Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturés : application au site de Äspö (Suède)

Andre Fourno

▶ **To cite this version:**

Andre Fourno. Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturés : application au site de Äspö (Suède). Hydrologie. Université de Poitiers, 2005. Français. NNT : . tel-00218275

HAL Id: tel-00218275
https://theses.hal.science/tel-00218275

Submitted on 26 Jan 2008

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.

THESE

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'université de Poitiers

(Faculté des sciences Fondamentales et Appliquées)
(Diplôme National - Arrêté du 25 avril 2002)

****

Ecole doctorale : Ingénierie Chimique Biologique et Géologique

Secteur de recherche : Terres solides et enveloppe superficielle

****

Présentée par : **André FOURNO**

Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturés : application au site de Äspö (Suède)

Soutenue le 3 juin 2005 devant la Commission d'Examen

Jury :

M. Quintard	Institut Mécanique des Fluides de Toulouse	Président et rapporteur
P. Ackerer	Institut Mécanique des Fluides de Strasbourg	Rapporteur
F. Delay	Université de Poitiers	Directeur de thèse
C. Grenier	Commissariat à l'Energie Atomique	Co-directeur de thèse
B. Noetinger	Institut Français du Pétrole	
H. Benabderrahmane	Agence Nationnal pour la gestion des Déchets RAdioactifs	

Invités :

E. Mouche	Commissariat à l'Energie Atomique
J.O. Selroos	Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co

THESE

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'université de Poitiers

(Faculté des sciences Fondamentales et Appliquées)
(Diplôme National - Arrêté du 25 avril 2002)

****

Ecole doctorale : Ingénierie Chimique Biologique et Géologique

Secteur de recherche : Terres solides et enveloppe superficielle

****

Présentée par : **André FOURNO**

Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturés : application au site de Äspö (Suède)

Soutenue le 3 juin 2005 devant la Commission d'Examen

Jury :

M. Quintard	Institut Mécanique des Fluides de Toulouse	Président et rapporteur
P. Ackerer	Institut Mécanique des Fluides de Strasbourg	Rapporteur
F. Delay	Université de Poitiers	Directeur de thèse
C. Grenier	Commissariat à l'Energie Atomique	Co-directeur de thèse
B. Noetinger	Institut Français du Pétrole	
H. Benabderrahmane	Agence Nationnal pour la gestion des Déchets RAdioactifs	

Invités :

E. Mouche	Commissariat à l'Energie Atomique
J.O. Selroos	Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co

Remerciements

Cette thèse n'aurait pas vu le jour sans l'Agence Nationale pour la gestion des Déchets RAdioactifs (ANDRA) et le Commissariat à l'Energie Atomique (CEA) de Saclay. Aussi, je tiens à remercier ces organismes pour leurs accueils, pour les financements dont j'ai pu bénéficier et pour les nombreuses conférences auxquelles j'ai eu la chance de participer et surtout pour la confiance qu'ils m'ont témoignée en me confiant ce sujet de thèse. Je tiens particulièrement à remercier, le laboratoire de Modélisation des Transferts en Milieux Solides (MTMS) qui m'a accueilli durant ces trois dernières années ainsi que le laboratoire d'étude des Transferts et de Mécaniques des Fluides (LTMF), dont la proximité a été très enrichissante.

En particulier, je tiens à remercier Monsieur Emmanuel Mouche pour m'avoir confié ce sujet de thèse, Monsieur Hakim Benabderrahmane pour ses conseils, son soutien et sa gentillesse, mon directeur de thèse Monsieur Frédéric Delay pour avoir accepté de diriger cette thèse et dont les conseils et le soutien ont grandement facilité mon travail et enfin, Messieurs Philippe Ackerer et Michel Quintard pour avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse. Ces remerciements s'adressent aussi plus particulièrement à mon codirecteur de thèse Monsieur Christophe Grenier dont l'enthousiasme, les conseils et l'ouverture d'esprit ont conduit à l'aboutissement de ce travail tout en m'apportant une vision inattendue du chercheur "shaolin" chez qui sciences, philosophie et art cohabitent. A son contact, je pense avoir tiré un enseignement dont je lui serai toujours redevable.

Chacune des réunions effectuées avec ces derniers a contribué, de manière importante, à l'avancement de mon travail tout en m'insufflant l'énergie nécessaire à sa poursuite. Un grand merci aussi à Monsieur Gilles Bernard-Michel qui a été impliqué dans ma thèse lors des dernières étapes.

Pour m'avoir accepté à leur coté, je tiens aussi à remercier l'ensemble des membres de la TASK FORCE de Äspö. A leur contact, j'ai énormément appris sur le travail en équipe avec des collaborations internationales, sur les difficultés liées aux études expérimentales. L'école doctorale GRN de Paris VI et ses thèsards méritent aussi des remerciements. Grâce à eux j'ai pu m'initier aux géosciences et effectuer deux stages de terrain très instructifs.

Durant les trois mois d'isolement forcé consécutifs à la fin de mon contrat, je ne remercierai jamais assez Messieurs Alain Cartalade, Alexandre Bleyer et de nouveau Christophe pour l'intérêt qu'ils témoignaient à mon travail, leurs encouragements, leur bonne humeur, leurs coups de téléphone et visite qui rompaient ainsi ces durs jours de solitude.

Enfin, pour avoir mis fin à cet exil et pour leur accueil chaleureux tout au long des

derniers mois de cette thèse, je remercie l'ensemble du laboratoire CMAP de polytechnique.

Ces trois années de thèse m'auraient sans doute paru beaucoup plus longues sans la présence de stagiaires et thèsards qui se sont succédées dans mon bureau. Aussi, merci à Caro, Sophie, Céline et Nina pour leur gentillesse et bonne humeur. Ces remerciements s'adressent aussi aux autres thèsards et postdocs du laboratoire Nico, Thibault, Karima, Nathalie, Elise dont le contact a été très enrichissant et agréable. Un grand merci à l'ensemble de mes amis de lycée, de promo, et sportifs en tout genre ... Le remerciement final ira bien entendu à papa, maman et à la soeurette à qui mon travail doit aussi beaucoup.

Résumé

Dans le cadre des travaux de recherche et de développement des laboratoires souterrains dédiés à la problématique du stockage des déchets radioactifs en milieux géologiques profonds, l'étude des transferts dans les milieux fracturés nécessite des outils de modélisation performants. Ces outils permettent d'analyser la phénoménologie du transport et de la rétention des radionucléides à l'échelle des expérimentations et de contribuer à la construction des modèles conceptuels de sûreté du stockage sur plusieurs centaines de milliers d'années.
La complexité géométrique a conduit à la mise au point de deux principaux types d'approches pour modéliser l'écoulement et le transport. Une première famille connue sous le nom "d'approches discrètes" limite la résolution des transferts aux réseaux de fractures. Dans le cadre de ces approches, différents outils de génération du maillage ont été mis au point (maillage des fractures déterministes et/ou maillages stochastiques de fractures de différentes échelles). Une seconde classe, appartenant à la famille des approches continues, s'appuie sur la notion de volume élémentaire représentatif (VER) et repose sur des processus d'homogénéisation pouvant comporter différents continua. L'inconvénient de ces approches est que, pour les approches discrètes, la modélisation de la diffusion matricielle conduit à des coûts informatiques élevés tandis que, pour les approches continues, la géométrie des fractures n'est pas prise en compte. Ainsi, des approches hybrides ont été mises au point. Les approches hybrides combinent la représentation en différents continua des fractures secondaires avec une représentation discrète des principales fractures. Néanmoins, bien qu'étant efficaces pour la résolution de l'écoulement, les approches hybrides n'ont pas été étendues à la résolution du transport.
L'approche Smeared fractures, objet de ce travail, appartient à cette dernière classe d'approches. Elle consiste à représenter les caractéristiques du milieu fracturé par un champ continu hétérogène sur un maillage régulier. Les fractures principales sont directement prises en compte grâce à l'affectation de propriétés corrigées aux mailles les représentant ; les autres mailles pouvant faire l'objet de différents processus d'homogénéisation prenant en compte les fractures de moindre importance ou représentant uniquement le bloc sain aussi appelé "matrice".
Notre approche Smeared Fractures se distingue des autres approches Smeared Fractures, utilisées par différents auteurs, par l'obtention d'un flux exact lors de la résolution de l'écoulement dans une fracture unique. La modélisation du transport, non abordée jusqu'à présent pour ce type d'approche, est effectuée de manière continue dans les fractures ainsi que dans les blocs de roches saines.
Après un rapide tour d'horizon du cadre de travail et des approches de modélisation, ce

document présentera l'aspect géométrique et théorique de l'approche pour s'achever par l'évaluation de ses performances et la qualité de ses résultats.
La génération du maillage ainsi que l'implémentation des propriétés associées ont été mises en oeuvre pour le problème de l'écoulement et du transport eulérien dans un réseau de fractures. La qualification et la validation de l'approche Smeared Fractures ont été effectuées par la comparaison des résultats avec des calculs de référence utilisant un maillage dédié à la géométrie du milieu. Le travail a été effectué dans CAST3M (code de calcul développé au CEA) pour un schéma de résolution des équations en éléments finis mixtes hybrides. L'approche a été testée sur différentes géométries, (2D et 3D), allant de la géométrie simple d'une fracture unique au problème plus complexe appliqué à un réseau de fractures et pour différents jeux de propriétés. Ayant donné de bons résultats en termes de précision des calculs, facilité de génération du maillage et ce pour des temps de calcul inférieurs, l'approche Smeared Fracture constitue un nouvel outil intéressant de modélisation des transferts en milieux fracturés à l'échelle d'un bloc, partiellement homogénéisé, ne possédant qu'un nombre limité de fractures.
A partir des différents tests de validation, les domaines d'application de l'approche ont pu être mis en évidence. L'utilisation optimale de l'approche correspond, d'une part, aux simulations de l'écoulement et du transport avec une diffusion matricielle ne jouant aucun rôle, (les transferts sont modélisés uniquement dans les fractures) et, d'autre part, pour des simulations pour lesquelles la diffusion dans les zones matricielles est importante et se traduit par une forte profondeur de pénétration de la matière dans la matrice et un retard dans les temps de sortie de la matière (simulation au temps longs). Ce second domaine d'application correspond aux conditions des études de la faisabilité d'un site de stockage de déchets nucléaires en profondeur. Cette approche répond donc aux besoins formulés par l'Agence Nationale pour la gestion des Déchets RAdioactif (ANDRA) et constitue une nouvelle alternative de modélisation pour les études phénoménologiques et d'évaluation de performance menées dans le laboratoire souterrain de Äspö. Différentes applications à ce site granitique suédois seront présentées.
La prise en compte d'une faible diffusion dans la matrice, au moyen d'un traitement par double porosité, ainsi que le traitement des incertitudes des propriétés physiques du milieu pourront faire l'objet de perspectives intéressantes à la suite de ce travail. De plus, la problématique du stockage géologique profond ne constitue pas le seul domaine d'application de cette approche. D'autres problématiques sont susceptibles d'utiliser cet outil (industrie pétrolière, environnement ...).

Table des matières

1 Introduction **9**

1.1 Problématique du stockage de déchets radioactifs et aspect multi-échelle . . 10

1.2 Milieu géologique étudié 11

1.2.1 Les milieux fracturés : définition et processus de formation 11

1.2.2 Phénomènes physiques 16

1.2.3 Etude pédagogique d'une fracture 1D : influence de la diffusion matricielle 17

1.2.4 Apports et contraintes liés à l'utilisation d'un maillage régulier. . . 22

1.3 Les différentes approches de modélisation et l'approche Smeared Fractures 27

1.3.1 Solutions analytiques 28

1.3.2 Modèles discrets 30

1.3.3 Modèles continus 32

1.3.4 Modèles hybrides 33

2 L'approche Smeared Fractures : développements théoriques et implémentation **37**

2.1 Principes de base de l'approche Smeared Fractures 39

2.2 Smeared Fractures pour le 2D 40

2.2.1 Maillage associé à l'approche Smeared Fractures 40

2.2.2 Formulation EFMH et applications 41

2.2.3 Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente 44

2.2.4 Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien 46

2.2.5 Critères de monotonie 48

2.2.6 Bilan de l'approche 2D 49
2.2.7 Cohérence du temps de sortie en convection pure 50
2.2.8 Perspective : modélisation des hétérogénéités au sein d'une fracture 54
2.2.9 Implémentation, travail informatique dans CAST3M 55
2.3 Smeared Fractures pour le 3D 56
2.3.1 Maillage associé à l'approche Smeared Fractures 56
2.3.2 Propriétés équivalentes : scalaires ou tensorielles ? 59
2.3.3 Formulation EFMH et applications 61
2.3.4 Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente 70
2.3.5 Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien 76
2.3.6 Orientation des tenseurs équivalents 81
2.3.7 Critères de monotonie 81
2.3.8 Bilan de l'approche 3D 83
2.3.9 Cohérence du temps de sortie en convection pure 85
2.3.10 Implémentation, travail informatique dans CAST3M 85

3 Qualification et Validation de l'approche Smeared Fractures 89
3.1 Stratégie pour la qualification et la validation de l'approche 89
3.2 Génération du maillage dédié 2D 90
3.3 Qualification et validation : approche 2D 92
3.3.1 Influence de l'inclinaison : fracture unique 2D 92
3.3.2 Transport : influence des phénomènes modélisés 93
3.3.3 Synthèse sur la validation de l'approche Smeared Fracture 2D . . . 123
3.4 Qualification et validation : approche 3D 124
3.4.1 Fracture unique 3D 124
3.4.2 Ecoulement 124
3.4.3 Transport 127
3.4.4 Synthèse sur la validation de l'approche Smeared Fracture 3D . . . 136

4 Application au site expérimental de Äspö **139**

4.1 Présentation du site de Äspö 139

4.2 Tâche 6 141

4.3 Etude d'un réseau 2D de fractures 143

4.4 Modélisation 3D : Tâche 6D (test de traçage) 160

4.5 Modélisation 3D : Tâche 6E 165

4.5.1 Sensibilité au nombre de fractures 166

4.5.2 Modélisation du transport 168

5 Conclusions **175**

6 Perspectives **179**

Chapitre 1

Introduction

L'exploitation de l'énergie nucléaire, que ce soit dans ses applications civiles ou militaires, conduit à s'interroger sur différentes problématiques. Parmi celles-ci, certaines sont liées à la gestion de l'aval du cycle comme les problèmes d'entreposage et de stockage des déchets faiblement ou fortement radioactifs ou à la transmutation de ces déchets.

L'étude du stockage géologique profond des déchets a été confiée à l'Agence Nationale pour la gestion des Déchets RAdioactifs (ANDRA) avec l'objectif de fournir tous les éléments permettant de décider en 2006 la création éventuelle d'un centre de stockage en formation géologique profonde (deux milieux sont en cours d'étude : l'argile ou le granite). Les concepts de stockage reposent sur un principe de barrières multiples comprenant le colis de déchets (le déchet et le matériau qui le stabilise dans un emballage adéquat), la barrière ouvragée qui est interposée entre le colis de déchets et la roche, et la barrière géologique qui est la roche elle-même. Les caractéristiques des sites (barrières géologiques) sont étudiées, en premier lieu, à partir de la surface puis, dans un second temps, in situ en laboratoires de recherche souterrains. Ainsi, l'ANDRA participe activement au programme de caractérisation géologique, hydrogéologique et hydrogéochimique du granite et de sa fracturation mené sur des sites expérimentaux étrangers, parmi lesquels le site granitique de Äspö en Suède ([1]). L'extrapolation dans le temps et l'espace de cette caractérisation est d'abord approchée par la modélisation d'expériences puis par des simulations du comportement des milieux et des phénomènes sur une période de temps de sûreté de plusieurs centaines de milliers d'années. Dans ce milieu, les fractures constituent les zones privilégiées de transferts de radio-éléments. La compréhension et la modélisation des phénomènes physiques et chimiques agissant dans ce milieu représentent, donc, une étape clef dans la construction des modèles de calcul de sûreté. Les études menées sur ces sites sont effectuées pour deux types de conditions d'écoulement. Un premier type correspond à des études sur les temps courts (quelques mois), c'est-à-dire pour des conditions d'écoulements perturbés (test de traçage, conditions expérimentales). Un second type d'études a pour objet de prédire les transferts de radio-éléments après fermeture du site de stockage (conditions naturelles). Pour ces études prédictives, les écoulements sont lents et s'effectuent sur des temps longs (quelques millénaires). Suivant les conditions de ces études, le comportement du milieu sera différent.

