplées. Elles peuvent s'écrire sous la forme d'une équation tensorielle de convection avec

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{C} + \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{C} = \mathbf{0} \quad (3.81)$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta \\ \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega \end{bmatrix} \quad (3.82)$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\epsilon_\eta \varphi_\eta} (\varphi_\eta v_\eta - u_{\eta\eta} - d_\eta) & \frac{1}{\epsilon_\eta \varphi_\eta} (d_\eta - u_{\eta\omega}) \\ \frac{1}{\epsilon_\omega \varphi_\omega} (d_\omega - u_{\omega\eta}) & \frac{1}{\epsilon_\omega \varphi_\omega} (\varphi_\omega v_\omega - u_{\omega\omega} - d_\omega) \end{bmatrix} \quad (3.83)$$

Ce système peut être découpé en utilisant une diagonalisation de la matrice \mathbf{V} (Eq. 3.84). Cette décomposition conduit à deux équations de convection classiques et indépendantes (Eq. 3.85), chacune est associée à une vitesse caractéristique (Λ) et une concentration caractéristique ($\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}$). Les vitesses convectives de chaque région sont alors différentes des vitesses à grande échelle, les modifications apportées par les coefficients \mathbf{u} et \mathbf{d} , prennent en compte une partie du couplage et du transfert de masse entre les deux régions.

$$\mathbf{V} = \mathbf{R}\Lambda\mathbf{R}^{-1} \quad (3.84)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}) + \Lambda \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}) = \mathbf{0} \quad (3.85)$$

Les deux équations obtenues sont résolues à l'aide d'un schéma du second ordre. Ce schéma est construit avec une formulation explicite au second ordre de l'opérateur convectif [Tackacs 1985], sur lequel est implémenté un nouveau limiteur de flux adapté au problème de transport [Bruneau et al. 1996, Fabrie et al. 1995]. Pour les équations de diffusion couplées (Eq. 3.79 pour la région η) un θ -schéma est utilisé. La valeur de θ est choisie

Chapitre 3. Méthodes numériques

légèrement supérieur à $\frac{1}{2}$, correspondant à la méthode de Crank-Nicholson. Enfin, une procédure implicite permet de résoudre le terme d'échange entre les deux régions (Eq. 3.80). La condition de CFL pour chaque région est imposée par les équations de convection, tandis que les pas de temps peuvent être différents lors de la résolution des différents termes de l'opérateur de transport. Le schéma global est finalement d'ordre deux avec une dispersion numérique négligeable.

Chapitre 4

Etude des milieux nodulaires

4.1 Choix de la représentation géométrique

Ce travail a pour but d'étudier l'influence des hétérogénéités locales sur le comportement macroscopique. De nombreuses configurations géométriques peuvent être choisies, tout en conservant une structure à double-région. Différentes raisons nous ont conduit à prendre une représentation nodulaire.

- Une cellule nodulaire présente des hétérogénéités bi-dimensionnelles et constitue un élargissement du cas stratifié étudié dans la partie 2.7. A partir de ces deux types d'hétérogénéités, on pressent qu'il est possible d'obtenir une large plage de comportements macroscopiques car les différents processus physiques responsables de la dispersion anormale peuvent être mis en évidence (convection prioritaire dans l'une ou l'autre des régions, diffusion lente dans des zones isolées, échange entre les deux régions faible ou élevé, ...).
- Dans ce cas, la résolution des problèmes de fermeture et des équations macroscopiques est obligatoirement numérique. Cette étude peut alors servir de validation des codes de calcul mis en place et du modèle théorique, pour toutes géométries comportant deux régions homogènes distinctes.
- Des analyses expérimentales sur des prélèvements ont révélé l'existence, dans les formations géologiques réelles, de structures présentant des inclusions moins perméables de formes plus ou moins cylindriques non connectées [Bachu et Cuthiell 1990, Desbarats 1990, Kramers et al. 1989]. Dans ce genre de structure (agrégats d'argile dans un milieu constitué principalement de sable), le contraste de perméabilité est très important. Cependant, dans la pratique, les comportements les plus anormaux sont rencontrés lorsque le rapport de perméabilité entre les deux régions est plus faible.

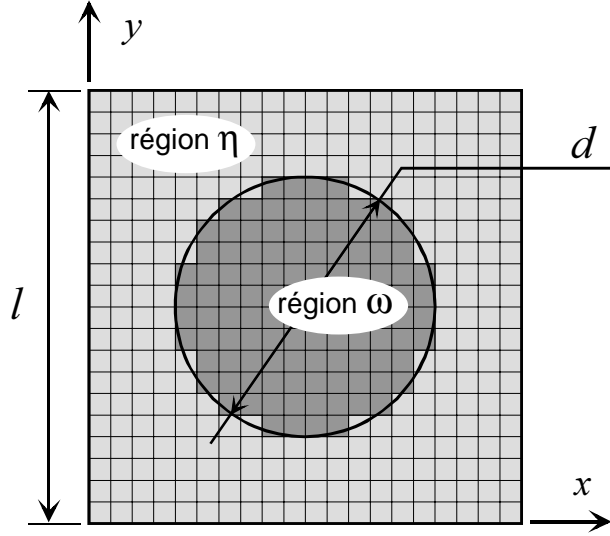


FIG. 4.1: Cellule unitaire nodulaire

4.2 Etude des propriétés effectives à grande échelle

Dans cette partie, les évolutions des propriétés à grande échelle pour une cellule nodulaire (Fig. 4.1) sont étudiées pour différentes configurations locales. L'objectif de cette analyse est de dégager l'influence respective des paramètres locaux (nombre de Péclet, rapport de perméabilité, dispersivités, géométrie) sur le comportement macroscopique. La dispersion locale est modélisée par la formulation de Bear (Eq. 3.12), à l'aide de deux dispersivités α_L , α_T , et d'un coefficient de diffusion effective D^{eff} . Pour limiter le nombre de paramètre, le rapport des dispersivités longitudinale et transversale est choisi constant avec comme rapport

$$\frac{\alpha_L}{\alpha_T} = 10 \quad (4.1)$$

Le nombre de Péclet de cellule, ou nombre de Péclet à grande échelle est défini par

$$Pe = \frac{v_m l}{D^{eff}} \quad \text{avec ici } v_m = |\{\langle \mathbf{v} \rangle\}| = (\{\langle \mathbf{v} \rangle\})_x \quad (4.2)$$

La résolution des trois problèmes de fermeture pour une cellule nodulaire discrétisée sur un maillage 50×50 , nécessite environ une à cinq minutes de temps CPU avec un Pentium 200 MHz. En conséquence, une étude assez fine des variations peut aisément être réalisée. Des exemples de champs solutions des problèmes de fermeture sont représentés sur les figures 4.2 à 4.4. Seules les composantes suivant la direction de l'écoulement sont calculées. L'influence du nodule moins perméable apparaît très clairement, car il modifie complètement le champ des déviations, donc la répartition de concentration.

4.2. Etude des propriétés effectives à grande échelle

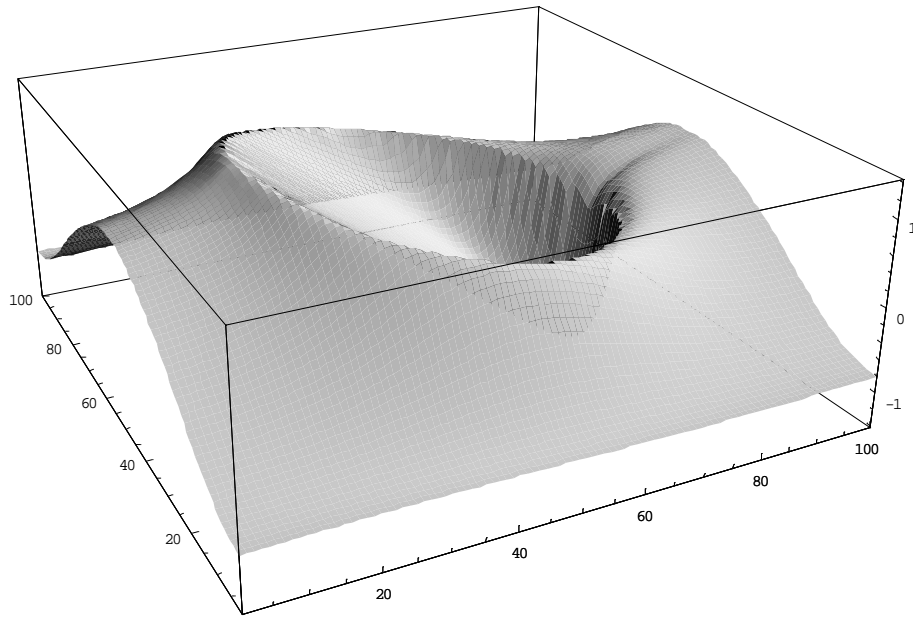


FIG. 4.2: Représentation des variables de fermeture $(\mathbf{b}_{\eta\eta})_x$ et $(\mathbf{b}_{\omega\eta})_x$ sur une cellule nodulaire (Problème I)

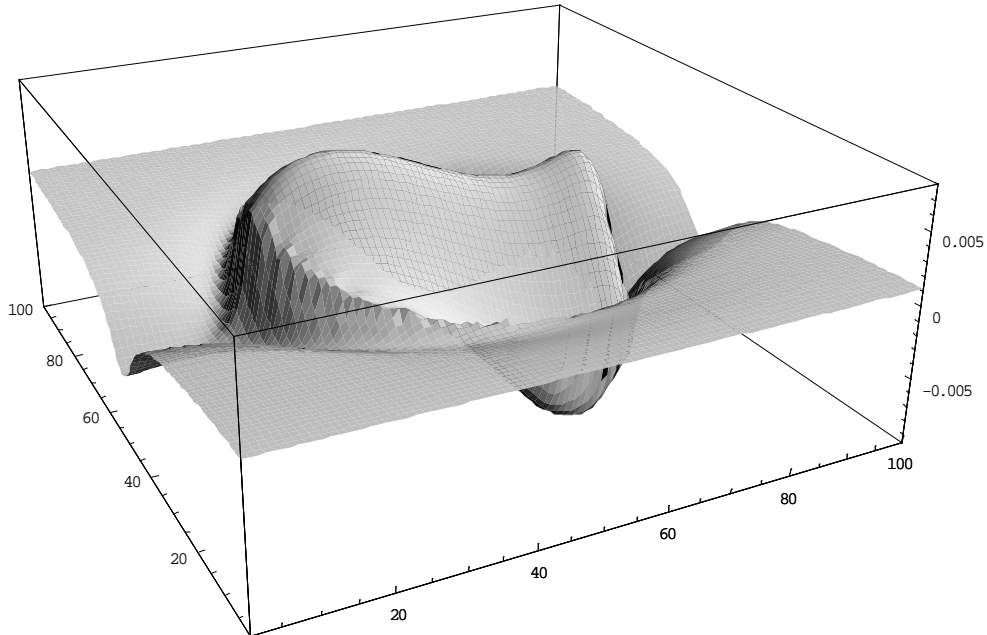


FIG. 4.3: Représentation des variables de fermeture $(\mathbf{b}_{\eta\omega})_x$ et $(\mathbf{b}_{\omega\omega})_x$ sur une cellule nodulaire (Problème II)

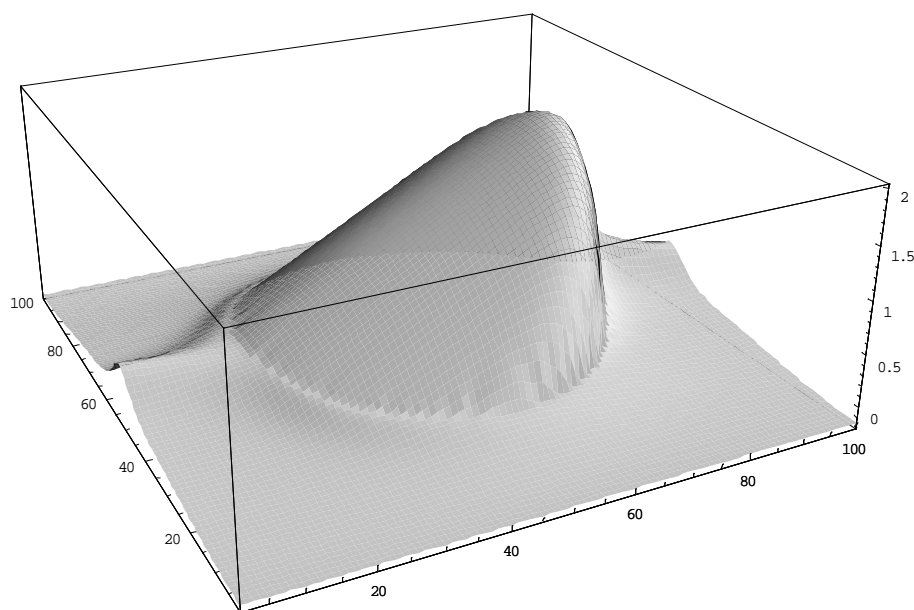


FIG. 4.4: Représentation des variables de fermeture s_η et s_ω sur une cellule nodulaire (Problème III)

4.2.1 Comparaison entre le modèle à une équation et le modèle asymptotique

Dans la partie 2.8, nous avons montré que le modèle à une équation à non-équilibre et le modèle à une équation issu du comportement asymptotique du modèle à deux équations sont équivalents dans le cas d'une géométrie stratifiée. Afin d'apporter des éléments de réflexion sur ce point, les études numériques menées dans cette partie permettent de comparer les coefficients de dispersion associés à chaque modèle dans différentes cellule nodulaires. Dans le tableau suivant, sont présentés quelques résultats du calcul de ces coefficients.

Nombre de Péclet	Modèle asymptotique	Modèle à une équation à non-équilibre
	D_∞^{**}	$(\mathbf{D}^{**})_{xx}$
0.1	1.010	1.010
1	1.107	1.106
10	2.708	2.646
100	48.11	47.91
1000	1800	1804
10000	56930	57010
100000	751100	751700

Dans toutes les autres configurations étudiées, les résultats sont identiques, c'est à dire les écarts entre les deux coefficients sont inférieurs à 1% et sont liés aux erreurs

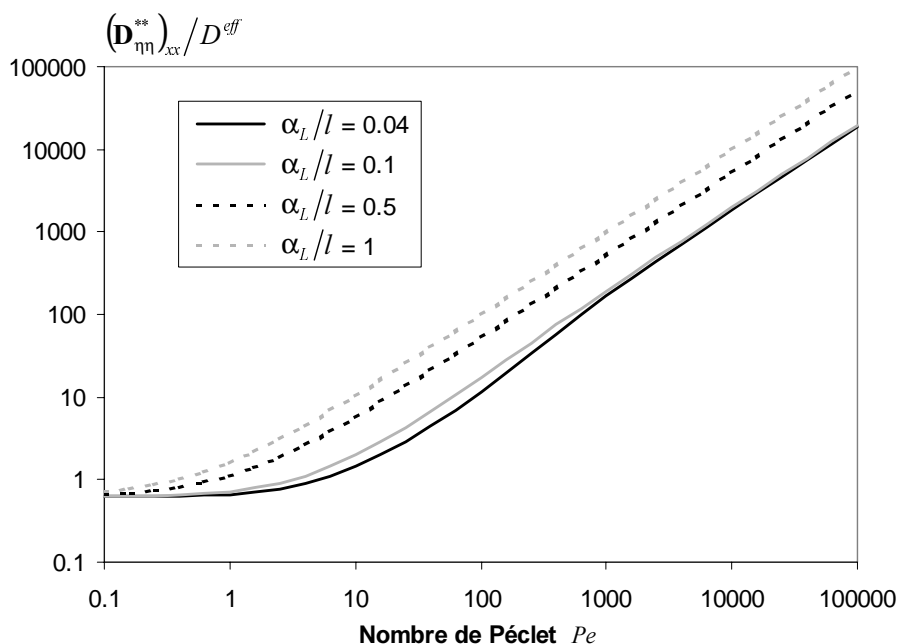


FIG. 4.5: Dispersion longitudinale à grande échelle dans la région η en fonction du nombre de Péclet pour différentes dispersivités

numériques engendrées par la résolution des problèmes de fermeture. Une étude numérique exhaustive sur un très grand nombre de cas ne peut pas tenir de lieu de démonstration rigoureuse, cependant il semblerait que les deux modèles à une équation soient réellement équivalents. Cette remarque est très importante et constitue une des conclusions majeures de ce travail. Si on s'intéresse uniquement au comportement asymptotique du transport dans une structure hétérogène, un seul problème de fermeture est à résoudre.

Par la suite, seules les variations du coefficient de dispersion associé au modèle à une équation à non-équilibre sont étudiées, les résultats concernant le coefficient de dispersion asymptotique étant identiques.

4.2.2 Influence du nombre de Péclet

Les figures 4.5 à 4.8 montrent les évolutions de différentes propriétés macroscopiques en fonction du nombre de Péclet et des dispersivités locales. Un comportement classique est observé pour la dispersion et le coefficient d'échange. C'est à dire, pour les nombres de Péclet faibles, le transport est uniquement diffusif. Le coefficient de dispersion longitudinale normalisé est donc légèrement inférieur à 1, mettant en évidence une tortuosité macroscopique. Le coefficient de transfert de masse est constant ne dépendant que du flux diffusif inter-région. Lorsque le nombre de Péclet augmente, deux effets sont conjugués. D'une part la dispersion locale est plus importante (voir la formulation choisie Eq. 3.12), d'autre part, des effets dispersifs macroscopiques apparaissent dus aux fluctuations du

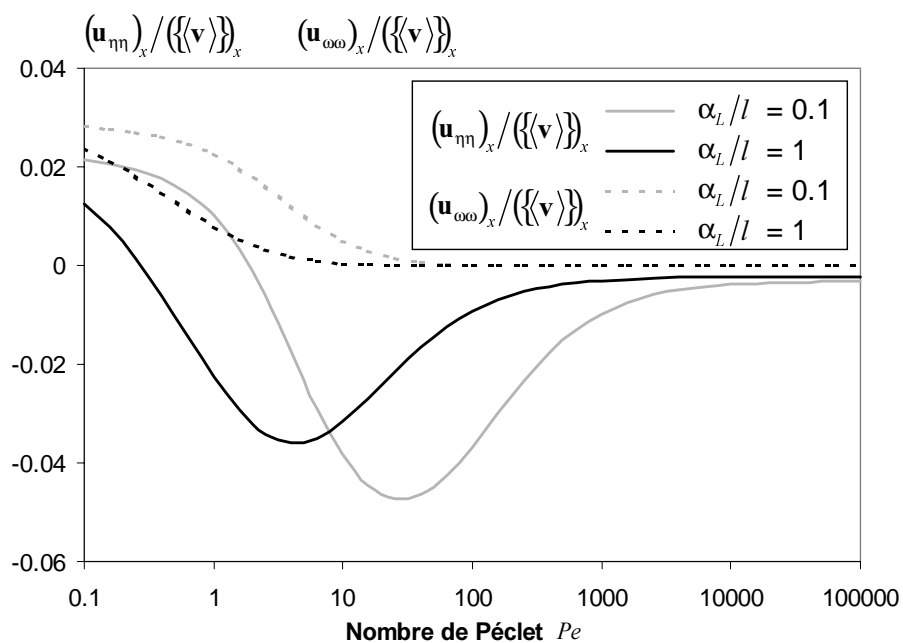


FIG. 4.6: Coefficients $\mathbf{u}_{\eta\eta}$ et $\mathbf{u}_{\omega\omega}$ en fonction du nombre de Péclet pour différentes dispersivités

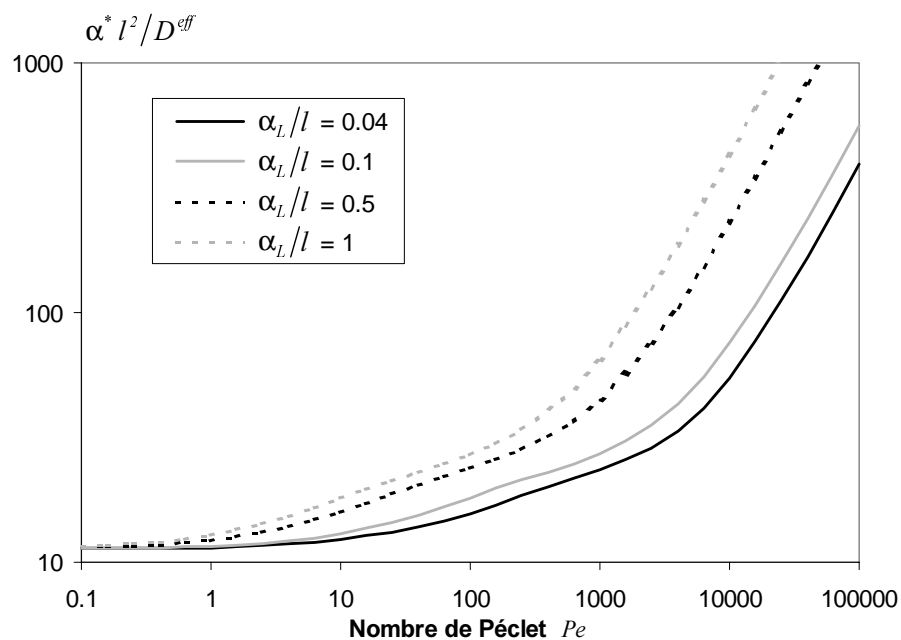


FIG. 4.7: Coefficient de transfert de masse en fonction du nombre de Péclet pour différentes dispersivités

4.2. Etude des propriétés effectives à grande échelle

champ de vitesse. Dans cette partie de la courbe, on observe donc une croissance linéaire des propriétés macroscopiques.

Sur la figure 4.6, sont représentées les évolutions des coefficients convectifs complémentaires $(\mathbf{u}_{\eta\eta})_x$ et $(\mathbf{u}_{\omega\omega})_x$. La normalisation par la vitesse macroscopique ($v_m = (\{\langle \mathbf{v} \rangle\})_x$) permet d'évaluer l'importance relative de ces coefficients dans les équations à grande échelle. Pour les valeurs extrêmes du nombre de Péclet (régime diffusif et régime dispersif), ces deux propriétés ont une importance négligeable devant les autres termes du modèle à deux équations. Le coefficient $(\mathbf{u}_{\eta\eta})_x$ atteint un maximum (5% de la vitesse moyenne globale) pour les valeurs intermédiaires du nombre de Péclet, ce qui semble être faible. Cependant il faut souligner le fait que, dans la région lente, où la vitesse moyenne régionale intrinsèque peut être petite, ces coefficients convectifs complémentaires peuvent avoir une influence significative en terme de convection. Toutefois, si le nombre de Péclet local est petit, ceci ne doit pas influencer le résultat car les termes de diffusion sont alors prépondérants.

Pour les coefficients de dispersion et d'échange de masse, une dépendance asymptotique linéaire ($\sim Pe^1$) est toujours observée pour les grands nombres de Péclet. Il est important de remarquer que ce type de comportement dépend en partie des définitions choisies pour

- la dispersion locale (Eq. 3.12). Cette formulation propose une dépendance linéaire de la dispersion par rapport au nombre de Péclet local. Un grand nombre d'études théoriques et expérimentales ont mis en évidence des évolutions différents ($\sim Pe^{0.7}$, $\sim Pe^{1.2}$, $\sim Pe^2$, ...) [Douglas et Gordon 1989, Edwards et al. 1991, Koch et Brady 1985]. Des modifications peuvent être aisément faites dans les codes de résolution des problèmes de fermeture pour prendre en compte des comportements différents.
- le nombre de Péclet à grande échelle. La formulation du nombre de Péclet choisie (Eq. 4.2) ne fait intervenir que la partie diffusive constante D^{eff} de l'expression de dispersion locale (Eq. 3.12). En réalité, lorsque la vitesse augmente, le coefficient de dispersion total (diffusion et dispersion) croît aussi.

Le coefficient de dispersion du modèle à une équation à non-équilibre est représenté sur la figure 4.8. Les valeurs trouvées ici sont environ 10 à 50 fois supérieures aux coefficients de dispersion correspondant au modèle à deux équations. Dans un système à double-porosité, l'étalement total du traceur est beaucoup plus influencé par le non-équilibre que par les effets diffusifs et dispersifs liés à chaque région. Une nouvelle fois, une dépendance linéaire en fonction du nombre de Péclet est observée pour des nombres de Péclet élevés. Ce comportement particulier permet de définir une dispersivité longitudinale à grande échelle α_L^{**} par

$$(\mathbf{D}^{**})_{xx} = \alpha_L^{**} v_m \quad (4.3)$$

Cette dispersivité longitudinale macroscopique rapportée à la dispersivité longitudinale locale est représentée sur la figure 4.9. De nombreuses études expérimentales [Graham et McLaughlin 1991, Huang et al. 1995, Sternberg et Greenkorn 1994] sur colonne de laboratoire ou sur site, ont mis en évidence deux phénomènes majeurs. D'une part, les dispersivités mesurées à une échelle supérieure à celle de Darcy sont beaucoup plus importantes

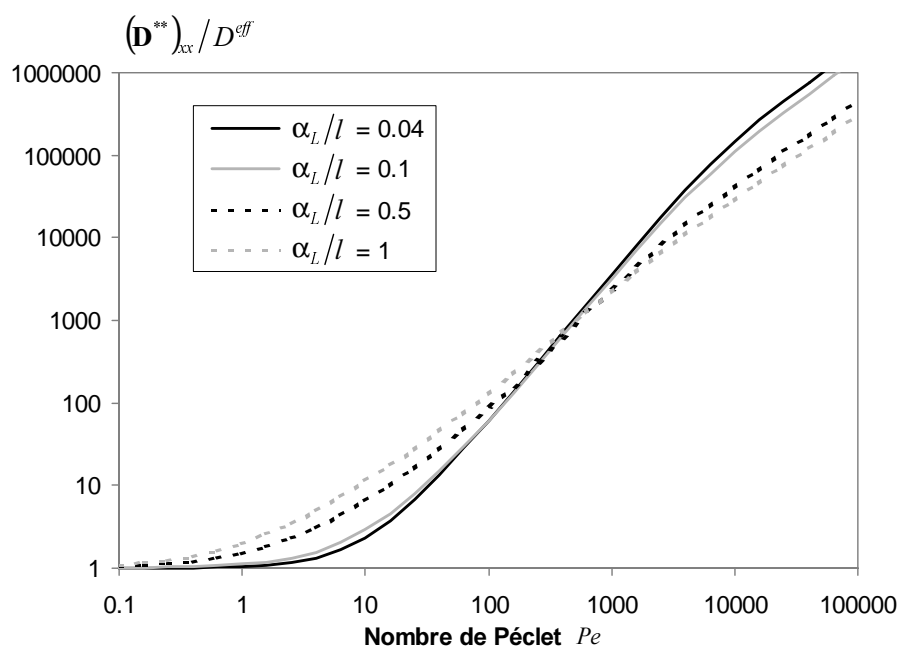


FIG. 4.8: Coefficient de dispersion longitudinale à grande échelle du modèle à une équation en fonction du nombre de Péclet pour différentes dispersivités

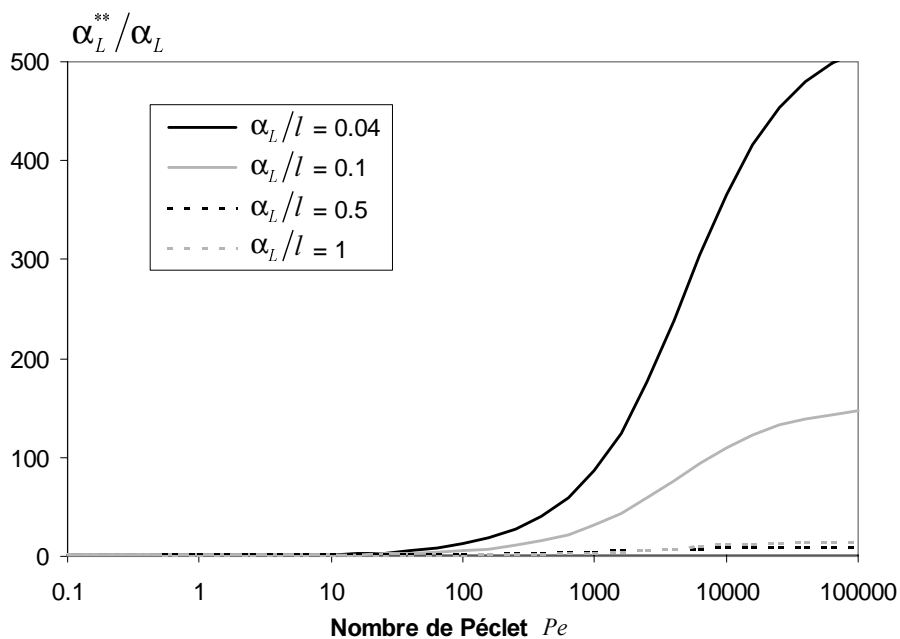


FIG. 4.9: Dispersivité longitudinale à grande échelle en fonction du nombre de Péclet pour différentes dispersivités

4.2. Etude des propriétés effectives à grande échelle

que les dispersivités locales (d'un facteur pouvant aller à plus de 1000). D'autre part, la dispersion macroscopique dépend de l'échelle d'observation. En général, les observations montrent que la dispersion à grande échelle (c'est à dire la macro-dispersivité) augmente avec la distance parcourue par le traceur, avant d'atteindre, dans certains cas, un régime asymptotique où les propriétés macroscopiques restent constantes.

Certains travaux ont développé des modèles à une équation basés sur une équation de convection-dispersion classique, où le coefficient de dispersion est une fonction du temps. Cette dépendance est en principe caractérisée par une approche inverse sur des résultats expérimentaux. Il a été montré [Berkowitz et Scher 1995, Matheron et de Marsily 1980] que dans le cadre d'un modèle à une équation, cette solution n'a pas de justification physique et ne peut être vue que comme une astuce de calcul.

Des études stochastiques ou déterministes [Dagan 1986, Gelhar et al. 1992, Güven et al. 1984, Logan 1996, Matheron et de Marsily 1980, Pickens et Grisak 1981] ont tenté d'expliquer cette dépendance de la dispersion par rapport à l'échelle d'observation. Une des interprétations est que le traceur transporté doit avoir rencontré toute la gamme d'hétérogénéité possible avant d'atteindre un régime permanent ou asymptotique. Par exemple, pour un milieu aléatoire avec une faible variance de perméabilité, Dagan [Dagan 1984] propose 10 longueurs de corrélation comme distance d'établissement du régime asymptotique. Par contre, dans ces analyses, les différentes échelles rencontrées par le fluide ne sont pas clairement identifiées. Au niveau d'un aquifère, plusieurs échelles (supérieures à celle de Darcy) coexistent. Lorsque le fluide traverse une structure géologique réelle de grande dimension, il ne cesse de rencontrer de nouvelles hétérogénéités et de nouveaux ordres de grandeur de perméabilité. En conséquence, le coefficient de dispersion global semble augmenter sur toute la longueur de l'étude. On rappelle ici que notre préférence va à une vision où la modélisation ultime de l'aquifère reste hétérogène, pour laquelle une formulation effective homogène n'est pas recherchée car le plus souvent inefficace.