Avec pour objectif le développement d'un modèle de simulation des phénomènes aux temps longs, une approche Smeared Fractures a été développée et implémentée dans le code de calcul, CAST3M, du CEA, [BET ANDRA 2002].
L'originalité de ce type d'approche est de se soustraire au maillage non structuré du milieu fracturé, étape nécessitant de gros moyens informatiques, en travaillant sur un maillage régulier. Le choix de représenter le milieu fracturé par un maillage régulier nécessite d'avoir choisi l'échelle de travail et de fournir les propriétés associées pour modéliser le milieu à cette échelle. La résolution des transferts est effectuée de manière continue par une résolution en éléments finis mixtes hybrides mais nécessite, préalablement, de déterminer des propriétés équivalentes à associer aux fractures, afin de tenir compte de leur représentation géométrique. Notre approche se distingue des autres approches de type Smeared Fractures par une détermination de propriétés équivalentes assurant la conservation des flux pour des problèmes 2D. Pour les problèmes 3D, la conservation des flux est assurée pour deux directions principales, minimisant ainsi l'erreur commise pour des directions quelconques toujours décomposables suivant ces deux directions principales. L'apport de notre approche réside, aussi, dans son extension à la résolution du transport, jusqu'à présent non abordée par les autres approches Smeared Fractures.

Testée sur différentes géométries, pour différentes configurations d'écoulement et de transport, cette approche Smeared Fractures se révèle très prometteuse par sa facilité de mise en oeuvre et des gains de temps de calcul obtenus. Elle ouvre des perspectives de tests de sensibilité aux nombres de fractures, aux paramètres physiques. Son extension aux problèmes de modélisation de l'adsorption, à la prise en compte de l'hétérogénéité peut être complétée par la mise au point, pour le transport, d'une version en volumes finis (évitant les problèmes de concentrations négatives liés aux EFMH dûs non respect du principe du maximum liés), par une utilisation dans le cadre de simulation de type Monte Carlo (afin de tenir compte d'incertitudes géométriques ou physiques du milieu).

Néanmoins, comme toutes les approches, une bonne étude des transferts en milieux naturels passe par une bonne connaissance des problèmes liés à la modélisation et au milieu naturel lui-même. Ainsi, avant d'aborder la mise au point de cette approche, sa validation et les différentes applications effectuées, la problématique du stockage de déchets radioactifs, les milieux fracturés, les phénomènes physiques rencontrés et leurs conséquences sur la modélisation des milieux naturels vont être présentés.

1.1 Problématique du stockage de déchets radioactifs et aspect multi-échelle

Les études liées au stockage de déchets radioactifs présentent certaines spécificités et objectifs dont il faudra tenir compte. Il est ainsi possible, parmi ceux-ci, de distinguer un double aspect :

- ⋆ Aspect multi-échelle

Un site de stockage de déchets radioactifs s'étend sur plusieurs kilomètres. Suivant, que l'ensemble du site ou une portion de ce site est étudié, différentes échelles de fracturation vont pouvoir être caractérisées. Ainsi, deux échelles sont particulièrement étudiées :

⇒ Le champ proche qui correspond à l'échelle d'un bloc fracturé incluant quelques fractures.

⇒ Le champ lointain pour lequel le réseau et les blocs matriciels interviennent.

L'aspect multi-échelle de la géométrie modélisée pour ces études constitue, donc, une spécificité importante des études de stockage de déchets radioactifs.

★ Aspect temporel : "Performance Assessment (PA) time"
L'aspect temporel constitue une seconde spécificité importante des études de stockage de déchets radioactifs. Deux échelles de temps sont considérées :

⇒ Echelle expérimentale (quelques mois à quelques années).
Les expériences ne peuvent pas être effectuées en conditions naturelles car leur durée serait trop importante. Ainsi, elle sont effectuées pour des conditions d'écoulements forcés limitant leur durée de quelques mois à quelques années.

⇒ Echelle de sûreté (quelques centaines à quelques millions d'années).
En conditions naturelles d'écoulement, les échelles de temps sont beaucoup plus importantes que l'échelle expérimentale. La durée des simulations peut aller jusqu'à des millions d'années et constitue une deuxième échelle de temps.

Que ce soit par l'importance des dimensions spatiales ou temporelles, un tel problème va nécessiter des ressources informatiques importantes. Aussi, des hypothèses vont devoir être formulées, puis justifiées, afin de rendre abordable une modélisation en condition de fermeture de site. Ces hypothèses vont conduire à l'élaboration d'un modèle simplifié, le modèle PA, à partir duquel seront effectuées les études prédictives. Outre les hypothèses simplificatrices sur lesquelles il est basé, le modèle PA sera aussi caractérisé par les données qu'il faudra lui fournir. C'est dans ce contexte que l'approche Smeared Fractures, objet de ce travail, a été mise au point.

1.2 Milieu géologique étudié

1.2.1 Les milieux fracturés : définition et processus de formation

Intéressons nous tout d'abord à ce qu'est une fracture. Les fractures résultent de contraintes mécaniques sur une roche, entraînant des discontinuités entre différentes zones

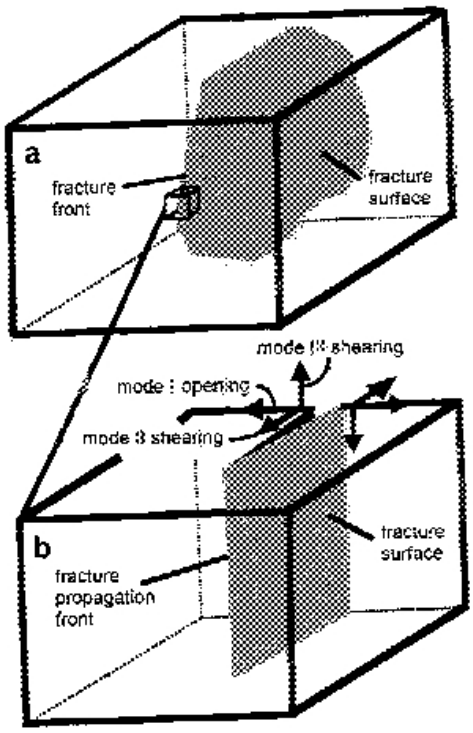


Fig. 1.1 – (a) La fracture et son front de propagation (b) les trois modes fondamentaux joints (mode I) and faults (mode II ou III) tirés de [Pollard et Aydin 1988].

ou surfaces. D'une manière générale, le terme 'fracture' désigne tous les types de discontinuité dans une roche. Deux grandes classes de fractures, dépendant du type de déplacement des faces de la fracture, peuvent être distinguées [2] :

- (i) fractures dilatées (joints). Les deux surfaces de la fracture ont un mouvement opposé l'une de l'autre. La direction du mouvement est perpendiculaire aux surfaces. Ce type de fracture est aussi appelé fracture de mode I [Law et Wilshaw 1975] (mode opening, fig. 1.1).
- (ii) fractures de cisaillement (faults). Les surfaces de la fracture ont un mouvement parallèle l'une par rapport à l'autre. Si le mouvement est perpendiculaire au front de propagation de la fracture, la fracture est dite de mode II, s'il est parallèle de mode III (mode 2, 3 shearing, fig. 1.1).

Néanmoins, ces fractures peuvent, aussi, être fermées. Celles-ci sont encore appelées anticraks et correspondent à des fractures dans des roches sédimentaires, dont les surfaces sont soudées.

Différents mécanismes peuvent être à l'origine de la formation des fractures [2], et peuvent être classés en deux catégories :

$\Rightarrow$ les actions purement mécaniques comme :

- la variation du poids de couches provoquée par des soulèvements ou de l'érosion (lithostatique).
- des pressions dues à un fluide.
- des mouvements tectoniques.
- des processus géologiques (activité volcanique, séismes ...).
- un impact d'objets extraterrestres.

$\Rightarrow$ les mécanismes thermiques.

Ces phénomènes peuvent s'étendre sur des temps extrêmements longs, se combiner, pour générer un milieu fracturé complexe. D'autre part, le milieu est affecté sur différentes échelles. Par exemple, un mouvement tectonique aura un impact à grande échelle, tandis qu'une variation de la température aura un effet plus localisé. La géométrie d'un milieu fracturé va donc dépendre de l'échelle considérée. La figure 1.2 illustre parfaitement la variation de la géométrie du milieu fracturé suivant l'échelle à laquelle il est regardé. Ainsi, à l'échelle de quelques centimètres, le milieu fracturé se réduit à une fracture unique au contact avec deux types de zones matricielles (des matériaux de remplissage ou "gouge" et du granite altéré). A l'échelle de quelques mètres, la géométrie est totalement différente et beaucoup plus complexe. Le réseau de fractures est formé, à cette échelle, d'une fracturation de fond accompagnée d'une zone de fracturation plus importante. Enfin pour une échelle de quelques centaines de mètres, le réseau est composé de structures fortement perméables de connectivité différente de celle rencontrée aux échelles inférieures.

Ainsi, suivant les différents types de fractures et leurs mécanismes de formation, des matériaux de caractéristiques physiques différentes sont observés à leur voisinage, figure 1.3.

[Winberg et al. 2000] proposent une représentation conceptuelle d'une fracture (fracture A) pour le site de Äspö, figure 1.3. A partir de cette représentation, on constate qu'une fracture peut être constituée de différents chenaux connectés, que son ouverture est variable dans l'espace et qu'elle possède des zones stagnantes. Elle est en contact avec différents matériaux comme la cataclasite, la mylonite ou des matériaux de remplissage. La roche peut, quant à elle, être décomposée en deux zones, la roche altérée et la roche non altérée, figure 1.3. Afin d'illustrer l'hétérogénéité de ces matériaux, il est intéressant de se référer aux travaux de [Mazurek et al. 2003] et [Dershowitz et al. 2003], dans le cadre des études menées sur le site granitique de Äspö en Suède. Ainsi à Äspö, les fractures dilatées ou diaclases sont entourées directement par une zone altérée de roche, tandis que les fractures de cisaillement sont au contact de différents matériaux comme la mylonite, la cataclasite ou des matériaux de remplissage (fault gouges), [Mazurek et al. 2003]. Les propriétés de ces matériaux différent, [Dershowitz et al. 2003], et le milieu fracturé n'est pas exclusivement constitué d'un type de fractures mais de combinaisons dont les plus classiques sont les fractures dilatées cisaillées (faulted joints) ou les fractures cisaillées dilatées (jointed faults) (fig. 1.4, [Mazurek et al. 2003]).

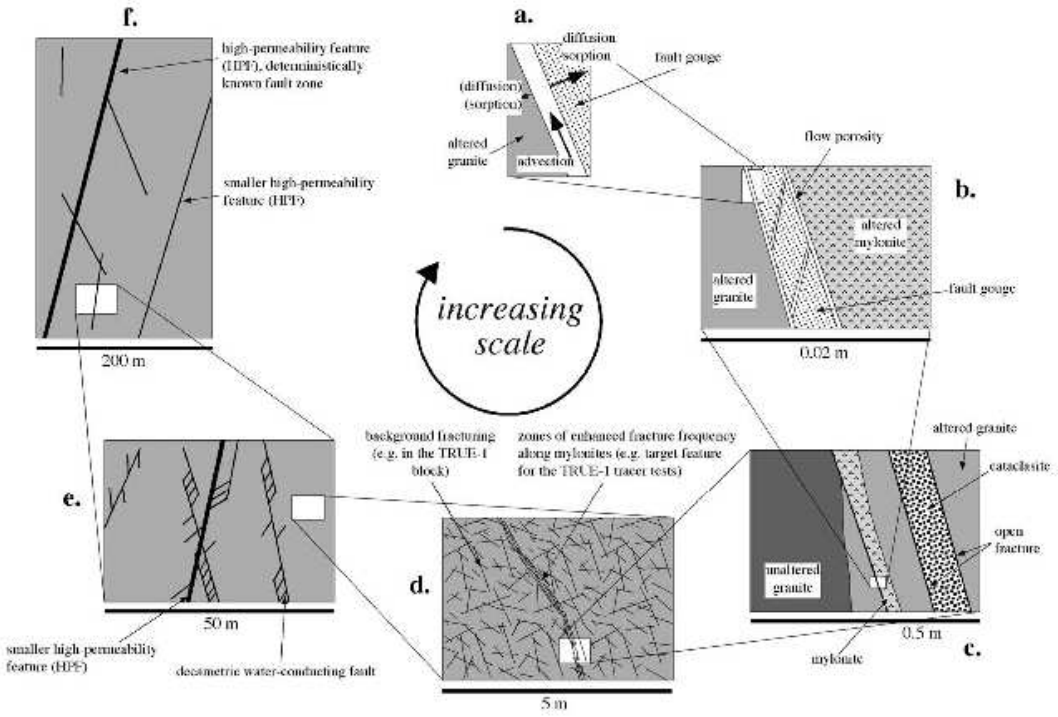
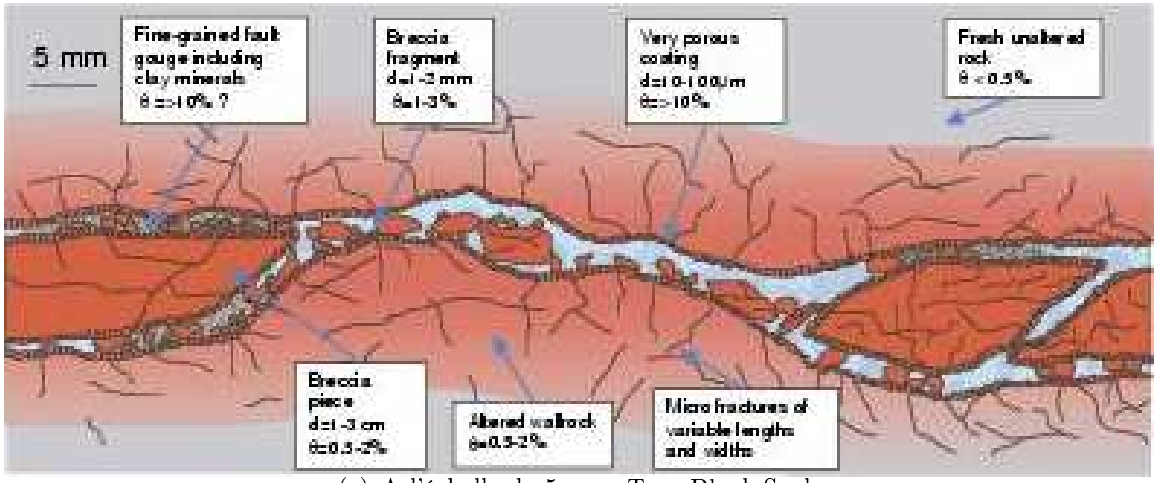
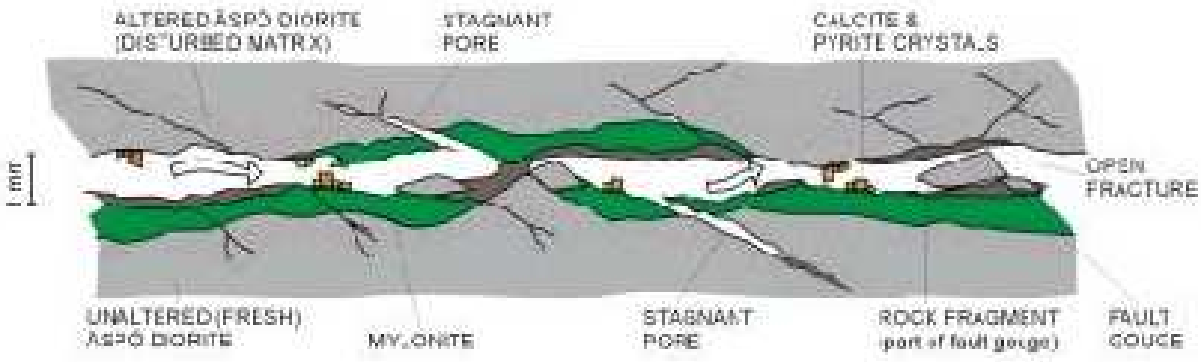


Fig. 1.2 – Série de modèles conceptuels montrant la géométrie de fractures à différentes échelles [Mazurek et al. 2003].



(a) A l'échelle de 5mm : True Block Scale



(b) A l'échelle de 1mm : Feature A

Fig. 1.3 – Représentation conceptuelle d'une fracture

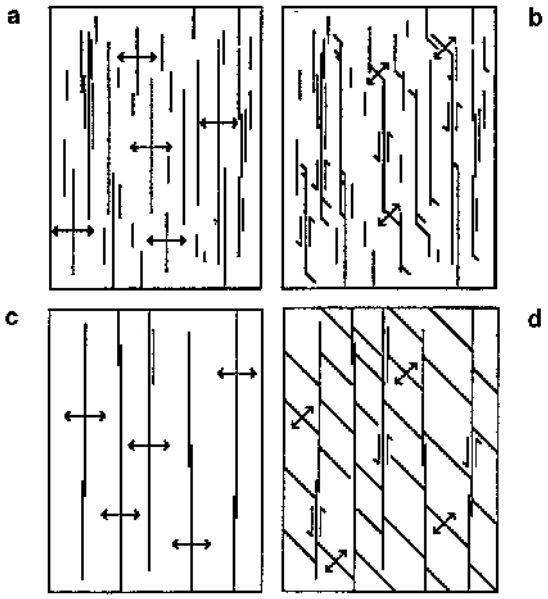


Fig. 1.4 – Formation de fractures dilatées cisaillées. (a) et (c) fractures dilatées originales, (b) et (d) fractures dilatées cisaillées d'aprés [Pollard et Aydin 1988].