Dans le travail présenté ici, la dispersivité macroscopique calculée (Fig. 4.9) est de la même manière supérieure à la dispersivité locale (d'un facteur de 1 à 500). Par contre, pour une configuration donnée (nombre de Péclet, contraste de perméabilité, ...), les coefficients de dispersion macroscopique calculés sont uniques et constants. En effet, nous nous intéressons à des systèmes hiérarchisés périodiques avec des échelles distinctes et séparées. Dans ces conditions, toutes les informations concernant le milieu étudié sont contenues dans la cellule unitaire. Donc lorsque le fluide a traversé la première cellule, il a rencontré toutes les variations de perméabilité existantes, et les caractéristiques dispersives n'évoluent plus. De plus, l'évolution apparente du coefficient de dispersion associé à un modèle à une équation provient de l'impossibilité de représenter correctement le non-équilibre avec un tel modèle. Nous rappelons que le coefficient de dispersion global présenté ici correspond au comportement asymptotique.

4.2.3 Influence des dispersivités locales

Les évolutions des propriétés macroscopiques ont été calculées pour différentes valeurs des dispersivités locales. Leur influence n'est sensible que pour les grands nombre de Péclet,

lorsque les vitesses deviennent importantes. L'augmentation des dispersivités (longitudinale et transversale) a pour effet d'accroître localement les coefficients de dispersion, donc le flux diffusif massique à l'interface entre les deux régions. En conséquence, les coefficients de dispersion à grande échelle dans chaque région et le coefficient de transfert de masse évoluent dans le même sens que les dispersivités (Fig. 4.5 et 4.7).

Le comportement du coefficient de dispersion du modèle à une équation est un peu différent (Fig. 4.8). Pour des nombres de Péclet inférieurs à 500, un raisonnement similaire permet d'expliquer l'influence des dispersivités locales sur l'augmentation de la dispersion macroscopique. Par contre, pour des nombres de Péclet supérieurs à 500, les résultats exhibent une variation inverse. En effet, l'augmentation de la dispersion locale tend à favoriser l'échange de masse entre le nodule et la matrice (augmentation de α^* sur la figure 4.7), donc à réduire le non-équilibre entre les deux régions. Cette homogénéisation de la concentration entre la zone lente et la zone rapide a tendance à diminuer les effets dispersifs macroscopiques. Ce type de comportement est généralement observé lorsqu'on veut affecter un coefficient de dispersion unique à une région hétérogène, ou si des fluctuations importantes du champ de vitesse apparaissent. Dans l'expression explicite de la dispersion macroscopique (Eq. 2.50), le terme $\{-\tilde{\mathbf{v}}\mathbf{b}\}$ est prépondérant. Dans le cas purement convectif, certaines zones peuvent n'être balayées que tardivement, provoquant un étalement important du front de concentration. La diffusion à l'échelle de Darcy permet d'atteindre ces zones plus tôt.

A partir d'un modèle macroscopique stochastique [Dagan 1984] formulé dans le cas purement convectif, des travaux théoriques [Fiori 1998] et numériques [Burr et al. 1994], ont permis de montrer que la prise en compte de la dispersion locale a pour effet de diminuer la dispersion à grande échelle. Ces analyses confirment nos résultats qui sont résumés par : lorsque la dispersion à l'échelle de Darcy est faible, dispersion locale et dispersion à grande échelle n'évoluent pas dans le même sens

Finalement, la figure 4.9 montre que le gain de dispersivité lors du changement d'échelle est d'autant plus important que la dispersivité locale est faible. Les comportements macroscopiques les plus anormaux (dispersion non-Fickienne) correspondent aussi à de faibles dispersivités locales ou à de grandes hétérogénéités (c'est à dire α_L/l petit). Gelhar et al. [1992] présente une analyse détaillée d'un ensemble important d'expérimentations réalisées à l'échelle de l'aquifère. Dans certaines situations le rapport de la macro-dispersivité sur la dispersivité locale peut être bien supérieur à 1000.

4.2.4 Influence du rapport de perméabilité

Le troisième paramètre influençant considérablement les propriétés à grande échelle est le rapport de perméabilité entre les deux régions (k_η/k_ω). En effet, la notion d'hétérogénéité est principalement basée sur une variation spatiale de la conductivité hydraulique. Les figures 4.10 à 4.13 présentent les variations de certains coefficients macroscopiques en fonction du contraste de perméabilité. Dans la plupart des systèmes géologiques, la région discontinue (nodules) a une perméabilité plus faible que la région continue (matrice). De plus, le non-équilibre apparaît principalement lorsque la région rapide est bien connectée,

4.2. Etude des propriétés effectives à grande échelle

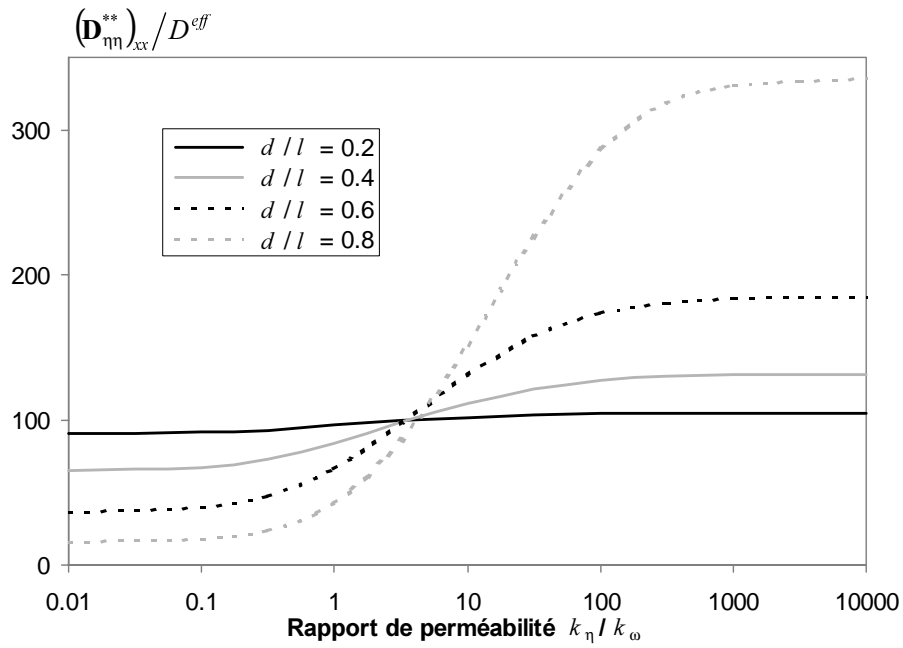


FIG. 4.10: Dispersion longitudinale à grande échelle dans la région η en fonction du rapport de perméabilité pour différentes tailles de nodule

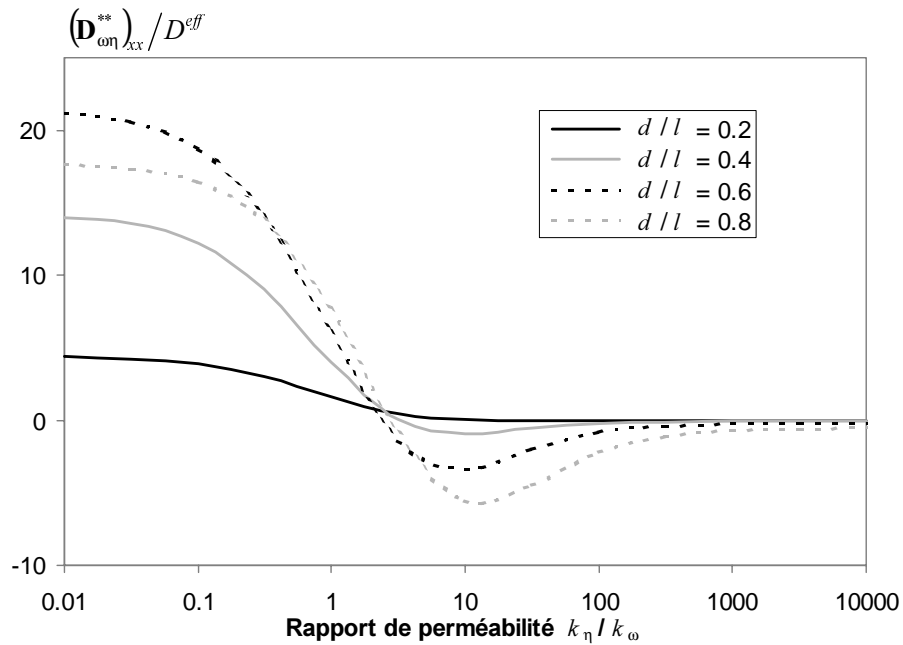


FIG. 4.11: Coefficient de dispersion de couplage à grande échelle en fonction du rapport de perméabilité pour différentes tailles de nodule

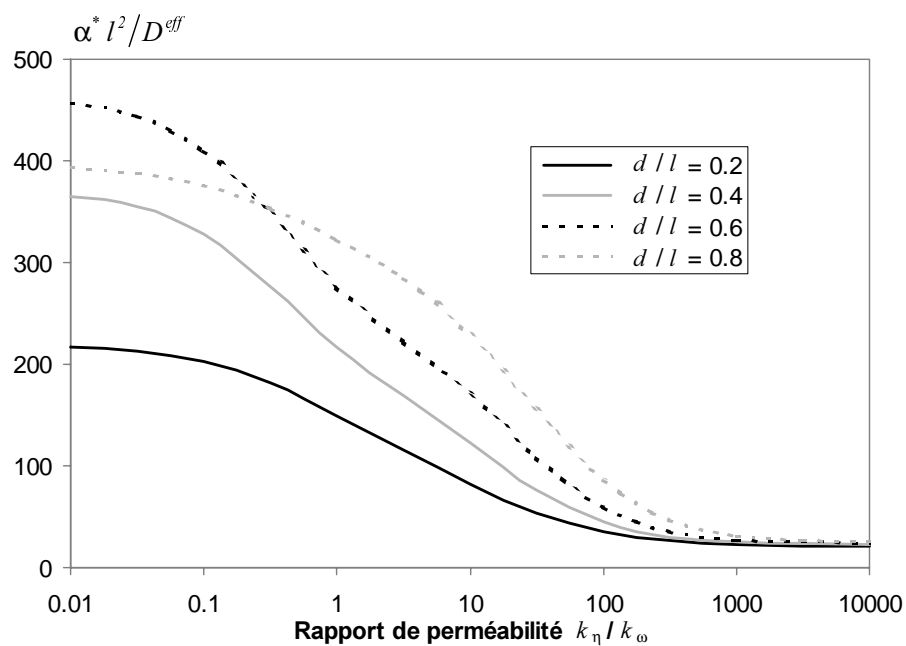


FIG. 4.12: Coefficient de transfert de masse en fonction du rapport de perméabilité pour différentes tailles de nodule

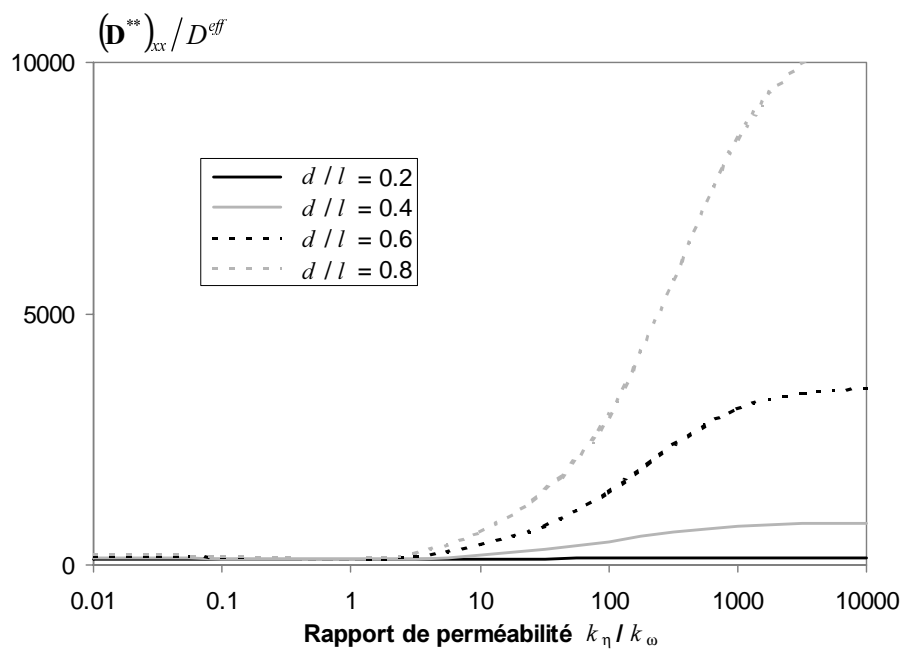


FIG. 4.13: Coefficient de dispersion du modèle à une équation en fonction du rapport de perméabilité pour différentes tailles de nodule

4.2. Etude des propriétés effectives à grande échelle

un modèle à deux équations n'est pas nécessaire lorsque $k_\eta < k_\omega$. La zone de plus grand intérêt correspond à $k_\eta/k_\omega > 1$, tandis que les résultats pour $k_\eta/k_\omega < 1$ sont ajoutés ici, pour une meilleure compréhension des phénomènes physiques qui contrôlent le transport macroscopique.

Toutes les propriétés mettent en évidence un comportement similaire, elles tendent vers une limite constante lorsque le contraste de perméabilité devient important ($k_\eta/k_\omega < 0.01$ ou $k_\eta/k_\omega > 1000$). Cela semble confirmer l'idée que les caractéristiques hydrauliques du milieu n'ont aucune influence sur le comportement à grande échelle en dehors de la zone $0.01 < k_\eta/k_\omega < 1000$. En effet, lorsque le rapport de perméabilité est élevé, le champ de vitesse reste identique dans la région rapide car la région lente apparaît alors comme un obstacle imperméable, alors que le transport est essentiellement diffusif dans la région lente.

Si $k_\eta/k_\omega \ll 1$, l'écoulement est contraint de passer au travers des nodules, et le flux convectif participant à l'échange de masse entre les deux zones est important. En conséquence sur la figure 4.12, le coefficient α^* est élevé pour de faibles rapports de perméabilité. Au contraire, si $k_\eta/k_\omega \gg 1$, l'écoulement a tendance à contourner les nodules et les conséquences sont

- un faible coefficient d'échange de masse contrôlé uniquement par le flux diffusif inter-régions.
- un coefficient de dispersion dans la région η élevé du à une tortuosité macroscopique plus importante.

Les valeurs des coefficients de dispersion de couplage $(\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**})_{xx} = (\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{xx}$ sont présentées sur la figure 4.11. Comparés aux autres coefficients de dispersion $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ et $(\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**})_{xx}$, ces paramètres jouent un rôle important dans certaines gammes de contraste de perméabilité. Ces termes de couplage ne sont donc pas à négliger dans le modèle à grande échelle.

4.2.5 Influence de la géométrie

La géométrie nodulaire est bien sûr conservée. Ici, le diamètre du nodule, donc la fraction volumique de la région lente, est modifié. En règle générale, l'augmentation de la taille du nodule a pour principal effet d'accroître la tortuosité du milieu en perturbant le champ de vitesse. Les coefficients de dispersion évoluent donc dans le même sens. D'un autre côté, la surface d'échange est supérieure, ce qui favorise l'échange entre les deux régions. Il faut souligner que l'influence de la taille de l'inclusion sur le comportement macroscopique n'est pas clairement perçue sur ces courbes. Dans le cas d'un système à deux régions où les fractions volumiques sont conservées, le coefficient d'échange (Fig. 4.12) évolue en $1/d^2$ dans le régime diffusif (d étant la taille de l'hétérogénéité). On ne retrouve pas cette tendance ici, car la modification des fractions volumiques (φ_η et φ_ω) dans les équations de transport à grande échelle (Eq. 2.48 et 2.49) change l'importance relative de chaque coefficient. Ce point est détaillé dans la partie 4.6 où l'influence de la géométrie sur le non-équilibre est étudiée.

4.3 Comparaison avec les résultats de la littérature

4.3.1 Système "Mobile-Immoble"

A travers la résolution des problèmes de fermeture, une méthode explicite de calcul des propriétés macroscopiques est proposée. De nombreux chercheurs ont travaillé en particulier sur la détermination du coefficient de transfert de masse α^* , qui semble poser beaucoup de problèmes [Van Genuchten et Dalton 1986, Gerke et Van Genuchten 1993b, Parker et Valocchi 1986, Rao et al. 1980]. Dans le cadre des modèles à deux équations valables pour les systèmes "mobile-immoble", une idée est de décrire finement le transport dans la zone immobile par une équation de diffusion. Les géométries considérées sont simples (rectangulaires, cylindriques, sphériques, ...) de façon à pouvoir écrire le problème aux limites simplement. Par exemple, en considérant un agrégat sphérique de rayon b moins perméable inclus dans une matrice très perméable, l'évolution de la concentration dans la région immobile (agrégat) est gouvernée par une équation de diffusion sphérique du type

$$\frac{\partial c_a}{\partial t} = \frac{D_{im}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_a}{\partial r} \right) \quad (4.4)$$

$$c_a(r = b) = C_m \quad (4.5)$$

Autour de cette description, il est possible de construire un modèle à deux équations, en prenant pour la concentration macroscopique associée à la région immobile C_{im} , la moyenne spatiale de la concentration dans l'agrégat c_a . Ce modèle s'écrit donc

$$C_{im} = \frac{1}{V} \int_V c_a dV = \frac{3}{b^3} \int_0^b r^2 c_a dr \quad (4.6)$$

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \epsilon_m \varphi_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \varphi_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \varphi_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (4.7)$$

Pour les configurations étudiées (inclusions rectangulaires, cylindriques ou sphériques), le problème de transport complet décrit précédemment admet une solution analytique. Le développement de cette solution, obtenue en appliquant une transformée de Laplace, est présentée à plusieurs reprises dans la littérature [Van Genuchten et Wierenga 1976, Van Genuchten et al. 1984, Goltz et Roberts 1986b, Parker et Valocchi 1986]. Le même système peut être modélisé en représentant l'échange entre les deux régions avec une cinétique du premier ordre (coefficient de transfert de masse α^*)

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + \epsilon_m \varphi_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \varphi_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \varphi_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (4.8)$$

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha^* (C_m - C_{im}) \quad (4.9)$$

Des techniques mathématiques similaires sont utilisées pour déterminer la solution analytique de ce problème. En faisant certaines approximations, les deux modèles donnent les

4.3. Comparaison avec les résultats de la littérature

mêmes évolutions temporelles des concentrations macroscopiques C_m et C_{im} . L'identification des solutions analytiques conduit à des relations explicites des coefficients d'échange associés aux différentes géométries. Ils sont écrits sous la forme

$$\alpha^* = \beta \frac{\varphi_{im} D_{im}}{b^2} \quad (4.10)$$

où φ_{im} est la fraction volumique de la région immobile, D_{im} est le coefficient de diffusion effectif dans la zone immobile. Les paramètres b et β , dépendent de la géométrie et sont définis par

agrégat rectangulaire (b : demi-épaisseur de la strate)	$\beta = 3$
agrégat cylindrique (b : rayon du cylindre)	$\beta = 8$
agrégat sphérique (b : rayon de la sphère)	$\beta = 15$

Notre objectif, alors, est de déterminer le coefficient d'échange donné par les problèmes de fermeture dans des situations identiques, afin de comparer ces différentes approches. Il faut donc résoudre le problème de fermeture IIIa (Eq. 3.10a à 3.10f) sur les géométries utilisées. Les différentes hypothèses faites dans le développement précédent et leurs implications sur les variables de fermeture sont les suivantes.

- Le transport dans l'agrégat est uniquement diffusif, donc $\langle \mathbf{v} \rangle_{im} = 0$, et le coefficient de diffusion D_{im} est constant sur tout le domaine.
- Dans la région mobile, le transport (convectif ou diffusif) est suffisamment rapide pour considérer que, à l'échelle d'une cellule unitaire, la concentration est uniforme et égale à sa valeur moyenne $C_m = \left\{ \langle c \rangle_m^\beta \right\}^m$. Ceci se traduit par une déviation spatiale de la concentration nulle $\tilde{c}_m = 0$, donc les variables de fermeture associées à \tilde{c}_m (Eq. 2.33) prennent la valeur zéro en tout point du domaine. Ceci est vrai en particulier pour s_m .

Finalement, la solution dans la région mobile est immédiate, et le problème de fermeture se résume à une équation de diffusion dans la région immobile

$$0 = \nabla \cdot (D_{im} \nabla s_{im}) + \frac{1}{\varphi_{im}} \quad (4.11)$$

$$s_{im} = 0 \quad \text{sur l'interface des deux régions} \quad (4.12)$$

$$s_{im}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{im}(\mathbf{r}) \quad \text{périodicité} \quad (4.13)$$

avec

$$\alpha^* = \frac{1}{\{s_{im}\}^{im}} \quad (4.14)$$

Pour chaque géométrie considérée, le problème doit être écrit en coordonnées cartésiennes, cylindriques ou sphériques. L'équation de diffusion prend une forme générale en utilisant un indice de dimension n qui vaut 1 pour la géométrie stratifiée, 2 pour la géométrie cylindrique, 3 pour la géométrie sphérique. La dimension $2b$ désigne la taille de l'inclusion. C'est à dire, la demi-épaisseur de la strate ou le rayon des cylindre et sphère valent b . Avec ces notations, le problème de fermeture associé à la variable s s'écrit

$$\frac{D_{im}}{r^{(n-1)}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{(n-1)} \frac{\partial}{\partial r} s_{im} \right) = -\frac{1}{\varphi_{im}} \quad (4.15)$$

$$s_{im}(r = b) = 0 \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} s_{im}(r = 0) = 0 \quad (4.17)$$

Cette dernière équation est issue des conditions de périodicité et de symétrie de la cellule unitaire. La solution de cette équation différentielle en tenant compte des conditions aux limites est

$$s_{im} = \frac{1}{2n\varphi_{im}D_{im}} (b^2 - r^2) \quad (4.18)$$

Le coefficient d'échange est alors donné par la relation générale

$$\alpha^* = \frac{1}{\frac{n}{b} \int_0^b r^{(n-1)} s_{im} dr} \quad (4.19)$$

Pour les trois configurations (en fonction de n), l'expression de α^* est

$$\alpha^* = n(n+2) \frac{\varphi_{im} D_{im}}{b^2} \quad (4.20)$$

Le coefficient d'échange peut donc être mis sous la forme

$$\alpha^* = \beta \frac{\varphi_{im} D_{im}}{b^2} \quad (4.21)$$

Les valeurs du facteur de forme β sont résumées dans le tableau suivant

inclusion rectangulaire ($n = 1$)	$\beta = 3$
inclusion cylindrique ($n = 2$)	$\beta = 8$
inclusion sphérique ($n = 3$)	$\beta = 15$

En analysant ces résultats, plusieurs remarques émergent

- Pour la géométrie stratifiée, on retrouve bien les résultats présentés dans la partie 2.7, en considérant le coefficient de diffusion infini dans la région mobile.
- Les deux approches présentées dans cette partie donnent exactement le même résultat. Ceci valide encore une fois le modèle proposé pour la détermination des propriétés macroscopiques, car les problèmes de fermeture conduisent à la même expression qu'une description fine des processus associée à une résolution temporelle.

4.3. Comparaison avec les résultats de la littérature

- Dans des travaux précédents [Grangeot et al. 1994, Rao et al. 1980], il a été montré que dans le cadre d’une représentation de l’échange par une cinétique au premier ordre, le coefficient de transfert α^* , n’est pas constant. Il diminue rapidement pour les temps courts avant d’atteindre une valeur asymptotique. Pour prendre en compte ce phénomène certains auteurs proposent des formulations différentes du terme d’échange pour les temps courts et les temps longs [Dykhuizen 1990], ou choisissent une valeur moyenne constante [Rao et al. 1980]. Les expressions calculées ici ne correspondent pas à la valeur asymptotique, mais fournissent directement la valeur moyenne qui permet de représenter au mieux le comportement macroscopique.
- Dans le cas purement diffusif développé ici, les caractéristiques de la région mobile n’interviennent qu’à travers la fraction volumique φ_{im} , qui traduit la fréquence d’apparition des inclusions.
- On voit ainsi clairement l’influence de la taille de l’hétérogénéité qui intervient au carré. Ce résultat peut facilement être extrapolé à des géométries quelconques, ou des structures aléatoires. Lorsque le contraste de perméabilité est très grand pour assimiler le milieu à un système ”mobile-immobile”, le coefficient d’échange est inversement proportionnel à la taille de l’inclusion moins perméable.

Les expressions du coefficient d’échange proposées ici et dans la littérature sont un bon moyen d’estimation a priori. L’approximation ”mobile-immobile” est bonne dans certains milieux réels, par exemple une structure de masses argileuses enfermées dans une couche de sable peut exhiber des rapports de perméabilité très élevé. Par contre, dès que le contraste des propriétés diminue, ou lorsque des effets dispersifs apparaissent, les expressions présentées ici ne sont plus valables. Pour s’en convaincre, il suffit de regarder les figures 4.7 et 4.12 qui montrent l’influence des propriétés locales. La technique de prise de moyenne propose ainsi une méthode générale de détermination des propriétés effectives à grande échelle, qui est une extension des techniques existantes.

4.3.2 Système ”Mobile-Mobile”

Le coefficient d’échange α^* tel qu’il est déterminé dans la partie précédente ne prend en compte que le flux diffusif inter-région. Il est bien évident que pour les systèmes ”mobile-mobile”, où le transport advectif est présent dans chaque région, le flux massique convectif interfacial n’est plus négligeable. On peut le voir sur la figure 4.12, où lorsque le rapport de perméabilité devient inférieur à 1, l’écoulement est contraint de traverser les nodules, et le coefficient d’échange devient très élevé. Pour généraliser les modèles ”mobile-immobile”, certains auteurs ont écrit un modèle à deux équations sous la forme [Gerke et Van Genuchten 1993b, Gerke et Van Genuchten 1996]

$$\epsilon_m \varphi_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \varphi_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \varphi_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} - \Gamma_s \quad (4.22)$$

$$\epsilon_{im} \varphi_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \varphi_{im} D_{im} \frac{\partial^2 C_{im}}{\partial x^2} - \varphi_{im} V_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial x} + \Gamma_s \quad (4.23)$$

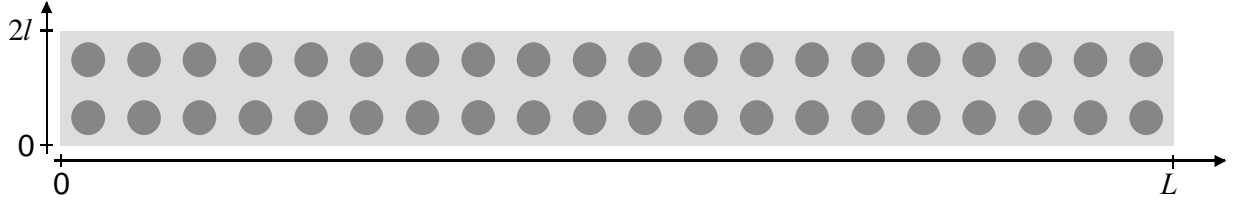


FIG. 4.14: Milieu nodulaire

Le flux massique inter-région est donné par

$$\Gamma_s = \alpha^* (C_m - C_{im}) + \begin{cases} C_m \alpha_w (P_m - P_{im}) & \text{si } P_m > P_{im} \\ C_{im} \alpha_w (P_m - P_{im}) & \text{si } P_m < P_{im} \end{cases} \quad (4.24)$$

où P_m et P_{im} sont les pressions macroscopiques associées à chacune des régions, et α_w est un coefficient d'échange qui caractérise l'écoulement au travers de l'interface entre les deux régions. Le terme ajouté permet en effet de prendre en compte un flux convectif. Cependant, si on considère un écoulement permanent établi, ce qui est le cas dans la plupart des problèmes rencontrés au niveau de l'aquifère, les pressions macroscopiques sont égales. Cette expression ne permet donc pas de représenter le flux massique échangé entre les différentes zones. L'expression du coefficient d'échange massique obtenue par la méthode de prise de moyenne (Eq. 2.44), quant à elle, prend bien en compte les deux modes de transport (convectif et dispersif) pour calculer le flux massique interfacial. Par contre, il resterait à évaluer la validité de cette expression du flux inter-région lorsque des effets d'écoulement instationnaires se produisent (écoulements faiblement compressibles par exemple).

4.4 Expériences numériques

Le modèle à deux équations associé aux problèmes de fermeture doit permettre de prévoir des courbes de percée ou des champs de concentration macroscopiques sans paramètre ajustable. Afin de tester cette capacité, des expériences numériques, basées sur une description fine des hétérogénéités et sur la simulation des équations locales de transport, ont été réalisées. Ces solutions de référence sont ensuite comparées aux résultats du modèle théorique.

La géométrie considérée est dessinée sur la figure 4.14. Un maillage 100×1000 a été utilisé. Les simulations numériques sont conduites de façon à s'approcher d'une expérience de traçage miscible sur une colonne de laboratoire. La cellule est confinée, des conditions de flux nul sont imposées sur les surfaces supérieures et inférieures. Un gradient de pression macroscopique constant est imposé entre les faces droite et gauche par

$$x = 0 : \quad \langle p \rangle = P_0 \quad (4.25)$$

$$x = L : \quad \langle p \rangle = 0 \quad (4.26)$$

À l'instant initial, un échelon de concentration est introduit en $x = 0$. Les conditions initiales et les conditions aux limites suivantes sont choisies

$$t = 0 : \quad \langle c \rangle = 0 \quad (4.27)$$

$$x = 0 : \quad \langle c \rangle = 1 \quad (4.28)$$

$$x = L : \quad \frac{\partial}{\partial x} \langle c \rangle = 0 \quad (4.29)$$

Cette dernière condition intervient dans l'expression du flux dispersif. Les propriétés du milieu nodulaire à l'échelle de Darcy sont données dans le tableau 4.1. Les dispersivités sont identiques dans les deux régions. Toutes les grandeurs sont normalisées par rapport à la taille de la cellule unitaire l et au coefficient de diffusion effectif D^{eff} (voir partie 3.1.4). Le temps adimensionné est défini par

$$t^* = t \frac{D^{eff}}{l^2} \quad (4.30)$$

Dimensions	d/l	L/l
	0.6	20
Propriétés locales	k_η/k_ω	
	100	
	ϵ_η	ϵ_ω
	0.4	0.25
	α_L/l	α_T/l
	0.02	0.002
Écoulement	$Pe = \frac{V_m l}{D^{eff}}$	
	1000	

Tableau 4.1 : Propriétés locales du milieu nodulaire

4.4.1 Méthodes numériques

Les solutions locales sont obtenues à l'aide de deux codes industriels : MODFLOW et MT3D [Zheng 1994]. Le premier logiciel, MODFLOW, résout l'équation de Darcy à partir d'un maillage cartésien définissant localement les hétérogénéités. La perméabilité est représentée par un coefficient k , correspondant à un tenseur diagonal isotrope. Le champ de vitesse en régime permanent ainsi calculé, est utilisé comme donnée pour le problème de transport. Le deuxième logiciel, MT3D, résout itérativement une équation de convection-dispersion afin de suivre l'évolution du champ de concentration dans le milieu hétérogène considéré. Un schéma mixte Eulérien-Lagrangien est introduit en décomposant l'opérateur de transport en deux termes. Le terme dispersif est résolu explicitement à partir d'un schéma aux volumes finis. Le terme convectif pose en général plus de problème (diffusion numérique des schémas du premier ordre). Un effort important a été fait en utilisant

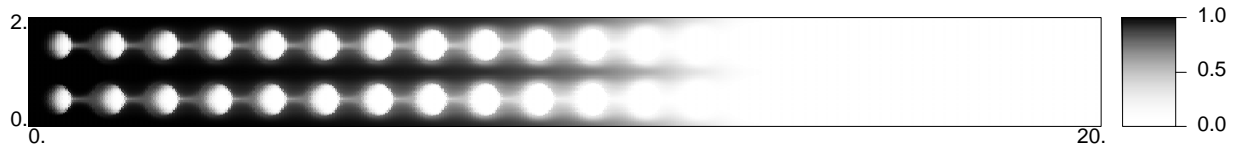


FIG. 4.15: Champ de concentration dans le milieu nodulaire pour $t^* = 3.10^{-3}$

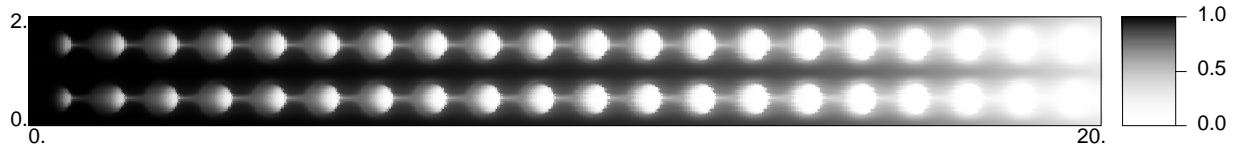


FIG. 4.16: Champ de concentration dans le milieu nodulaire pour $t^* = 5.10^{-3}$

une méthode des caractéristiques qui a la particularité de ne causer qu'une très faible dispersion numérique. Le principe est de suivre le déplacement convectif d'un ensemble de particules réparties également sur l'ensemble du domaine. Une méthode de Runge-Kutta au quatrième ordre est choisie pour résoudre l'équation différentielle correspondant à l'opérateur de convection, ce qui permet une détermination précise de la position de chaque particule. Une gestion dynamique du nombre de particules est intégrée, autorisant la suppression dans les zones d'accumulation et un ajout dans les zones soumises à de fortes fluctuations de vitesse.

Des exemples de champs de concentration obtenus lors des simulations sont présentés dans la partie suivante.

4.4.2 Interprétation des champs de concentration

Les résultats des expériences numériques sont présentés sur les figures 4.15 à 4.17 à trois instants distincts. On peut suivre le déplacement du traceur de gauche à droite et faire ressortir les phénomènes physiques responsables de la dispersion anormale.

Dans la matrice, plus perméable, le transport est essentiellement convectif et très rapide. La diffusion à l'échelle de Darcy ne joue pas un rôle déterminant. Par contre, on voit apparaître des effets dispersifs macroscopiques dus aux fluctuations du champ de vitesse à l'intérieur d'une même région. Les zones situées entre les nodules, où la vitesse est faible,

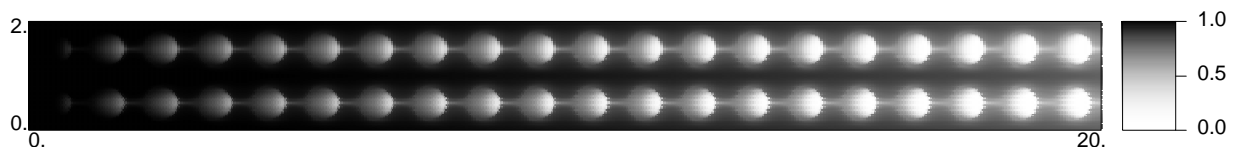


FIG. 4.17: Champ de concentration dans le milieu nodulaire pour $t^* = 7.10^{-3}$

retardent le transport et provoquent un étalement important du front de concentration. Ce comportement est pris en compte dans le calcul des propriétés à grande échelle par l'intermédiaire du terme $\{-\tilde{\mathbf{v}}_\eta \mathbf{b}_{\eta\eta}\}^\eta$ (Eq. 2.50). On comprend ainsi que la définition de région rapide (ou lente) basée sur des notions de perméabilité n'est pas adéquate. La disposition des différentes régions les unes par rapport aux autres est un facteur primordial. Ici, ces zones inter-nodules devraient appartenir à la région "lente" afin de mieux représenter les fronts de concentration. Une telle remarque a été effectuée pour le premier changement d'échelle [Souadnia 1999] où le comportement anormal observé pour un treillis *régulier* de cylindres a été attribué à l'effet des zones stagnantes derrière les cylindres. Le point concernant l'identification des régions est abordé dans la partie 5.3.4 lors de l'étude des milieux aléatoires.

Les deux modes de transport (convection et diffusion) sont en compétition lors du remplissage des nodules. Le champ de vitesse est assez uniforme, donc les coefficients de dispersion à grande échelle associés à la région moins perméable sont en général beaucoup plus faible que ceux correspondants à la région "rapide". Par contre l'échange interfacial prédominant est responsable de l'étalement important observé sur les figures 4.18 et 4.19. Macroscopiquement, les inclusions jouent le rôle de zones de rétention du traceur, et provoquent les longues traînées généralement observées sur les courbes expérimentales d'élution.

Ces simulations offrent la possibilité de comprendre les processus physiques à l'échelle de Darcy provoquant le non-équilibre à grande échelle. Il faut alors rappeler que l'objectif initial est d'avoir des solutions de référence pour la validation du modèle à deux équations. Habituellement, les courbes d'élution (ou de percée) sont utilisées pour comparer des comportements macroscopiques, car ce sont les informations les plus précises et les plus simples à obtenir à l'issue d'une expérience de traçage miscible sur colonne ou sur site. Par contre, ce type de comparaison n'est pas le plus discriminant visuellement. Dans notre cas, les expériences sont réalisées numériquement, donc nous avons accès à toutes les informations nécessaires à une analyse plus précise. Ainsi, la connaissance des champs de concentration dans le milieu pour tout instant t , permet d'accéder aux concentrations à grande échelle $\{\langle c \rangle_\eta^\beta\}^\eta$ et $\{\langle c \rangle_\omega^\beta\}^\omega$ en appliquant un processus de prise de moyenne sur les champs solutions

$$\{\langle c \rangle_\eta^\beta\}^\eta = \frac{1}{V_\eta} \int_{V_\eta} \langle c \rangle^\beta dV = \frac{1}{\varphi_\eta n_x n_y} \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \langle c \rangle_\eta^\beta(i, j) \quad (4.31)$$

$$\{\langle c \rangle_\omega^\beta\}^\omega = \frac{1}{V_\omega} \int_{V_\omega} \langle c \rangle^\beta dV = \frac{1}{\varphi_\omega n_x n_y} \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \langle c \rangle_\omega^\beta(i, j) \quad (4.32)$$

Le volume de prise de moyenne est une cellule unitaire nodulaire (Fig. 4.1) se déplaçant sur l'ensemble milieu considéré (Fig. 4.14).

A l'issue de cette convolution spatiale, le problème de transport est uni-dimensionnel suivant la direction de l'écoulement car toutes les informations locales suivant les directions transversales sont moyennées.

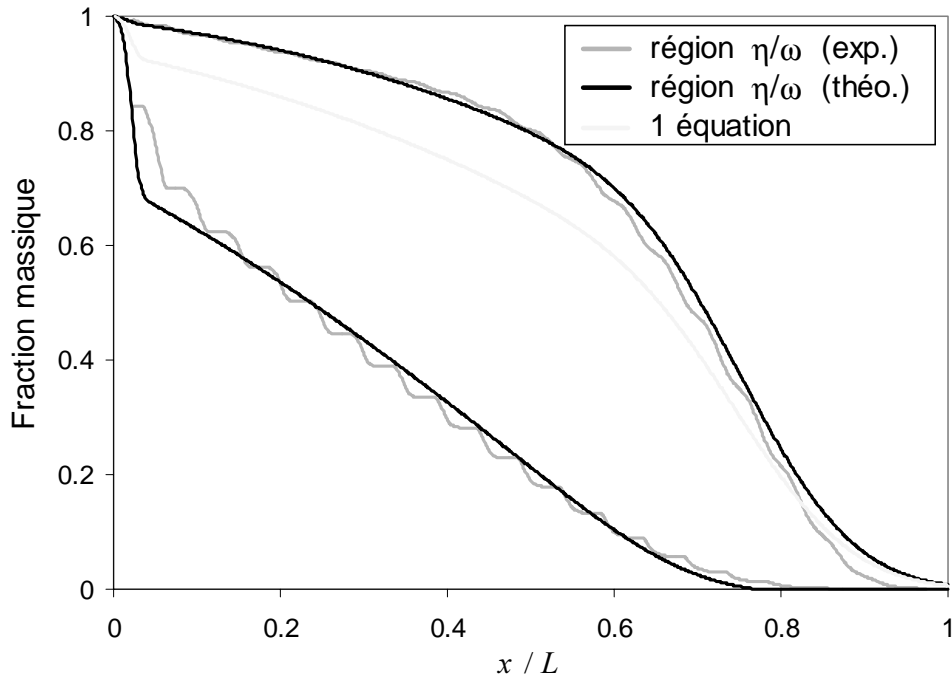


FIG. 4.18: Profils de concentration macroscopique dans le milieu nodulaire pour $t^* = 4.10^{-3}$

4.5 Comparaison entre les résultats expérimentaux et théoriques

Les figures 4.18 et 4.19 montrent les comparaisons entre les profils de concentration issus des expériences numériques et ceux déterminés par le modèle théorique. La courbe en pointillé est calculée par une moyenne des concentrations pondérée par les porosités (Eq. 2.103). Elle correspond à la solution que devrait donner un modèle à une équation pour représenter correctement le transport dans une structure hétérogène. Ce profil est caractéristique de la dispersion anormale (dispersion non-Fickienne). On comprend alors, qu'en présence de non-équilibre, l'utilisation d'une équation classique de convection-dispersion est une mauvaise approximation. Les approches à deux équations ont l'avantage de rajouter des degrés de liberté dans le modèle, offrant ainsi la possibilité de capturer la plupart des comportements anormaux.

On peut remarquer que les résultats numériques sont sujets à des fluctuations de longueur comparable à la taille de la cellule unitaire. Ce phénomène a été observé [Prat 1989, Prat 1992] dans plusieurs contextes équivalents. Il est possible de construire des fonctions de pondérations [Quintard et Whitaker 1994c] dans l'opérateur de prise de moyenne permettant de lisser ces courbes. Toutefois, ceci n'est pas appliqué ici, les courbes observées, malgré ces fluctuations, permettent de se représenter clairement ce que seraient les profils de concentration à grande échelle associés.

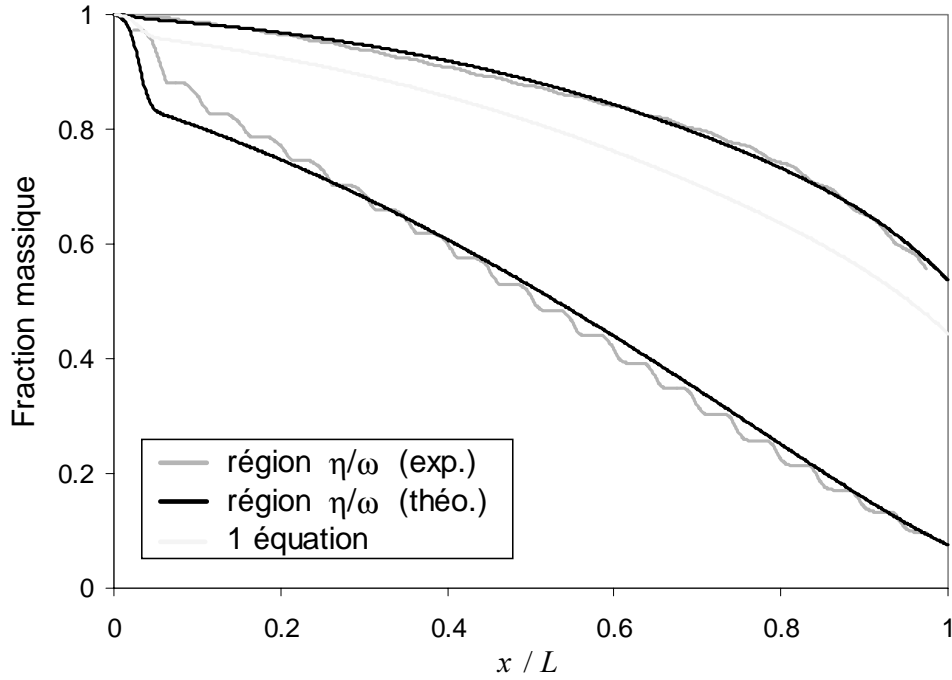


FIG. 4.19: Profils de concentration macroscopique dans le milieu nodulaire pour $t^* = 6.10^{-3}$

La corrélation entre les expériences numériques et les prédictions numériques est très bonne. Avec une complexité relativement faible, le modèle à deux équations est capable de représenter de manière très correcte le comportement macroscopique vis à vis du transport dans une structure à deux régions, et ceci sans paramètre ajustable. D'autres comparaisons, non présentées ici, ont été effectuées sur des arrangements nodulaires différents, et à chaque fois les confrontations avec les simulations numériques sont excellentes. La conclusion de cette étude est la validation du modèle à deux équations et des problèmes de fermeture associés.

4.6 Condition de non-équilibre local

Le principe de non-équilibre local est basé sur la nécessité de conserver les termes relatifs à la différence de concentration entre les deux régions $\left\{ \langle c \rangle_{\eta}^{\beta} \right\}^{\eta} - \left\{ \langle c \rangle_{\omega}^{\beta} \right\}^{\omega}$ dans le développement du modèle. Si ce terme de déséquilibre devient négligeable devant les variations de concentrations, alors l'approche à deux équations ne présente plus d'intérêt, et une modélisation à une équation suffit. Afin d'étudier l'importance et les conditions de

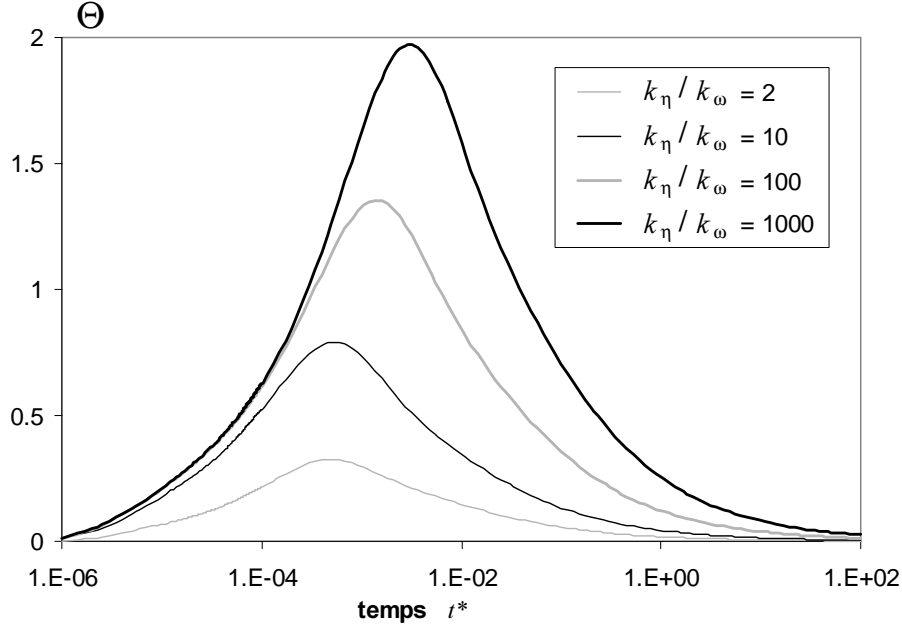


FIG. 4.20: Evolution du non-équilibre dans un milieu nodulaire pour différents contrastes de perméabilité

non-équilibre, un critère de non-équilibre est défini par

$$\Theta = \sqrt{\int_{x=0}^{x=\infty} \left(\left\{ \langle c \rangle_{\eta}^{\beta} \right\}^{\eta} - \left\{ \langle c \rangle_{\omega}^{\beta} \right\}^{\omega} \right)^2 dx} \quad (4.33)$$

Ce critère correspond à l'intégration du non-équilibre sur tout le domaine d'étude à un instant donné. La simulation du modèle à deux équations sur un milieu nodulaire quasi semi-infini (10^6 cellules unitaires) autorise le calcul du critère Θ pour des temps très courts à très longs, afin d'étudier le comportement asymptotique du non-équilibre. Plusieurs évolutions sont présentées sur la figure 4.20. Les rapports de perméabilité choisis sont supérieurs à 1 ($k_{\eta}/k_{\omega} > 1$) pour faire apparaître le non-équilibre, et inférieur à 1000 ($k_{\eta}/k_{\omega} < 1000$) car au delà de cette limite, nous avons montré dans la partie 4.2.4 que les caractéristiques hydrauliques n'avaient plus d'influence sur le comportement macroscopique. Les propriétés à l'échelle de Darcy du milieu sont

$$Pe = 1000 \quad \frac{\alpha_L}{l} = 0.1 \quad \frac{\alpha_T}{l} = 0.01 \quad \frac{d}{l} = 0.6 \quad \epsilon_{\eta} = \epsilon_{\omega} = 0.3 \quad (4.34)$$

Pour les temps courts, ce critère est contraint par les conditions initiales choisies (voir partie 3.2), imposant

$$\Theta(t^* = 0) = 0 \quad (4.35)$$

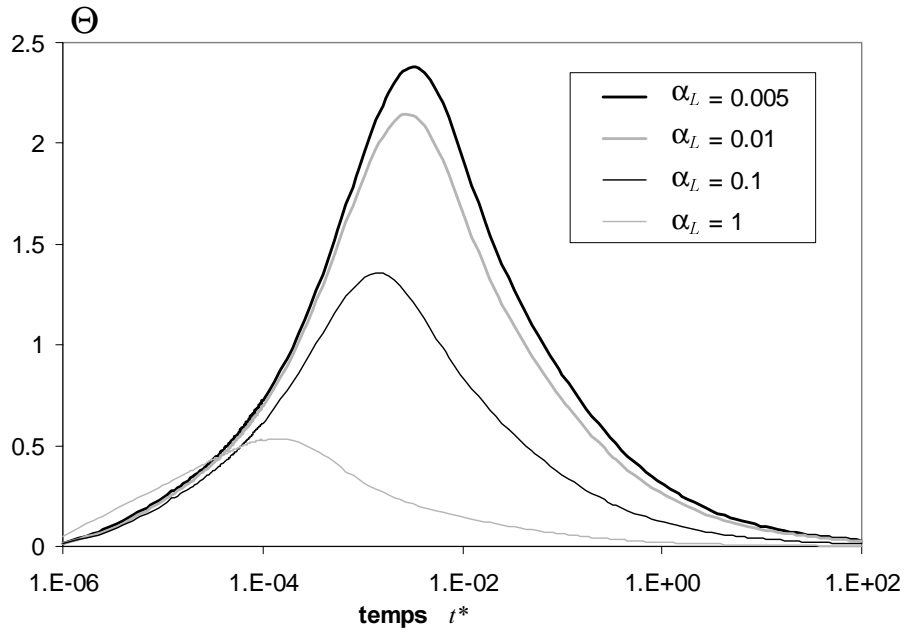


FIG. 4.21: Evolution du non-équilibre dans un milieu nodulaire pour différentes dispersivités locales

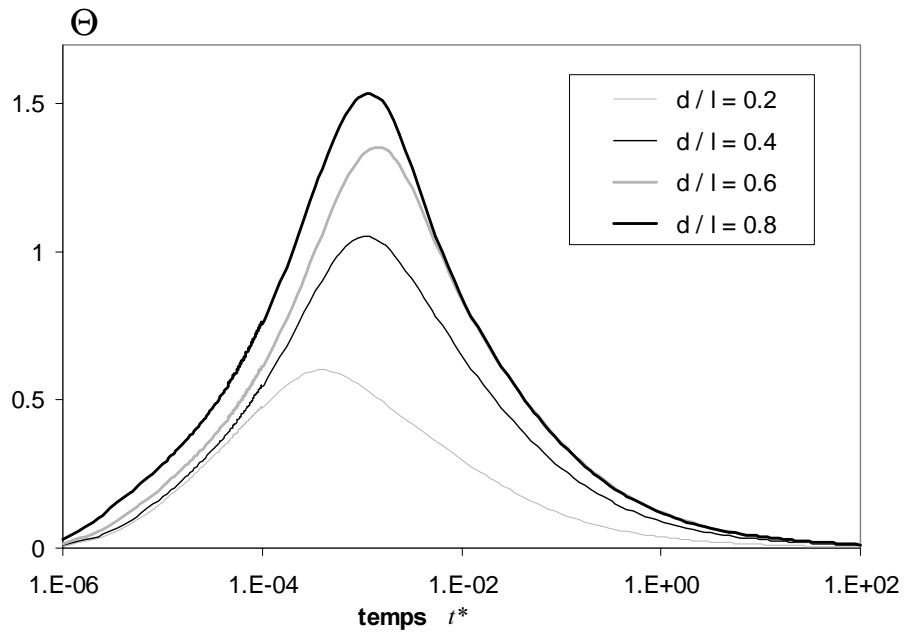


FIG. 4.22: Evolution du non-équilibre dans un milieu nodulaire pour différents diamètres de nodule

Dans chaque configuration, le milieu est suffisamment long pour que les conditions aux limites en $x = L$ n'aient aucune influence sur les résultats présentés (milieu semi-infini).

D'après la figure 4.20, le non-équilibre est d'autant plus important que le contraste de perméabilité est élevé. Ce sont en effet les différences entre les temps caractéristiques de chaque processus de transport (exacerbées quand le rapport de perméabilité augmente) qui provoquent les effets de retard observés sur les champs de concentration (Fig. 4.15 à 4.17). Inversement, lorsque le contraste tend vers 1, le milieu devient homogène et l'équilibre local est possible. Les résultats présentés figure 4.21 montrent les évolutions du non-équilibre pour différentes valeurs des dispersivités locales. Ces courbes viennent conforter les idées développées dans la partie 4.2.3. Une forte dispersion à l'échelle de Darcy homogénéise la concentration entre les deux zones, donc réduit le non-équilibre. Pour des valeurs très faibles ($\alpha_L/l = 0.005$), approchant le cas purement convectif, les effets du non-équilibre sont maximums. Les effets d'une modification de la taille de l'inclusion sont clairement perçus sur la figure 4.22. L'échange de masse entre les deux régions diminue lorsque le diamètre de l'hétérogénéité augmente (même si le coefficient d'échange α^* n'évolue pas dans le même sens sur la figure 4.12).

Pour les temps longs, les figures 4.20 à 4.22 montrent que le non-équilibre tend vers zéro. Quelle que soit la configuration locale, asymptotiquement, l'équilibre entre les deux régions est vérifié. Ces simulations numériques confirment les résultats théoriques obtenus dans la partie 2.5. Nous avons montré qu'au bout d'un temps de parcours suffisamment grand, les deux fronts de concentration avancent à la même vitesse, c'est à dire l'écart moyen δ entre les deux reste constant. Sur la figure 4.23 sont représentés les deux fronts de concentration dans chaque région à deux instants différents dans le régime asymptotique. Il est clair que les effets dispersifs toujours présents ont tendance à augmenter l'étalement de ces deux fronts, donc à réduire localement l'écart entre les concentrations dans chaque région. Le critère de non-équilibre (Eq. 4.33) est donc contraint par

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Theta(t^*) = 0 \quad (4.36)$$

Ainsi, pour les temps longs, le modèle à deux équations ne présente aucun intérêt et le comportement macroscopique peut être convenablement représenté par un modèle à une équation. Le fait d'obtenir asymptotiquement l'équilibre entre les deux régions inviterait donc à choisir un modèle à une équation à équilibre local (Eq. 2.97). Cette déduction est complètement fautive (voir partie 2.7 et figure 2.4) car dans un processus de transport, l'état d'un système à un instant donné, dépend de toute l'histoire du déplacement du traceur à travers la structure étudiée. Un fort déséquilibre dans la zone pré-asymptotique provoque une importante dispersion macroscopique, même si asymptotiquement l'équilibre massique est atteint. La prise en compte de l'hypothèse d'équilibre massique à grande échelle ne doit pas être la conséquence d'une observation à un instant précis, mais être le résultat d'une étude de la structure poreuse, des conditions d'écoulement, des fluides en présence, ... La résolution des problèmes de fermeture et le calcul des propriétés effectives à grande échelle peuvent être vue comme des outils d'analyse. La confrontation des deux coefficients

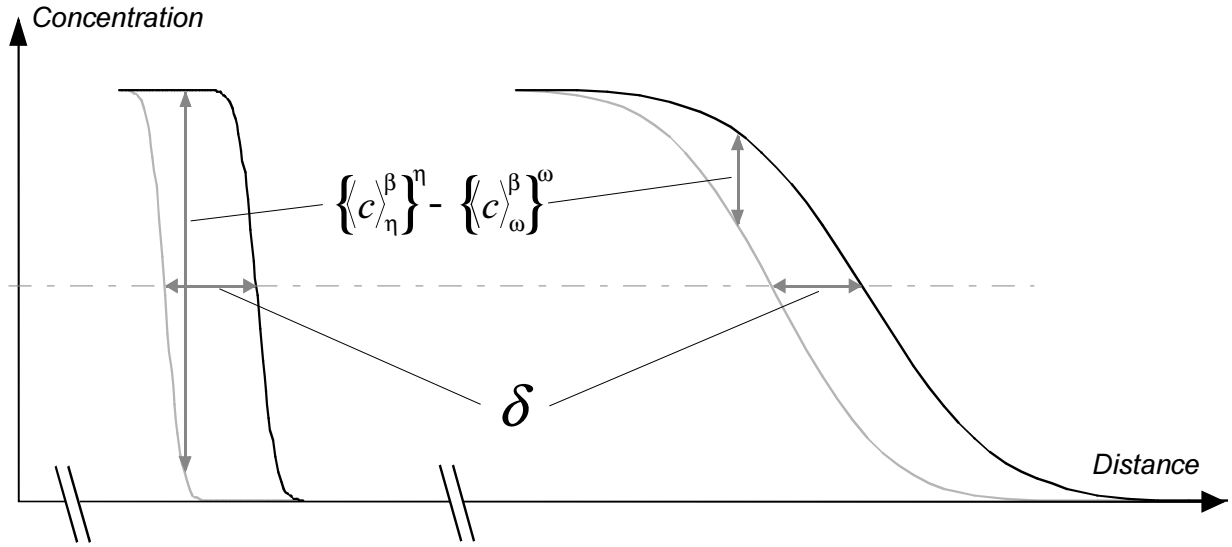


FIG. 4.23: Représentation du non-équilibre dans le domaine asymptotique

de dispersion à grande échelle correspondant aux modèles à une équation (coefficient de dispersion associé au modèle à non-équilibre $(\mathbf{D}^{**})_{xx}$ de l'équation 2.120, coefficient de dispersion avec équilibre local $(\mathbf{D}_{eq}^{**})_{xx}$ de l'équation 2.98) permet d'identifier clairement les situations où l'hypothèse d'équilibre local n'est plus validée.

Avec la configuration étudiée dans cette partie, le non-équilibre devient négligeable au bout de 10^3 à 10^5 cellules nodulaires. Il est peu probable, lors d'une simulation numérique macroscopique, d'obtenir des mailles comportant un si grand nombre d'hétérogénéités. De plus, les structures géologiques réelles mettent en évidence de nombreuses échelles imbriquées. Une zone assez grande pour contenir au moins 10^3 inclusions moins perméables (type cellule nodulaire) ayant des caractéristiques voisines a donc peu de chance d'exister. Par contre, avec des configurations différentes (nombre de Péclet plus faible, dispersivités plus élevées, ...), le régime asymptotique peut être atteint beaucoup plus rapidement. Le choix entre un modèle à deux équations et un modèle à une équation dépend donc de la distance à laquelle on veut la réponse, des caractéristiques du milieu considéré, de la précision demandée, ... Cette difficulté ne peut donc pas avoir de réponse à priori, mais doit faire l'objet d'une étude préliminaire dans chaque cas particulier.

Chapitre 4. Etude des milieux nodulaires

Chapitre 5

Application aux milieux aléatoires

5.1 Introduction

Les structures géologiques sont, en général, très hétérogènes et comportent des variabilités spatiales complexes sur plusieurs échelles d'observation. Cette variabilité des propriétés échappe, en principe, à une description précise. Compte tenu de cette incertitude, il est souvent approprié de caractériser les milieux poreux hétérogènes de façon statistique [Dagan 1989, Matheron 1967]. Dans cette conception, on suppose que le milieu considéré est une réalisation appartenant à un ensemble de Borel tel qu'une propriété, comme la perméabilité, obéisse à une certaine statistique. L'hypothèse d'ergodicité est prise en compte pour que l'étude d'un milieu donné ait quelque pertinence, ainsi, les propriétés statistiques sont déterminées en identifiant moyenne d'ensemble avec moyenne spatiale. Pour étudier les propriétés d'un écoulement dans un milieu poreux hétérogène, un milieu "synthétique" compatible avec les informations statistiques disponibles est généré. Afin d'obtenir des résultats statistiquement significatifs, il faut effectuer des simulations pour différentes réalisations et prendre ensuite la moyenne. Ces réalisations de structures géologiques sont en général construites sur des grilles hautes résolutions. Idéalement, cette résolution est liée directement à la taille des carottes sur lesquelles les propriétés locales sont mesurées. Nous devons donc faire appel à des techniques de changement d'échelle pour nous ramener à des tailles de mailles raisonnables pour des études numériques à l'échelle de l'aquifère.

Avec l'objectif d'utiliser le modèle à deux équations et les problèmes de fermeture associés en connection avec les outils géostatistiques de génération de structure géologique, cette partie est axée sur l'étude des milieux aléatoires. Dans un premier temps, des géométries stratifiées non-corrélées sont analysées. Puis, quelques applications aux milieux aléatoires bidimensionnels spatialement corrélés et des résultats préliminaires sont présentés dans une deuxième partie.

5.2 Milieu stratifié aléatoire

5.2.1 Présentation du problème

Dans cette partie, un milieu parfaitement stratifié est étudié, dans le cas particulier où l'écoulement est parallèle aux strates. Ce type de milieu est une idéalisation de la plus élémentaire des structures hétérogènes rencontrées dans la nature. L'intérêt porté à cette représentation dans la littérature est bien évidemment lié à la présence de stratifications géologiques dans les formations sédimentaires [Thorbjarnarson et Mackay 1997], bien que l'existence de milieux stratifiés sur de grandes distances horizontales soit peu probable. Cependant, même dans cette situation idéalisée, plusieurs aspects du problème de dispersion n'ont pas été complètement analysés, et ne sont toujours pas compris [Chin 1987, Communar 1998, Ippolito et al. 1994, Lake et Hirasaki 1981, Leroy et al. 1992, Pickens et Grisak 1981, Plumb et Whitaker 1988b]. Ce type d'étude permet une approche heuristique, car le milieu stratifié est suffisamment simple pour dissocier et identifier les différents processus physiques qui participent au transport. Par exemple, la partie convective n'intervient pas dans l'échange de masse entre strates, qui est uniquement influencé par la diffusion transversale. De plus, la simplicité géométrique autorise des développements analytiques relativement poussés, comme le calcul explicite des moments associés à la concentration macroscopique, même pour des profils de perméabilité complexes [Gelhar et al. 1979, Güven et al. 1984, Güven et Molz 1986, Matheron et de Marsily 1980, Marle et al. 1967, Valocchi 1989].

Dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique et du modèle à deux équations, l'étude d'un milieu bi-couche (voir partie 2.7) est étendue ici en considérant que chaque région initialement homogène est maintenant constituée d'un ensemble de strates de caractéristiques différentes. Cette approche a pour but d'introduire une dimension aléatoire dans notre étude déterministe, et de préparer la seconde partie, où le modèle à deux équations est utilisé en relation avec une définition statistique des hétérogénéités.

La cellule stratifiée considérée (Fig. 5.1) est constituée de n strates de différentes perméabilités. Chaque strate est d'épaisseur e , l'ensemble formant une structure de hauteur l . Le milieu est uniforme suivant la direction x , et périodique suivant la direction z de période les n strates. Le milieu n'est pas corrélé spatialement, c'est à dire, chaque strate est homogène et choisie indépendamment des strates voisines. Pour conserver des caractéristiques bi-modales et rester dans le champ d'application d'un modèle à deux équations, la génération des cellules se fait à partir d'une fonction de densité de probabilité de perméabilité bi-modale (Fig. 5.2). A l'aide de cette loi, une limite est fixée et deux régions distinctes peuvent être identifiées. On définit simplement en fonction de la valeur de la perméabilité, les strates appartenant à la région "rapide" (η) et celles appartenant à la région "lente" (ω). Nous négligeons dans cette partie les variations de porosité.

L'écoulement est parallèle aux strates, donc le vecteur vitesse local $\langle \mathbf{v} \rangle_i$ dans la strate i peut être représenté par sa seule composante suivant x , v_i . De même les vitesses moyennes

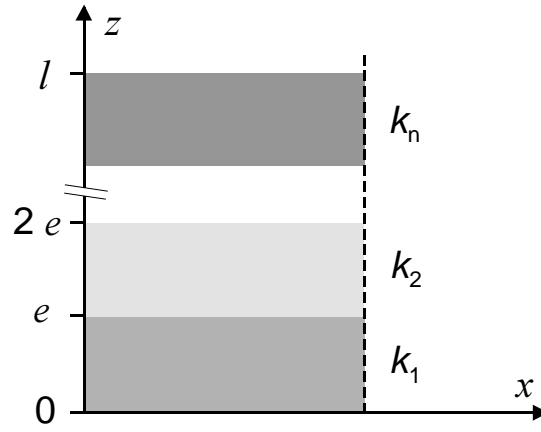


FIG. 5.1: Cellule stratifiée aléatoire

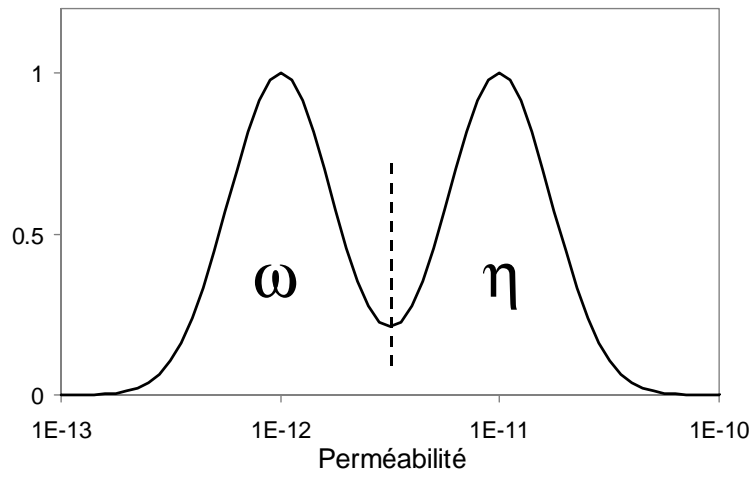


FIG. 5.2: Fonction de densité de probabilité de perméabilité bi-modale

à grande échelle dans les deux régions (η et ω) sont écrites

$$\left(\left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\eta \right\}^\eta \right)_x = v_\eta \quad \text{et} \quad \left(\left\{ \langle \mathbf{v} \rangle_\omega \right\}^\omega \right)_x = v_\omega \quad (5.1)$$

La formulation de Bear (Eq. 3.12) est conservée pour la définition de la dispersion locale.

5.2.2 Résolution des problèmes de fermeture

D'une manière analogue au milieu bi-couche (voir 3.1.5), les problèmes de fermeture sont ici aussi résolus analytiquement. Le problème à grande échelle est unidimensionnel (Eq. 2.58 et 2.59), les coefficients nécessaires sont donc

$$\left(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**} \right)_{xx} \quad \left(\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**} \right)_{xx} \quad \left(\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**} \right)_{xx} \quad \left(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**} \right)_{xx} \quad \alpha^* \quad (5.2)$$

$$\left(\mathbf{u}_{\eta\eta} \right)_x \quad \left(\mathbf{u}_{\omega\omega} \right)_x \quad \left(\mathbf{u}_{\eta\omega} \right)_x \quad \left(\mathbf{u}_{\omega\eta} \right)_x \quad \left(\mathbf{d}_\eta \right)_x \quad \left(\mathbf{d}_\omega \right)_x \quad (5.3)$$

Seules les composantes suivant x ($(\mathbf{b}_{\eta\eta})_x$, $(\mathbf{b}_{\omega\omega})_x$, $(\mathbf{b}_{\eta\omega})_x$, $(\mathbf{b}_{\omega\eta})_x$) des solutions des problèmes I et II sont à déterminer. Nous développerons, dans cette partie, la procédure de résolution du problème I (Ia et Ib), un traitement similaire pouvant être appliqué aux autres problèmes. Les variables de fermeture sont écrites sous la forme

$$b = \begin{cases} (\mathbf{b}_{I\eta})_x & \text{dans } \eta \\ (\mathbf{b}_{I\omega})_x & \text{dans } \omega \end{cases} \quad B = \begin{cases} B_{I\eta} & \text{dans } \eta \\ B_{I\omega} & \text{dans } \omega \end{cases} \quad (5.4)$$

A cause de l'invariance du milieu suivant la direction x , les dérivées partielles des variables par rapport à x sont nulles. Les inconnues b et B sont des fonctions de la seule variable z . En conséquence, les simplifications suivantes sont prises en compte

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_i b) = 0 \quad \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla b) = (\alpha_T v_i + D^{eff}) \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} \quad (5.5)$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_i B) = 0 \quad \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla B) = (\alpha_T v_i + D^{eff}) \frac{\partial^2 B}{\partial z^2} \quad (5.6)$$

Pour le problème Ia et Ib, les équations de conservation dans η (Eq. 3.2a et 3.3a) et ω (Eq. 3.2d et 3.3d) se résument à

$$(\alpha_T v_i + D^{eff}) \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} = \begin{cases} v_i - v_\eta & \text{dans } \eta \\ 0 & \text{dans } \omega \end{cases} \quad (5.7)$$

$$(\alpha_T v_i + D^{eff}) \frac{\partial^2 B}{\partial z^2} = \begin{cases} -\varphi_\eta^{-1} & \text{dans } \eta \\ \varphi_\omega^{-1} & \text{dans } \omega \end{cases} \quad (5.8)$$

Les expressions générales des variables de fermeture en tout point du milieu stratifié sont déduites directement de ces équations différentielles sous la forme

$$b = 1_\eta (v_i - v_\eta) \frac{z^2}{2(\alpha_T v_i + D^{eff})} + A_i z + B_i \quad (5.9)$$

$$B = \left(\frac{1_\omega}{\varphi_\omega} - \frac{1_\eta}{\varphi_\eta} \right) \frac{z^2}{2(\alpha_T v_i + D^{eff})} + C_i z + D_i \quad (5.10)$$

L'indicateur de phase 1_η (ou 1_ω) vaut 1 dans la région η (ou ω) et 0 dans la région ω (ou η). Les quatre constantes (A_i, B_i, C_i, D_i) sont différentes pour chaque strate, ce qui fait $4n$ inconnues pour ce problème. La prise en compte des conditions aux limites nous permet d'écrire $2n$ conditions de continuité à l'interface de chaque strate (Eq. 3.2b et 3.3b), $2(n-1)$ conditions de continuité du flux diffusif aux interfaces (Eq. 3.2c et 3.3c) et 2 conditions de moyenne nulle sur l'ensemble de la cellule (Eq. 3.2f et 3.3f). Il est donc possible de former un système linéaire de dimension $4n$ ayant pour solution les $4n$ constantes intervenant dans les expressions 5.9 et 5.10. L'équation 3.4 permet de construire la solution générale du problème I en écrivant

$$b_\eta = \begin{cases} (\mathbf{b}_{\eta\eta})_x & \text{dans } \eta \\ (\mathbf{b}_{\eta\omega})_x & \text{dans } \omega \end{cases} \quad c_{\omega\eta} = - \frac{\int_{z=0}^{z=l} b dz}{\int_{z=0}^{z=l} B dz} \quad (5.11)$$

$$b_\eta = \left[1_\eta(v_i - v_\eta) + c_{\omega\eta} \left(\frac{1_\omega}{\varphi_\omega} - \frac{1_\eta}{\varphi_\eta} \right) \right] \frac{z^2}{2(\alpha_T v_i + D^{eff})} + (A_i + c_{\omega\eta} C_i) z + (B_i + c_{\omega\eta} D_i) \quad (5.12)$$

Les variations de la variable de fermeture b_η dans l'épaisseur de la cellule sont représentées par des arcs de paraboles continus entre eux (Fig. 5.3). La convexité (ou la concavité) de chaque arc dépend de la région (η ou ω) à laquelle appartient la strate, et aussi du signe de la déviation de la vitesse ($v_i - v_\eta$), qui caractérise le fait que la strate est rapide ou non.

Ensuite, les propriétés effectives à grande échelle sont calculées à partir des expressions littérales de la variable de fermeture (Eq. 5.12)

$$(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^n 1_\eta \left[(\alpha_L v_i + D^{eff}) e - (v_i - v_\eta) \int_{z=(i-1)e}^{z=ie} b_\eta dz \right] \quad (5.13)$$

$$(\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**})_{xx} = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^n 1_\omega \left[-(v_i - v_\omega) \int_{z=(i-1)e}^{z=ie} b_\eta dy \right] \quad (5.14)$$

Finalement, la calcul de toutes les propriétés macroscopiques associées à une cellule stratifiée aléatoire se résume à la résolution de 3 systèmes linéaires de faible dimension. Par exemple, dans le cas d'une cellule composée de dix strates, l'ensemble des calculs ne dépasse pas le dixième de seconde.

Comme application du développement présenté ci-dessus, un premier résultat intéressant concerne l'évolution des coefficients de dispersion à grande échelle en fonction des dispersivités locales (Fig. 5.4). Nous rappelons que les dispersivités locales sont choisies telles que $\frac{\alpha_T}{\alpha_L} = 0.1$. Pour de faibles valeurs des dispersivités ($\alpha_L < 10^{-4}$), le tenseur de dispersion locale est isotrope et égal à $D^{eff} \mathbf{I}$, c'est pourquoi les coefficients macroscopiques sont constants. Lorsque les dispersivités croissent ($10^{-2} < \alpha_L < 1$), le flux diffusif (contrôlé par la dispersivité transversale) entre les strates augmente aussi. Ainsi, cet échange de masse entre les différentes strates d'une même région tend à homogénéiser la concentration, donc à réduire l'étalement du front de concentration. En conséquence, le coefficient de

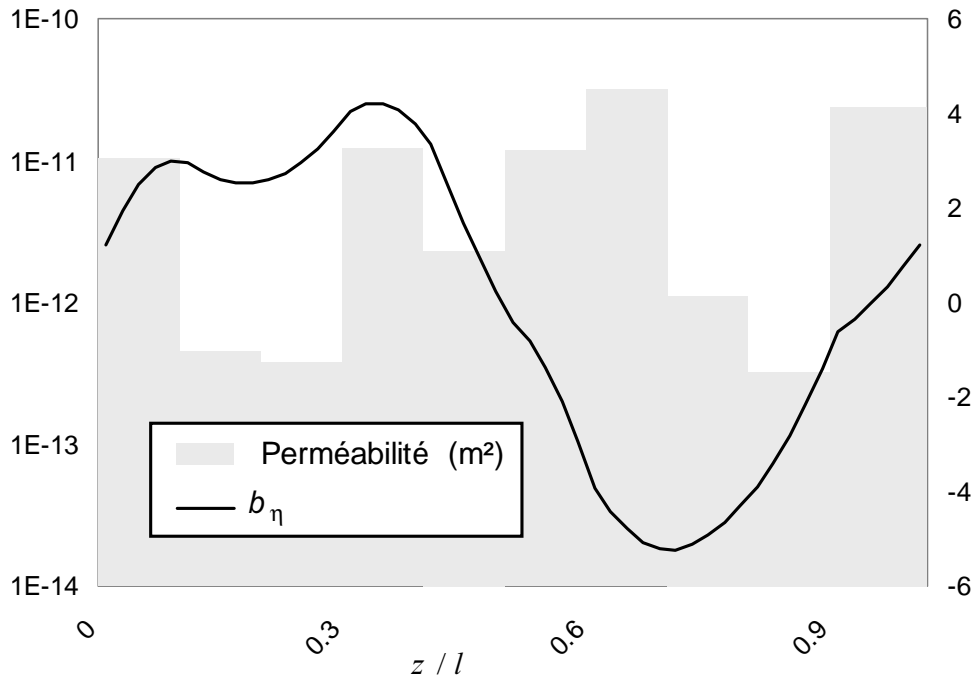


FIG. 5.3: Evolution de b_η dans l'épaisseur du milieu

dispersion longitudinal passe par un minimum pour $\alpha_L \simeq 0.1$. Pour les grandes valeurs de dispersivité, le terme de dispersion longitudinale locale ($\alpha_L v_i$) devient prépondérant, et la dispersion macroscopique croît linéairement. Dans cette situation, le front de concentration est complètement homogénéisé entre les différentes strates, mais très étalé.

Ce genre de comportement (passage par un minimum pour des valeurs intermédiaires des dispersivités) se retrouve souvent lorsque l'on veut attribuer un coefficient de dispersion unique à une région hétérogène ou si le champ de vitesse est très perturbé. Ces résultats confirment l'analyse faite dans la partie 4.2.3, où les mêmes tendances sont observées.

5.2.3 Influence de la topologie sur le comportement à grande échelle

Dans un processus de changement d'échelle, toutes les informations locales (géométrie, propriétés, ...) sont moyennées de façon à représenter par quelques coefficients un ensemble de mécanismes physiques complexes. Ces mécanismes sont en principe très sensibles à la topologie locale, c'est à dire à la disposition relative des zones "lentes" et "rapides" par rapport à la direction de l'écoulement. Par exemple, dans le cas d'un milieu stratifié bi-couche, l'orientation des strates par rapport à la vitesse moyenne du fluide peut modifier complètement le comportement macroscopique. Un écoulement parallèle aux strates met en évidence un non-équilibre important (voir partie 2.7), alors qu'avec un écoulement per-

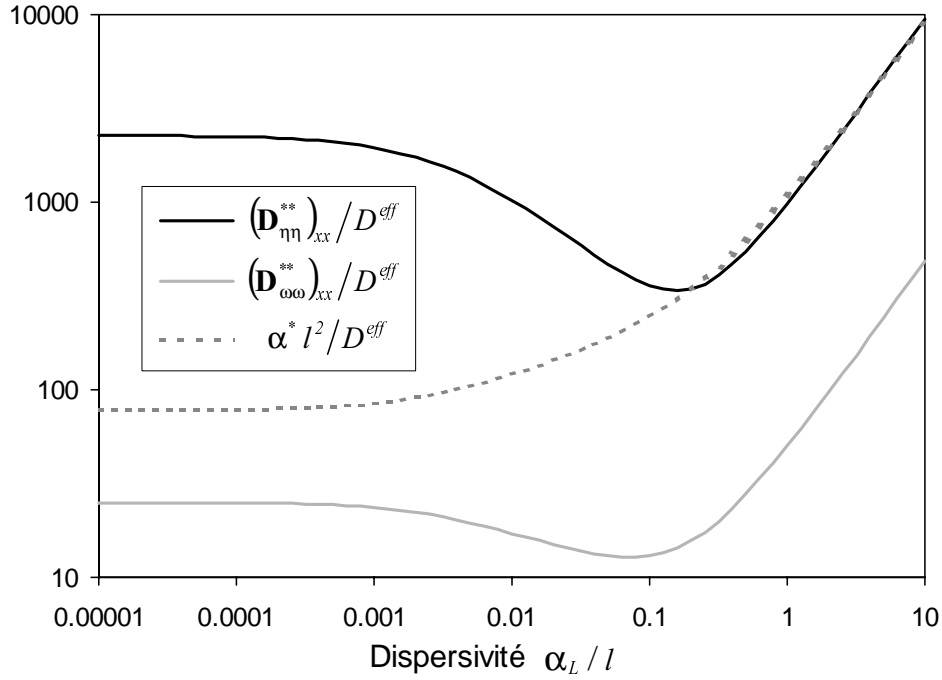


FIG. 5.4: Evolution des dispersions macroscopiques et du coefficient d'échange en fonction des dispersivités locales

pendiculaire aux strates, un comportement de milieu homogène est observé. Dans cette étude sur les milieux stratifiés aléatoires, il est intéressant de regarder l'influence d'une modification de la topologie locale sur le comportement à grande échelle.

Avec cet objectif, une cellule aléatoire a été générée sur laquelle des permutations séquentielles ont été effectuées. L'intérêt de cette démarche est de montrer qu'avec un même ensemble de strates (statistique identique lors de la génération), différents comportements macroscopiques peuvent être observés. Tous les arrangements possibles avec les dix strates de départ sont formés, puis sur chaque nouvelle cellule, toutes les propriétés effectives à grande échelle sont calculées. Ce genre d'approche n'est possible qu'avec une résolution analytique, donc rapide, des problèmes de fermeture.

La démarche décrite précédemment a été appliquée à trois cellules différentes. La prise en compte de tous les résultats permet de tracer la distribution de la dispersion longitudinale (Fig. 5.5) et du coefficient d'échange de masse (Fig. 5.6). La plage de variation totale du paramètre considéré est donnée en abscisse, et la fréquence d'apparition en ordonnée. Les résultats montrent que ces coefficients peuvent varier sur plus de deux décades sur simple modification de l'arrangement local. Des comportements macroscopiques très différents sont observés. Pour les trois cas étudiés ici, les distributions se ressemblent, leurs étalements sont voisins.

Une deuxième information importante est donnée par la connaissance de la géométrie

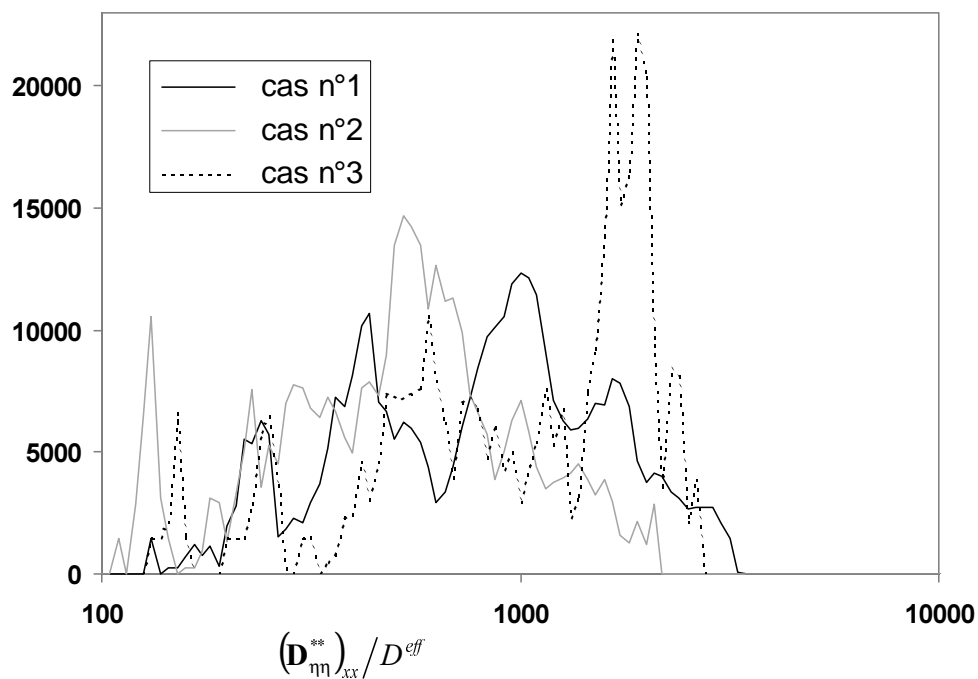


FIG. 5.5: Distribution de $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$

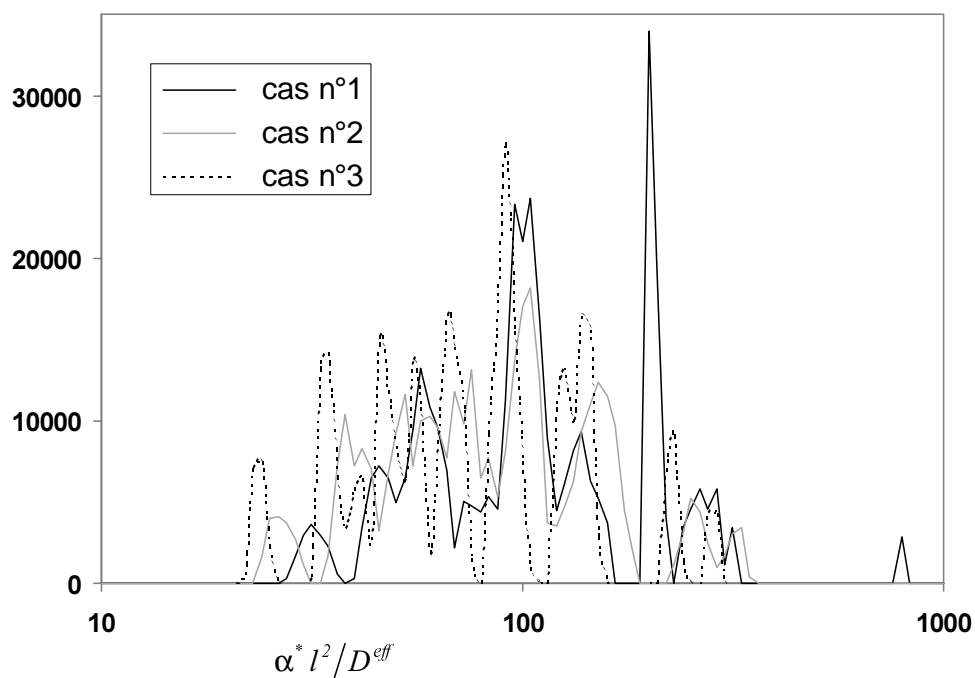


FIG. 5.6: Distribution de α^*

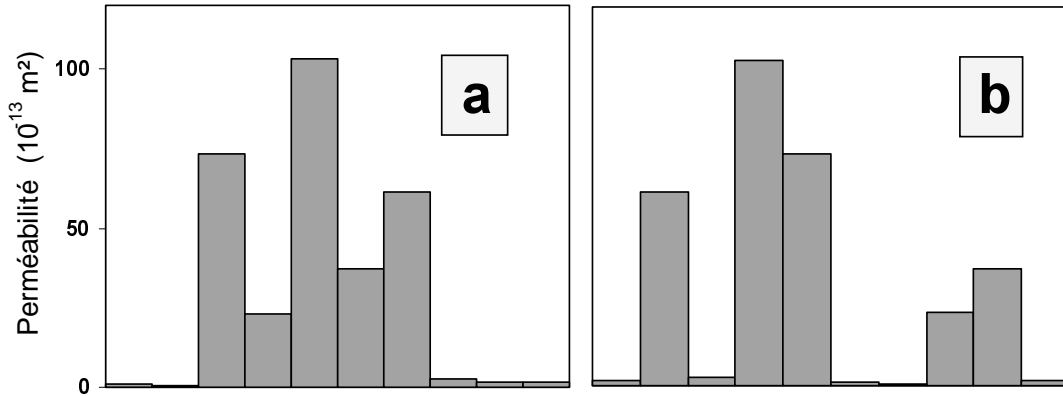


FIG. 5.7: Champs de perméabilité : (a) $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ minimum (b) $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ maximum

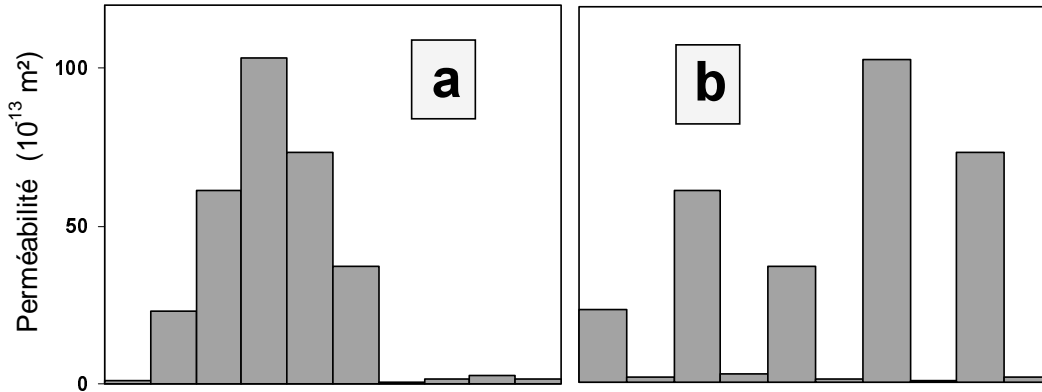


FIG. 5.8: Champs de perméabilité : (a) α^* minimum (b) α^* maximum

locale pour les valeurs extrêmes des coefficients étudiés. Ainsi pour les valeurs maximums et minimums de la dispersion longitudinale (Fig. 5.7) ou du coefficient de transfert de masse (Fig. 5.8), les champs de perméabilité du cas n°3 sont représentés. Les deux régions η et ω (forte et faible perméabilité) ne sont pas indiquées, mais se distinguent aisément.

La configuration **a** (Fig. 5.7) a tendance à homogénéiser le front de concentration dans la région rapide, donc à réduire le coefficient de dispersion longitudinale à grande échelle. Inversement, pour la cellule **b**, la région rapide pourrait être représentée par deux ou trois fronts distincts. Pour prendre en compte ce contraste à l'intérieur d'une même zone, la dispersion macroscopique doit être élevée.

Les deux configurations obtenues pour les valeurs limites du coefficient de transfert de masse sont classiques. Dans la situation **b** (Fig. 5.8), la surface d'échange entre les deux régions est beaucoup plus importante et la dimension caractéristique pour la diffusion transverse plus petite, donc le coefficient d'échange α^* est plus élevé. Cette observation est

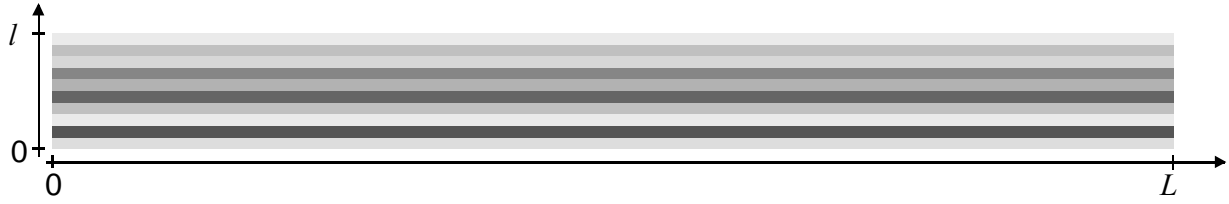


FIG. 5.9: Milieu stratifié aléatoire

vérifiée par le calcul analytique de la partie 2.7. Le coefficient d'échange pour un système bi-strate est proportionnel à $1/e^2$ (e étant l'épaisseur d'une strate). En approchant les deux configurations de la figure 5.8 par deux systèmes bi-couche, un rapport de 25 serait trouvé entre les valeurs maximum et minimum. Le rapport obtenu avec des cellules aléatoires est légèrement supérieur (≈ 30), car le flux diffusif inter-région est plus important pour la géométrie **b** (Fig. 5.8) où les perméabilités autour de l'interface $A_{\eta\omega}$ sont plus contrastées.

Afin d'illustrer les conclusions de cette partie, les comportements à grande échelle obtenus pour les quatre configurations étudiées ici sont présentés dans la partie suivante.

5.2.4 Comparaison avec les expériences numériques

De manière analogue aux résultats présentés pour le système nodulaire, des comparaisons entre des expériences numériques et les solutions obtenues avec le modèle théorique ont été réalisées. Les expériences numériques sont issues de simulations des équations de transport à l'échelle de Darcy sur un maillage fin effectuées avec les codes industriels MODFLOW et MT3D [Zheng 1994]. Les caractéristiques adimensionnées du milieu stratifié utilisé (Fig 5.9) et des conditions d'écoulement sont données dans le tableau 5.1.

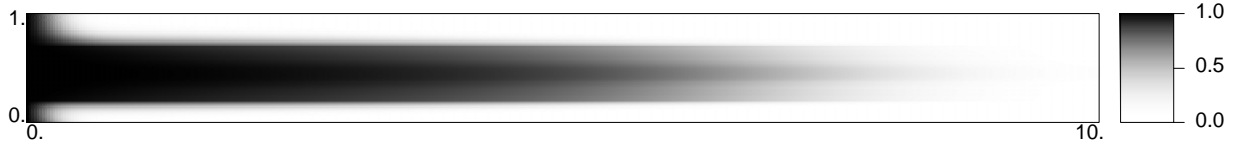
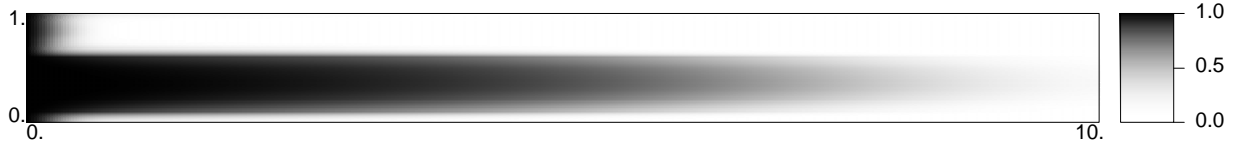
Géométrie	$\frac{e}{l} = 0.1$	$\frac{L}{l} = 10$
Dispersivités	$\frac{\alpha_L}{l} = 0.1$	$\frac{\alpha_T}{l} = 0.01$
Écoulement	$Pe = \frac{\{\langle \mathbf{v} \rangle\} l}{D^{eff}} = 1000$	

Tableau 5.1 : Caractéristiques du milieu stratifié aléatoire

Le temps adimensionné est défini par

$$t^* = t \frac{D^{eff}}{l^2} \quad (5.15)$$

Du point de vue numérique, un maillage 100×1000 a été choisi pour réaliser les simulations locales de façon à représenter correctement le processus de dispersion transversale (10 mailles par strates) et à conserver un pas d'espace égal dans les deux directions ($\delta x = \delta y$). L'obtention du champ de concentration à $t^* = 10^{-3}$ nécessite une vingtaine d'heures de

FIG. 5.10: Champ de concentration pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ minimum)FIG. 5.11: Champ de concentration pour $t^* = 10^{-3}$. (α^* minimum)

temps CPU. D'un autre coté, avec le modèle à deux équations, 100 mailles suivant la direction x ont permis de faire les simulations macroscopiques, le temps de calcul n'excédant pas deux secondes.