Un milieu fracturé est donc un milieu très hétérogène : différents types de fractures, différents matériaux composent la matrice. Il possède, de plus, une géométrie complexe avec différentes échelles de fracturation. L'identification des propriétés est difficile voire impossible et des incertitudes existent que ce soit sur la géométrie ou sur les propriétés physiques des différents matériaux. Ces incertitudes sont généralement appréhendées par des méthodes et des processus stochastiques s'appuyant sur la variabilité des données d'observation sur site.

1.2.2 Phénomènes physiques

Aux caractéristiques hétérogènes et à la complexité de la géométrie des milieux fracturés, s'ajoutent des mécanismes de transferts de cinétiques très différentes, faisant intervenir différentes disciplines scientifiques, [De Marsily 1981]. Ces mécanismes peuvent être classés en deux catégories :

- ⋆ Les phénomènes convectifs et dispersifs.
  Ces phénomènes sont aussi les plus rapides. Ils se composent principalement des phénomènes de convection et de dispersion dans les fractures circulantes (certaines fractures peuvent être colmatées). Le traceur, sur lequel ils agissent, se propage rapidement des fractures vers l'extérieur.

  - Ecoulement :
    Pour un fluide homogène incompressible, évoluant dans un milieu poreux

saturé, l'écoulement du fluide peut se ramener à un système de deux équations [De Marsily 1981] : l'équation de Darcy dont l'article [Brown 2002] retrace l'historique et l'équation de conservation de masse. La combinaison de ces deux équations forme une équation de diffusion.

$$\begin{cases} \vec{q} = -\bar{\bar{K}} * \vec{grad}h & \text{(équation de Darcy)} \\ div(\vec{q}) = s & \text{(équation de conservation de masse)} \end{cases}$$

Où $\vec{q}$ est la vitesse de Darcy, $\bar{\bar{K}}$ le tenseur de perméabilité, h la charge et s le terme puit-source.

- Transport :
  L'équation du transport est l'équation de convection-dispersion suivante :

$$\omega.R.\frac{\partial C}{\partial t} = div(\omega.\bar{\bar{D}}^*.\vec{grad}C - C.\vec{q}) \tag{1.1}$$

avec
C la concentration $(kg.m^{-3})$
$\bar{\bar{D}}^*$ le tenseur de dispersion $(m^2.s^{-1})$
ω la porosité $(-)$
$\vec{q}$ la vitesse de Darcy $(m.s^{-1})$
R le coefficient de retard dû à l'adsorption $(-)$.

★ Les phénomènes de rétention.
Aux phénomènes rapides précédents sont associés d'autres plus lents. Ces derniers tendent à ralentir le cheminement de la matière. Parmi eux, un des plus influant est le phénomène de diffusion dans la matrice. Son action se traduit par la rétention d'une partie de la matière, entraînant des temps de sorties beaucoup plus longs, [Neretnieks 1980]. A ce phénomène, s'ajoutent des phénomènes physicochimiques comme l'adsorption, la précipitation, et autres réactions chimiques diverses. Le problème de transport de colloïdes n'est pas considéré.

1.2.3 Etude pédagogique d'une fracture 1D : influence de la diffusion matricielle

Afin d'illustrer les actions du phénomène de diffusion, exposons le problème classique du transport dans une fracture unique (fig. 1.5). L'équation générale de transport peut s'écrire sous deux formes, suivant que le milieu fracturé est considéré en globalité ou en deux continua. En considérant le milieu dans sa globalité, l'équation de transport s'écrit classiquement sous la forme :

$$\omega.R.\frac{\partial C}{\partial t} = div(\omega.\bar{\bar{D}}^*.\vec{grad}C - C.\vec{q}) \tag{1.2}$$

	Fracture	Matrice
ω	ω_{fr}	ω_m
$\bar{\bar{D}}^*$	$\begin{vmatrix} D_L^* & 0 & 0 \\ 0 & D_T^* & 0 \\ 0 & 0 & D_T^* \end{vmatrix}$	$\omega_m * d$
$\vec{q}$	$\vec{q}$	$\vec{0}$
R	$R_a = 1 + \frac{2}{e} K_a$	$R_d = 1 + \frac{1-\omega_m}{\omega_m} \rho_s K_d$

Tab. 1.1 – Expression des paramètres de transport pour la fracture et la matrice

Suivant que la zone considérée sera la fracture ou la matrice, les indices fr ou m seront affectés aux paramètres de l'équation 1.2, comme indiqué dans le tableau 1.1. Les expressions des coefficients de retards sont déterminées avec l'hypothèse que la concentration massique, représentant la masse d'éléments absorbés par unité de masse solide, est proportionnelle à la concentration du milieu ($F = K_d.C$), [De Marsily 1981].

avec
- C la concentration $(kg.m^{-3})$
- $\bar{\bar{D}}^*$ le tenseur de dispersion $(m^2.s^{-1})$
- ω la porosité $(-)$
- e l'ouverture (m)
- $\vec{q}$ la vitesse de Darcy $(m.s^{-1})$
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore $(m^2.s^{-1})$
- $D_L^* = d_p^{fr} + \alpha_L * \frac{q}{\omega_{fr}}$ le coefficient de diffusion longitudinale $(m^2.s^{-1})$.
- $D_T^* = d_p^{fr} + \alpha_T * \frac{q}{\omega_{fr}}$ le coefficient de diffusion transverse $(m^2.s^{-1})$
- α le coefficient de dispersivité : T transverse L longitudinal (m)
- R le coefficient de retard dû à l'adsorption $(-)$
- K_a le coefficient d'adsorption surfacique (m)
- K_d le coefficient d'adsorption matricielle $(m^3.kg^{-1})$
- ρ_s la masse volumique $kg.m^{-3}$

Si le bloc fracturé est modélisé par deux continua, (matrice et fracture), un terme de couplage, $S = \frac{2}{e}\omega_m d \frac{\partial C_m}{\partial z}|_{z=0}$, doit être rajouté dans l'équation de transport de la fracture, [Bear et al. 1993] où z est la direction orthogonale au plan de fracture. Les équations de transport deviennent alors :

- pour la fracture (suite à l'homogénéisation verticale sur e)

$$\omega_{fr} R_a \frac{\partial C_{fr}}{\partial t} = \omega_{fr} D_L^* \frac{\partial^2 C_{fr}}{\partial x^2} - q \frac{\partial C_{fr}}{\partial x} + \frac{2}{e} \omega_m d \frac{\partial C_m}{\partial z}|_{z=0} \tag{1.3}$$

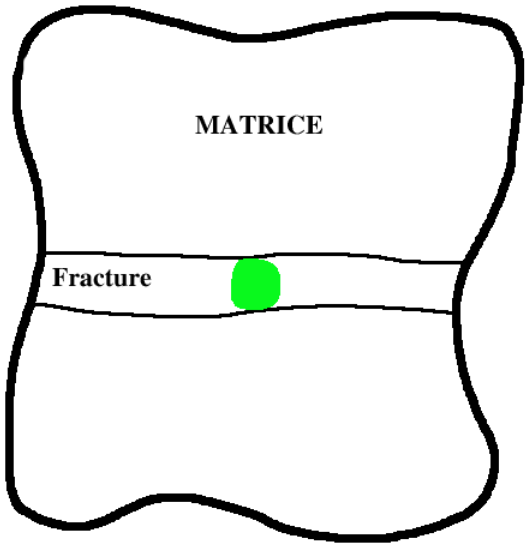


Fig. 1.5 – Illustration du problème de la fracture unique.

- pour la matrice

$$R_d \frac{\partial C_m}{\partial t} = d \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} \tag{1.4}$$

avec comme condition à l'interface fracture-matrice $C_m = C_f$

Etude analytique

[Neretnieks 1982] propose une solution analytique au problème 1.3 et 1.4, en réponse à une injection continue de concentration C_0, en se plaçant en convection pure dans une fracture unique et pour une matrice infinie.

$$\frac{C}{C_0} = erfc\left(\frac{\omega_m.d.\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{D_a.(t-\tau_w.R_a)}}\right) \tag{1.5}$$

où $D_a = \frac{d}{R_d}$.
A partir de cette solution, il est possible de déterminer la solution en réponse à un créneau de taille t_0.

$$\frac{C}{C_0} = erfc\left(\frac{\omega_m.d.\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{D_a.(t-\tau_w.R_a)}}\right) - erfc\left(\frac{\omega_m.d.\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{D_a.(t-t_0-\tau_w.R_a)}}\right) \tag{1.6}$$

∇h	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}
R_p	1.2	3.4	25.

Tab. 1.2 – Valeur du coefficient de retard : sensibilité au gradient de charge ($e = 2.6.10^{-2}$ m)

e (m)	$2.6.10^{-2}$	10^{-2}	5.10^{-3}
R_p	1.2	1.6	2.3

Tab. 1.3 – Valeur du coefficient de retard : sensibilité à l'ouverture de fracture ($\nabla h = 10^{-2}$)

Le but de cette étude est de déterminer une expression du temps du maximum de concentration, τ_{max}, c'est à dire le temps annulant la dérivée de la solution 1.6 en réponse à un Dirac de concentration. Ce temps peut être exprimé en fonction d'un coefficient de retard du pic, R_p et du temps de sortie convectif, τ_w, après avoir effectué un développement limité en considérant t_0 petit.

$$\tau_{max} = R_p.\tau_w \tag{1.7}$$

$$R_p = R_a + \frac{2}{3}\frac{\omega_m^2.d.R_d}{\omega_{fr}^2.e^2}\tau_w \tag{1.8}$$

Cette étude du maximum de la solution de [Neretnieks 1982] ne fournit pas d'information sur la forme de la courbe mais permet d'établir une estimation du temps de sortie du maximum de concentration. Dans le cas du problème simple du transport dans une fracture unique, de transmissivité 10^{-7} $m^2.s^{-1}$ et de porosité $2.1.10^{-1}$, le coefficient de retard, R_p, peut être calculé en considérant différentes vitesses d'écoulement et différentes ouvertures de fracture. La matrice considérée est de porosité 6.10^{-3} et de coefficient de diffusion de pore, $d = 5.10^{-11}$ $m^2.s^{-1}$. Les tableaux 1.2 et 1.3 présentent les valeurs obtenues pour une longueur de parcours de 230 m. Dans les deux cas, les effets d'adsorption sont négligés. L'ouverture importante de la fracture est due à la prise en compte de différentes zones entourant celle-ci et qui ont fait l'objet d'un processus d'homogénéisation, expliquant ainsi la porosité de fracture différente de 1. Les valeurs utilisées sont celles du site expérimental de Äspö, dont le gradient de charge, en écoulement naturel, est estimé à 0.1%.

Les résultats des tableaux 1.2 et 1.3 indiquent que le temps de sortie est d'autant plus grand que l'ouverture de la fracture ou la vitesse d'écoulement sera faible. La diffusion matricielle joue, par conséquent, un rôle d'autant plus important lorsque la fracture est de faible ouverture ou lorsque l'écoulement est lent. Un phénomène de diffusion matricielle important est caractérisé par un temps de sortie beaucoup plus important. Ainsi, la modélisation du transport dans un milieu fracturé nécessite la prise en compte du phénomène de diffusion matricielle.

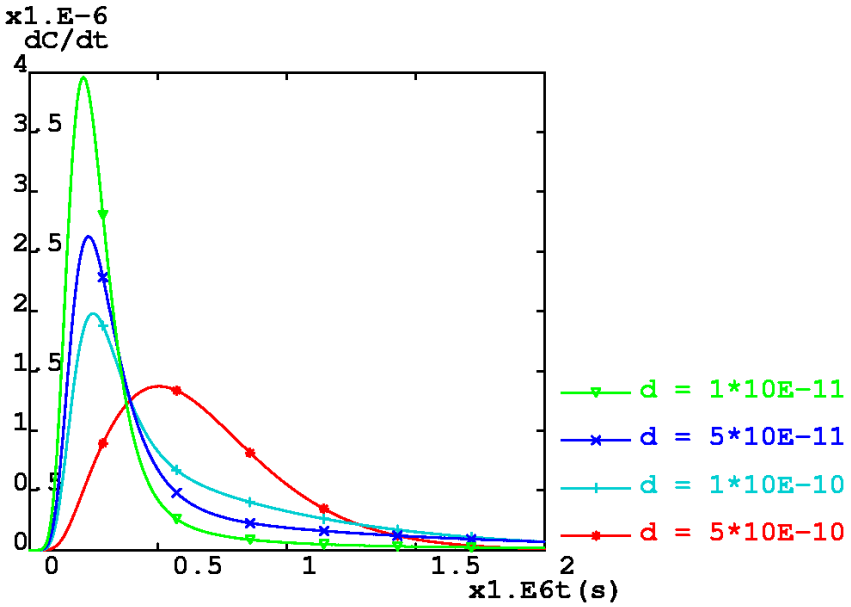


Fig. 1.6 – Evolution de la concentration à la sortie de la fracture : influence de la diffusion matricielle.

Etude numérique

Après l'étude des solutions analytiques, une analyse des résultats d'une modélisation numérique du transport d'un traceur dans une fracture unique est maintenant effectuée. Seuls les phénomènes de convection dispersion et de diffusion matricielle sont ici considérés. L'étude de la sensibilité des résultats à la variation du coefficient de diffusion de la matrice permet de caractériser l'action plus ou moins importante de la matrice. Plus le coefficient de diffusion de la matrice est élevé, plus le terme source, $\frac{2}{e}\omega_m d\frac{\partial C_m}{\partial z}|_{z=0}$, de l'équation 1.3 est important. La masse prélevée à la fracture est, par conséquent, d'autant plus importante que le coefficient de diffusion matricielle est important. L'influence de la diffusion matricielle, d, sur le transport est illustrée par les courbes figure 1.6.

Les résultats indiquent que la diffusion matricielle influe sur la hauteur du pic des flux massiques. Plus la diffusion matricielle joue un rôle important, moins le maximum de concentration est élevé. Cette baisse du maximum de concentration s'accompagne d'une faible pente de la queue de la courbe. La décroissance de la valeur de la pente s'explique facilement par la faible cinétique du phénomène de diffusion matricielle. Le traceur, ayant pénétré dans la matrice, est restitué par celle ci avec une cinétique très faible, par rapport à sa vitesse de propagation dans la fracture. Plus la diffusion matricielle est importante, plus la profondeur de pénétration de matière est importante et plus la restitution de la matière par la matrice s'effectue sur des temps longs. Le maximum de concentration est, lui aussi, influencé par la diffusion. Étant donné que de la masse séjourne dans les zones matricielles, le maximum de concentration est d'autant plus faible que la diffusion matricielle est importante. Si la diffusion est vraiment très importante, un retard dans les temps de sortie de la matière est obtenu (fig. 1.6). Pour une étude plus poussée des effets

de la diffusion matricielle, il est possible de se référer à [Carrera et al. 1998].

Dans la problématique du stockage de déchets radioactifs, (écoulements naturels), la diffusion matricielle joue donc un rôle essentiel dans les processus de rétention. Son action, loin d'être négligeable, devra donc être prise en compte.

1.2.4 Apports et contraintes liés à l'utilisation d'un maillage régulier.

La modélisation des transferts en milieux naturels se révèle être une tâche complexe. Les caractéristiques géométriques, les différentes zones, ainsi que les phénomènes physiques rencontrés dans un milieu fracturé contribuent à créer un ensemble de difficultés auxquelles toutes les approches de modélisation cherchent à pallier. Avant de présenter ces approches, chapitre 1.3, il est intéressant de confronter les difficultés rencontrées avec des solutions apportées par une approche s'appuyant sur un maillage régulier (comme, par exemple, une approche de type Smeared Fractures). Lors d'une modélisation en milieux fracturés, trois familles de difficultés peuvent être distinguées :

⋆ Les difficultés liées à la géométrie du milieu.