Les quatre configurations géométriques mises en évidence dans la partie précédente sont reprises ici afin de discuter les capacités du modèle à deux équations dans des conditions très différentes. Les deux premières situations étudiées correspondent au cas où $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ est minimum (Fig. 5.10) et au cas où α^* est minimum (Fig. 5.11). Pour les deux tests, les comportements macroscopiques sont similaires, une seule comparaison des champs de concentration à grande échelle est donc présentée sur la figure 5.12. Les deux simulations à l'échelle de Darcy (Fig. 5.10 et 5.11) montrent bien que les deux régions plus regroupées interfèrent peu entre elles. La surface d'échange est minimale dans ce cas. Ces deux agencements locaux correspondent assez bien aux capacités du modèle à deux équations, les hétérogénéités de chaque zone sont capturées bien que de la dispersion anormale soit présente dans chaque région. On peut voir sur la figure 5.12 que le coefficient d'échange est sous-estimé par les problèmes de fermeture. Une remarque similaire a été formulée pour le milieu stratifié bi-couche (voir partie 2.7).

Les simulations locales correspondant aux deux dernières configurations sont représentées sur la figure 5.13 lorsque $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ est maximum et sur la figure 5.14 pour α^* maximum. Dans les deux cas l'échange de masse est beaucoup plus important car les épaisseurs moyennes de chaque région sont plus faibles. Sur la figure 5.13, la région rapide (région η) est partagée en trois zones distinctes, avec des vitesses moyennes de déplacement de front sensiblement différentes. Dès lors, pour représenter l'étalement observé à l'intérieur de cette région, le coefficient de dispersion longitudinale doit être très élevé. En réalité, plusieurs équations sont nécessaires pour mieux représenter ces trois fronts, c'est un cas typique où l'on voit apparaître de la dispersion anormale à l'intérieur d'une même région. La configuration où α^* est maximum (Fig. 5.14) exhibe quasiment un comportement de milieu homogène, les strates appartenant aux deux régions η et ω se distinguent à peine.

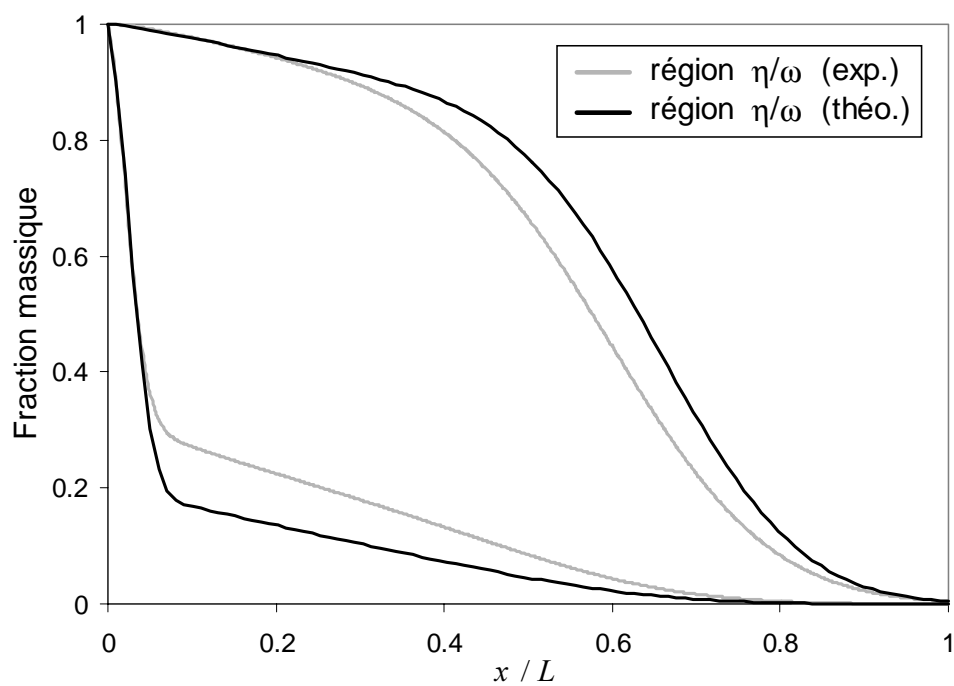


FIG. 5.12: Profils de concentration macroscopique pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ minimum)



FIG. 5.13: Champ de concentration pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ maximum)

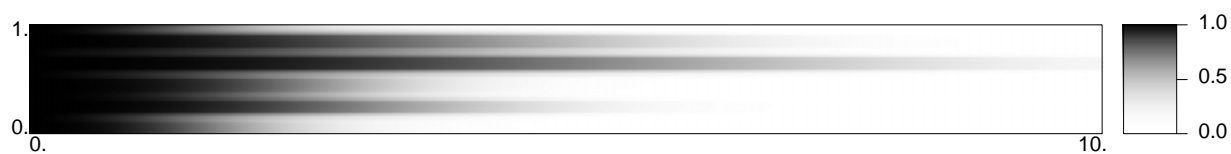


FIG. 5.14: Champ de concentration pour $t^* = 10^{-3}$. (α^* maximum)

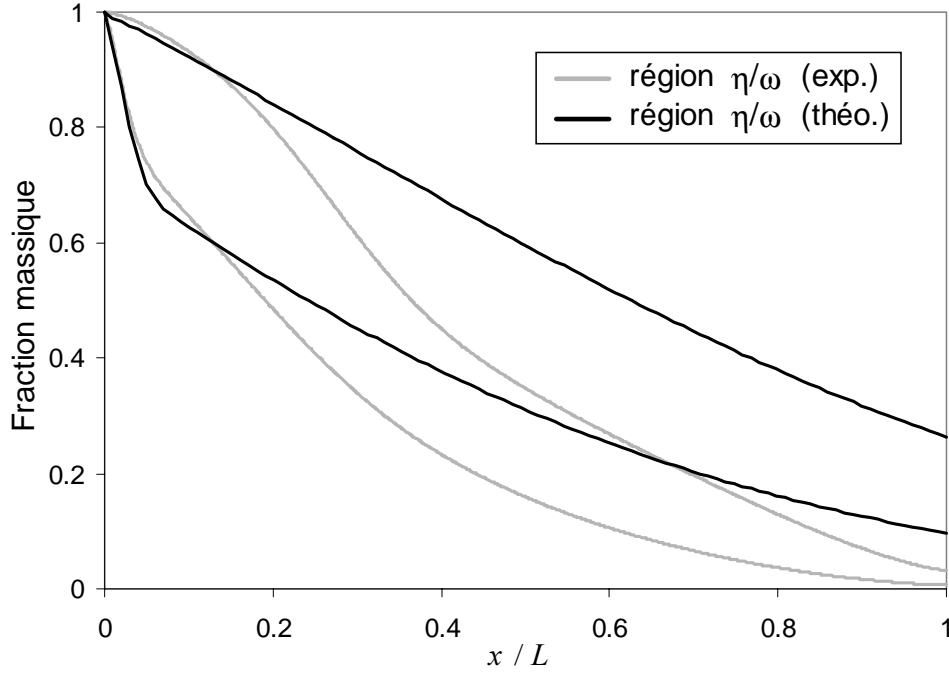
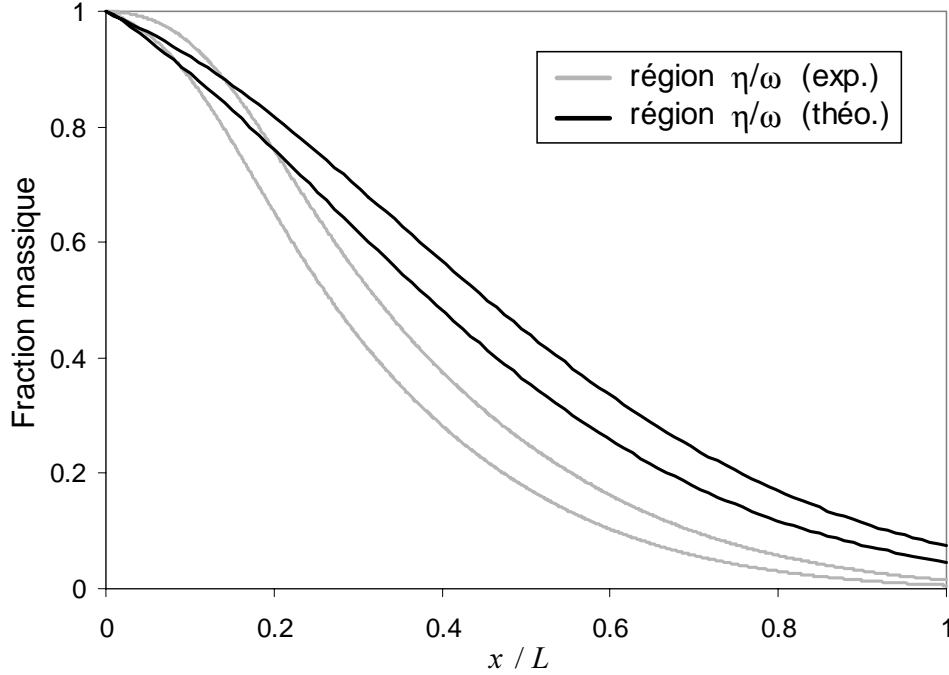


FIG. 5.15: Profils de concentration macroscopique pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ maximum)

Dans ces deux situations, les comparaisons entre les expériences numériques et les prédictions théoriques réalisées avec le modèle à deux équations (Fig. 5.15 et 5.16) ne sont pas satisfaisantes. On peut remarquer que la conservation de la masse n'est pas vérifiée avec les simulations du modèle à deux équations, les champs de concentration macroscopiques théoriques semblent progresser à des vitesses plus élevées. Cette déviation n'est pas une erreur intrinsèque au modèle à deux équations, mais est une erreur numérique. En effet, pour ces deux cas, les coefficients de dispersion longitudinale des deux régions sont élevés. La simulation numérique d'une équation de convection-dispersion avec une forte dispersion pose généralement des problèmes, car les conditions aux limites prises ici

$$\text{en } x = 0 : \quad \left\{ \langle c \rangle_{\eta}^{\beta} \right\}^{\eta} = \left\{ \langle c \rangle_{\omega}^{\beta} \right\}^{\omega} = 1 \quad (5.16)$$

perturbent le flux massique entrant en l'augmentant artificiellement. En conséquent, la quantité de traceur pénétrant à l'entrée du milieu n'est pas la même lors de la simulation à l'échelle locale et de la simulation à grande échelle. Il faudrait comparer les solutions obtenues loin des limites du milieu, pour pouvoir conclure objectivement sur la qualité de la prédiction théorique. Les propriétés effectives à grande échelle fournies par les problèmes de fermeture peuvent correspondre parfaitement au système étudié, même si les résultats présentés ici ne valident pas cette possibilité.


 FIG. 5.16: Profils de concentration macroscopique pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ maximum)

5.2.5 Modèle à n équations

Le comportement macroscopique de certaines configurations s'avère être mal représenté par une approche à deux équations, une alternative possible est d'adopter une approche multi-équations. En reprenant des idées développées dans le cas d'un modèle à trois équations destiné aux problèmes d'ébullition en milieu poreux [Petit et al. 1996], la méthode de prise de moyenne est employée pour aboutir à une modélisation à n équations, n étant le nombre de strates de la cellule unitaire. On comprend bien que ce développement n'est possible pratiquement que dans le cas stratifié, où les interfaces sont clairement identifiées a priori. Seules les grandes étapes de la méthode de prise de moyenne exposées dans la partie 2.2 ne sont données ici, par contre, les simplifications apportées par la géométrie stratifiée sont détaillées.

Le problème à l'échelle locale s'écrit

$$\epsilon_i \frac{\partial \langle c \rangle_i^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_i \langle c \rangle_i^\beta) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta) \quad \text{dans la strate } i \quad (5.17)$$

$$\langle c \rangle_i^\beta = \langle c \rangle_{i+1}^\beta \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.18)$$

$$\mathbf{n}_{i+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta) = \mathbf{n}_{i+\frac{1}{2}} \cdot (\mathbf{D}_{i+1}^* \cdot \nabla \langle c \rangle_{i+1}^\beta) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.19)$$

Dans cette partie, la moyenne régionale intrinsèque est exprimée par

$$\{\langle \psi \rangle_i\}^i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \langle \psi \rangle_i dV \quad (5.20)$$

La géométrie particulière étudiée ici permet de déterminer à priori le champ de vitesse. En utilisant la formulation de la dispersion locale donnée au chapitre 3 (Eq. 3.12), nous avons

$$\langle \mathbf{v} \rangle_i = \begin{bmatrix} v_i \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{D}_i^* = \begin{bmatrix} \alpha_L v_i + D_i^{eff} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T v_i + D_i^{eff} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T v_i + D_i^{eff} \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

Dès lors, ces quantités locales sont constantes dans chaque maille. Avec la définition de la moyenne régionale intrinsèque choisie (Eq. 5.20), les déviations spatiales de la vitesse et du tenseur de dispersion sont nulles. Il est donc possible d'écrire

$$\{\langle \mathbf{v} \rangle_i\}^i = \langle \mathbf{v} \rangle_i \quad \{\mathbf{D}_i^*\}^i = \mathbf{D}_i^* \quad (5.22)$$

Ensuite, la déviation spatiale de la concentration dans la strate i est donnée par

$$\langle c \rangle_i^\beta = \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i + \tilde{c}_i \quad \text{avec} \quad \{\tilde{c}_i\}^i = 0 \quad (5.23)$$

Dans le cas d'un milieu stratifié périodique, la cellule unitaire minimale permettant de représenter complètement le système est une cellule unidimensionnelle de direction z . Les conditions de périodicité suivant les trois directions de l'espace appliquées à la déviation de la concentration imposent

$$\frac{\partial}{\partial x} \tilde{c}_i = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial y} \tilde{c}_i = 0 \quad \text{donc} \quad \nabla \tilde{c}_i = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} \tilde{c}_i \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

$$\tilde{c}_{i+n} = \tilde{c}_i \quad (5.25)$$

Les théorèmes de prise de moyenne (Eq. 2.11, 2.12 et 2.13) prennent une forme particulière dans le cas d'une géométrie stratifiée. En effet, les interfaces entre régions sont clairement identifiées, la strate i est contact avec la strate $i + 1$ à l'interface $A_{i+\frac{1}{2}}$ et avec la strate $i - 1$ à l'interface $A_{i-\frac{1}{2}}$. De plus les normales à l'interface sont obligatoirement

$$\mathbf{n}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n}_{i-\frac{1}{2}} = -\mathbf{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

De même, les intégrales volumiques sont en fait des intégrales linéaires, et les aires interfaciales sont concentrées en des points. L'applications des théorèmes de prise de moyenne

aux équations locales de transport (Eq. 5.17) aboutit à

$$\begin{aligned}
 & \epsilon_i \varphi_i \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\varphi_i \langle \mathbf{v} \rangle_i \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right] + \frac{\mathbf{k}}{l} \cdot \left(\left[\langle \mathbf{v} \rangle_i \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\langle \mathbf{v} \rangle_i \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i-\frac{1}{2}} \right) \\
 &= \nabla \cdot \left[\mathbf{D}_i^* \cdot \left(\varphi_i \nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i + \varphi_i \{ \nabla \tilde{c}_i \}^i \right) \right] + \frac{\mathbf{k}}{l} \cdot \left(\left[\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i-\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

Dans cette équation, trois simplifications peuvent être effectuées. Tout d'abord, il faut remarquer que le produit scalaire $\mathbf{k} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle_i$ est nul, car l'écoulement est parallèle aux strates. Ce qui s'écrit

$$\mathbf{k} \cdot \left[\langle \mathbf{v} \rangle_i \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i+\frac{1}{2}} = 0 \quad \mathbf{k} \cdot \left[\langle \mathbf{v} \rangle_i \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i-\frac{1}{2}} = 0 \tag{5.28}$$

Cette remarque traduit le fait que le flux massique convectif interfacial est nul, donc l'échange entre deux strates voisines est uniquement la conséquence des effets diffusifs transversaux. Ensuite, en utilisant la décomposition spatiale de $\langle c \rangle_i^\beta$ (Eq. 5.23), il est possible d'écrire

$$\left(\left[\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \langle c \rangle_i^\beta \right]_{i-\frac{1}{2}} \right) \tag{5.29}$$

$$= \mathbf{D}_i^* \cdot \left(\left[\nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i + \nabla \tilde{c}_i \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i + \nabla \tilde{c}_i \right]_{i-\frac{1}{2}} \right) \tag{5.30}$$

$$= \mathbf{D}_i^* \cdot \left(\left[\nabla \tilde{c}_i \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\nabla \tilde{c}_i \right]_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{car} \quad \left[\nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right]_{i+\frac{1}{2}} = \left[\nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right]_{i-\frac{1}{2}} \tag{5.31}$$

Finalement, le terme macroscopique $\{ \nabla \tilde{c}_i \}^i$ est invariant dans la direction x , en conséquent

$$\nabla \cdot \{ \nabla \tilde{c}_i \}^i = 0 \tag{5.32}$$

Dans ces conditions l'équation à grande échelle (Eq. 5.27) devient

$$\begin{aligned}
 & \epsilon_i \varphi_i \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\varphi_i \langle \mathbf{v} \rangle_i \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right] \\
 &= \nabla \cdot \left[\varphi_i \mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right] + \frac{\mathbf{k}}{l} \cdot \mathbf{D}_i^* \cdot \left(\left[\nabla \tilde{c}_i \right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\nabla \tilde{c}_i \right]_{i-\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

Tous les termes de cette équation sont des quantités à grande échelle ou des déviations spatiales. Seuls les vitesses et les tenseurs de dispersion sont pris indifféremment à l'échelle locale ou à grande échelle, étant données les relations 5.22. A ce stade, il faut rappeler que pour un système multi-strates, nous obtenons n équations à grande échelle similaires

à l'équation 5.33. Pour évaluer les termes contenant les déviations spatiales des concentrations, il faut développer les problèmes de fermeture. L'équation différentielle contrôlant \tilde{c}_i est obtenue en soustrayant l'équation à grande échelle (Eq. 5.33) à l'équation locale dans la strate correspondante (Eq. 5.17), ce qui donne

$$\epsilon_i \frac{\partial \tilde{c}_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\langle \mathbf{v} \rangle_i \tilde{c}_i] = \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \tilde{c}_i) - \frac{\varphi_i^{-1}}{l} \mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_i^* \cdot \left([\nabla \tilde{c}_i]_{i+\frac{1}{2}} - [\nabla \tilde{c}_i]_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.34)$$

Des hypothèses similaires à celles faites lors du développement du modèle à deux équations (voir partie 2.3) sont prises en compte. On considère que le problème est quasi-stationnaire au sens évoqué au chapitre précédent si la contrainte suivante est vérifiée

$$\frac{D_i^* t}{e^2 \epsilon_i} \gg 1 \quad (5.35)$$

Ce qui revient à négliger les variations temporelles de la déviation de la concentration dans le problème local. Les décompositions spatiales sont aussi introduites dans les conditions aux limites à l'interface entre les strates. Le problème local gouvernant les déviations \tilde{c}_i est alors donné par

$$\nabla \cdot [\langle \mathbf{v} \rangle_i \tilde{c}_i] = \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \tilde{c}_i) - \frac{\varphi_i^{-1}}{l} \mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_i^* \cdot \left([\nabla \tilde{c}_i]_{i+\frac{1}{2}} - [\nabla \tilde{c}_i]_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.36a)$$

$$\tilde{c}_i = \tilde{c}_{i+1} + \left(\left\{ \langle c \rangle_{i+1}^\beta \right\}^{i+1} - \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.36b)$$

$$\mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \tilde{c}_i) + \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) \quad (5.36c)$$

$$= \mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_{i+1}^* \cdot \nabla \tilde{c}_{i+1}) + \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{D}_{i+1}^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_{i+1}^\beta \right\}^{i+1} \right) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.36d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \tilde{c}_i(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_i(\mathbf{r}) \quad (5.36e)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \langle \tilde{c}_i \rangle^i = 0 \quad (5.36f)$$

A ce stade, de nouvelles simplifications sont possibles en considérant les particularités d'une géométrie stratifiée (vecteur vitesse perpendiculaire à la direction z , tenseur de dispersion diagonal) et la condition de dérivée nulle de la déviation (Eq. 5.24). On obtient

$$\nabla \cdot [\langle \mathbf{v} \rangle_i \tilde{c}_i] = 0 \quad (5.37)$$

$$\mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) = 0 \quad (5.38)$$

Le problème local devient finalement

$$\text{Dans la strate } i \quad 0 = \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \tilde{c}_i) - \frac{\varphi_i^{-1}}{l} \mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_i^* \cdot \left([\nabla \tilde{c}_i]_{i+\frac{1}{2}} - [\nabla \tilde{c}_i]_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.39a)$$

$$\tilde{c}_i = \tilde{c}_{i+1} + \left(\left\{ \langle c \rangle_{i+1}^\beta \right\}^{i+1} - \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.39b)$$

$$\mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \tilde{c}_i) = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_{i+1}^* \cdot \nabla \tilde{c}_{i+1}) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.39c)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \left\{ \tilde{c}_i \right\}^i = 0 \quad (5.39d)$$

$$\text{Périodicité} \quad \tilde{c}_{i+n} = \tilde{c}_i \quad (5.39e)$$

Le problème complet est obtenu en écrivant ces cinq équations pour les n strates de la cellule unitaire. Les termes sources provoquant les variations des déviations sont les différences des concentrations macroscopiques. La méthode de prise de moyenne propose de chercher une solution au problème sous la forme

$$\tilde{c}_i = \sum_{j=1}^n r_{ij} \left(\left\{ \langle c \rangle_{j+1}^\beta \right\}^{j+1} - \left\{ \langle c \rangle_j^\beta \right\}^j \right) \quad (5.40)$$

dans laquelle r_{ij} sont les variables de fermeture. En remplaçant dans le problème local (Eq. 5.39a à 5.39e) la déviation \tilde{c}_i par son expression donnée ci-dessus, nous obtenons un ensemble de n problèmes de fermeture correspondant chacun à un terme source. Tous les problèmes sont similaires.

Problème n° j

Problème relatif au terme source $\left(\left\{ \langle c \rangle_{j+1}^\beta \right\}^{j+1} - \left\{ \langle c \rangle_j^\beta \right\}^j \right)$

$$\text{Dans la strate } i \quad 0 = \nabla \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla r_{ij}) - \varphi_i^{-1} \alpha_{ij}^* \quad (5.41a)$$

$$r_{ij} = r_{i+1,j} + \delta_{ij} \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.41b)$$

$$\mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_i^* \cdot \nabla r_{ij}) = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{D}_{i+1}^* \cdot \nabla r_{i+1,j}) \quad \text{en } i + \frac{1}{2} \quad (5.41c)$$

$$\text{Moyenne nulle} \quad \left\{ r_{ij} \right\}^i = 0 \quad (5.41d)$$

$$\text{Périodicité} \quad r_{i+n,j} = r_{ij} \quad (5.41e)$$

avec les relations

$$\alpha_{ij}^* = \frac{\mathbf{k}}{l} \cdot \mathbf{D}_i^* \cdot \left([\nabla r_{ij}]_{i+\frac{1}{2}} - [\nabla r_{ij}]_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.42)$$

Ici encore, le problème de fermeture n° j complet comprend n fois les six équations précédentes, ce qui permet d'identifier n^2 coefficients d'échange massique α_{ij}^* . La dimension du problème est réduite en remarquant que

$$\sum_{i=1}^n \alpha_{ij}^* = 0 \quad (5.43)$$

Pour obtenir une forme fermée des équations à grande échelle (Eq. 5.33), il suffit de substituer les déviations \tilde{c}_i par leur représentation (Eq. 5.40), ce qui donne

$$\begin{aligned} \epsilon_i \varphi_i \frac{\partial \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\varphi_i \langle \mathbf{v} \rangle_i \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) \\ = \nabla \cdot \left(\varphi_i \mathbf{D}_i^* \cdot \nabla \left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i \right) + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij}^* \left(\left\{ \langle c \rangle_{j+1}^\beta \right\}^{j+1} - \left\{ \langle c \rangle_j^\beta \right\}^j \right) \end{aligned} \quad (5.44)$$

Dans la situation particulière d'un système bi-strate ($n = 2$), on retrouve exactement le modèle à deux équations et les expressions des propriétés à grande échelle données dans la partie 2.7 (Eq. 2.121 à 2.124). Les 4 coefficients d'échange α_{ij}^* sont alors égaux en valeur absolue, de façon à n'avoir qu'un seul terme de transfert de masse. Ce modèle à n équations fait apparaître dans chaque strate un terme de convection, un terme de dispersion longitudinale et un terme d'échange multiple. Pour une strate, le terme d'échange fait intervenir les différences de concentration macroscopique entre toutes les strates voisines. Le couplage entre les différentes régions est relativement complexe, car la concentration dans chaque strate est influencée par les évolutions des concentrations dans toutes les autres strates, mêmes les plus éloignées. Par la suite, l'étude d'un cas précis fait ressortir l'importance relative de chaque partie du couplage.

Encore une fois, une approche semi-analytique est employée pour résoudre les n problèmes de fermeture. La procédure est équivalente à celle développée dans la partie 5.2.2, les solutions sont des arcs de paraboles principalement contrôlés par la diffusion transversale. Finalement, n^2 coefficients d'échange sont déterminés ainsi.

Afin d'illustrer la démarche présentée ici, la configuration \mathbf{b} de la figure 5.7 est étudiée avec le modèle à n équations. Nous avons vu dans la partie précédente que le comportement macroscopique relatif à cette cellule unitaire n'est pas correctement représenté par le modèle à deux équations, l'objectif étant ici de proposer un outil plus performant pour les cas limites. Pour cette cellule unitaire, l'ensemble des coefficients d'échange adimensionnés $\alpha_{ij}^* l^2 / D^{eff}$ sont présentés dans le tableau suivant.

$i \backslash j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	65	-3.5	1.7	-0.36	0.05	-0.09	0.28	-4.0	20	-45
2	-53	71	-34	7.1	-0.22	0.08	-0.12	1.4	-6.7	15
3	4.0	-100	102	-22	0.63	-0.17	0.08	-0.12	0.51	-1.1
4	-1.6	39	-85	458	-13	3.5	-1.6	0.52	-0.23	0.45
5	0.30	-7.0	15	-456	56	-15	6.7	-2.1	0.16	-0.11
6	-0.05	0.25	-0.54	16	-55	36	-16	4.9	-0.30	0.09
7	0.12	-0.08	0.17	-4.9	17	-35	47	-14	0.87	-0.25
8	-1.4	0.10	-0.10	1.2	-6.8	14	-47	171	-10	2.9
9	7.7	-0.42	0.21	-0.54	1.7	-3.5	12	-169	58	-16
10	-20	1.1	-0.53	0.15	-0.13	0.26	-0.86	12	-62	44

Les coefficients d'échange les plus importants apparaissent sur les deux diagonales écrites en gras. De ce fait, dans le terme d'échange complet, on s'aperçoit que pour une strate j , les différences de concentrations

$$\left(\left\{ \langle c \rangle_{j+1}^\beta \right\}^{j+1} - \left\{ \langle c \rangle_j^\beta \right\}^j \right) \quad \text{et} \quad \left(\left\{ \langle c \rangle_j^\beta \right\}^j - \left\{ \langle c \rangle_{j-1}^\beta \right\}^{j-1} \right) \quad (5.45)$$

ont une influence prédominante. Ceci montre que le couplage est maximum avec les deux strates voisines (strate $j + 1$ et strate $j - 1$), ce qui semble logique. Par contre, le couplage avec les autres strates, même si il n'y a pas de surface d'échange en commun, n'est pas à négliger.

Les méthodes numériques utilisées pour simuler le transport à grande échelle à l'aide du modèle à n équations sont analogues à celles décrites dans la partie 3.2. Le schéma numérique est globalement d'ordre deux, et donne des solutions de bonne qualité. Les dix profils de concentration obtenus sont moyennés par section dans les régions η et ω , de façon à retrouver un comportement à double-perméabilité. La comparaison entre les expériences numériques et les prédictions théoriques est présentée sur la figure 5.17. Ces courbes doivent être comparées à celles de la figure 5.15, pour voir les améliorations apportées par le modèle à n équations. La prédiction théorique se confond parfaitement avec les expériences numériques. L'avantage du modèle à n équations est de fournir la bonne représentation macroscopique correspondant à n'importe quelle géométrie stratifiée, et pas seulement à celles présentant un caractère bi-modale. Dans l'exemple suivant, une distribution uniforme de perméabilité a été choisie pour générer la cellule unitaire. Les caractéristiques dispersives locales sont prises assez faibles de façon à réduire l'échange massique entre les strates. Ainsi, sur la comparaison des concentrations macroscopiques (Fig. 5.18), on observe des profils en escalier impossible à représenter par des équations simples de convection-dispersion. D'une manière assez simple et rapide, une approche à n équations permet d'accéder directement aux champs de concentration macroscopiques qui s'établissent dans une formation stratifiée quelconque. Dans les applications présentées ici, la porosité et l'épaisseur des strates sont constantes pour simplifier l'étude, mais le modèle à n équations autorise des porosités et des épaisseurs différentes dans chaque strate.

Une étude plus approfondie est nécessaire pour identifier les configurations où l'approche à deux équations n'est pas satisfaisante et pour en connaître les causes. En règle générale, on remarque que lorsque la dispersion transversale devient faible, l'échange massique caractérisée par le coefficient α^* diminue aussi, et les coefficients macroscopiques de dispersion longitudinale deviennent importants. En extrapolant l'expression du coefficient de dispersion associé au modèle à une équation à non-équilibre donné dans la partie 2.8 (Eq. 2.131), on s'aperçoit que la dispersion macroscopique tend vers l'infini quand le coefficient de dispersion transversale locale tend vers zéro. Dans ce genre de situation, les fronts de concentration dans chaque strate sont plus raides, et il est difficile de représenter un tel comportement (front en escalier) autrement que par un modèle à n équations.

Il serait intéressant de discuter les capacités du modèle à deux équations en fonction de la loi statistique bi-modale choisie (Fig. 5.2). Lorsque les variances sont nulles, la distribution se résume à deux Dirac, et on retrouve un milieu stratifié bi-couche. Par contre,

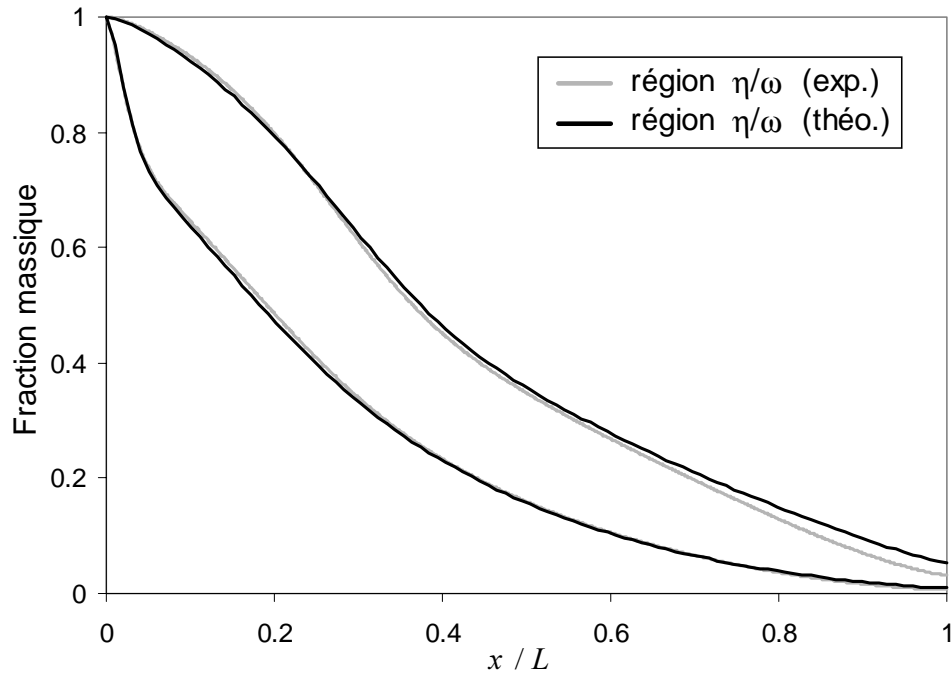


FIG. 5.17: Profils de concentration macroscopique pour $t^* = 10^{-3}$. ($(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ maximum)

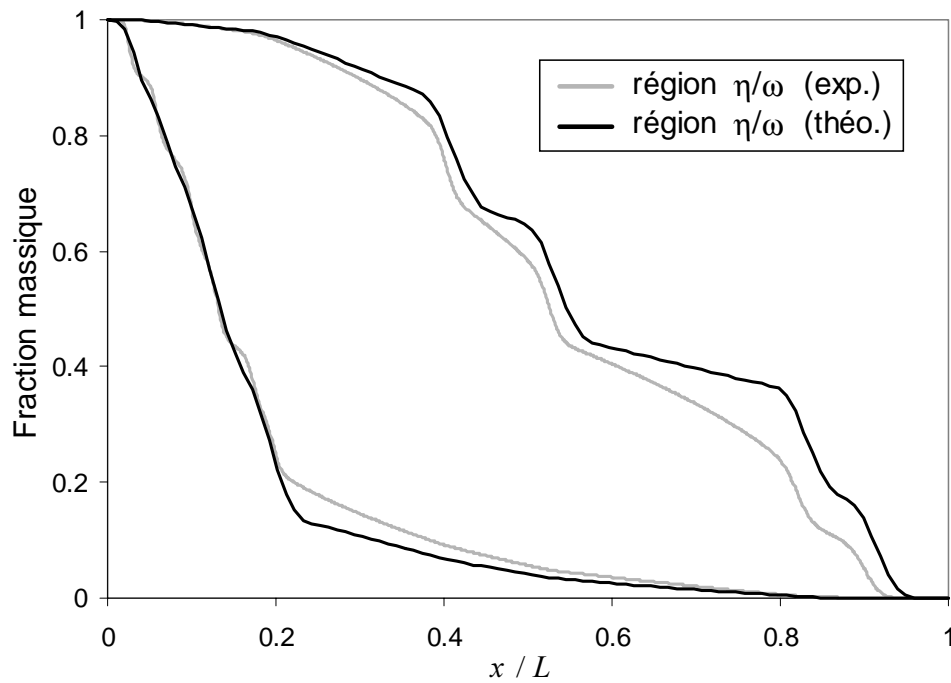


FIG. 5.18: Profils de concentration macroscopique dans un milieu stratifié quelconque

si les deux courbes de Gauss deviennent très étalées, jusqu'à se confondre, est-ce qu'une approche à deux équations est toujours justifiée ? De plus, les problèmes de fermeture ont tendance à sous-estimer l'échange massique entre les deux régions. Par approche inverse sur la solution expérimentale, la détermination du "bon" coefficient d'échange est possible. Aussi, l'étude de la différence entre les deux approches dans chaque situation rencontrée serait enrichissante. Pour mener à bien ce type d'analyse, il est nécessaire d'effectuer des comparaisons pour un grand nombre de réalisations. Chaque comparaison demande une simulation numérique des équations locales très coûteuse en temps de calcul. Le modèle à n équations semble être une bonne alternative pour réaliser cette étude exhaustive, car il fournit le bon comportement macroscopique tout en étant très léger numériquement.

5.3 Milieu aléatoire bi-dimensionnel

5.3.1 Génération des cellules unitaires aléatoires

L'objectif de cette partie est de travailler sur des cellules bi-dimensionnelles présentant un arrangement spatial (fonction de corrélation quelconque) et suivant une loi de distribution de perméabilité bi-modale. Il est difficile de générer des cellules aléatoires ayant des caractéristiques un peu originales. La plupart des outils disponibles actuellement sont basés sur une distribution normale des propriétés associée à une fonction d'autocorrélation exponentielle. La bibliothèque de programmes GSLib propose des procédures qui transforment un milieu quelconque dans le but de se rapprocher d'une fonction de densité de probabilité objectif, tout en conservant l'arrangement spatial.

La première étape consiste à générer une cellule aléatoire à l'aide d'un simulateur Gaussien (programme **sgsim**). Un modèle Gaussien est choisi pour le semi-variogramme sous la forme

$$\gamma(h) = c \left[1 - \exp \left(-\frac{(3h)^2}{a} \right) \right] \quad (5.46)$$

où a est une longueur définissant la portée de la corrélation imposée, appelée longueur de corrélation l_c . Le paramètre c permet de prendre en compte le "nugget effect". Cet effet a pour but de relâcher les contraintes imposées par le semi-variogramme aux très courtes distances, afin d'ajouter un peu de bruit lors de la génération. Lorsque $c = 1$, ce qui correspond au modèle Gaussien normal, les champs de perméabilité sont extrêmement lissés. Dans la suite, le paramètre c est pris égal à 0.97. Une réalisation est présentée sur la figure 5.19. Les caractéristiques statistiques mesurées sur cette cellule sont données dans la figure 5.20. Les deux semi-variogrammes, calculés dans les deux directions de l'espace, mettent en évidence approximativement la même longueur de corrélation ($l_c/l \simeq 0.2$). La fonction de densité de probabilité suit effectivement une loi de Gauss.

La seconde étape consiste à transformer cette réalisation, dans l'objectif d'obtenir une fonction de densité de probabilité bi-modale (programme **trans**). Cette modification des propriétés est basée sur une technique appelée "Set Transformation Method" [Holiday n.d.],

permettant de converger vers n'importe quelle probabilité et corrélation spatiale à partir d'un ensemble de valeurs aléatoires. Le résultat de cette transformation est présenté sur la figure 5.21, et les caractéristiques statistiques associées sur la figure 5.22. L'arrangement spatial n'est pas modifié, les semi-variogrammes mesurés sur les deux cartes de perméabilité (avant et après transformation) sont identiques. Par contre, la distribution de perméabilité est décrite maintenant par une loi bi-modale. On peut remarquer que l'image correspondant au champ de perméabilité final (Fig. 5.21) est plus contrastée, et que les transitions entre les zones très perméables et les zones moins perméables sont plus franches.

Les exemples de cellules générées peuvent être interprétés comme les mailles d'une simulation numérique à l'échelle de l'aquifère. La définition des caractéristiques physiques est faite à une échelle beaucoup plus petite que celle correspondant à la taille des mailles. Le dimensionnement du maillage est fixé par rapport à la puissance de calcul disponible et à un temps de simulation acceptable. Dans cette situation, il est nécessaire de remplacer la maille hétérogène par un milieu homogène équivalent, c'est à dire réaliser un changement d'échelle. Nous allons donc analyser dans quelles mesures, il est possible d'affecter des propriétés effectives à grande échelle à une cellule hétérogène aléatoire à l'aide des problèmes de fermeture. Dans ce cas-là, est-ce qu'une représentation macroscopique avec le modèle à deux équations est correcte ?

5.3.2 Influence de la taille de la cellule de prise de moyenne

Dans le contexte d'un problème de changement d'échelle en utilisant la méthode de prise de moyenne, plusieurs questions viennent à l'esprit.

- Quelle taille de volume de prise de moyenne faut-il choisir pour que les propriétés à grande échelle calculées soient significatives ? Autrement dit, combien de longueurs de corrélation doit contenir la cellule unitaire pour être représentative des hétérogénéités du système.
- Pour une taille de volume de prise de moyenne (ou de maille de simulation) choisie ou imposée par des contraintes économiques, quelle est la qualité de la propriété moyenne calculée à partir d'une réalisation ? Quel est le nombre de réalisations nécessaire pour avoir des résultats significatifs ?

Dans cette partie, nous allons apporter des éléments de réponse à ces questions. La méthode de prise de moyenne demande que la taille du volume de prise de moyenne soit très "grand" devant la longueur de corrélation du milieu étudié. Dans la pratique, il n'est pas toujours possible de satisfaire cette condition. L'objectif est de discuter la qualité des résultats obtenus pour différentes tailles de volume de prise de moyenne. Notons que nous n'utiliserons pas une approche statistique proprement dite. Pour chaque réalisation générée par la procédure décrite dans la partie précédente, les propriétés macroscopiques sont calculées. Des informations statistiques sont recueillies sur un ensemble de réalisations.

Sept types de cellule unitaire sont générés, le rapport l/l_c variant de 1 (Fig. 5.23 à gauche) à 20 (Fig. 5.23 à droite). Par étape, le nombre de longueur de corrélation contenu

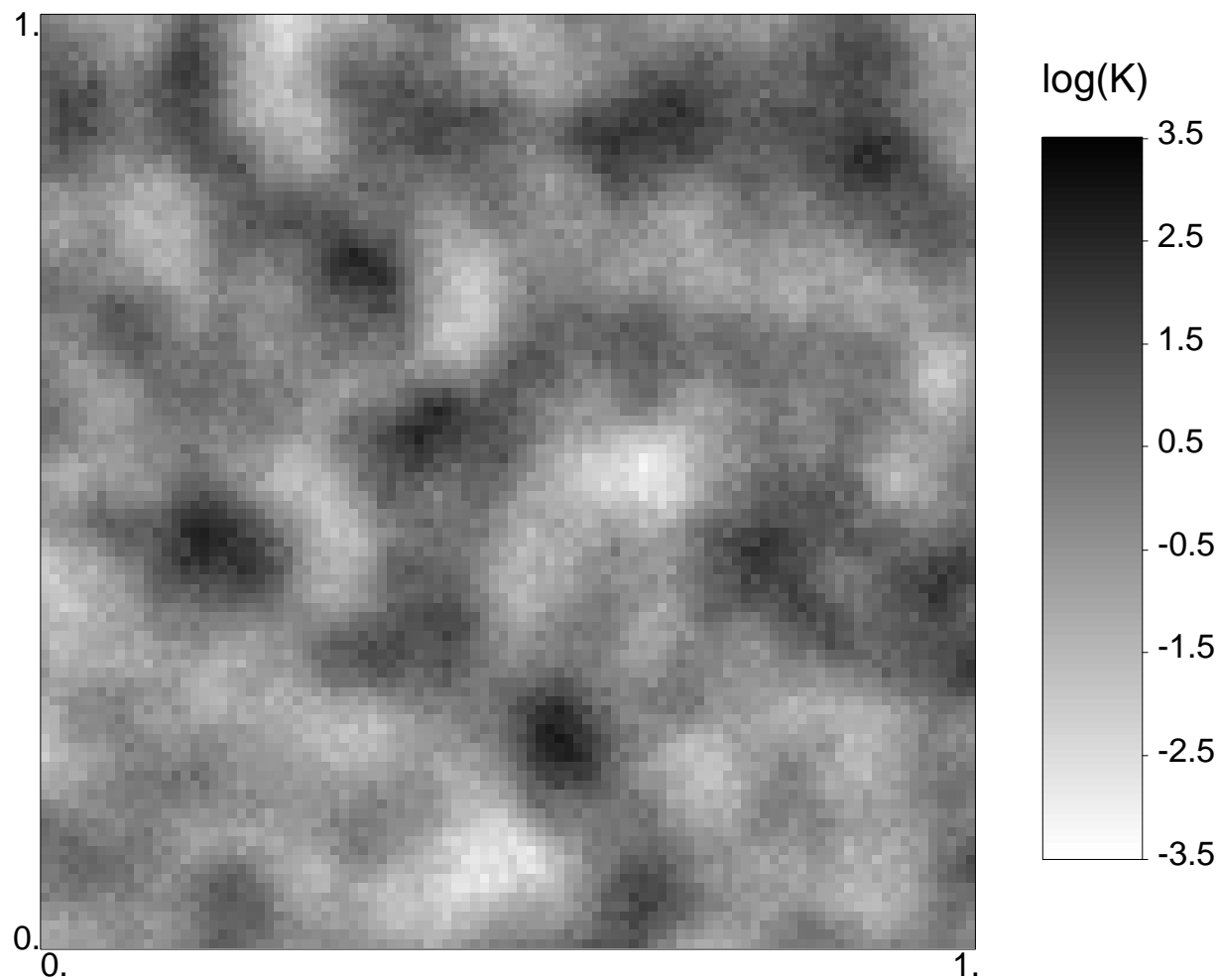


FIG. 5.19: Champ de perméabilité de la cellule unitaire (distribution Gaussienne)

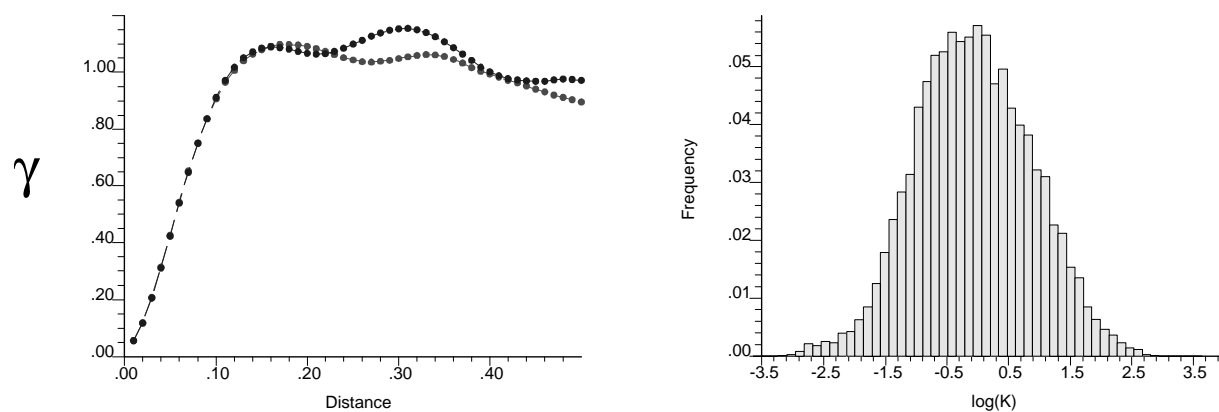


FIG. 5.20: Caractéristiques statistiques (semi-variogramme et distribution de perméabilité)

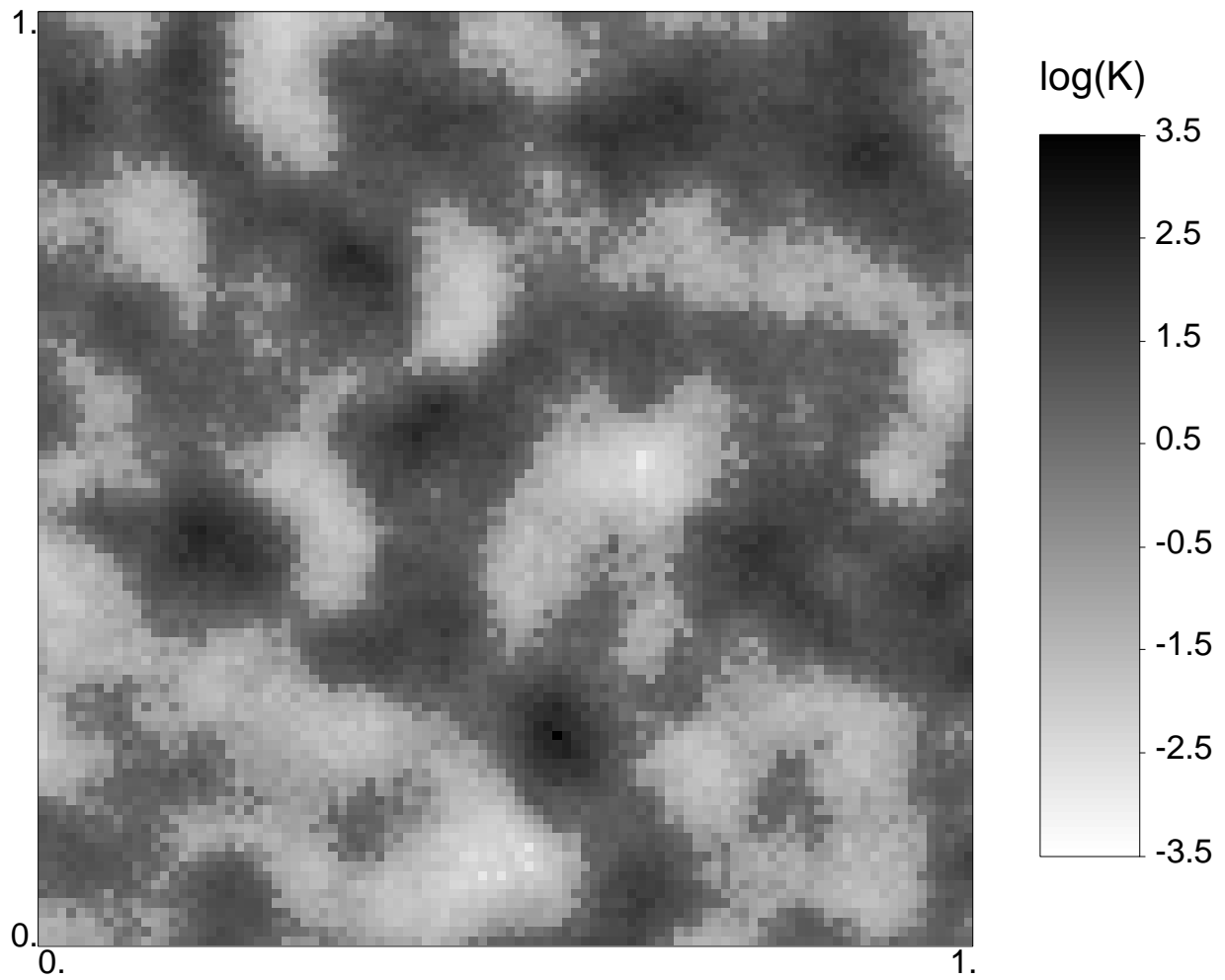


FIG. 5.21: Champ de perméabilité de la cellule unitaire (distribution bi-modale)

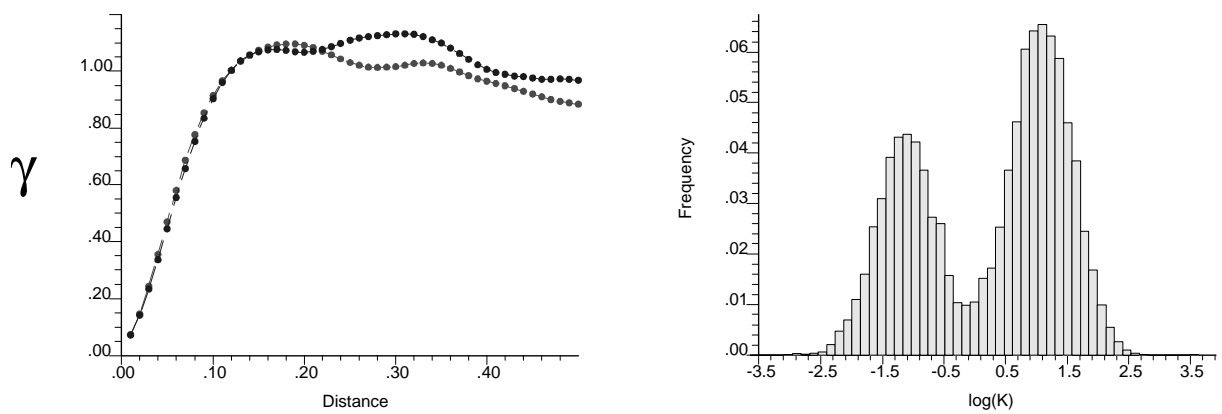


FIG. 5.22: Caractéristiques statistiques (semi-variogramme et distribution de perméabilité)

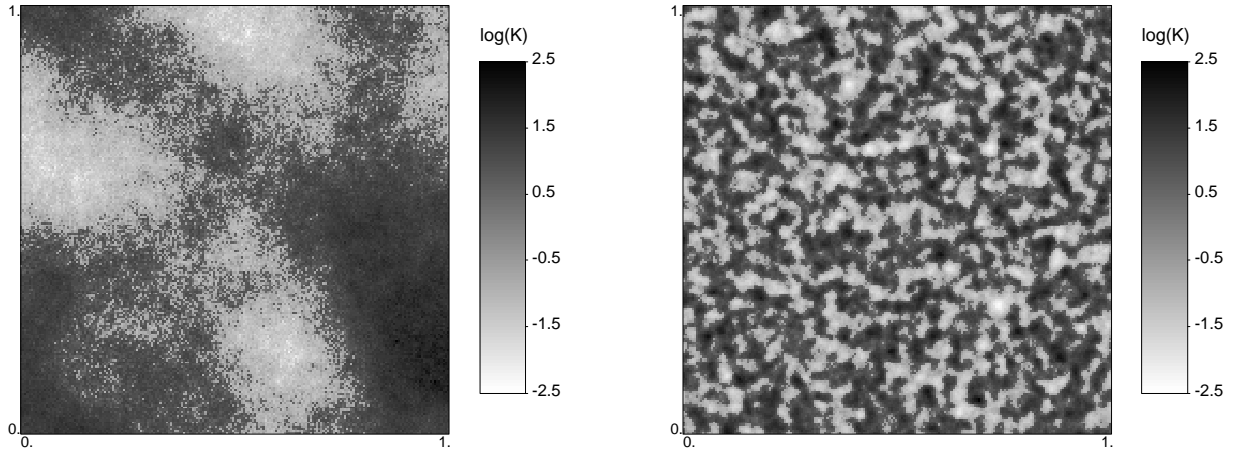


FIG. 5.23: Différentes cellules hétérogènes (à gauche : $l/l_c = 1$ - à droite : $l/l_c = 20$)

dans la cellule de prise de moyenne est augmenté. Pour chaque valeur de l/l_c , dix réalisations sont construites. C'est à dire, les mêmes caractéristiques géométriques et statistiques sont utilisées pour obtenir 10 jeux de propriétés à grande échelle, sur lesquelles sont calculés l'espérance et la variance. Le nombre de réalisation est trop faible pour obtenir une bonne représentation statistique, mais permet de se faire une idée sur la variabilité de chaque propriétés. Une étude plus approfondie est nécessaire afin de valider l'argumentation présentée ici.

Le figures 5.24 et 5.25 présentent les résultats pour différentes propriétés à grande échelle. On peut remarquer que l'espérance mathématique de chaque propriété tend vers une valeur constante lorsque le rapport l/l_c augmente. Il semblerait que lorsque le volume de prise de moyenne contient au moins 10 longueurs de corrélation, les hétérogénéités du système sont assez bien représentées. Le même ordre de grandeur avait déjà été avancé par les théories stochastiques [Dagan 1984, Tompson et Gelhar 1990]. Par contre, l'observation des écarts-type met en évidence deux comportements différents. L'écart-type calculé sur l'ensemble des réalisations vis à vis de la dispersion longitudinale dans la région "lente" $(\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**})_{xx}$ et du coefficient d'échange α^* diminue sensiblement lorsque le volume de moyenne augmente. En conséquent, on peut espérer pour ces deux propriétés obtenir une valeur représentative avec une seule réalisation, il existerait une relation direct entre la statistique et la valeur de ces coefficients. Les deux autres propriétés (dispersion longitudinale dans la région "rapide" $(\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**})_{xx}$ et dispersion longitudinale associé au modèle à une équation à non-équilibre $(\mathbf{D}^{**})_{xx}$) évoluent différemment. Même pour un grand volume de prise de moyenne (20 longueurs de corrélation), une importante variabilité de ces coefficients est observée (dans un rapport de 6). La topologie locale a une influence prédominante sur ces deux propriétés, et les réalisations générées à partir d'une même statistique exhibent des comportements macroscopiques très différents. Dans le but d'expliquer les différences observées entre les propriétés, il faut remarquer que les chemins préférentiels de transport sont très sensibles à la disposition des régions entre elles, et apparaissent principalement

dans la région "rapide". Il est donc normal que la variabilité au niveau de l'arrangement spatial à l'échelle locale soit répercutée sur les propriétés à grande échelle associées à la région "rapide".

Une étude analogue sur les capacités de la méthode de prise de moyenne pour calculer les tenseurs de perméabilité de cellules aléatoires [Ahmadi 1992], avait mis en évidence des tendances similaires. La perméabilité est déterminée par résolution d'une équation diffusive, or un opérateur convectif est beaucoup plus sensible aux singularités et à la topologie qu'un opérateur diffusif.

Les conclusions avancées ici ne peuvent pas avoir un caractère général car elles sont associées à la méthode de génération aléatoire et aux définitions statistiques choisies (loi de distribution, semi-variogramme, ...). La prise en compte d'un semi-variogramme exponentiel, ou une modification du petit paramètre c conduit à des milieux hétérogènes forts différents, donc à d'autres évolutions des propriétés macroscopiques.

5.3.3 Comparaison avec les expériences numériques

Une procédure de validation équivalente à celles présentées dans les parties 4.4 et 5.2.4 est employée ici. Des simulations numériques à l'aide des codes MODFLOW et MT3D [Zheng 1994] sont réalisées à partir des cellules aléatoires décrivant finement le champ de perméabilité. Des exemples de champs de concentration à l'échelle locale sont présentés sur la figure 5.26. Les caractéristiques statistiques sont conservées par rapport à la partie précédente, la taille de la cellule correspond à 5 longueurs de corrélation ($l/l_c = 5$). Les deux images des répartitions de concentration dans le milieu à deux instants différents mettent bien évidence des chemins préférentiels de transport et des zones de retard.

Les deux régions sont identifiées en se basant sur la valeur de la perméabilité de chaque maille. Avec les outils mis en place dans la partie 3.1, les propriétés effectives à grande échelle associées à cette cellule unitaire sont calculées numériquement, puis injectées dans la simulation macroscopique avec le modèle à deux équations. Le coefficient d'échange obtenu pour cet exemple est de $\alpha^* l^2 / D^{eff} = 659$. Sur les cellules aléatoires, la taille moyenne des hétérogénéités est de l'ordre de la longueur de corrélation l_c . Il est donc possible d'estimer a priori le coefficient de transfert dans le cas purement diffusif avec les relations établies dans la partie 4.3.1 (Eq. 4.21). Ainsi, nous avons

$$\alpha^* \frac{l^2}{D^{eff}} = 4\beta\varphi_\omega \left(\frac{l}{l_c}\right)^2 \quad (5.47)$$

Dans notre cas $\varphi_\omega = 0.4$, $l/l_c = 5$. Le facteur de forme β doit être de l'ordre de 8, car les hétérogénéités ont plus ou moins des formes cylindriques. L'estimation du coefficient d'échange est

$$\alpha^* \frac{l^2}{D^{eff}} = 320 \quad (5.48)$$

Cette valeur est plus faible que celle calculée par les problèmes de fermeture, car ne sont pas pris en compte l'échange convectif et les effets dispersifs dans la région "lente", par

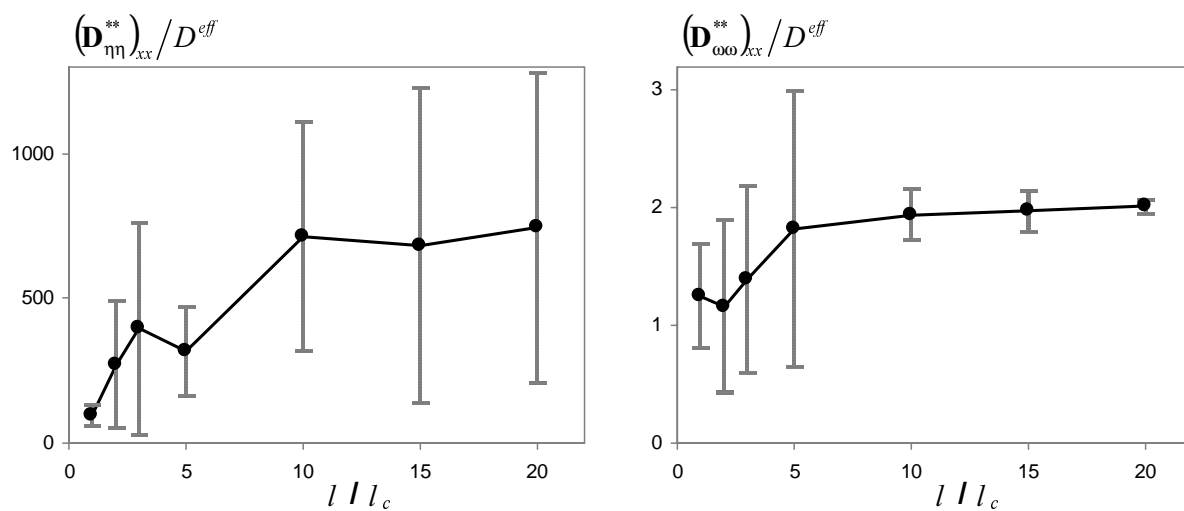


FIG. 5.24: Evolutions des propriétés effectives à grande échelle en fonction de la taille du volume de prise de moyenne.

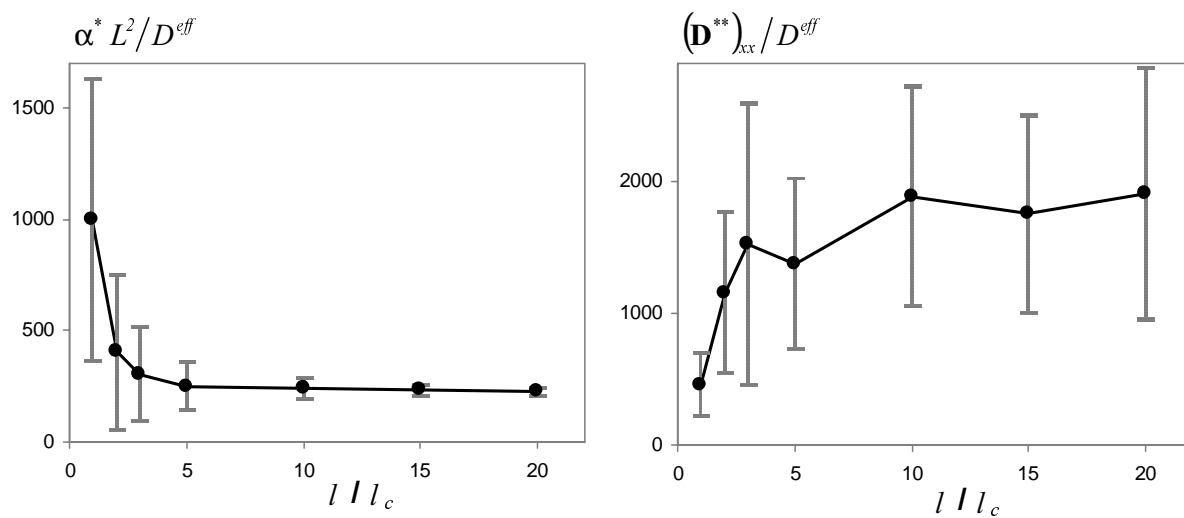


FIG. 5.25: Evolutions des propriétés effectives à grande échelle en fonction de la taille du volume de prise de moyenne.