La formation des fractures, leur géométrie, résultent de phénomènes complexes conduisant à des géométries difficiles à modéliser, [2]. Un milieu fracturé est composé de différentes échelles de fracturation. A chaque échelle, peuvent correspondre différentes distributions de fractures, [Brown 2002]. La dépendance de la géométrie vis à vis de l'échelle considérée, les incertitudes sur la position des fractures rajoutent encore un degré de difficulté. Ainsi, pour certaines modélisations, il est nécessaire de s'intéresser à des échelles de fracturation inférieures, tout en travaillant à une échelle supérieure.
La matrice joue, elle aussi, un rôle important (chapitre 1.2.3). De volume très supérieur aux volumes des fractures, la matrice constitue une zone de rétention potentiellement forte. Il est donc essentiel de définir l'échelle de travail, pour ensuite pouvoir s'attaquer aux problèmes de la représentation géométrique d'un milieu fracturé (matrice et fractures). Une modélisation dédiée, c'est à dire pour laquelle la géométrie du milieu est prise directement en compte, semble être une bonne solution. Cependant, la complexité du milieu et les coûts de calcul trop importants rendent cette solution peu pratique.

⇒ Apports d'un maillage régulier.

Les difficultés liées à la prise en compte de la géométrie complexe du réseau fracturé sont évitées par la régularité du maillage utilisé. Le milieu est représenté,

sur le maillage régulier, par un champ hétérogène de propriétés. Ainsi, les différentes zones du milieu ne sont pas différenciées par leurs géométries mais par la variation de leurs caractéristiques physiques. De cette manière, le maillage d'un bloc fracturé, partiellement homogénéisé, ne possédant qu'un nombre limité de fractures, ne pose plus de difficultés. Cependant, les propriétés affectées à chaque maille doivent faire l'objet d'une étude afin de les déterminer. En ce qui concerne le choix de l'échelle de travail, elle est directement liée au choix du pas du maillage utilisé.

⋆ **Les difficultés d'identification des propriétés associées aux réseaux de fractures et aux blocs matriciels.**

L'accès aux fractures est souvent difficile et la détermination de leurs propriétés est effectuée par deux types de mesures : des mesures directes ou des mesures indirectes. Les mesures directes consistent à analyser les affleurements de surfaces du site, les carottes de différents forages afin de déterminer le pendage, l'extension des fractures, leur ouverture ... Les mesures indirectes correspondent aux résultats obtenus par la modélisation d'essais de pompages ou d'autres expériences ([2] et exemple de l'expérience TRUE Block Scale réalisée dans le laboratoire expérimental de Äspö [Anderson et al. 2002]). Une démarche de caractérisation du site de Äspö est présentée par [Mazurek et al. 1996]. Elle s'appuie classiquement sur les données géologiques, hydrogéologiques de l'échelle du mètre au décamètre pour fournir une première caractérisation des différentes structures géologiques du milieu. L'ensemble constitue un jeu de données d'entrée pour les modélisations. Ces mesures indirectes se heurtent à un problème lié aux échelles de temps considérées. Les expériences sont effectuées pour des échelles de temps assez courtes correspondant à des vitesses d'écoulement assez élevées dans les fractures. Les zones touchées par ces tests restent donc localisées au voisinage des fractures. Les informations obtenues par les données expérimentales correspondent donc, généralement, aux fractures et à une zone de faible profondeur les entourant. Notre domaine d'application, modélisation des transferts dans un site de stockage après fermeture, correspond, au contraire, à des vitesses d'écoulement lentes et sur des échelles de temps importantes (plusieurs dizaines de milliers d'années). Lorsqu'une modélisation pour des temps longs (vitesses d'écoulement lentes) est effectuée, les zones explorées par le traceur sont beaucoup plus étendues et les phénomènes, comme la diffusion matricielle, qui jouaient peu de rôle pour les vitesses d'écoulemnt rapides, jouent, dans ce cas-là, un rôle important. La caractérisation des zones plus éloignées devient, par conséquent, indispensable. De plus, la géométrie et les caractéristiques du milieu à modéliser sont souvent accompagnées d'incertitudes ce dont il faudra tenir compte. Ainsi une dernière étape d'analyse de sensibilité est nécessaire, afin d'évaluer l'ensemble des caractéristiques du milieu. Afin de prendre en compte ces incertitudes, il est possible de faire des simulations de type Monte Carlo. Pour cela, les outils mis en oeuvre doivent être de faibles coûts informatiques, permettant des résolutions rapides du

problème. La validation des modèles est obtenue par comparaison des résultats numériques avec les résultats expérimentaux.

⇒ **Facilités apportées par l'utilisation d'un maillage régulier.**

L'attrait des approches utilisant un maillage régulier, outre le fait de ne pas à avoir à mailler le milieu, vient de la facilité de mise en oeuvre d'études de sensibilité. Ces études de sensibilité peuvent porter à la fois sur la géométrie du milieu ou sur ses propriétés physiques. Un changement de géométrie est, en effet, facile à prendre en compte grâce à la souplesse induite par l'utilisation d'un maillage régulier. Ainsi, il est tout à fait possible d'envisager des simulations de type Monte Carlo afin de prendre en compte les incertitudes pouvant exister sur la position des fractures ou sur les caractéristiques du milieu.

⋆ **Les difficultés liées à l'hétérogénéité des propriétés du milieu.**

En milieux naturels la matrice est constituée de différents matériaux (suivant le type de fracture considéré, par exemple) ayant des comportements différents et présentant de forts contrastes entre leurs propriétés. Ces différentes zones doivent être modélisées car elles jouent un rôle important dans la rétention de la matière. Leur représentation pose une série de questions auxquelles le modélisateur devra répondre : un maillage de ces différentes zones est-il nécessaire ? Un processus d'homogénéisation serait-il possible ? Quelle est la répartition de ces zones le long des fractures ? ... A ces questions, relevant plus du choix de la modélisation, un problème supplémentaire se superpose. Dans un cas simplifié, un milieu fracturé peut être considéré comme composé de deux structures : les fractures et le bloc matriciel. Les caractéristiques du milieu ainsi que les vitesses d'écoulement varient fortement au niveau de l'interface matrice fracture : les fractures constituant les zones d'écoulement, tandis que la matrice constitue des zones de stockage de vitesses d'écoulement faibles. Ces discontinuités ajoutent une difficulté supplémentaire à la modélisation des phénomènes se produisant à l'interface matrice-fracture. En particulier, pour le volet transport, il est important de bien coupler le transport dans les fractures (relativement rapide) avec le transport dans les blocs matriciels (relativement lent). Ainsi, dans une approche mono domaine, avec un maillage dédié à la géométrie du milieu, il faut veiller à mailler finement l'interface afin de rendre compte des gradients de concentration [Grenier et al. 1999] et [Grenier et Mouche 1997].

⇒ **Facilités apportées par l'utilisation d'un maillage régulier.**

Comme pour toutes les approches de modélisation, l'utilisation d'une approche utilisant un maillage régulier n'échappe pas aux différents problèmes liés à la prise

en compte des différentes zones. Son avantage est que, par sa représentation du milieu, une étude de sensibilité à la variation de la localisation de différentes zones hétérogénes, par exemple pour un problème inverse, ne nécessite pas de remailler le milieu pour chacune des configurations étudiées. Une résolution basée sur un processus de type Monte Carlo est alors envisageable.

⇒ **Contraintes dues à l'utilisation d'un maillage régulier.**

- Choix de la discrétisation spatiale.
  Un milieu fracturé étant un milieu multi-échelle, le choix de l'échelle de travail va être un paramètre important de la modélisation. L'utilisation d'un maillage régulier nous contraint à choisir un pas de discrétisation unique pour l'ensemble du domaine. Ce pas de discrétisation peut, alors, être assimilé à un volume élémentaire de référence VER. Le raffinement nécessaire au traitement numérique des phénomènes aux interfaces matrice fracture constitue, donc, la contrainte principale de l'approche. Le choix d'un pas de discrétisation uniforme sur l'ensemble du domaine implique un raffinement identique à l'interface fracture matrice et sur l'ensemble du domaine. Ainsi, pour des configurations (vitesses d'écoulement rapides dans les fractures) où la matrice se révèle peu active, un raffinement est nécessaire, entraînant des coûts informatiques trop importants. Par contre, pour des vitesses lentes, entraînant une influence plus importante de la matrice (diffusion matricielle importante), le pas du maillage peut être plus grossier. Le domaine d'application recherché, modélisation de l'écoulement et du transport après fermeture du site de stockage de déchets nucléaires, correspond à cette seconde configuration et permet d'envisager l'utilisation de ce type d'approche.

- Choix de la discrétisation temporelle.
  Dans le cas d'un milieu fracturé constitué d'une fracture et de la matrice, des contrastes importants de vitesses d'écoulement dans la matrice, (écoulements quasi nuls), et dans la fracture, (zone d'écoulements rapides), existent. L'utilisation d'un maillage régulier pour modéliser deux vitesses d'écoulement différentes peut poser des problèmes de monotonie ou de convergence. Le respect de critères de monotonie doit donc être vérifié lors du choix de la discrétisation temporelle.

Le domaine d'application de ces approches est imposé par l'importance de la diffusion matricielle. Néanmoins, pour les cas vraiment défavorables (faible diffusion matricielle), d'autres solutions peuvent être envisagées comme la résolution du problème dans les mailles de vitesses d'écoulement élevées et une prise en compte de la diffusion matricielle par un terme d'échange évalué grâce à une solution analytique de la diffusion.

Bien que représentant un milieu fortement hétérogène mal défini, il est possible de pallier à certaines des difficultés de modélisation des milieux fracturés par l'utilisation d'un maillage régulier. Cependant, les approches s'appuyant sur des maillages réguliers présentent, aussi, des contraintes, nécessitant de s'interroger sur le choix de la discrétisation et sur les paramètres à affecter. Néanmoins, en se replaçant dans la problématique du stockage de produits radioactifs pour laquelle les écoulements sont lents et le phénomène de diffusion dans la matrice important, les discrétisations spatiales et temporelle sont moins contraignantes. De telles approches ne représentent qu'une solution parmi d'autres. Un grand nombre d'approches existe, résolvant certaines des difficultés et se heurtant à d'autres. Un rapide tour d'horizon de ces différentes approches est proposé dans le chapitre suivant.

1.3 Les différentes approches de modélisation et l'approche Smeared Fractures

Comme le chapitre précédent l'annonçait, une des difficulté de la modélisation des transferts en milieu fracturé réside dans la définition de l'échelle de travail. Ainsi, reprenant [Berkowitz 1994], l'approche de modélisation, suivie dans une application à un site, dépend :

- des informations disponibles sur le site,
- des caractéristiques dominantes de l'écoulement,
- de l'échelle de travail,
- du type de résultats recherchés.

Il n'existe pas d'approches universelles pour le traitement des problèmes de transferts dans les milieux fracturés. Une démarche intéressante pour classifier, en première approche, les différents types de modèles est proposée par [Bear et al. 1993] et [Berkowitz 1994], s'appuyant sur quatre échelles de fracturation différentes :

- Le champ très proche (quelques métres) : prise en compte des transferts dans une fracture isolée.
- Le champ proche (quelques centaines de métres) : bloc fracturé incluant quelques fractures identifiées de façon déterministe ou statistique (via des densités de fracturation et d'orientation).
- Le champ lointain (quelques kilométres) : le réseau et les blocs matriciels interviennent et on tient compte des différentes cinétiques par une approche double porosité ; (transfert dans deux milieux continus équivalents à chaque sous-système avec des termes de couplage entre les deux).
- Le champ très lointain (échelle régionale) : Les transferts sont modélisés dans un milieu continu équivalent qui rend compte de la présence des fractures ainsi que des blocs matriciels. Typiquement, l'échelle d'observation est plus importante que l'échelle de fracturation, conduisant à la définition de grandeurs continues équivalentes.

Avant de nous intéresser à ces approches, un inventaire des solutions analytiques disponibles est nécessaire.

1.3.1 Solutions analytiques

Ces solutions analytiques sont toutes obtenues à partir d'une formulation du problème sur deux continua. C'est-à-dire que l'équation de transport de la fracture est couplée, par l'intermédiaire d'un terme source, à l'équation de transport dans la matrice, équations 1.3 et 1.4. Toutes les solutions proposées partent de l'hypothèse d'une diffusion matricielle 1D orthogonale. Ces solutions sont rappelées ici car certaines seront utilisées ensuite.

★ Diffusion dans un milieu poreux (diffusion matricielle).
Pour un milieu poreux homogène, de coefficient de diffusion d, en contact pendant un temps, τ, avec des espèces stables, la solution de l'équation de diffusion 1D, en réponse à une injection continue de concentration C_0 en z = 0 et dans un milieu infini, est donnée par [Neretnieks 1980].

$$\frac{C_m}{C_0} = erfc\frac{z}{2\sqrt{d\tau}} \tag{1.9}$$

Une application classique faite par [Neretnieks 1980], est la détermination de la pénétration dans la matrice. La notation $\eta_{0.01}$ est utilisée pour indiquer qu'il s'agit de la pénétration pour $\frac{C_m}{C_0} = 0.01$ et son expression est : $\eta_{0.01} = 4\sqrt{d\tau}$.

★ Solution au problème de convection dans la fracture et diffusion dans la matrice avec décroissance radioactive.
[Neretnieks 1980] généralise la solution de [Carslaw et Jaeger 1959] en y ajoutant une décroissance radioactive (de vitesse de dégradation, λ), pour une injection de traceur à l'entrée d'une fracture au temps τ_0 de la forme $C_0.e^{-\lambda\tau}$ pendant un temps $\Delta\tau$. Seules la convection dans la fracture et la diffusion dans la matrice, avec la décroissance radioactive, sont modélisées. La solution obtenue est :

$$\frac{C_m}{C_0} = exp(-\lambda\tau).(erfc\frac{G}{\sqrt{\tau-(\tau_w+\tau_0)}} - erfc\frac{G}{\sqrt{\tau-(\tau_w+\tau_0+\Delta\tau)}}) \tag{1.10}$$

$$G = \frac{D_m + \frac{q.e.z}{2x}}{2e.\sqrt{d}}\tau_w \tag{1.11}$$

avec τ_w le temps de sortie en considérant uniquement la convection dans la fracture. L'évolution de la concentration dans la fracture est obtenue pour $z = 0$.

★ Prise en compte de la dispersion dans les fractures et des phénomènes d'adsorption.
[Tang et al. 1981] puis [Maloszewski et Zuber 1985] étendent cette solution à un problème de convection, dispersion dans la fracture, avec de la diffusion 1D dans la matrice. L'adsorption ainsi que la décroissance radioactive sont aussi prises en compte. Une solution analogue à celle de Tang est obtenue par [Sudicky et Frind 1982] pour un système de deux fractures parallèles. Une solution pour une géométrie plus complexe est proposée par [Barten 1996].

Un modèle, prenant en compte les phénomènes de convection, dispersion, adsorption dans la fracture et de diffusion, adsorption dans la matrice peut s'écrire sous la forme [Maloszewski et Zuber 1990] (en reprenant les notations de Malozewski) :

- pour la fracture :

$$R_{af}\frac{\partial C_f}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C_f}{\partial x^2} - \vec{v}\frac{\partial C_f}{\partial x} + \frac{n_p D_p}{b}\frac{\partial C_p}{\partial y}|_{y=b} \tag{1.12}$$

  où R_{af} est le coefficient de retard dû à l'adsorption instantanée dans la fracture, D le coefficient de dispersion dans les fractures, v la vitesse de Darcy, C_f la concentration dans la fracture, b sa demi-ouverture et n_p, D_p, C_p, respectivement la porosité, le coefficient de diffusion de pore et la concentration dans la matrice.

- pour la matrice (diffusion 1D) :

$$n_p\frac{\partial C_p}{\partial t} = n_p D_p\frac{\partial^2 C_p}{\partial y^2} - (1-n_p)\rho(\Phi_1 - \Phi_2) \tag{1.13}$$

  avec ρ la densité de la matrice, $\Phi_1 = k_3\frac{\partial C_p}{\partial t}$ et $\Phi_2 = k_1\frac{n_p C_p}{(1-n_p)\rho} - k_2 q_2$ le transfert de masse, entre les phases solide et liquide dans la matrice, dû à une adsorption linéaire isotherme en équilibre instantané et le transfert de masse entre les phases solide et liquide dans la matrice, dû à une réaction cinétique d'ordre 1. k_1, k_2, k_3 sont les coefficients de distribution, respectivement, d'avancée et de retour de la réaction non instantanée et de la réaction instantanée.

Pour les conditions aux limites suivantes :

$$C_f(x,0) = 0 \quad C_f(0,t) = \frac{M}{Q}\delta(t) \quad C_f(\infty,t) = 0 \tag{1.14}$$

$$C_p(y,x,0) = 0 \quad C_p(b,x,t) = C_f(x,t) \quad C_p(\infty,x,t) = 0 \tag{1.15}$$

$$q_1(x,0) = 0 \qquad q_2(x,0) = 0 \tag{1.16}$$

avec M la masse du traceur injecté, Q le débit d'injection et $\delta(t)$ la fonction Dirac ; la solution aux équations 1.12 et 1.13 est fournie par [Maloszewski et Zuber 1990] :

$$C_f(t) = \frac{aM}{2\Pi Q}\sqrt{P_e t_0'}.\left(\int_0^t e^{-\frac{P_e}{4ut_0'}(t_0'-u)^2 - k_1'(t-u) - \frac{a^2u^2}{t-u}}.\frac{du}{\sqrt{u(t-u)^3}}\right. \tag{1.17}$$

$$+\sqrt{k_1'k_2}.\int_0^t e^{-\frac{P_e}{4ut_0'}(t_0'-u)^2 - k_1'(t-u)}\frac{1}{\sqrt{u}}.\int_u^t e^{-\frac{a^2u^2}{\tau-u} - (k_1'-k_2)(\tau-t)} \tag{1.18}$$

$$\left..I_1\sqrt{4k_1'k_2(\tau-u)(t-\tau)}\frac{d\tau}{\tau-u}\frac{du}{\sqrt{t-\tau}}\right) \tag{1.19}$$

Si $\Phi_2 = 0$ cette solution s'écrit plus simplement :

$$C_f(t) = \frac{aM}{2\Pi Q}\sqrt{P_e t_0'}.(\int_0^t e^{-\frac{P_e}{4ut_0'}(t_0'-u)^2 - k_1'(t-u) - \frac{a^2u^2}{t-u}}.\frac{du}{\sqrt{u(t-u)^3}}) \tag{1.20}$$

Trois coefficients apparaissent dans la formulation de cette solution, $a = n_p\frac{\sqrt{D_p R_{ap}}}{2bR_{af}}$, $P_e = \frac{vx}{D}$ et $t_0' = \frac{xR_{af}}{v} = R_{af}t_0$ avec $k_1' = \frac{k_1}{R_{ap}}$, $R_{ap} = \frac{(1-n_p)\rho k_3}{n_p}$. Ainsi, pour un traceur non sorbant ($R_{ap} = R_{af} = 1$), ces trois coefficients, a, P_e et t_0' contrôlent le transport. Lorsque a croît, suivant que la diffusion de pore, d, augmente ou que l'ouverture, $2b$, de la fracture diminue, la diffusion dans la matrice est favorisée. Dans ce cas là, le maximum de concentration est plus faible et un décalage dans les temps de sortie peut être observé.

Ces solutions analytiques servent à mieux comprendre certains phénomènes rencontrés dans les milieux fracturés tout en permettant de valider les différents modèles développés. Une bonne vision de ces modèles utilisés pour la simulation des transferts en milieux fracturés est proposée par [Ezzedine 1994]. Ces modèles peuvent être classés en trois grandes familles : les modèles discrets, les modèles continus et les modèles hybrides.

1.3.2 Modèles discrets

Les modèles discrets consistent à travailler sur la géométrie réelle du milieu fracturé. Dans ce cas là, on parlera de représentations discrètes. Ils sont généralement appliqués à l'échelle des champs trés proches, proches et lointains. Différentes options ont été choisies pour obtenir le réseau discret de fractures. Ainsi, il est possible de distinguer deux écoles :

★ les modèles à fractures discrètes ou modèles DFN.

Les modèles DFN consistent à générer des réseaux de fractures à partir d'objets géométriques simples s'appuyant sur une distribution statistique des caractéristiques géométriques (ouverture, position, orientation) et des caractéristiques du réseau (transmissivité des fractures, densité de fracturation). Différentes géométries ont été utilisées pour générer les réseaux de fracture. [Ezzedine 1994] cite quelques modèles s'appuyant sur la génération de disques ([Baecher 1983] et [Barton 1978]) ou sur une génération de surfaces planes ([Dershowitz 1985]). Plus récemment, [Koudina et al. 1998] décrivent la génération d'un réseau discret de fractures à partir de polygones sur lesquels l'écoulement est résolu. Les gros coûts informatiques nécessaires à ces approches ont incité les différents auteurs à optimiser leurs outils par l'exploitation d'idées différentes. Ainsi, [Delay et Bodin 2001] et [Bodin et al. 2003] ont, par exemple, proposé une autre approche de résolution. Par une approche lagrangienne, la résolution de l'écoulement et du transport (l'advection, la dispersion et la diffusion matricielle sont prises en compte) est obtenue

en s'intéressant aux temps de transition entre deux points fixes d'un réseau de liens symbolisant un réseau de fractures 2D. De cette manière, la résolution est bien plus rapide.

⇒ L'avantage de ces approches est de conserver une représentation explicite de la géométrie du milieu, pour différentes échelles. Les fractures, parfaitement caractérisées, sont facilement prises en compte. Ces codes sont rapides et optimisés mais nécessitent de gros moyens informatiques. De plus, le transport est souvent simulé uniquement dans le réseau de fractures, la diffusion dans la matrice étant prise en compte par des solutions analytiques, avec l'hypothèse d'une diffusion homogène 1D infinie.

⇒ Les inconvénients de ces approches résident dans leur maniabilité comme, par exemple, pour des études de sensibilité à la géométrie des fractures. En effet, à chaque modification de la géométrie du milieu, un remaillage est nécessaire conduisant à de forts coûts informatiques. L'hypothèse d'une diffusion 1D infinie dans la matrice peut aussi se révéler non justifiée. Dans le cas d'écoulements pour lesquels la diffusion matricielle joue un rôle important, il est tout à fait envisageable que le traceur circule d'une fracture à une autre par l'intermédiaire de la matrice. Ce cheminement est complexe à modéliser avec les approches DFN pour des coûts informatiques abordables.

★ les modèles à chenaux ou modèles CN.

Les modèles à chenaux découlent directement des modèles DFN. Une fracture est, pour ce type de modèles, représentée par différents liens, ou chenaux, interconnectés. L'idée de chenaliser une fracture provient de ce que l'écoulement dans des fractures suit des chemins préférentiels. Ceux-ci forment ainsi des liens plus ou moins connectés. Ces chenaux peuvent être générés directement à partir des points d'intersection des objets géométriques des modèles DFN, [Cacas et al. 1990a], [Cacas et al. 1990b] et [Dverstorp et al. 1992]. Le modèle de [Moreno et Neretnieks 1993], quant à lui, s'appuie sur un réseau de chenaux de géométrie régulière et cubique.

⇒ L'utilisation de chenaux réduit énormément les difficultés et les temps de calculs. Cependant, la prise en compte de la diffusion dans la matrice est uniquement déterminée à partir de solutions analytiques. L'utilisation d'un modèle à chenaux semble être justifiée dans le cas d'écoulements rapides pour lesquels les écoulements dans les fractures sont chenalisés.

⇒ Pour des écoulements de cinétiques faibles, (écoulements naturels, conditions d'écoulement pour des calculs de sûreté), le traceur s'écoule beaucoup plus lentement. Il est, par conséquent, susceptible d'explorer une surface beaucoup plus importante de la fracture. Dans la fracture, les zones les moins conductrices, restées inaccessibles lors des écoulements rapides, peuvent, au contraire, jouer un rôle important en fournissant au traceur des zones importantes de diffusion. Dans ces conditions, l'hypothèse de chenalisation est à débattre.

$\Rightarrow$ De plus, un réseau de chenaux dépend des directions principales d'écoulements. Ainsi, pour des gradients de pression différents, la géométrie du réseau va varier.

Les modèles discrets présentent l'avantage de pouvoir tenir compte de la géométrie réelle des blocs fracturés, pour différentes échelles. Ils nécessitent, cependant, une puissance de calcul importante. La modélisation de la diffusion dans la matrice accroît encore ces coûts de calculs.

1.3.3 Modèles continus

Les modèles continus sont généralement appliqués à l'échelle des champs lointains et trés lointains. Parmis ces modèles, on distingue :

$\star$ Le milieu poreux équivalent.

Un milieu poreux est constitué, comme son nom l'indique, de pores et de grains. Un milieu fracturé, quant à lui, est constitué de nombreuses fractures et de zones matricielles. Une correspondance peut être faite entre ces deux milieux, si les fractures sont assimilées aux pores et les zones matricielles aux grains. La distinction entre les milieux poreux et les milieux fracturés reviendrait, alors, à un problème d'échelle. Il est ainsi possible de représenter le milieu fracturé par un milieu poreux équivalent, de caractéristiques hydrauliques équivalentes aux milieux fracturés. Ces caractéristiques équivalentes doivent être définies en tout point du milieu. Cependant, que ce soit pour la porosité ou la perméabilité, il n'est pas possible de les définir ponctuellement. Pour cela, la notion de volume élémentaire de référence (VER) est introduite. Le VER consiste à considérer un certain volume autour d'un point sur lequel les propriétés seront affectées et appliquées au point considéré. En pratique, le VER est difficile à caractériser et son existence n'est pas assuré. [Long et al. 1982] proposent de considérer le VER comme le volume minimal à partir duquel la perméabilité reste constante. Le gros handicap de ce modèle est d'être mal adapté pour traiter les discontinuités du milieu. En effet, reprenant [Neuman 1988], pour des milieux fracturés, un volume fixe peut être intersecté par quelques fractures et, d'une zone à l'autre, les mesures expérimentales peuvent présenter de fortes variations. Dans ce cas, il est possible de supposer que le volume considéré est inférieur au VER. Or, dans le cas d'un site comme celui de Äspö en Suède, il est courant de rencontrer d'autres zones fracturées en augmentant l'échelle. Dans ce cas, il est impossible de déterminer un VER. Pour des réseaux fracturés pour lesquels une homogénéisation est possible, le VER obtenu est souvent trop important par rapport à l'échelle de travail. Cette définition du VER est aussi incompatible avec la notion de milieu fractal pour lequel la perméabilité ne fait que décroître avec la taille du volume considéré. Des milieux fracturés semblent toute fois répondre, au moins hydrauliquement comme

des milieux fractals, ([Delay et al. 2004], [Le Borgne et al 2004]). Pour ces raisons, les modèles à simples continua sont peu utilisés en milieux fracturés. Cependant, la philosophie de cette approche reste présente dans tous les modèles continus.

★ Les approches double porosité.

Ces approches consistent à traiter le problème sur deux continua, correspondant aux milieux équivalents, associés au réseau de fractures et aux blocs matriciels. Un terme de couplage, S, règle les échanges entre les deux sous-systèmes. A l'origine développées pour l'écoulement, le principe de ces approches a, par la suite, été étendu au transport.

⇒ Pour l'écoulement [Pirson 1953], [Barenblatt et al. 1960] et [Warren et Root 1963] sont à l'origine des techniques habituelles de modélisation par des méthodes de double porosité.

⇒ Pour le transport, le système d'équations est formé par les équations 1.21 et 1.22, avec S le terme d'échange entre la matrice et la fracture.

- pour la fracture :

$$\omega_{fr}\frac{\partial C_{fr}}{\partial t} = \omega_{fr}.D_L^*\Delta C_{fr} - \vec{q}\vec{\nabla}C_{fr} - S \tag{1.21}$$

- pour la matrice :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = d\Delta C_m \tag{1.22}$$

avec comme condition à l'interface fracture-matrice $C_m = C_f$

[Bibby 1981] et [Huyakorn et al. 1983] ont, par la suite, étendu ces approches aux transports, déterminant S grâce à une solution analytique ou une solution numérique de l'équation de transport dans la matrice. [Grenier et al. 1999] se sont appuyés sur la revue des approches de simulation de transport en milieu fracturé de [Pinder et al. 1993] et, en particulier, sur les contributions de [Bibby 1981] afin de proposer une approche double porosité appliquée, par la suite, au site de la Vienne [Grenier 2000]. Pour une revue plus détaillée de l'ensemble des approches existantes, on peut se reporter à l'article de [Carrera et al. 1998] dans lequel les principales expressions de S sont données. Divers autres travaux ont étendu cette approche à des modèles multi-continua représentant différentes échelles de fracturation et les blocs matriciels.

1.3.4 Modèles hybrides

Ces approches présentent l'avantage d'utiliser un maillage structuré (généralement régulier). La variabilité des propriétés associées à chaque maille permet de distinguer les

fractures (zones de perméabilité importante) de la matrice (zones de perméabilité faible). Ces approches sont généralement utilisées pour des échelles de travail importantes (champ très lointain). Il existe deux approches dans la façon de générer le champ de propriétés sur le maillage régulier :

★ Les modèles stochastiques.

Dans le cas des modèles stochastiques, le milieu est représenté par une réalisation de variables aléatoires continues hétérogènes ; les zones les plus transmissives correspondant à des zones fracturées. Diverses approches stochastiques ont été mises au point et appliquées à différents sites expérimentaux. Ainsi, à partir d'une proposition de [Neuman 1988], un code correspondant à une approche stochastique continue a pu être mis au point [Norman 1992]. Le champ de conductivité est généré à partir d'une distribution log-normale sur un maillage uniforme. Des zones représentant les fractures connues peuvent y être incorporées par une augmentation de la perméabilité moyenne [Selroos et al. 2002]. Une application de cette approche a été effectuée sur le site de Äspö [Widén et Walker 1999]. On peut encore citer le travail de [Tsang et al. 1996] appliqué au site de Äspö. A partir d'un champ de perméabilité défini sur un maillage de multi-grille, [Chan et al. 2001] proposent une modélisation de l'écoulement et du transport appliquée au laboratoire souterrain de recherche de Manitoba (Canada). Les perméabilités sont obtenues à partir de moyennes géométriques.
La différence entre ces approches réside dans la manière dont est obtenu le champ de perméabilité. L'avantage de ces approches, en plus de ne nécessiter qu'un coût informatique peu élevé, est leur facilité à prendre en compte les incertitudes sur les positions ainsi que sur les valeurs des paramètres associés aux fractures, dans le cadre de modélisation stochastique (type Monte-Carlo).

★ Les modèles dit de type Smeared Fractures.

Pour les modèles Smeared Fractures, les fractures et les zones matricielles sont différenciées par les propriétés plus ou moins conductrices affectées aux mailles du maillage régulier. La différence entre ces modèles et les modèles stochastiques réside dans la détermination des propriétés à affecter à ces mailles. Ainsi, plutôt que de générer le champ de perméabilité de manière aléatoire, celui-ci est établi de manière à respecter des critères liés aux fractures importantes, comme une bonne précision sur les flux dans les fractures. La détermination des caractéristiques peut s'appuyer sur les travaux de [Oda 1986], [Renard 1997], [De Marsily et Renard 1997] ou [Sanchez-Villa et al. 1995]. [Oda 1986] propose, ainsi, un tenseur équivalent de perméabilité, dépendant du nombre de fractures dans le volume considéré, exprimé sous la forme d'une densité de probabilité, fonction du vecteur normal, de la taille et de l'ouverture des fractures. Une autre approche est celle de [McKenna et Reeves 1999] qui propose une perméabilité effective, en fonction de trois paramètres : la perméabilité moyenne des fractures, leur nombre et le nombre de branches de fractures émanant d'une intersection. Cette approche pré-

sente l'avantage de prendre en compte la connectivité du réseau de fractures. Divers auteurs se sont intéressés à des approches Smeared Fractures. Parmi eux, [Gomez-Hernandez et al. 1999] proposent un modèle dans lequel les fractures sont représentées de manière déterministe. Le champ de perméabilité est généré de manière aléatoire (distribution log-normale), avec des moyennes différentes suivant que les mailles appartiennent aux fractures ou aux zones matricielles. [Svensson 1999a], plutôt que d'utiliser un champ aléatoire de perméabilité dans une fracture, va rechercher l'expression d'une perméabilité équivalente par maille, de manière à minimiser l'erreur commise sur les flux. Dans son modèle, les fractures sont représentées par des tubes coudés, pour le 2D. La perméabilité équivalente est obtenue par le rapport du volume de la fracture intersectée par la maille, sur le volume de la maille que multiplie la perméabilité réelle de la fracture. Après avoir été qualifiée et validée, une application de cette approche a été réalisée sur le site de Äspö, [Svensson 1999b]. [Tanaka et al. 1996] étudient l'impact hydraulique d'un tunnel sur le site de Äspö par une approche similaire. Pour cette application, la perméabilité équivalente d'une maille représentant une fracture est obtenue par la formule : perméabilité de la fracture que multiplie le volume intersecté de la fracture, plus la perméabilité de la matrice que multiplie son volume intersecté sur le volume de la maille.

Ces approches présentent les avantages combinés des approches déterministes et continues. Elles permettent de modéliser facilement les fractures connues et de faciliter les études de sensibilité ou les simulations de type Monte-Carlo, afin de prendre en compte les incertitudes liées aux caractéristiques géométriques et physiques des fractures. Elles se révèlent aussi économiques en terme de besoins informatiques. Le pas de discrétisation est directement lié à l'échelle de travail.