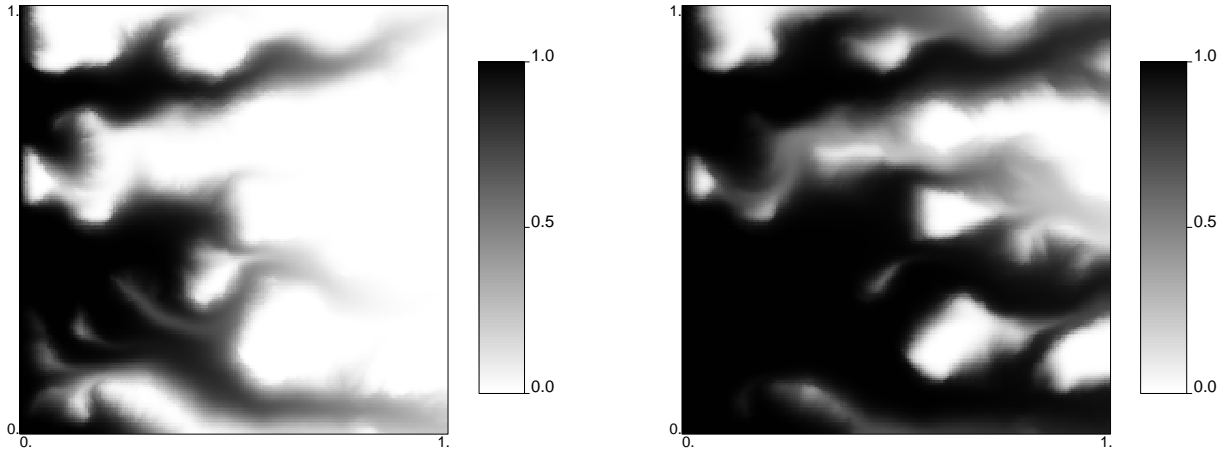


FIG. 5.26: Champs de concentration dans la cellule hétérogène pour $t^* = 1.10^{-4}$ et $t^* = 3.10^{-4}$

contre, cette estimation grossière et rapide donne le bon ordre de grandeur du coefficient d'échange.

Les profils de concentration macroscopique expérimentaux présentés sur les figures 5.27 et 5.28, sont calculés par un processus de moyenne sur une fenêtre mobile de largeur l (largeur de la cellule unitaire), de longueur l_c . Sur cette réalisation, les prédictions théoriques représentent assez bien les expériences numériques, sans faire apparaître les fluctuations à petite échelle. Dans chaque région, la perméabilité varie sur plus de deux ordres de grandeurs. A l'intérieur de chacune de ces régions, encore très hétérogènes, des phénomènes complexes telle que la dispersion anormale peuvent se manifester. Ce type de structure sort du cadre direct d'application du modèle à deux équations où les deux régions sont supposées homogènes. Malgré les déviations observées, le développement présenté dans ce travail permet d'accéder à une bonne approximation du comportement macroscopique à moindre coût.

5.3.4 Identification des régions

Les profils de concentration macroscopique expérimentaux (Fig. 5.27 et 5.28) sont sujets à des fluctuations importantes. Nous avons déjà fait remarquer dans la partie 4.5, que l'utilisation de fonction de pondération dans l'opérateur de prise de moyenne permet de lisser ces courbes. Mais un deuxième phénomène majeur est mis en évidence par ces fluctuations. Une zone est caractérisée comme une région "lente" si sa perméabilité est faible, ou "rapide" si sa perméabilité est élevée, alors que l'analyse des champs de concentration à l'échelle locale montre que certaines zones "lentes" sont très rapidement envahies par le traceur, au contraire, une zone "rapide" insérée dans une zone de faible perméabilité est balayée tardivement. Ainsi cette identification basée sur un critère de perméabilité se révèle en partie défailante, car elle ne tient pas compte du positionnement des régions entre elles.

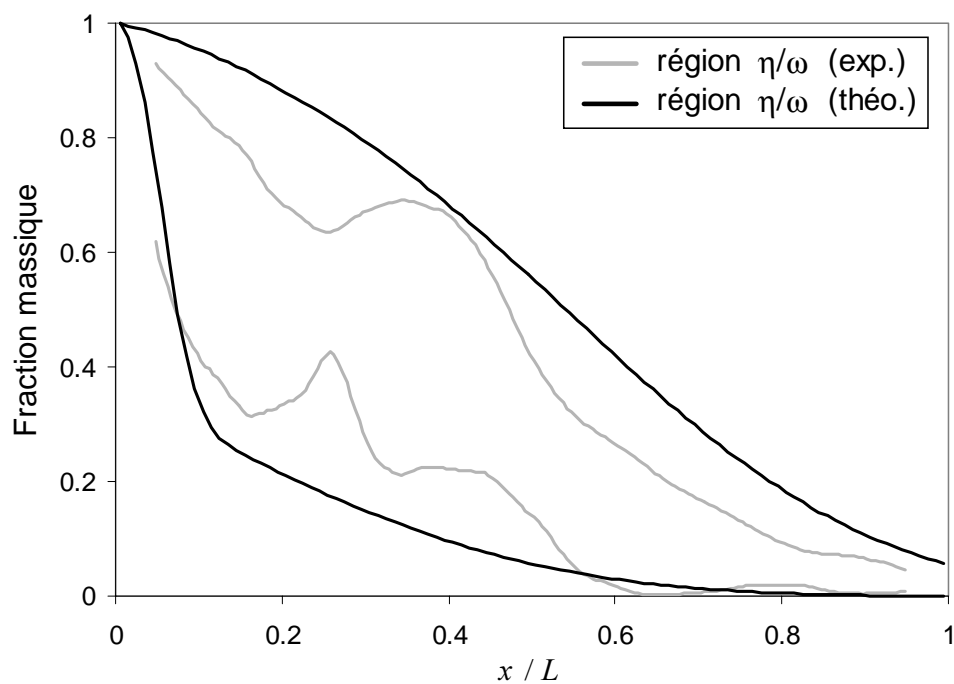


FIG. 5.27: Profils de concentration macroscopique dans le milieu aléatoire pour $t^* = 1.10^{-4}$

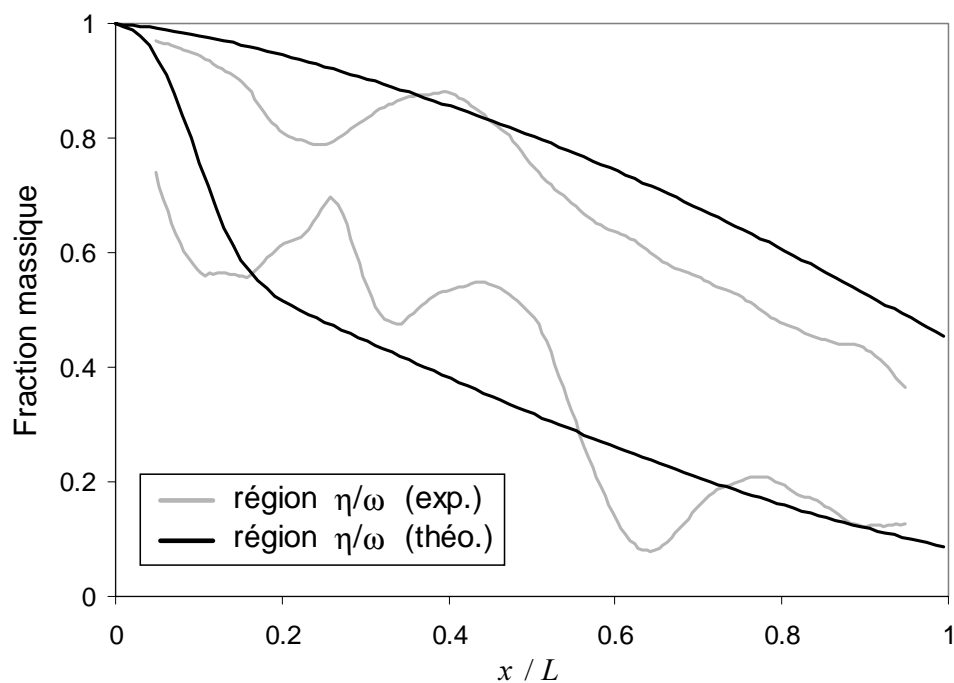


FIG. 5.28: Profils de concentration macroscopique dans le milieu aléatoire pour $t^* = 2.10^{-4}$

Dans la partie 4.5, nous avons vu que l'espace placé entre les nodules appartenant à la région "rapide" agit comme une zone de rétention. Un critère possible plus proche de la réalité devrait utiliser le champ local de vitesse plutôt que la carte de perméabilité. Dans le but d'arriver à une meilleure distinction des différentes régions, une idée intéressante est de se servir des variations de la variable de fermeture s , solution du problème de fermeture III. Le champ de s correspondant à l'exemple précédent est représenté sur la figure 5.29. Les valeurs importantes du scalaire s sont en principe des zones "lentes", en fait, plus cette valeur est forte, plus la zone associée retarde le transport du traceur. Cette remarque nous invite à seuiller le champ de s , de façon à affubler de l'adjectif "rapide" les régions définies par les faibles valeurs de la variable de fermeture, les zones restantes appartiennent à la région "lente". Sur la figure 5.30 sont dessinés les répartitions des deux régions, les régions "rapides" en blanc et les régions "lentes" en noir. Le critère basé sur la carte de perméabilité est utilisé pour la figure de gauche, alors que le seuillage sur la variable de fermeture s permet de créer l'image de droite. La procédure est menée de façon à conserver les mêmes fractions massiques dans les deux cas ($\varphi_\eta = 0.6$, $\varphi_\omega = 0.4$). La comparaison de ces deux représentations fait ressortir deux idées essentielles.

- Le bruit pris en compte lors de la génération aléatoire ressort très nettement sur l'image de gauche. On voit dans certaines zones limites une alternance rapide de région "rapide" et "lente". Ces fluctuations sont de l'ordre de grandeur d'une maille et ne sont pas représentatives de la structuration et des hétérogénéités du système. Ce ne sont que des artefacts de la méthode employée. La conséquence de ce découpage irréaliste est l'augmentation apparente de l'échange de masse entre les deux régions, car la surface interfaciale est très étendue et les hétérogénéités petites (voir les relations entre le coefficient d'échange et la taille de l'hétérogénéité (Eq. 4.21)). Sur la figure de droite, les transitions entre régions "rapides" et régions "lentes" sont nettes, on distingue plus clairement les hétérogénéités.
- La répartition représentée sur l'image de droite prend en compte l'écoulement, pour cette raison, les inclusions "lentes" ont une forme plus allongée dans le sens de l'écoulement.

5.4 Conclusions

Nous avons vu dans cette partie que le modèle à deux équations associé aux problèmes de fermeture pouvait donner dans de nombreuses situations une bonne représentation macroscopique du transport dans un milieu aléatoire. L'idée principale qui ressort d'une telle étude est l'influence de la géométrie à l'échelle locale sur le comportement à grande échelle. Dans le cas de la cellule stratifiée, ou en considérant un milieu bidimensionnel spatialement corrélé, une grande variabilité des propriétés macroscopiques est observée pour une même statistique de génération aléatoire. Dans les situations choisies ici, il est très difficile de prévoir le coefficient de dispersion à grande échelle à partir de la seule connaissance d'informations statistiques, comme dans le cadre des théories stochastiques. L'approche

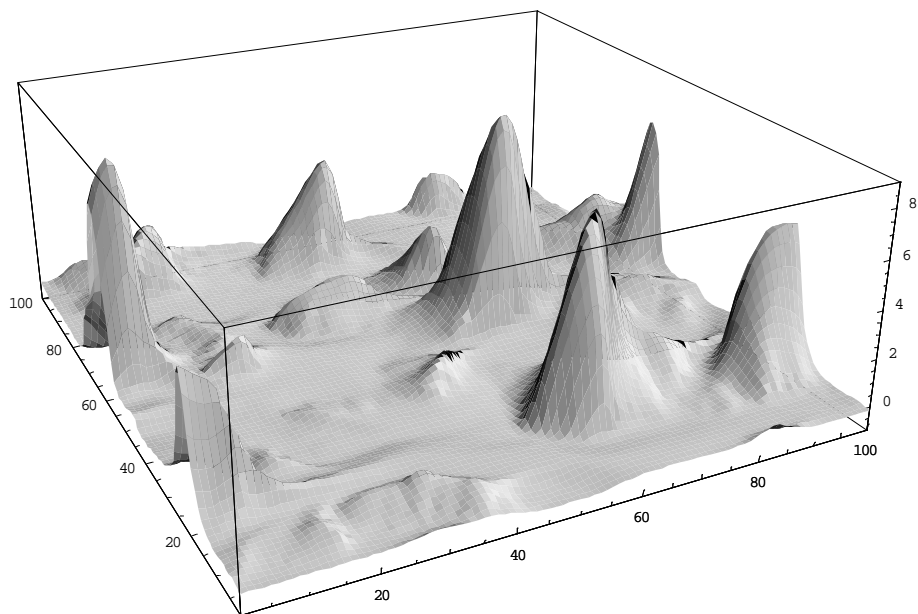


FIG. 5.29: Représentation de la variable de fermeture s dans la cellule aléatoire

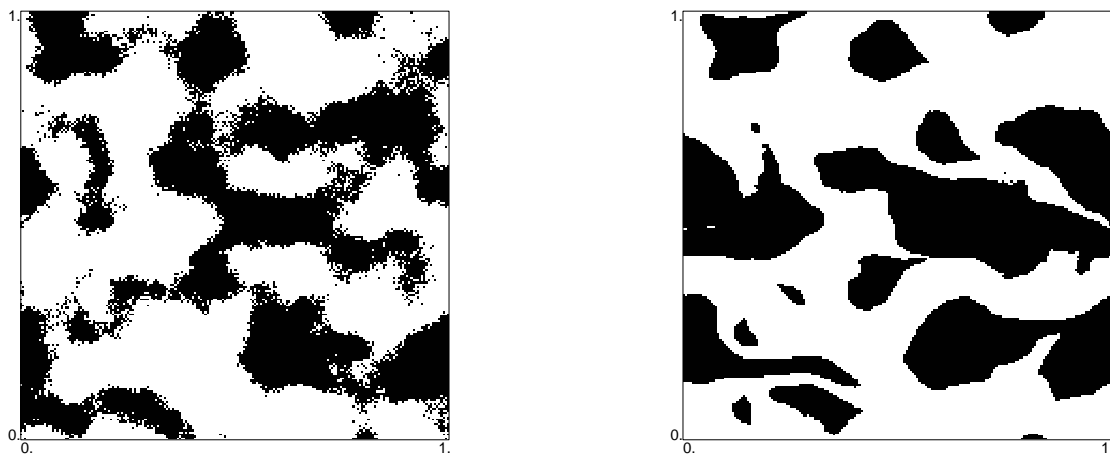


FIG. 5.30: différentes répartitions des régions "rapides" (en blanc) et des régions "lentes" (en noir)

déterministe est nécessaire car elle permet de prendre en compte des informations topologiques complexes. De plus, le type de loi statistique (distribution, semi-variogramme, ...) ou de méthode de génération a beaucoup d'influence sur les propriétés du milieu. La méthode choisie doit correspondre au processus qu'on veut modéliser [Journel et Alabert 1988].

Chapitre 5. Application aux milieux aléatoires

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Dans ce travail nous nous sommes intéressés au transport miscible en milieux poreux hétérogènes, et en particulier au problème de changement d'échelle. L'objectif de ce type d'approche est de fournir une modélisation macroscopique et de définir les propriétés physiques associées. Dans le cas du transport d'un soluté dans une formation hétérogène, un des phénomènes physiques majeurs est le non-équilibre massique. Le non-équilibre est responsable de tous les comportements anormaux observés à l'échelle de l'aquifère. Il est donc indispensable de prendre en compte le non-équilibre dans la modélisation macroscopique.

Nous nous sommes particulièrement intéressés à la méthode de prise de moyenne volumique à grande échelle appliquée aux systèmes à deux régions. Sous diverses hypothèses et simplifications, il est possible d'obtenir un modèle à deux équations, qui peut être vu comme une généralisation de tous les modèles du type "Coats & Smith" ou "mobile-immobile" établis empiriquement. Un des avantages majeurs de la technique employée ici, est le lien entre les échelles réalisé par les problèmes de fermeture. A travers une définition locale des hétérogénéités sur une cellule unitaire périodique représentative du milieu étudié, ces problèmes permettent de déterminer explicitement les propriétés effectives à grande échelle telles que les tenseurs de dispersion macroscopique ou le coefficient d'échange massique.

Afin de discuter l'intérêt d'une représentation à deux équations, plusieurs modèles à une équation ont été mis en place. Le premier est obtenu à partir du comportement asymptotique du modèle à deux équations. Le deuxième est basé sur l'hypothèse très forte d'équilibre local. Le dernier est développé en appliquant directement la méthode de prise de moyenne sur un milieu hétérogène en tenant compte du non-équilibre massique. Une étude préliminaire sur un milieu stratifié bi-couche montre que des comportements très anormaux peuvent être observés, le modèle à deux équations fournit alors une description de bonne qualité. Asymptotiquement, une représentation à une équation est acceptable et le modèle asymptotique développé ici donne la bonne évolution. Dans cette situation, une résolution analytique des problèmes de fermeture montre que le coefficient de dispersion asymptotique et le coefficient de dispersion associé au modèle à une équation à non-équilibre sont

identiques. Cette remarque est étendue au cas de géométries à double-régions quelconques par des études numériques. Une conclusion importante de ce travail est l'équivalence entre les deux modèles à une équation prenant en compte le non-équilibre.

Des procédures numériques originales ont été mises en place dans la parties 3, en particulier pour prendre en compte un tenseur de dispersion complet dans la résolution des problèmes de fermeture. Ces outils ont permis d'étudier les évolutions des coefficients à grande échelle en fonction des différents paramètres locaux. En particulier, on a pu définir une dispersivité à grande échelle dont les variations sont cohérentes avec les observations réalisées dans des travaux antérieurs. De même, dans certaines situations, des développements théoriques ont validé les valeurs du coefficient d'échange massique calculées à partir des problèmes de fermeture. La technique de prise de moyenne propose ainsi une méthode générale de détermination des propriétés effectives à grande échelle, qui est une extension des techniques existantes.

Par comparaison avec des solutions de référence basées sur une description fine des processus physiques, le modèle à deux équations a montré ses capacités à représenter correctement le transport miscible dans des structures nodulaires. Ces résultats servent de validation du modèle pour les milieux à double-perméabilité. Même si ce type de formation binaire est présent dans la nature, l'objectif sous-jacent est de parvenir à utiliser le modèle à deux équations et les problèmes de fermeture associés en relation avec une description géostatistique des hétérogénéités. Dans la partie 5, des structures stratifiées aléatoires et des milieux aléatoires bi-dimensionnels spatialement corrélés sont étudiés. Nous avons veillé à conserver des fonctions de densité de probabilité de perméabilité bi-modales, de façon à rester dans le domaine d'intérêt d'une approche à deux équations. Bien que certaines déviations entre les prédictions théoriques et les expériences numériques soient observées, la description proposée dans ce travail peut être suffisamment précise par rapport aux incertitudes associées à la caractérisation des aquifères. Une conclusion principale est l'importance de la topologie locale. Plusieurs milieux poreux hétérogènes générés à partir des mêmes lois statistiques mettent en évidence des comportements macroscopiques très différents. Dans le cas général, il est impossible d'effectuer le changement d'échelle en ne connaissant que des caractéristiques statistiques. Il est alors nécessaire d'utiliser des outils élaborés comme la méthode de prise de moyenne volumique.

Les études préliminaires présentées ici sont à poursuivre en augmentant le nombre de tests numériques de façon à apporter des conclusions ayant un caractère plus général. Il serait intéressant de voir l'influence des lois statistiques choisies (distribution, semi-variogramme, ...) et des méthodes de génération de cellules aléatoires sur les propriétés macroscopiques calculées. Il est clair aujourd'hui, que la technique de génération doit correspondre au processus étudié, afin de prendre en compte les informations spatiales qui ont une influence prédominante sur le transport miscible.

Il serait intéressant à ce stade de l'étude, d'effectuer des validations du modèle sur des simulations de plus grande dimension. Les résultats présentés dans ce travail pourraient être étendus à des systèmes composés d'un plus grand nombre de mailles hétérogènes. De plus, les perturbations engendrées par la prise en compte des conditions aux limites périodiques au niveau de chaque maille sont-elles négligeables à l'échelle de l'aquifère ?

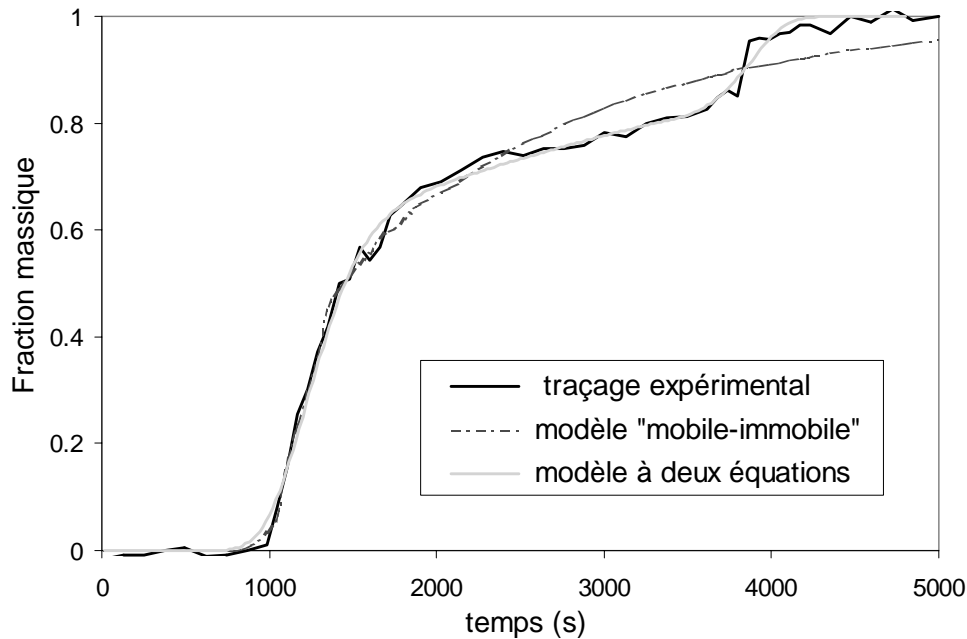


FIG. 6.1: Courbes de percée à la sortie d'une carotte hétérogène

Cependant le coût numérique d'une telle étude est élevé, principalement pour réaliser les solutions de référence basées sur un maillage fin de la structure.

Dans le but de relier les travaux théoriques présentés ici et des études expérimentales, il est indispensable de développer une méthode inverse pour estimer les propriétés effectives de transport de milieux hétérogènes à partir de courbes expérimentales de traçage miscible. Une collaboration avec la société ELF a permis de réaliser une étude théorique préliminaire et de mettre en place des outils numériques. L'objectif est de modéliser les roches hétérogènes avec une approche à deux équations, et de caractériser les propriétés effectives associées en s'appuyant sur des courbes de percée expérimentales. Les avantages du traçage miscible sont la simplicité du matériel et de la procédure expérimentale, et le faible coût de mis en oeuvre, alors que des informations capitales comme le coefficient d'échange massique ou les fractions volumiques sont accessibles.

L'algorithme d'inversion est inspiré de celui de Levenberg-Marquardt [Marquardt 1963] et utilise l'approximation de Gauss-Newton [Press et al. 1986]. Le modèle à deux équations est simplifié de façon à réduire le nombre de paramètres à identifier, malgré cela, cinq grandeurs macroscopiques doivent être estimées en utilisant une seule courbe expérimentale. En conséquent, certains paramètres comme les dispersions macroscopiques exhibent de très faibles sensibilités, et sont difficilement estimables. Cependant, dans certaines situations, la procédure d'inversion donne de bons résultats, comme sur l'exemple présenté sur la figure 6.1. Les deux fronts correspondant aux deux régions sont clairement identifiés et bien représentés par le modèle à deux équations. Par contre, une approche similaire effectuée

Chapitre 6. Conclusions et perspectives

avec un modèle du type "Coats & Smith" ne permet pas de capturer la complexité des processus de transport dans un matériau poreux hétérogène.

Pour mettre au point une procédure d'estimation de paramètre robuste et fiable, d'importantes recherches théoriques restent à faire. En particulier, il faudrait réduire le nombre de paramètres ou utiliser simultanément plusieurs courbes expérimentales.

Chapitre 7

Nomenclature

Lettres romaines

$A_{\eta\omega}$	Interface entre les régions η et ω , m^2 .
\mathbf{b}	vecteur de fermeture qui détermine \tilde{C} en fonction de ∇C^* , m.
$\mathbf{b}_{\eta\eta}$	vecteur de fermeture qui détermine \tilde{c}_η en fonction de $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta$, m.
$\mathbf{b}_{\eta\omega}$	vecteur de fermeture qui détermine \tilde{c}_η en fonction de $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega$, m.
$\mathbf{b}_{\omega\eta}$	vecteur de fermeture qui détermine \tilde{c}_ω en fonction de $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta$, m.
$\mathbf{b}_{\omega\omega}$	vecteur de fermeture qui détermine \tilde{c}_ω en fonction de $\nabla \left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega$, m.
$\mathbf{b}_{I\eta}$	vecteur résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\eta\eta}$, m.
$B_{I\eta}$	scalaire résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\eta\eta}$, m.
$\mathbf{b}_{I\omega}$	vecteur résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\omega\eta}$, m.
$B_{I\omega}$	scalaire résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\omega\eta}$, m.
$\mathbf{b}_{II\eta}$	vecteur résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\eta\omega}$, m.
$B_{II\eta}$	scalaire résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\eta\omega}$, m.
$\mathbf{b}_{II\omega}$	vecteur résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\omega\omega}$, m.
$B_{II\omega}$	scalaire résultant de la décomposition du vecteur de fermeture $\mathbf{b}_{\omega\omega}$, m.
C_m	concentration macroscopique dans la région "mobile", mol m^{-3} .
C_{im}	concentration macroscopique dans la région "immobile", mol m^{-3} .
C^*	concentration moyenne intrinsèque à grande échelle, mol m^{-3} .
\tilde{C}	$= \langle c \rangle^\beta - C^*$, déviation spatiale de la concentration, mol m^{-3} .
$\langle c \rangle_\eta^\beta$	concentration moyenne intrinsèque à l'échelle locale dans la région η , mol m^{-3} .
$\langle c \rangle_\omega^\beta$	concentration moyenne intrinsèque à l'échelle locale dans la région ω , mol m^{-3} .

Chapitre 7. Nomenclature

$\langle c \rangle_i^\beta$	concentration moyenne intrinsèque à l'échelle locale dans la strate i , mol m ⁻³ .
$\left\{ \langle c \rangle_\eta^\beta \right\}^\eta$	concentration moyenne intrinsèque à grande échelle dans la région η , mol m ⁻³ .
$\left\{ \langle c \rangle_\omega^\beta \right\}^\omega$	concentration moyenne intrinsèque à grande échelle dans la région ω , mol m ⁻³ .
$\left\{ \langle c \rangle_i^\beta \right\}^i$	concentration moyenne intrinsèque à grande échelle dans la strate i , mol m ⁻³ .
\tilde{c}_η	déviatio n spatiale de la concentration dans la région η , mol m ⁻³ .
\tilde{c}_ω	déviatio n spatiale de la concentration dans la région ω , mol m ⁻³ .
\tilde{c}_i	déviatio n spatiale de la concentration dans la strate i , mol m ⁻³ .
d_p	diamètre moyen des pores, m.
\mathcal{D}	coefficient de diffusion moléculaire, m ² s ⁻¹ .
\mathcal{D}^{eff}	coefficient de diffusion effective à l'échelle locale, m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}^*	tenseur de dispersion à l'échelle locale, m ² s ⁻¹ .
$\tilde{\mathbf{D}}$	déviatio n spatiale du tenseur de dispersion, m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}_η^*	tenseur de dispersion à l'échelle locale dans la région η , m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}_ω^*	tenseur de dispersion à l'échelle locale dans la région ω , m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}_i^*	tenseur de dispersion à l'échelle locale dans la strate i , m ² s ⁻¹ .
$\tilde{\mathbf{D}}_\eta$	déviatio n spatiale du tenseur de dispersion dans la région η , m ² s ⁻¹ .
$\tilde{\mathbf{D}}_\omega$	déviatio n spatiale du tenseur de dispersion dans la région ω , m ² s ⁻¹ .
$\mathbf{D}_{\eta\eta}^{**}$	tenseur de dispersion principal à grande échelle pour la région η , m ² s ⁻¹ .
$\mathbf{D}_{\eta\omega}^{**}$	tenseur de dispersion de couplage à grande échelle pour la région η , m ² s ⁻¹ .
$\mathbf{D}_{\omega\omega}^{**}$	tenseur de dispersion principal à grande échelle pour la région ω , m ² s ⁻¹ .
$\mathbf{D}_{\omega\eta}^{**}$	tenseur de dispersion de couplage à grande échelle pour la région ω , m ² s ⁻¹ .
\mathcal{D}_∞^{**}	coefficient de dispersion associé au modèle à une équation asymptotique, m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}_{eq}^{**}	tenseur de dispersion à grande échelle associé au modèle à une équation à équilibre local, m ² s ⁻¹ .
\mathbf{D}^{**}	tenseur de dispersion à grande échelle associé au modèle à une équation à non-équilibre, m ² s ⁻¹ .
e	épaisseur d'une strate du milieu stratifié aléatoire, m.
l	taille de la cellule unitaire périodique, m.
l_c	longueur de corrélation, m.
l_η	longueur caractéristique à l'échelle locale associée à la région η , m.
l_ω	longueur caractéristique à l'échelle locale associée à la région ω , m.
L	longueur caractéristique à grande échelle, m.
\mathbf{l}_i	vecteur de périodicité, m.
n	nombre de strates du milieu stratifié aléatoire.

$\mathbf{n}_{\eta\omega}$	vecteur normal unitaire, dirigé de la région η vers la région ω .
r_0	rayon du volume de prise de moyenne à grande échelle, m.
r_η	variable de fermeture qui détermine \tilde{c}_η en fonction de $\left(\left\{\langle c \rangle_\omega^\beta\right\}^\omega - \left\{\langle c \rangle_\eta^\beta\right\}^\eta\right)$.
r_ω	variable de fermeture qui détermine \tilde{c}_ω en fonction de $\left(\left\{\langle c \rangle_\omega^\beta\right\}^\omega - \left\{\langle c \rangle_\eta^\beta\right\}^\eta\right)$.
r_{ij}	variable de fermeture qui détermine \tilde{c}_i en fonction de $\left(\left\{\langle c \rangle_\omega^\beta\right\}^\omega - \left\{\langle c \rangle_\eta^\beta\right\}^\eta\right)$.
s_η	$= r_\eta$, variable de fermeture.
s_ω	$r_\omega + 1$, variable de fermeture.
$s_{I\eta}$	scalaire résultant de la décomposition de la variable de fermeture s_η .
$s_{I\omega}$	scalaire résultant de la décomposition de la variable de fermeture s_ω .
t	temps, s.
t^*	temps adimensionné.
\mathbf{U}^*	vitesse interstitielle moyenne à grande échelle, m s^{-1} .
$\tilde{\mathbf{U}}$	$= \langle \mathbf{v} \rangle^\beta - U^*$, déviation spatiale de la vitesse interstitielle, m s^{-1} .
V_η	volume de la région η contenu dans le volume de prise de moyenne V_∞ , m^3 .
V_ω	volume de la région ω contenu dans le volume de prise de moyenne V_∞ , m^3 .
V_i	volume de la strate i contenu dans le volume de prise de moyenne V_∞ , m^3 .
V_∞	volume de prise de moyenne à grande échelle V_∞ , m^3 .
v_η	composante suivant x de la vitesse moyenne régionale intrinsèque dans la région η $\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\right\}^\eta$, m s^{-1} .
v_ω	composante suivant x de la vitesse moyenne régionale intrinsèque dans la région ω $\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\right\}^\omega$, m s^{-1} .
v_i	composante suivant x de la vitesse moyenne régionale intrinsèque dans la strate i $\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_i\right\}^i$, m s^{-1} .
v_m	norme de la vitesse moyenne superficielle à grande échelle $\{\langle \mathbf{v} \rangle\}$, m s^{-1} .
$\langle \mathbf{v} \rangle_\eta$	vitesse moyenne de filtration dans la région η , m s^{-1} .
$\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\right\}^\eta$	vitesse moyenne régionale intrinsèque dans la région η , m s^{-1} .
$\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\eta\right\}$	vitesse moyenne régionale superficielle dans la région η , m s^{-1} .
$\tilde{\mathbf{v}}_\eta$	déviation spatiale de la vitesse dans la région η , m s^{-1} .
$\langle \mathbf{v} \rangle_\omega$	vitesse moyenne de filtration dans la région ω , m s^{-1} .
$\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\right\}^\omega$	vitesse moyenne régionale intrinsèque dans la région ω , m s^{-1} .
$\left\{\langle \mathbf{v} \rangle_\omega\right\}$	vitesse moyenne régionale superficielle dans la région ω , m s^{-1} .
$\tilde{\mathbf{v}}_\omega$	déviation spatiale de la vitesse dans la région ω , m s^{-1} .
$\{\langle \mathbf{v} \rangle\}$	vitesse moyenne superficielle à grande échelle, m s^{-1} .
$\langle \mathbf{v} \rangle_i$	vitesse moyenne de filtration dans la strate i , m s^{-1} .