L'approche Smeared fractures, mise au point dans ce travail, appartient à cette dernière catégorie d'approches. Elle diffère des autres approches Smeared Fractures existantes par :

$\Rightarrow$ le maillage utilisé
La représentation des fractures reste relativement proche de la géométrie des fractures modélisées (tube coudé pour le 2D ou plan stratifié pour le 3D). Le choix de la discrétisation dépend d'une part de la dimension du milieu modélisé et d'autre part de la densité des fractures.

$\Rightarrow$ un bon contrôle des flux hydriques pour l'écoulement
L'expression de la perméabilité équivalente est déterminée de manière à obtenir un flux exact, pour des simulations 2D et une bonne estimation, pour des modélisations 3D (exacte suivant deux directions principales). Pour cela, on s'appuie sur le schéma de résolution en éléments finis mixtes hybrides. Ainsi, l'erreur commise sur les flux est parfaitement contrôlée.

$\Rightarrow$ son extension à la résolution du problème du transport
Les phénomènes modélisés sont la convection-dispersion dans les fractures et la

diffusion dans les zones matricielles. Le bon contrôle des flux hydriques est un pré-requis indispensable à l'extension de l'approche à la résolution du transport. L'expression du flux hydrique étant comparable au celles des flux massiques dispersif et convectif pour le transport dans une fracture, une correction similaire à la correction de la perméabilité est apporté au terme dispersif et au terme convectif. De cette manière, l'erreur commise sur les flux massiques est elle aussi contrôlée. La porosité équivalente associée au maillage régulier est déterminée directement par le rapport exact des volumes.

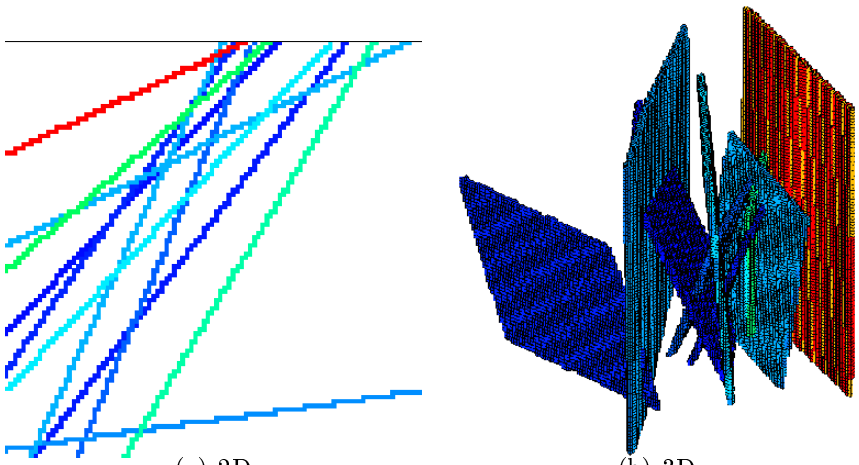
De manière plus détaillée, le chapitre suivant reprend la manière dont est généré le maillage et, comment les propriétés équivalentes sont déterminées.

Chapitre 2

L'approche Smeared Fractures : développements théoriques et implémentation

Le principe des approches smeared fractures consiste à modéliser les milieux fracturés à l'aide d'un maillage régulier afin de représenter à la fois les fractures et les zones matricielles. Les différentes zones constituant le milieu sont représentées par un champ hétérogène de propriétés. Une fracture (ou une zone fracturée) est représentée, pour des approches Smeared Fractures, par un chenal coudé de section carrée pour le 2D ou par des strates successives d'épaisseur Δ pour le 3D (fig. 2.1) de fortes perméabilités. Cette représentation géométrique particulière des fractures est une conséquence directe de l'utilisation d'un maillage régulier. En effet, pour le 2D, si une fracture est alignée suivant une direction principale du maillage, elle sera représentée par une ligne de mailles sinon des groupes de deux mailles formant des coudes apparaîtront rendant compte de l'inclinaison de la fracture tout en assurant la connection des mailles. De la même manière pour le 3D, si une fracture est parallèle à un plan principal du maillage, elle sera représentée par un plan de mailles (ou strate) sinon des mailles apparaîtront afin de modéliser correctement l'inclinaison de la fracture en assurant la connectivité de différentes strates. La matrice correspond quant à elle aux zones les moins perméables dont les propriétés peuvent faire l'objet de différents choix : il est en effet possible d'affecter les propriétés réelles des blocs sains ou de prendre en compte une fracturation de petite échelle par un travail d'homogénéisation. Le choix de la discrétisation est directement lié à l'échelle de travail.

Le maillage des zones matricielles correspond au complémentaire du maillage des fractures sur le maillage régulier. Ces deux maillages obtenus à partir du maillage régulier de base, sont composés de mailles carrées ou cubiques de côté Δ. Ainsi le maillage associé aux fractures a une épaisseur de Δ avec Δ supérieur aux ouvertures des fractures ou des zones fracturées. Cette représentation géométrique des fractures impose au préalable la détermination de propriétés équivalentes et conduit à des champs de concentration plus étalés (fig. 2.2) pouvant être comparé à un tracé à l'encre sur une papier buvard. C'est



(a) 2D (b) 3D

Fig. 2.1 – Représentation des fractures par une approche S.F.

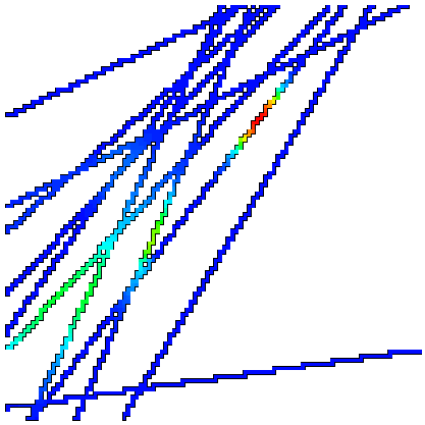


Fig. 2.2 – Illustration de la terminologie "Smeared"

cette caractéristique qu'illustre le mot 'SMEARED' signifiant "étalé dans l'espace" en anglais.

L'approche Smeared Fractures, développée dans un code de calcul du Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), CAST3M, pour des problèmes 2D, se différencie des autres approches de type Smeared Fractures présentes dans la littérature ([Svensson 2001], [Svensson 1999a], [Tanaka et al. 1996] et [Gomez-Hernandez et al. 1999]) par le schéma numérique utilisé lors de la résolution de l'équation de Darcy. Ce code utilise les éléments finis mixtes hybrides, EFMH, dont l'avantage est d'avoir un bilan de flux exact par maille. De cette manière, les flux sont parfaitement contrôlés et, pour une maille carrée ou cubique, il est possible de déterminer leur expression pour une direction d'écoulement donnée. Ce schéma constitue une innovation par rapport à ces différentes approches en permettant l'obtention des flux réels pour le 2D et pour le 3D. La résolution, toujours en éléments finis mixtes hybrides (EFMH), de l'équation de transport par l'approche

Smeared Fractures constitue un apport supplémentaire à ce type d'approches, jusqu'à présent uniquement destinées à la résolution de l'écoulement.
Précédemment amorcée par [Thouvenin et Grenier 2000], l'approche a été remaniée et étendue pour l'écoulement et le transport eulérien pour des géométries 2D et 3D en tenant compte des phénomènes de diffusion, dispersion au sein des fractures ainsi que de la diffusion matricielle.

A la suite du travail théorique, un gros effort de développement informatique a été nécessaire que ce soit pour le 2D et le 3D et en particulier pour la génération du maillage. Les stratégies de maillages, d'implémentation des propriétés ont été nombreuses avec toujours un souci d'optimisation de l'approche. Dans ce chapitre, les aspects théoriques (génération du maillage, détermination des propriétés équivalentes), résultant de ce travail de réflexion, sont présentés. Les éléments de validation et de qualification de la méthode seront abordés ensuite.

2.1 Principes de base de l'approche Smeared Fractures

L'approche Smeared Fractures fait partie des approches dites hybrides. Avec ce type de concepts, le milieu fracturé n'est pas maillé de façon dédié mais les fractures sont représentées par un champ continu hétérogène de propriétés sur un maillage régulier. Pour cela, différentes étapes sont nécessaires afin de conserver :

1. la géométrie du milieu lors de la génération du maillage
   La première étape consistera à identifier, à partir d'un maillage régulier, les mailles à associer aux fractures.

2. les flux
   Cette deuxième étape nécessite de s'intéresser aux EFMH. Les grandeurs équivalentes seront établies de manière à obtenir les bons flux (débits et flux massiques de l'élément transporté) à l'échelle de la fracture. Ces grandeurs sont le tenseur de perméabilité pour l'écoulement, la porosité et le tenseur de diffusion-dispersion pour le transport eulérien.

L'article [Fourno et al. 2002] introduit ces principes pour le 2D. Cet article a été présenté en juin 2002 à la XIV International Conference on Computational Methods in Water Ressources (CMWR2002) à Delft en Hollande. Néanmoins afin de compléter les informations et détailler les aspects 3D, les différentes étapes de l'approche seront revues en détail.

2.2 Smeared Fractures pour le 2D

2.2.1 Maillage associé à l'approche Smeared Fractures

La caractéristique principale de l'approche Smeared Fractures est l'utilisation d'un maillage régulier. La génération de ce maillage est composée de différentes étapes.

⇒ La génération du maillage régulier.
La première étape de maillage du milieu consiste à générer le maillage régulier. Ce maillage se présente alors sous la forme d'un damier.

⇒ La recherche des mailles intersectées par la fracture.
La seconde étape, correspondant à l'identification des mailles associées à une fracture, nécessite de rechercher toutes les intersections de la fracture (représentée par la droite noire sur la figure 2.3) avec les cellules du maillage régulier. Pour cela, si la fracture coupe une ligne horizontale de cette grille, la cellule située au-dessus de cette intersection sera retenue (cellules vertes de la figure 2.3). Si la fracture coupe une ligne verticale de la grille, la maille située à droite de cette intersection sera conservée (cellules rouges de la figure 2.3).

⇒ La connectivité du maillage.
Afin d'assurer une connectivité minimale entre les mailles du maillage associé à la fracture, chaque maille ne pourra posséder que deux voisines.

Parmi ces mailles, deux familles sont identifiées. Ces deux familles se différencient par la manière dont elles sont traversées par la fracture. Ainsi le maillage associé à l'approche Smeared Fractures possède :

- des mailles X : deux faces opposées sont traversées par la fracture.
- des mailles Y : deux faces voisines sont traversées par la fracture.

En implémentant cette démarche, le maillage associé à la fracture est facilement généré. Si cette fracture n'est pas unique et qu'elle possède des intersections avec d'autres fractures les mailles formant ces intersections sont enregistrées et supprimées du maillage associé à leurs fractures. De cette manière des propriétés différentes peuvent être affectées aux intersections (propriétés de la fracture la plus transmissive, propriétés moyennées ...).
Cette procédure de maillage comprenant la création du maillage régulier et l'identification des mailles fracture et matrice possède l'avantage de ne nécessiter que de faibles coûts informatiques. Néanmoins, l'utilisation d'un maillage régulier impose d'établir des propriétés équivalentes à affecter aux mailles fractures ou matrice lors de la modélisation de l'écoulement et du transport. Pour cela il est nécessaire d'étudier le

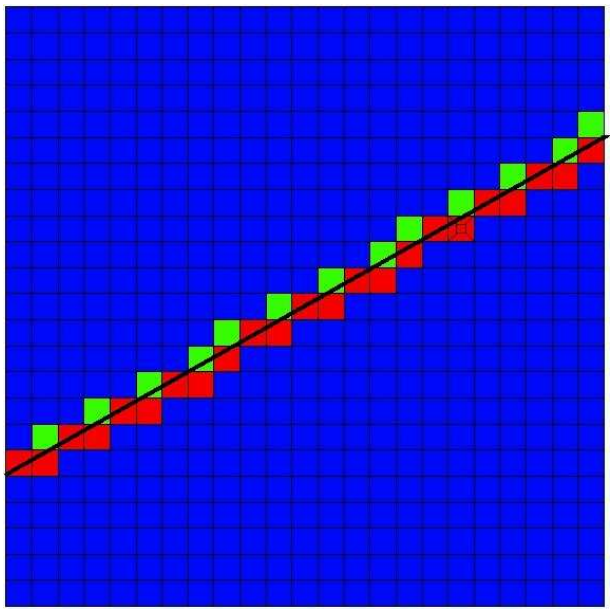


Fig. 2.3 – Génération du maillage : mailles à associer à la fracture

schéma de résolution numérique, c'est-à-dire les Éléments Finis Mixtes Hybrides (EFMH).

2.2.2 Formulation EFMH et applications

L'écoulement du fluide est régi par un système de deux équations :

★ équation de Darcy

$$\vec{q} = -\bar{\bar{K}}.\vec{\nabla}h \tag{2.1}$$

★ équation de conservation de la masse (fluide incompressible et régime permanent)

$$\vec{\nabla}.\vec{q} = 0 \tag{2.2}$$

où $\vec{q}$ est la vitesse de Darcy, $\bar{\bar{K}}$ le tenseur de perméabilité, h la charge.
De forts contrastes existent entre les fractures (zone d'écoulements rapides) et la matrice (zone d'écoulements faibles). Ainsi, l'écoulement s'effectue toujours préférentiellement dans la direction de la fracture. La composante transverse de l'écoulement est, par conséquent, négligeable. Si le tenseur de perméabilité est assimilé à une grandeur scalaire, l'écoulement n'est possible que dans une seule direction. Par la suite, le tenseur de perméabilité peut donc être remplacé par une perméabilité scalaire.
La modélisation de l'écoulement, que ce soit pour une approche Smeared Fractures ou

une approche utilisant un maillage dédié à la géométrie du milieu, s'appuie sur un schéma en éléments finis mixtes hybrides.

1. Formulation EFMH

   Les éléments finis mixtes hybrides permettent la formulation d'une approximation simultanée de la charge et de la vitesse de Darcy, [Mosé et al. 1994]. L'approximation du champ de vitesse et de la charge est exprimée sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions d'interpolation définies en différents points de Gauss [Dabbene 1995]. En deux dimensions, pour un élément carré Ω ces points sont au nombre de 4 et sont situés au centre de chacune des faces. Deux degrés de liberté sont affectés à chaque point et correspondent d'une part au flux total Q_i traversant la face i, et d'autre part à la charge Th_i moyenne sur cette face. En outre, l'élément possède un dernier degré de liberté en son centre correspondant à la valeur de la charge moyenne $\bar{h}$ sur cet élément, soit un total de 9 inconnues par élément. La continuité des flux aux interfaces des mailles est aussi imposée lors de la résolution de l'équation de Darcy dans l'espace de Raviart-Thomas.
   A partir de la formulation variationnelle faible discrète, [Dabbene et Dada 1995] montrent que le problème d'écoulement de type Darcy en régime permanent se traduit par un système de 5 équations :

$$Q_i^{\Omega} = \bar{h}_{\Omega}(\sum_j M_{ij}^{\Omega^{-1}}) - \sum_j (M_{ij}^{\Omega^{-1}}.Th_j^{\Omega^{-1}}) \text{ pour } i = 1..4 \tag{2.3}$$

$$\bar{h}_{\Omega} = \frac{\sum_i (\alpha_i^{\Omega} Th_i)}{\sum_i (\alpha_i^{\Omega})} \tag{2.4}$$

   avec $\alpha_i^{\Omega} = \sum_j M_{ji}^{\Omega^{-1}}$, M^{Ω} étant la matrice de masse hybride définie par :

$$M_{ij}^{\Omega} = \int_{\Omega} (\vec{w}_i)^t \bar{\bar{K}}^{-1} \vec{w}_j d\Omega$$

   avec $\vec{w}_i$ les fonctions d'interpolation telles que :

$$\int_{F_j} \vec{w}_i.\vec{n} dF_j = \delta_{ij}$$

   Ces 5 équations sont complétées par les conditions aux limites du problème et les conditions de continuité entre les éléments du maillage (continuité des flux et des traces de charges sur chaque face).

2. Application

   Pour un élément carré de côté Δ, centré sur l'origine, les fonctions d'interpolations sont :

$$\vec{w}_1 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_2 = \begin{vmatrix} \frac{(x+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \vec{w}_3 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_4 = \begin{vmatrix} \frac{(x-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \\ 0 \end{vmatrix}$$

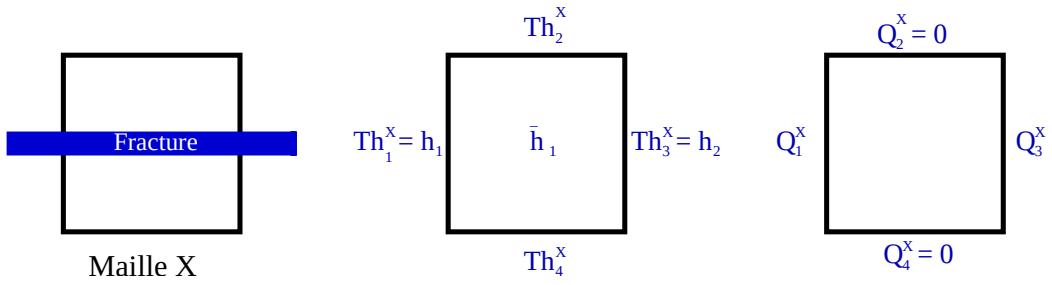


Fig. 2.4 – Maille X et ses conditions aux limites

Dans le cas où la perméabilité des fractures est isotrope, les expressions de la matrice hybride, de son inverse et des différents coefficients α_i^Ω sont relativement simples.

$$M^\Omega = \frac{1}{6K}\begin{vmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 \end{vmatrix} \quad M^{\Omega^{-1}} = K\begin{vmatrix} 4 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \end{vmatrix} \quad \alpha_i^\Omega = 6K$$

L'expression du flux pour les deux types de mailles X et Y formant le maillage associé à une fracture peut alors être déterminé.

- Cas 1 : Maille X, deux faces opposées sont traversées par le fluide.
  Dans le cadre uniquement convectif (convection dans la fracture vitesse nulle dans la matrice) les conditions aux limites d'une maille X sont telles que :

  $Th_1^X = h_1$, $Th_3^X = h_2$ et $Q_2^X = Q_4^X = 0$ (fig. 2.4).

  En utilisant la formule 2.3, on en déduit que :
  $Q_1^X = -Q_3^X = -K\Delta h$

- Cas 2 : Maille Y, deux faces voisines sont traversées par le fluide.
  Les conditions aux limites d'une maille Y sont telles que :

  $Th_1^Y = h_1$, $Th_2^Y = h_2$ et $Q_3^Y = Q_4^Y = 0$ (fig. 2.5).

  De la même manière que pour la maille X on obtient :
  $Q_1^Y = -Q_2^Y = -\frac{3}{2}K\Delta h$

3. Bilan.

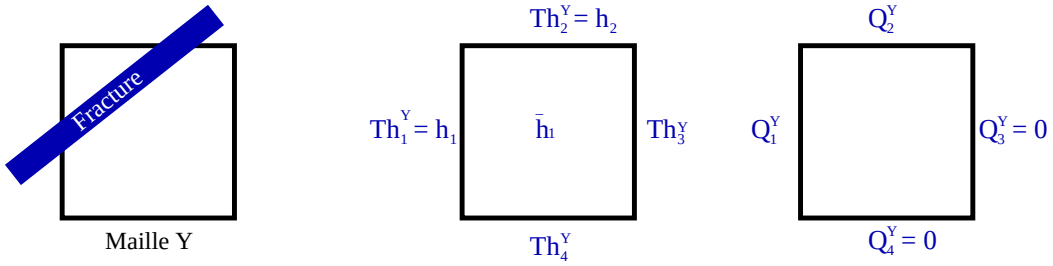


Fig. 2.5 – Maille Y et ses conditions aux limites

L'expression du flux a pu être exprimée à la fois pour le type de maille Y et pour le type de maille X. Ainsi, pour une représentation d'une fracture par un chenal coudé correspondant à une combinaison de ces mailles, l'expression du flux peut être établie. Il est, de plus, possible d'exprimer le flux d'une fracture unique par une solution analytique classique. Ces deux expressions (flux analytique et flux obtenu par la discrétisation EFMH) étant connues, leur égalité va nous fournir les expressions des propriétés équivalentes à affecter aux mailles associées à la fracture. C'est cette détermination des paramètres équivalents qui fait l'objet des paragraphes suivants.

2.2.3 Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente

Pour chaque type de maille, les flux entrant et sortant sont de signes opposés. Ceci est vrai par construction du schéma en EFMH. Pour un chenal constitué de mailles carrées, l'expression du flux sortant peut être exprimée en fonction de la différence de charge Δh, du nombre de mailles X et du nombre de mailles Y notés respectivement N_X et N_Y.

$$\Delta h = \sum_{i=1..(N_X+N_Y)} \Delta h_i \tag{2.5}$$

$$= \sum_{i=1..N_X} \Delta h_i + \sum_{i=1..N_Y} \Delta h_i \tag{2.6}$$

or il a été établi que :

$$\Delta h_i = \frac{Q_{sf}}{K_{sf}} \text{ pour une maille } X \tag{2.7}$$

$$\Delta h_i = \frac{2Q_{sf}}{3K_{sf}} \text{ pour une maille } Y \tag{2.8}$$

Le flux d'une fracture Q_{sf}, dans le cadre d'une modélisation par une approche Smeared Fractures, est alors obtenu, relation 2.9, à partir des équations 2.5 à 2.8.

$$Q_{sf} = \frac{3K_{sf}\Delta h}{3N_X + 2N_Y} \tag{2.9}$$

De plus, l'expression analytique du flux, Q_r, pour une fracture unique est donnée par l'expression 2.10.

$$Q_r = \frac{eK_r\Delta h}{L_r} \tag{2.10}$$

L'objectif de conserver un flux exact lors de simulations de l'écoulement dans une fracture unique par une approche Smeared Fractures impose l'égalité des flux Q_{sf} et Q_r. Cette contrainte permet de déterminer la perméabilité équivalente, K_{sf}, avec :

$$K_{sf} = \frac{(3.N_X + 2.N_Y)e}{3.L_r}.K_r \tag{2.11}$$

où e, L_r et K_r sont respectivement l'ouverture, la longueur et la perméabilité de la fracture.
Une bonne approximation de la perméabilité équivalente peut être obtenue en fonction de l'inclinaison $0 < \theta < 45^\circ$ de la fracture. En effet, il est tout à fait possible de déterminer de façon approchée les nombres N_X et N_Y par :

$$N_Y = \frac{2.L_r.\sin\theta}{\Delta} \tag{2.12}$$

$$N_X = \frac{L_r.\cos\theta}{\Delta} - \frac{N_Y}{2} \tag{2.13}$$

On en déduit que :

$$K_{sf} = \frac{e}{\Delta}.\frac{3\cos\theta + \sin\theta}{3}.K_r \tag{2.14}$$

Ainsi, pour une inclinaison nulle le rapport correctif $\frac{e}{\Delta}$ est obtenu assurant la conservation des flux lorsqu'une fracture d'ouverture e est modélisée avec une ouverture Δ.

Ce raisonnement nous a conduit à déterminer une perméabilité équivalente pour le modèle Smeared Fractures directement conditionnée par la conservation des flux. Cette approche permet un bon contrôle des flux, ce que ne peuvent pas faire les autres modèles Smeared Fracture pour lesquels la perméabilité est estimée à partir de moyennes pondérées des perméabilités des fractures et de la matrice [Svensson 2001] et où la précision sur les flux est vérifiée à posteriori [Svensson 1999a].

La perméabilité ainsi déterminée est une grandeur équivalente à l'échelle de la fracture. Elle présuppose que la transmissivité est constante tout le long de la fracture.

Néanmoins, l'extension à une fracture de transmissivité hétérogène est tout à fait envisageable et sera introduite ultérieurement, chapitre 2.2.8.
En outre, la perméabilité équivalente calculée est une grandeur scalaire et non pas tensorielle. Ce point ne pose pas de problème car les applications envisagées ne considèrent que le cas de forts contrastes de perméabilité entre les fractures et les blocs matriciels. La géométrie du système impose alors la direction de l'écoulement.

2.2.4 Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien

L'équation générale traduisant le transport d'un champ de concentration peut se mettre sous la forme :

$$\omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} = \vec{\nabla}.(\omega_r.\bar{\bar{D}}^*_r.\vec{\nabla}C_r - C_r.\vec{q}) \tag{2.15}$$

Où C_r représente la concentration dans la fracture, $\bar{\bar{D}}^*_r = \begin{vmatrix} D^*_L & 0 \\ 0 & D^*_T \end{vmatrix}$ son tenseur de dispersion. Les coefficients de dispersion longitudinale et transversale, D^*_L et D^*_T, sont donnés par les relations $D^*_L = d + \alpha_L.\frac{|\vec{q}|}{\omega_r}$ et $D^*_T = d + \alpha_T.\frac{|\vec{q}|}{\omega_r}$. On notera ω_r la porosité de la fracture, d la diffusion de pore et respectivement α_L et α_T les coefficients de dispersivité longitudinale et transversale. $\vec{q}$ étant la vitesse de Darcy.
De la même manière qu'il a fallu déterminer une perméabilité équivalente, des propriétés équivalentes pour la porosité et pour les coefficients de diffusion-dispersion vont être établies. Pour cela, on utilisera les notations, $\bar{\bar{D}} = \omega.\bar{\bar{D}}^*$, $D_L = \omega.D^*_L$, $D_T = \omega.D^*_T$. L'indice "*" indique de cette maniére que les définitions classiques sont utilisées tandis que sa suppression indique la multiplication par ω.
Le tenseur de dispersion comporte des composantes longitudinales et transverses traduisant la possibilité d'échanges de masse entre la fracture et la matrice. Cependant, étant donnés les forts contrastes de propriétés existant entre la fracture et la matrice, la composante transverse du flux dispersif est faible. Ainsi, approcher le tenseur de dispersion par une grandeur scalaire semble être envisageable.

Tenseur de dispersion équivalent

L'observation de l'équation du transport 2.15 permet de constater la similitude entre les expressions des flux massiques dispersif Q_d et convectif Q_m et celle du flux hydrique Q :

$$Q_d = \iiint_{Vr} \vec{\nabla}.(\bar{\bar{D}}.\vec{\nabla}C_r)dv \tag{2.16}$$

$$\Longleftrightarrow Q = \iiint_{Vr} \vec{\nabla}.(\bar{\bar{K}}.\vec{\nabla}h)dv \tag{2.17}$$

$$Q_m = \iiint_{Vr} \vec{\nabla}.(C_r\bar{\bar{K}}.\vec{\nabla}h)dv \tag{2.18}$$

Le coefficient de dispersion équivalent D_{sf} peut donc être obtenu de la même manière que le coefficient de perméabilité équivalent K_{sf}. Pour le flux massique convectif, la correction a déjà été appliquée au coefficient de perméabilité K_{sf} lors de la résolution de l'écoulement.

$$D_{sf} = \frac{(3.N_X + 2.N_Y)e}{3.L_r}.D_r \tag{2.19}$$

où e, L_r et D_r sont respectivement l'ouverture, la longueur et le coefficient de dispersion de la fracture.

Détermination de la porosité équivalente

En s'appuyant sur l'équation de transport 2.15 la conservation de la masse nous conduit à considérer son intégrale sur le volume de la fracture :

$$\iiint_{Vr} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} dv = Q_d + Q_m \tag{2.20}$$

La détermination des coefficients équivalents est établie à partir de la conservation du flux massique dispersif Q_d et du flux massique convectif Q_m. Dans le cadre de la résolution de l'équation de transport avec le modèle Smeared Fractures le second membre de l'équation 2.20 est donc correctement évalué. Il ne nous reste donc plus qu'à nous intéresser au premier membre de cette équation.

Soit ω_{sf} et ω_r respectivement la porosité équivalente et réelle de la fracture. On va rechercher la relation entre ω_{sf} et ω_r afin d'établir l'égalité suivante :

$$\iint_{V^{sf}} \omega_{sf} \frac{\partial C_r}{\partial t} = \iint_{V^r} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t}$$

On obtient immédiatement :

$$\omega_{sf} = \frac{V^r}{V^{sf}}.\omega_r \tag{2.21}$$

$$\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta}\frac{L_r}{(N_X + N_Y)\Delta}\omega_r \tag{2.22}$$

ou en l'exprimant en fonction de l'angle d'inclinaison de la fracture, θ :

$$\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta} \frac{1}{\cos\theta + \sin\theta} \omega_r \tag{2.23}$$

Les propriétés équivalentes de K_{sf}, relation 2.11, de D_{sf}, relation 2.19 et de ω_{sf}, relation 2.22, sont obtenues en conservant d'une part les flux et d'autre part en considérant la conservation de la masse.
Connaissant l'expression du coefficient de dispersion D_{sf} et de la porosité équivalente, ω_{sf}, il nous est maintenant possible d'exprimer les corrections à apporter aux coefficients de diffusion de pore et de dispersivité du coefficients de diffusion $D = \omega d + \alpha q$ avec d la diffusion de pore et α la dispersivité.

Diffusion et dispersion équivalente

Il a été établi que :

$$D_{sf} = \frac{(3N_X+2N_Y)e}{3L_r} D_r$$

La relation entre les coefficients de diffusion de pore s'exprime alors par :

$$d_{sf} = \frac{(3N_X + 2N_Y)(N_X + N_Y)}{3} (\frac{\Delta}{L_r})^2 . d_r \tag{2.24}$$

et pour les coefficients de dispersivité :

$$\alpha_{sf} = \frac{(3N_X+2N_Y)}{3} \frac{e.q_r}{\Delta.q_{sf}} \frac{\Delta}{L_r} . \alpha_r$$

Or $e.q_r = Q_r = Q_{sf} = \Delta.q_{sf}$

On a donc

$$\alpha_{sf} = \frac{(3N_X + 2N_Y)}{3} \frac{\Delta}{L_r} . \alpha_r \tag{2.25}$$

2.2.5 Critères de monotonie

Afin d'assurer la monotonie du schéma relatif à l'équation du transport, deux critères doivent être respectés pour la convection et la diffusion. Ces critères de monotonie permettent d'éviter l'apparition d'oscillations sur la solution du problème discrétisé, pouvant conduire à l'apparition de concentrations négatives. Le premier critère à considérer pour

	Contrainte	Expression
Perméabilité	Conservation du flux	$K_{sf} = \frac{(3.N_X+2.N_Y)e}{3.L_r}.K_r$
Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_{sf} = \frac{(3.N_X+2.N_Y)e}{3.L_r}.D_r$
Porosité	Conservation du bilan de masse	$\omega_{sf} = \frac{V^r}{V^{sf}}.\omega_r$

Tab. 2.1 – Expression des propriétés équivalentes pour le 2D

la convection porte sur le nombre de Péclet P_e et doit être tel que ce nombre soit inférieur à 2 :

$$P_e = \frac{q\Delta}{D} < 2 \tag{2.26}$$

Un second critère associé au phénomène de diffusion porte sur le nombre de Fourier F_o et nécessite de se placer dans des conditions telles que le nombre de Fourier soit supérieur à $\frac{1}{6}$, [H.Hoteit et al. 2002] ou [H.Hoteit 2002].

$$F_o = \frac{d\Delta t}{\Delta^2} > \frac{1}{6} \tag{2.27}$$

Ce second critère impose de raffiner l'interface fracture-matrice de manière importante lorsque la diffusion matricielle, est faible.

2.2.6 Bilan de l'approche 2D

Les grandeurs équivalentes ont été établies pour une fracture unique. Le tableau 2.1 récapitule leurs expressions ainsi que les contraintes dont elles découlent. L'établissement de ces grandeurs est basé sur le schéma discret en éléments finis mixtes hybrides de manière à obtenir les flux exacts, pour une fracture unique. Ceci constitue un des apport important de notre travail ; les autres approches ne vérifient pas cette propriété. Un second apport important est l'extension de l'approche à la résolution du transport.

Ces propriétés sont à affecter à chaque maille de la fracture. Avant cela, il est, cependant, nécessaire de s'intéresser à quelques détails :

$\Rightarrow$ Propriétés à affecter aux intersections.
Dans le cas de deux fractures qui s'intersectent, il faut affecter aux éléments communs des propriétés tenant compte des informations liées à chacune de ces fractures. D'une manière générale, lorsqu'une fracture intersecte une autre fracture, l'écoulement dans cette fracture va être peu perturbé au niveau de l'intersection et

tout va se passer comme si la fracture la moins transmissive n'était pas connectée. Notre choix a été d'affecter au niveau des intersections les propriétés de la fracture la plus transmissive.

$\Rightarrow$ Propriétés à affecter aux blocs matriciels.
La résolution de l'écoulement est uniquement effectuée dans le maillage des fractures. L'écoulement dans les blocs matriciels est toujours considéré comme négligeable. Pour le transport, par contre, de la matière peut diffuser dans ces blocs. Les propriétés affectées à ces blocs sont les propriétés réelles du bloc. L'influence de ce choix sur les résultats est étudié dans le chapitre 3.3. La variation de la géométrie de l'interface fracture-matrice peut en effet entraîner une erreur de modélisation de la diffusion matricielle (la surface de l'interface étant sur-évaluée).

$\Rightarrow$ Temps de sortie en convection pure.
Les propriétés équivalentes ont été établies de manière à conserver les flux, d'une part, et le bilan de masse, d'autre part. Le temps de sortie en convection pure est, par conséquent, correctement estimé. L'étude du chapitre suivant démontrera cette affirmation.