Lettres grecques

α^*	coefficient macroscopique d'échange de masse entre les deux regions η et ω , s^{-1} .
α_L	dispersivité longitudinale à l'échelle locale, m.
α_T	dispersivité transversale à l'échelle locale, m.
α_L^*	dispersivité longitudinale à grande échelle, m.
β	facteur de forme utilisé pour le calcul du coefficient d'échange massique α^* .
γ	semi-variogramme.
δ_{ij}	symbole de Kronecker.
δ_x	pas d'espace dans la direction x du maillage cartésien.
δ_y	pas d'espace dans la direction y du maillage cartésien.
ϵ_η	porosité totale de la région η .
ϵ_ω	porosité totale de la région ω .
ϵ_i	porosité totale dans la strate i .
ϵ_m	porosité totale de la région "mobile".
ϵ_{im}	porosité totale de la région "immobile".
φ_η	fraction volumique de la région η .
φ_ω	fraction volumique de la région ω .
φ_i	fraction volumique de la strate i .
φ_m	fraction volumique de la région "mobile".
φ_{im}	fraction volumique de la région "immobile".

Bibliographie

- Ahmadi, A. : 1992, *Utilisation de propriétés équivalentes dans les modèles de réservoir : Cas des écoulements diphasiques incompressibles*, Thèse de 3ème cycle, Université Bordeaux I.
- Ahmadi, A. et Quintard, M. : 1996, Large-scale properties for two-phase flow in random porous media, *Journal of Hydrology* **183**, 69–99.
- Ahmadi, A., Quintard, M. et Whitaker, S. : 1998, Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media v : Two-equation model for solute transport with adsorption, *Advances in Water Resources* **22**, 59–86.
- Arbogast, T., Douglas, J. J. et Hornung, U. : 1990, Derivation of the Double-Porosity model of single phase flow via homogenization theory, *SIAM J. Math. Anal.* **21**, 823–836.
- Aris, R. : 1956, On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube, *Proc. Roy. Soc. London, A* **235**, 67–77.
- Bachu, S. et Cuthiell, D. : 1990, Effects of core-scale heterogeneity on steady state and transient fluid flow in porous media : Numerical analysis, *Water Resources Research* **26**, 863–874.
- Bajracharya, K. et Barry, D. A. : 1997, Nonequilibrium solute transport parameters and their physical significance : Numerical and experimental results, *Journal of Contaminant Hydrology* **24**, 185–204.
- Bear, J. : 1961, On the tensor form of dispersion in porous media, *Journal of Geophysical Research* **66**, 1185–1197.
- Berkowitz, B. et Scher, H. : 1995, On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media, *Water Resources Research* **31**, 1461–1466.
- Bosma, W. J. P. et Van der Zee, S. E. A. T. M. : 1995, Dispersion of a continuously injected, nonlinearly adsorbing solute in chemically or physically heterogeneous porous formations, *Journal of Contaminant Hydrology* **18**, 181–198.
- Bourgeat, A., Quintard, M. et Whitaker, S. : 1988, Eléments de comparaison entre la méthode d’homogénéisation et la méthode de prise de moyenne avec fermeture, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Série II* **306**, 463–466.
- Bruneau, C. H. : 1989, *Schémas aux différences finies décentrées pour la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles*, Thèse de 3ème cycle, Université de Paris-Sud, centre d’Orsay.

BIBLIOGRAPHIE

- Bruneau, C. H., Fabrie, P. et Rasetarinera, P. : 1996, Numerical resolution of in situ bioremediation in porous media, *SIAM J. Num. Anal.* .
- Brusseau, M. L. : 1994, Transport of reactive contaminants in heterogeneous porous media, *Reviews of Geophysics* **32**, 285–313.
- Brusseau, M. L., Jessup, R. E. et Rao, P. S. C. : 1989, Modeling the transport of solutes influenced by multiprocess nonequilibrium, *Water Resources Research* **25**, 1971–1988.
- Brusseau, M. L. et Rao, P. S. : 1989, Nonequilibrium and dispersion during transport of contaminants in groundwater : Field-scale process, *Contaminant Transport in Groundwater* pp. 237–244.
- Burr, D. T., Sudicky, E. A. et Naff, R. L. : 1994, Nonreactive and reactive solute transport in three-dimensional heterogeneous porous media : Mean displacement, plume spreading, and uncertainty, *Water Resources Research* **30**, 791–815.
- Chin, D. A. : 1987, Macrodispersion in a stratified porous media, *Journal of Hydraulic Engineering* **113**, 1343–1358.
- Coats, K. H. et Smith, B. D. : 1964, Dead-end pore volume and dispersion in porous media, *SPE Journal* **4**, 73–84.
- Combarous, M. A. et Fried, J. J. : 1971, Dispersion in porous media, *Advances in Hydroscience* **7**, 169–282.
- Communar, G. M. : 1998, A solute transport in stratified media, *Transport in Porous Media* **31**, 133–143.
- Corrêa, A. C., Pande, K. K., Ramey, H. . et Brigham, W. E. : 1990, Computation and interpretation of miscible displacement performance in heterogeneous porous media, *SPE Reservoir Engineering* pp. 69–78.
- Cushman, J. H. : 1990, *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*, Academic Press.
- Cushman, J. H. : 1991, On diffusion in fractal porous media, *Water Resources Research* **27**, 643–644.
- Cushman, J. H. et Ginn, T. R. : 1993, Nonlocal dispersion in media with continuously evolving scales of heterogeneity, *Transport in Porous Media* **13**, 123–138.
- Dagan, G. : 1984, Solute transport in heterogeneous porous formations, *Journal of Fluid Mechanics* **145**, 151–177.
- Dagan, G. : 1986, Statistical theory of groundwater flow and transport : Pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale, *Water Resources Research* **22**, 120–134.
- Dagan, G. : 1988, Time-dependent macrodispersion for solute transport in anisotropic heterogeneous aquifers, *Water Resources Research* **24**, 1491–1500.
- Dagan, G. : 1989, *Flow and Transport in Porous Formations*, Springer-Verlag.
- Dagan, G. : 1990, Transport in heterogeneous porous formations : Spatial moments, ergodicity, and effective dispersion, *Water Resources Research* **26**, 1281–1290.

- De Josselin de Jong, G. : 1958, Longitudinal and tranverse diffusion in granular deposits, *American Geophysical Union* **39**, 67–74.
- De Smedt, F. et Wierenga, P. J. : 1979, Mass transfer in porous media with immobile water, *Journal of Hydrology* **41**, 59–67.
- Deans, H. A. : 1963, A mathematical model for dispersion in the direction of flow in porous media, *AIME* **228**, 49.
- Desbarats, A. J. : 1990, Macrodispersion in sand-shale sequences, *Water Resources Research* **26**, 153–163.
- Desbarats, A. J. et Srivastava, R. M. : 1991, Geostatistical characterization of groundwater flow parameters in a simulated aquifers, *Water Resources Research* **27**, 687–698.
- Deutsch, C. V. et Journel, A. G. : 1998, *GSLIB Geostatistical Software Library and User's Guide*, Oxford University Press.
- Ding, A. et Candela, D. : 1996, Probing nonlocal tracer dispersion in flows through random porous media, *Physical Review E* **54**(1), 656–660.
- Douglas, L. K. et Gordon, A. H. : 1989, Experimental study of dispersion in a consolidated sandstone, *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **67**, 39–44.
- Durner, W. : 1994, Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure, *Water Resources Research* **30**, 211–223.
- Dykhuizen, R. C. : 1990, A new coupling term for dual-porosity models, *Water Resources Research* **26**, 351–356.
- Edwards, D. A., Shapiro, M., Brenner, H. et Shapira, M. : 1991, Dispersion of inert solutes in spatially periodic, two-dimensional model porous media, *Transport in Porous Media* **6**, 337–358.
- Edwards, M. G. et Rogers, C. F. : 1994, A flux continuous scheme for the full tensor pressure equation, *Proc. 4th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery D*, 1–8.
- Eidsath, A., Carbonell, R. G., Whitaker, S. et Hermann, L. R. : 1983, Dispersion in pulsed systems-III, *Chemical Engineering Science* **38**, 1803–1816.
- Fabrie, P., Quintard, M. et Whitaker, S. : 1995, Calculation of porous media effective properties : Computational problems and required unit cell features, *Conference on Mathematics Modelling of Flow Through Porous Media*, World Scientific Publishing Co., pp. 166–182.
- Fiori, A. : 1998, On the influence of pore-scale dispersion in nonergodic transport in heterogeneous formations, *Transport in Porous media* **30**, 57–73.
- Freeze, R. A. : 1975, A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media, *Water Resources Research* **11**, 725–741.
- Gaudet, J. P., Jégat, H., Vachaud, G. et Wierenga, P. J. : 1977, Solute transfer, with exchange between mobile and stagnant water, through unsaturated sand, *Soil Science Society of America Journal* **41**, 665–671.

BIBLIOGRAPHIE

- Gelhar, L. W. et Axness, C. L. : 1983, Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers, *Water Resources Research* **19**, 161–180.
- Gelhar, L. W., Gutjahr, A. L. et Naff, R. L. : 1979, Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer, *Water Resources Research* pp. 1387–1397.
- Gelhar, L. W., Welty, C. et Rehfeldt, K. R. : 1992, A critical review of data on field-scale dispersion aquifers, *Water Resources Research* **28**, 1955–1974.
- Gerke, H. H. et Van Genuchten, M. T. : 1993a, A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media, *Water Resources Research* **29**, 305–319.
- Gerke, H. H. et Van Genuchten, M. T. : 1993b, Evaluation of a First-Order water transfer term for variably saturated Dual-Porosity flow models, *Water Resources Research* **29**, 1225–1238.
- Gerke, H. H. et Van Genuchten, M. T. : 1996, Macroscopic representation of structural geometry for simulating water and solute movement in dual-porosity media, *Advances in Water Resources* **19**, 343–357.
- Glimm, J., Lindquist, W. B., Pereira, F. et Zhang, Q. : 1993, A theory of macrodispersion for the scale-up problem, *Transport in Porous Media* **13**, 97–122.
- Goltz, M. N. et Oxley, M. E. : 1991, Analytical modeling of aquifer decontamination by pumping when transport is affected by rate-limited sorption, *Water Resources Research* **27**, 547–556.
- Goltz, M. N. et Roberts, P. V. : 1986a, Interpreting organic solute transport data from a field experiment using physical nonequilibrium models, *Journal of Contaminant Hydrology* **1**, 77–93.
- Goltz, M. N. et Roberts, P. V. : 1986b, Three-dimensional solutions for solute transport in an infinite medium with mobile and immobile zones, *Water Resources Research* **22**, 1139–1148.
- Goltz, M. N. et Roberts, P. V. : 1988, Simulations of physical nonequilibrium solute transport models : Application to a large-scale field experiment, *Journal of Contaminant Hydrology* **3**, 37–63.
- Goyeau, B., Benihaddadene, T., Gobin, D. et Quintard, M. : 1997, Averaged momentum equation for flow through a non homogeneous porous structure, *Transport in Porous Media* **28**, 19–50.
- Graham, W. D. et McLaughlin, D. B. : 1991, A stochastic model of solute transport in groundwater : Application to the borden, ontario, tracer test, *Water Resources Research* **27**, 1345–1359.
- Grangeot, G., Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994, Heat transfer in packed beds : Interpretation of experiments in terms of one- and two-equation models, *paper PP-15B, 10th Inter. Heat Transfer Conf., Brighton* **5**, 291–296.
- Gray, W. G. : 1975, A derivation of the equations for multi-phase transport, *Chemical Engineering Science* **30**, 229–233.

- Grisak, G. E. et Pickens, J. F. : 1980, Solute transport through fractured media 1. the effect of matrix diffusion, *Water Resources Research* **16**, 719–730.
- Gupta, V. K. et Bhattacharya, R. N. : 1986, Solute dispersion in multidimensional periodic saturated porous media, *Water Resources Research* **22**, 156–164.
- Güven, O. et Molz, F. J. : 1986, Deterministic and stochastic analyses of dispersion in an unbounded stratified porous medium, *Water Resources Research* **22**(11), 1565–1574.
- Güven, O., Molz, F. J. et Melville, J. G. : 1984, An analysis of dispersion in a stratified aquifer, *Water Resources Research* **20**(10), 1337–1354.
- Gvirtzman, H., Paldor, N., Magaritz, M. et Bachmat, Y. : 1988, Mass exchange between mobile freshwater and immobile saline water in the unsaturated zone, *Water Resources Research* **24**, 1638–1644.
- Hamed, M. M., Bedient, P. B. et Dawson, C. N. : 1996, Probabilistic modeling of aquifer heterogeneity using reliability methods, *Advances in Water Resources* **19**, 277–295.
- Herr, M., Schäfer, G. et Spitz, K. : 1989, Experimental studies of mass transport in porous media with local heterogeneities, *Journal of Contaminant Hydrology* **4**, 127–137.
- Holiday, E. M. : n.d., Transformation of a set of pseudo-random numbers into a set representing any desired probability an correlation, *Technical Report RE-TR-69-25*, Advanced Sensors Laboratory, Research an Engineering Directorate, U.S. Army Missile Command, Redstone Arsenal, Alabama.
- Hornung, U. : 1997, *Homogenization an Porous Media*, Springer-Verlag.
- Howes, F. A. et Whitaker, S. : 1985, The spatial averaging theorem revisited, *Chemical Engineering Science* **40**, 1387–1392.
- Hu, B. X., Cushman, J. H. et Deng, F. W. : 1997, Nonlocal reactive transport with physical, and biological heterogeneity, *Advances in Water Resources* **20**, 293–308.
- Hu, Q. et Brusseau, M. L. : 1996, Transport of rate-limited sorbing solutes in an aggregated porous medium : A multiprocess non-ideality approach, *Journal of Contaminant Hydrology* **24**, 53–74.
- Huang, K., Toride, N. et Van Genuchten, M. T. : 1995, Experimental investigation of solute transport in large, homogeneous and heterogeneous, saturated soil columns, *Transport in Porous Media* **18**, 283–302.
- Ippolito, I., Daccord, G., Hinch, E. J. et Hulin, J. P. : 1994, Echo tracer dispersion in model fractures with a rectangular geometry, *Journal of Contaminant Hydrology* **16**, 87–108.
- Journel, A. G. et Alabert, F. G. : 1988, Focusing on spatial connectivity of extreme-valued attributes : Stochastic indicator models of reservoir heterogeneities, *SPE* **18324**, 621–632.
- Koch, D. L. et Brady, J. F. : 1985, Dispersion in fixed beds, *Journal of Fluid Mechanic* **154**, 399–427.
- Koch, D. L. et Brady, J. F. : 1987, A non-local description of advection-diffusion with application to dispersion in porous media, *Journal of Fluid Mechanics* **180**, 387–403.

BIBLIOGRAPHIE

- Koch, D. L. et Brady, J. F. : 1988, Anomalous diffusion in heterogeneous porous media, *Physics of Fluids* **5**, 965–973.
- Kramers, J. W., Bachu, S., Cuthiell, D. L., Prentice, M. E. et Yuan, L. P. : 1989, A multidisciplinary approach to reservoir characterization : The provost upper mannville b pool, *The Journal of Canadian Petroleum Technology* **28**, 48–57.
- Lafolie, F., Hayot, C. H. et Schweich, D. : 1997, Experiments on solute transport in aggregated porous media : Are diffusions within aggregates and hydrodynamic dispersion independent, *Transport in Porous Media* **29**, 281–307.
- Lake, L. W. et Hirasaki, G. J. : 1981, Taylor's dispersion in stratified porous media, *Society of Petroleum Engineers Journal* pp. 459–468.
- Leroy, C., Hulin, J. P. et Lenormand, R. : 1992, Tracer dispersion in stratified porous media : Influence of transverse dispersion and gravity, *Journal of Contaminant Hydrology* **11**, 51–68.
- Logan, J. D. : 1996, Solute transport in porous media with scale-dependent dispersion and periodic boundary conditions, *Journal of Hydrology* **184**, 261–276.
- Magnico, P., Leroy, C., Bouchaud, J. P., Gauthier, C. et Hulin, J. P. : 1993, Tracer dispersion in porous media with a double porosity, *Physics of Fluids* **A5**, 46–57.
- Marle, C. M. : 1967, Ecoulements monophasiques en milieu poreux, *Revue de l'Institut Francais du Pétrole* pp. 1471–1509.
- Marle, C. M., Simandoux, P., Pacsirszky, J. et Gaulier, C. : 1967, Etude du déplacement de fluides miscibles en milieu poreux stratifié, *Revue de l'Institut Francais du Pétrole* **22**, 272–294.
- Marquardt, D. W. : 1963, An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, *J. Soc. Indust. Appl. Math.* **11**, 431–441.
- Matheron, G. : 1967, *Eléments pour une théorie des milieux poreux*, Masson et Cie.
- Matheron, G. et de Marsily, G. : 1980, Is transport in porous media always diffusive? a counter example, *Water Resources Research* **16**, 901–917.
- Moyne, C., Didierjean, S., Amaral Souto, H. P. et Da Silveira, O. T. : 1999, Dispersion thermique en milieux poreux : Modèle à une équation, *Congrès Annuel de la Société Française des Thermiciens*, Elsevier, pp. 467–472.
- Neuman, S. P., Winter, C. L. et Newman, C. M. : 1987, Stochastic theory of field-scale fickian dispersion in anisotropic porous media, *Water Resources Research* **23**, 453–466.
- Parker, J. C. et Valocchi, A. J. : 1986, Constraints on the validity of equilibrium and first-order kinetic transport models in structured soils, *Water Resources Research* **22**, 399–407.
- Passioura, J. B. : 1971, Hydrodynamic dispersion in aggregated media, *Soil Science* **111**, 339–344.
- Petit, F., Fichot, F. et Quintard, M. : 1996, Two-phase flow and heat transfer in porous media : Averaged equations and effective properties in the case of local non-equilibrium, *soumis* .

- Pickens, J. F. et Grisak, G. E. : 1981, Scale-dependent dispersion in a stratified granular aquifer, *Water Resources Research* **17**, 1191–1211.
- Piquemal, J. : 1992, On the modelling of miscible displacements in porous media with stagnant fluid, *Transport in Porous Media* **8**, 243–262.
- Plumb, O. A. et Whitaker, S. : 1988a, Dispersion in heterogeneous porous media i : Local volume averaging and large-scale averaging, *Water Resources Research* **24**, 913–926.
- Plumb, O. A. et Whitaker, S. : 1988b, Dispersion in heterogeneous porous media ii : Predictions for stratified and two-dimensional spatially periodic systems, *Water Resources Research* **24**, 927–938.
- Prat, M. : 1989, On the boundary conditions at the macroscopic level, *Transport in Porous Media* **4**, 259–280.
- Prat, M. : 1992, Some refinements concerning the boundary conditions at the macroscopic level, *Transport in Porous Media* **7**, 147–161.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. et Vetterling, W. T. : 1986, *Numerical recipes : The art of scientific computing*, Cambridge University Press.
- Quintard, M. : 1993, Diffusion in isotropic and anisotropic porous systems : Three-dimensional calculations, *Transport in Porous Media* **11**, 187–199.
- Quintard, M. : 1995, Two-medium treatment of heat transfert in porous media : Numerical results for effective properties, *Advances in Water Resources* **20**, 77–94.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1987, Ecoulement monophasique en milieu poreux : Effet des hétérogénéités locales, *Journal de Mécanique théorique et appliquée* **6**, 691–726.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1988, Two-phase flow in heterogeneous porous media : The method of large-scale averaging, *Transport in Porous Media* **3**, 357–413.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1990, Two-phase flow in heterogeneous porous media i : The influence of large spatial and temporal gradient, *Transport in Porous Media* **5**, 341–379.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1993a, One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems, *Advances in Heat Transfert* **23**, 369–464.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1993b, Transport in ordered and disordered porous media : Volume-averaged equations, closure problems, and comparison with experiment, *Chemical Engineering Science* **48**, 2537–2564.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994a, Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media, *Advances in Water Resources* **17**, 221–239.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994b, Transport in ordered and disordered porous media iii : Closure and comparison between theory and experiment, *Transport in Porous Media* **15**, 31–49.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994c, Transport in ordered and disordered porous media i : The cellular average and the use of weighting functions, *Transport in Porous Media* **14**, 163–177.

BIBLIOGRAPHIE

- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994d, Transport in ordered and disordered porous media ii : Generalized volume averaging, *Transport in Porous Media* **14**, 179–206.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994e, Transport in ordered and disordered porous media iv : Computer generated porous media for three-dimensional systems, *Transport in Porous Media* **15**, 51–70.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1994f, Transport in ordered and disordered porous media v : Geometrical results for two-dimensional systems, *Transport in Porous Media* **15**, 183–196.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1995, Local thermal equilibrium for transient heat conduction : Theory and comparison with numerical experiments, *Int J Heat Mass Transfert* **38**, 2779–2796.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1996a, Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. i : Theoretical development of region-averaged equations for slightly compressible single-phase flow, *Advances in Water Ressources* **19**, 29–47.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1996b, Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. ii : Comparison with numerical experiments for slightly compressible single-phase flow, *Advances in Water Ressources* **19**, 49–60.
- Quintard, M. et Whitaker, S. : 1998, Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media iv : Large-scale mass equilibrium for solute transport with adsorption, *Advances in Water Ressources* **22**, 33–58.
- Rao, P. S. C., Jessup, R. E., Rolston, D. E., Davidson, J. M. et Kilcrease, D. P. : 1980, Experimental and mathematical description of nonadsorbed solute transfer by diffusion in spherical aggregates, *Soil Science Society of America Journal* **44**, 684–688.
- Rubin, Y. : 1991, Transport in heterogeneous porous media : Prediction and uncertainty, *Water resources research* **27**, 1723–1738.
- Saez, A. E., Otero, C. J. et Rusinek, I. : 1989, The effective homogeneous behaviour of heterogeneous porous media, *Transport in Porous Media* **4**, 213–238.
- Saffman, P. G. : 1959, A theory of dispersion in porous media, *Journal of Fluid Mechanics* **6**, 321–349.
- Serrano, S. E. : 1997, Non-fickian transport in heterogeneous saturated porous media, *Journal of Engineering Mechanics* pp. 70–76.
- Skopp, J., Gardner, W. R. et Tyler, E. J. : 1981, Solute movement in structured soils : Two-Region model with small interaction, *Soil Science Society of America Journal* **45**, 837–842.
- Slattery, J. C. : 1967, Flow of viscoelastic fluids through porous media, *AIChE J.* **13**, 1066–1071.
- Souadnia, A. : 1999, *Dispersion permanente et transitoire en milieux poreux spatialement périodiques*, Thèse de 3ème cycle, Institut National Polytechnique de Lorraine.

- Sternberg, S. P. K., Cushman, J. H. et Greenkorn, R. A. : 1996, Laboratory observation of nonlocal dispersion, *Transport in Porous Media* **23**, 135–151.
- Sternberg, S. P. K. et Greenkorn, R. A. : 1994, An experimental investigation of dispersion in layered porous media, *Transport in Porous Media* **15**, 15–30.
- Tackacs, L. L. : 1985, A two-step scheme for the advection equation with minimized dissipation and dispersion errors, *Monthly Weather Review* **113**, 1050–1065.
- Thorbjarnarson, K. W. et Mackay, D. M. : 1997, A field test of tracer transport and organic contaminant elution in a stratified aquifer at the rocky mountain arsenal (denver, colorado, u.s.a.), *Journal of Contaminant Hydrology* **24**, 287–312.
- Tompson, A. F. B. et Gelhar, L. W. : 1990, Numerical simulation of solute transport in three-dimensional randomly heterogeneous porous media, *Water Resources Research* **26**, 2541–2562.
- Urgelli, D. : 1998, *Prise en compte des hétérogénéités par prise de moyenne des transmissivités sur maillage adaptés en simulation de réservoir*, Thèse de 3ème cycle, Université de Provence (Aix-Marseille I).
- Valocchi, A. J. : 1989, Spatial moment analysis of the transport of kinetically adsorbing solutes through stratified aquifers, *Water Resources Research* **25**, 273–279.
- Van Genuchten, M. T. et Dalton, F. N. : 1986, Models for simulating salt movement in aggregated field soils, *Geoderma* **38**, 165–183.
- Van Genuchten, M. T., Tang, D. H. et Guennelon, R. : 1984, Some exact solutions for solute transport through soils containing large cylindrical macropores, *Water Resources Research* **20**, 335–346.
- Van Genuchten, M. T. et Wierenga, P. J. : 1976, Mass transfer studies in sorbing porous media i. analytical solutions, *Soil Science Society of America Journal* **40**, 473–180.
- Warren, J. E. et Skiba, F. F. : 1964, Macroscopic dispersion, *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.* **231**, 215–230.
- Wen, X. H. et Gomez-Hernandez, J. J. : 1998, Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media : A comparison of multi-gaussian and non-multi-gaussian models, *Journal of Contaminant Hydrology* **30**, 129–156.
- Whitaker, S. : 1967, Diffusion and dispersion in porous media, *AIChE J.* **13**, 420–427.
- Whitaker, S. : 1986a, Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy's law, *Transport in Porous Media* **1**, 3–25.
- Whitaker, S. : 1986b, Flow in porous media II : The governing equations for immiscible, two-phase flow, *Transport in Porous Media* **1**, 105–125.
- Whitaker, S. : 1988, Levels of simplification : The use of assumptions, restrictions and constraints in engineering analysis, *Chemical Engineering Ed.* **22**, 104–108.
- Zanotti, F. et Carbonell, R. G. : 1984, Development of transport equations for multiphase systems i : General development for two-phase systems, *Chemical Engineering Science* **39**, 263–278.

BIBLIOGRAPHIE

- Zhang, D. : 1995, Impacts of local dispersion and first-order decay on solute transport in randomly heterogeneous porous media, *Transport in Porous media* **21**, 123–144.
- Zhang, D. et Neuman, S. P. : 1996, Effect of local dispersion on solute transport in randomly heterogeneous media, *Water Resources Research* **32**, 2715–2723.
- Zheng, C. : 1994, *MT3D : A modular three-dimensionnal transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems*, S.S. Papadopoulos and Associates.
- Zurmühl, T. et Durner, W. : 1996, Modeling transient water and solute transport in a biporous soil, *Water Resources Research* **32**, 819–829.

Résumé :

De nombreux travaux visent à caractériser l'influence des hétérogénéités sur le transport de soluté dans les sous-sols. La dispersion anormale observée à l'échelle de l'aquifère est en partie attribuée aux effets du non-équilibre, comme l'échange de masse entre des régions présentant un contraste de perméabilité élevé.

En présence de non-équilibre à grande échelle, le transport miscible ne peut plus être décrit par une équation classique de convection-dispersion. Une méthode de changement d'échelle doit permettre de prendre en compte les hétérogénéités, et donner une représentation macroscopique du transport. Différentes techniques peuvent être utilisées, la méthode de *prise de moyenne volumique à grande échelle* est employée ici. Cette méthode calcule les équations de transport et les propriétés effectives associées par un processus de moyenne spatiale sur les équations correspondant à l'échelle inférieure. Au travers de trois problèmes de fermeture, une expression explicite des propriétés à grande échelle est proposée. Le modèle obtenu peut être vu comme une extension des modèles à double-porosité, capable de représenter la plupart des comportements anormaux. Différents modèles à une équation sont ensuite dérivés et comparés entre eux (comportement asymptotique, hypothèse d'équilibre local, cas de non-équilibre).

Une procédure numérique générale est mise en place afin de résoudre les problèmes de fermeture, et ainsi calculer les coefficients de transport macroscopiques. Afin de valider le modèle à deux équations, les prédictions théoriques sont comparées aux expériences numériques réalisées sur des milieux stratifiés et nodulaires. Nous explorons enfin la possibilité d'utiliser une approche à deux équations en relation avec une définition géo-statistique des hétérogénéités. Des systèmes stratifiés aléatoires et des milieux aléatoires bi-dimensionnels sont étudiés, un bon accord est obtenu entre l'approche théorique et les résultats expérimentaux.

Mots clés :

Transport miscible, dispersion, milieux poreux, hétérogénéités, modèle à deux équations, double-porosité, non-équilibre, dispersion anormal, milieux aléatoires.

Abstract :

The impact of heterogeneities on solute transport in the subsurface has been the focus of intensive research in recent years. Anomalous dispersion at the field-scale is partly attributed to physical non-equilibrium effects such as solute transfer between different regions with highly contrasted characteristics (permeability, porosity, ...).

With large-scale non-equilibrium effects, macroscopic miscible flow cannot be described using the classical advective-dispersive transport equation. An up-scaling method must be used in order to take into account the heterogeneities, and give a macroscopic representation of solute transport. This change of scale problem has been treated theoretically by different up-scaling techniques, such as the method of *large-scale volume averaging*. This method calculates the transport equations and the effective properties at a given scale by an averaging process over the equations corresponding to the lower scale. In this way, the large-scale properties are given explicitly from a local representation of heterogeneities through a set of three closure problems. The resulting model is an extension of dual-porosity models, with the capability of dealing with fully "mobile-mobile" systems. Several one-equation models are derived and compared (asymptotic behavior, local equilibrium assumption, non-equilibrium case).

A numerical procedure is proposed to solve the closure problems for any geometry, and therefore calculate the macroscopic transport coefficients. In order to test the two-equation model, theoretical results are compared to numerical experiments in the case of stratified and nodular systems. Then, we explore the possibility of using this two-medium treatment in connection with a geo-statistical representation of the heterogeneities. Random stratified systems and bi-dimensionnal random media are studied, the results show a reasonable agreement between theory and experiment.

Keywords :

Solute transport, dispersion, porous media, heterogeneity, two-equation model, dual-porosity, non-equilibrium effects, anomalous dispersion, random media.