2.2.7 Cohérence du temps de sortie en convection pure

La migration d'une particule dans une fracture peut être régie par deux processus qui sont la convection et la dispersion hydrodynamique. Si le transport est soumis à la seule convection, une formulation lagrangienne conduit à l'équation suivante dans la direction x (une expression analogue est obtenue dans la direction y) :

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \frac{1}{\omega}\vec{q}(\vec{X}, t) \tag{2.28}$$

où $\vec{X}$ est la position de la particule.

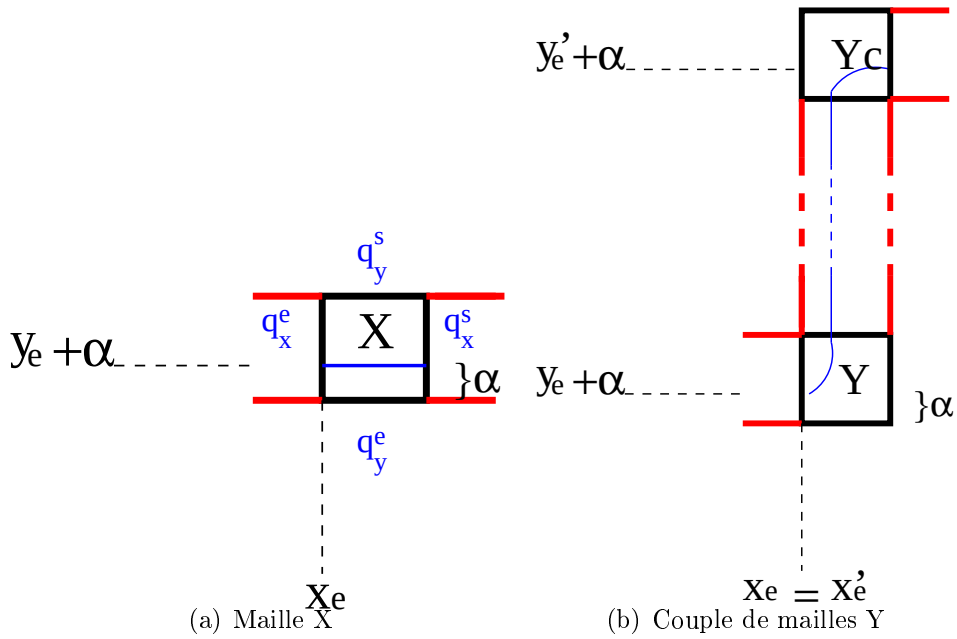
Une méthode semi-analytique [Pollock 1988] permet de calculer la position de la particule à partir d'une interpolation linéaire de la vitesse, (gradient de vitesse constant sur une maille).

$$\frac{q_x(t)}{\omega} = \frac{dx}{dt} \tag{2.29}$$

$$\frac{q_x(t)}{\omega} = A_x(x - x_e) + \frac{q_x^e}{\omega} \tag{2.30}$$

avec A_x, le gradient de vitesse selon la direction $\vec{x}$, défini par :

$$A_x = \frac{q_x^s - q_x^e}{\omega.\Delta}$$



(a) Maille X (b) Couple de mailles Y

Fig. 2.6 – Trajectoire d'une particule (tracé bleu) dans des éléments de maillage Smeared Fractures

Les indices e et s indiquent respectivement l'entrée et la sortie d'une maille de côté Δ. Après intégration entre $\left[\ t\ ,\ \ t+\Delta t\ \right]$, l'expression de la position peut être déterminée, (la particule restant dans la maille entre t et $t+\Delta t$). L'expression de composante y est déterminée de la même manière que la composante x.

$$x(t+\Delta t) = x_e - \frac{q_x^e}{\omega.A_x} + (x(t) - x_e + \frac{q_x^e}{\omega.A_x})\exp(A_x\Delta t) \tag{2.31}$$

$$y(t+\Delta t) = y_e - \frac{q_y^e}{\omega.A_y} + (y(t) - y_e + \frac{q_y^e}{\omega.A_y})\exp(A_y\Delta t) \tag{2.32}$$

où (x , y) sont les coordonnées de la maille étudiée, q la vitesse de Darcy. Pour les différents indices utilisés se reporter à la figure 2.6.

- Maille X

  Pour un élément traversé par deux côtés opposés, le champ de vitesse étant unidirectionnel, l'écoulement l'est également et toutes les trajectoires sont donc les mêmes quelle que soit la position d'entrée de la particule dans l'élément (fig. 2.6).

$$\begin{cases} q_x^s = q_x^e = q \\ q_y^s = q_y^e = 0 \end{cases}$$

La position de la particule s'exprime alors par :

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x_e + \frac{q}{\omega}\Delta t \\ y(t+\Delta t) = y(t) \end{cases}$$

Le temps τ_X que met une particule pour traverser l'élément d'une face à l'autre est donc déterminé par :

$$\begin{cases} \Delta t = \tau_X \\ x(t+\tau_X) = x_s = x_e + \Delta \end{cases}$$

On en déduit que :

$$\tau_X = \frac{\omega}{q}.\Delta \tag{2.33}$$

- Maille Y

L'écoulement est, pour ce type de maille, soumis à un gradient de vitesse dont les composantes sont opposés. La trajectoire d'une particule est alors hyperbolique (fig. 2.6). En effet, on a comme conditions aux limites :

$$\begin{cases} q_y^s = q_x^e = q \\ q_x^s = q_y^e = 0 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} q_x(t) = q - q\frac{(x(t)-x_e)}{\Delta} \\ q_y(t) = q\frac{(y(t)-y_e)}{\Delta} \end{cases}$$

La position d'une particule est donnée par :

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x_e + \Delta + (x(t) - x_e - \Delta)exp(\frac{-q\Delta t}{\omega\Delta}) \\ y(t+\Delta t) = y_e + (y(t) - y_e)exp(\frac{q\Delta t}{\omega\Delta}) \end{cases}$$

Si l'on considère une particule pénétrant dans une maille Y en $(x_e, y_e + \alpha)$ on va pouvoir déterminer sa position de sortie $(x_\alpha, y_e + \Delta)$ après un temps τ_Y. Les conditions initiales de ce problème sont telles que :

$$\begin{cases} x(t) = x_e \\ y(t) = y_e + \alpha \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x(t+\tau_Y) = x_\alpha = x_e + \Delta - \Delta.exp(\frac{-q\tau_Y}{\omega\Delta}) \\ y(t+\tau_Y) = y_e + \Delta = y_e + \alpha.exp(\frac{q\tau_Y}{\omega\Delta}) \end{cases}$$

Ce qui conduit aux expressions suivantes :

$x_\alpha = x_e + \Delta - \alpha$ et $\tau_Y = \frac{\omega\Delta}{q} ln(\frac{\Delta}{\alpha})$

- Maille Y_c complémentaire

Une maille Y traversée de gauche vers le haut est, toujours, suivie d'une seconde maille Y_c traversée du bas vers la droite. Ainsi, on va s'intéresser au temps mis par

une particule pour traverser un couple de maille $Y - Y_c$. Entre un tel couple, des mailles X peuvent s'intercaler. Etant donné que dans les mailles X l'écoulement est unidirectionnel, le point d'entrée dans la maille Y_c a la même abscisse que le point de sortie de la maille Y (fig. 2.6).

La maille Y_c a comme conditions aux limites :

$$\begin{cases} q_x^s = q_y^e = q \\ q_x^e = q_y^s = 0 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} q_x(t) = q\frac{(x(t)-x_e^{'})}{\Delta} \\ q_y(t) = q - q\frac{(y(t)-y_e^{'})}{\Delta} \end{cases}$$

La position d'une particule est donnée par :

$$\begin{cases} x(t+\Delta t) = x_e^{'} + (x(t) - x_e^{'})exp(\frac{q\Delta t}{\omega\Delta}) \\ y(t+\Delta t) = y_e^{'} + \Delta + (y(t) - y_e^{'} - \Delta)exp(\frac{-q\Delta t}{\omega\Delta}) \end{cases}$$

En tenant compte de la position de sortie de la particule après avoir traversée la maille Y, les conditions initiales suivantes sont obtenues :

$$\begin{cases} x(t) = x_e^{'} + \Delta - \alpha \\ y(t) = y_e^{'} + \Delta \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x(t+\tau_{Y_c}) = x_e^{'} + \Delta = x_e^{'} + (\Delta - \alpha).exp(\frac{q\tau_{Y_c}}{\omega\Delta}) \\ y(t+\tau_{Y_c}) = y_\alpha^{'} = y_e^{'} + \Delta - \Delta.exp(\frac{-q\tau_{Y_c}}{\omega\Delta}) \end{cases}$$

On en déduit que :

$y_\alpha^{'} = y_e^{'} + \alpha$ et $\tau_{Y_c} = \frac{\omega\Delta}{q} ln(\frac{\Delta}{\Delta-\alpha})$

Le temps mis pour parcourir un couple de maille Y est donc :

$$\tau_{2Y} = \tau_Y + \tau_{Y_c} = \frac{\omega\Delta}{q} ln(\frac{\Delta^2}{\alpha(\Delta-\alpha)}) \tag{2.34}$$

A partir de ces expressions il est possible :

1. de déterminer le trajet d'une particule le long d'une fracture modélisée par l'approche Smeared Fractures ainsi que le temps de parcours.
   Si la particule entre en $(x_e,\ y_e + \alpha)$ elle ressortira en $(x_s,\ y_s + \alpha)$. Le temps de parcours d'une particule dépend du nombre de mailles X et Y et est donné par l'expression :

$$\tau_{sf} = N_X\tau_X + \frac{N_Y}{2}\tau_{2Y} = \frac{\omega\Delta}{q_{sf}}(N_X + \frac{N_Y}{2} ln(\frac{\Delta^2}{\alpha(\Delta-\alpha)})) \tag{2.35}$$

2. de déterminer, pour la simulation du transport eulérien, le temps moyen de trajet. L'expression précédente est intégrée sur l'intervalle $\left[\ 0 \quad \Delta\ \right]$ et divisée par Δ. L'expression de τ_{sf} est ainsi obtenue.

$$\tau_{sf} = \frac{\omega_{sf}\Delta}{q_{sf}}(N_X + N_Y) \tag{2.36}$$

Pour parcourir le maillage représentant une fracture de porosité ω_{sf}, le temps τ_{sf} est nécessaire. Le temps de trajet d'une particule peut, de plus, s'exprimer de manière analytique par $\tau_r = \frac{L_r.\omega_{ref}}{q_r}$. Or, le flux convectif Q est conservé lors du passage du modèle de référence au modèle Smeared Fractures.
En exprimant les temps en fonction du flux, les expressions suivantes sont obtenues :

- $\tau_{sf} = \frac{\omega_{sf}\Delta^2}{Q_{sf}}.(N_X + N_Y)$
- $\tau_r = \frac{e.L_r.\omega_r}{Q_r}$
- avec $Q_{sf} = Q_r$.

Précédemment on a établi que $\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta}\frac{L_r}{(N_X+N_Y)\Delta}\omega_r$ ce qui conduit à :

$$\tau_{sf} = \tau_r \tag{2.37}$$

La manière dont ont été déterminées les propriétés équivalentes permet de conserver les flux hydrique et massique pour une fracture unique tout en conservant un temps caractéristique de l'écoulement ; à savoir le temps de sortie en convection pure.

2.2.8 Perspective : modélisation des hétérogénéités au sein d'une fracture

Précédemment, la fracture a été considérée comme étant un milieu homogène. Cependant, une fracture peut présenter des hétérogénéités (variation de son ouverture, de ses propriétés ...). Il est intéressant de pouvoir les traiter. Une façon de prendre en compte ces hétérogénéités est de considérer une fracture comme une série de portions de fractures ayant leurs propres caractéristiques. Le problème est alors de connaître la forme des propriétés équivalentes à affecter.

1. volet écoulement

   Le flux sortant de la fracture est tel que :

   - pour le modèle de référence

   $$Q_r = Q_r^i = \frac{e^i.K_r^i}{L^i}\Delta h_i \tag{2.38}$$

   où Q_r^i est le flux pour la portion 'i' de la fracture d'ouverture e^i de longueur L^i et de perméabilité K_r^i.

   - pour le modèle Smeared Fractures

$$Q_{sf} = Q_{sf}^i = \frac{3K_{sf}^i}{3N_X^i + 2N_Y^i}\Delta h_i \tag{2.39}$$

où Q_{sf}^i est le flux pour la portion 'i' de la fracture modélisée avec l'approche Smeared Fractures, N_X^i, N_Y^i sont ses nombres de mailles X et Y et K_{sf}^i sa perméabilité équivalente.

La détermination des perméabilités équivalentes de chaque portion est obtenue par conservation du flux. Pour chaque portion de la fracture, le flux est obtenu de manière exacte.

2. volet transport

Le raisonnement, pour l'établissement des coefficients équivalents de diffusion dispersion, est similaire à celui tenu pour l'écoulement. La fracture est toujours considérée comme une série de fractures. A chaque portion de fracture sont affectés les coefficients équivalents de diffusion dispersion, établis par la conservation des flux massique.

Le traitement des hétérogénéités dans une fracture par le modèle Smeared Fractures ne pose donc pas de difficultés particulières. Il suffit de représenter cette fracture par une suite de portions de fractures, chaque portion pouvant être composée d'une ou plusieurs mailles et de leur associer leurs propriétés équivalentes.

2.2.9 Implémentation, travail informatique dans CAST3M

Le travail nécessaire à l'implémentation de cette approche a demandé de gros efforts de programmation durant toute la durée de la thèse. La résolution de l'écoulement et du transport repose sur trois procédures successives, "SMMAIL", "SMEQ3" et "TRANSGEN".

★ "SMMAIL" est la procédure permettant la génération du maillage. Les arguments nécessaires à la génération du maillage sont fournis sous la forme de deux tables, "Tabfrac" et "Esmmail". Dans la première, toutes les informations du milieu modélisé ont été enregistrées : inclinaison, centre, étendue et ouverture des fractures ainsi que les propriétés physiques du milieu, perméabilité, porosité, coefficients de diffusion, coefficients de dispersivité de la fracture et de la matrice. La seconde est liée aux caractéristiques du maillage fournissant la dimension du maillage ainsi que le pas de discrétisation choisi.
A partir de ces informations la procédure génère le maillage du réseau de fractures en dénombrant dans un même temps le nombre de mailles X et le nombre de mailles Y associés à chacune des fractures. Dans un premier temps l'ensemble des fractures est obtenu. La détermination des intersections est effectuée dans un

second temps. Le maillage obtenu est mis sous forme d'une table, "Tabmail". Le maillage de chaque fracture privé des intersections est enregistré ainsi que celui de chaque intersection. La zone matricielle est aussi stockée dans ce tableau. Enfin les nombres de mailles X et Y sont aussi conservés.

★ "SMEQ3" calcule les différentes propriétés équivalentes et résout l'écoulement. En entrée cette procédure utilise la table, "Tabmail", obtenue après la procédure "SMMAIL" ainsi que la table "Tabfrac" dans laquelle les propriétés physiques du milieu ont été enregistrées. Il est intéressant de noter que la précaution d'enregistrer les mailles intersections pendant la procédure "SMMAIL" permet un choix d'affectation de propriétés variées. Le choix d'affecter aux intersections les propriétés de la fracture la plus transmissive n'est donc pas imposé et peut être facilement modifié. En sortie la table "Tabsf" est obtenue. Les champs de porosité, de dispersion et de vitesse y sont stockés.

★ Enfin "TRANSGEN" est la dernière procédure utilisée. Cette procédure est la procédure permettant la résolution du transport. Déjà implémentée dans "Cast3m", elle n'a fait l'objet d'aucune modification. Son utilisation est donc classique. Pour plus d'informations sur cette procédure, il est possible de se référer à [Bernard-Michel 2004].

2.3 Smeared Fractures pour le 3D

2.3.1 Maillage associé à l'approche Smeared Fractures

Le passage au 3D nécessite d'envisager une approche différente de celle utilisée pour le 2D, l'extension de l'approche précédente au 3D étant complexe et coûteuse. Une autre technique a donc été mise au point. Quatre étapes sont nécessaires à la génération d'un maillage composé de strates en contact les unes par rapport aux autres par l'intermédiaire des mailles formant leurs bordures. Cette propriété de connectivité est nécessaire à la détermination des propriétés équivalentes.

1. Dans un premier temps, il faut générer le maillage régulier du milieu fracturé. Ce maillage se présente alors sous la forme d'un maillage cubique régulier.

2. Dans un deuxième temps, la distance entre les points du maillage régulier et le plan de la fracture devra être déterminée. Le maillage se composant alors de trois types d'éléments :
   - Les éléments possédant des points de distance positive, représentés par les mailles vertes et vert clair sur l'illustration 2D (figure 2.7)

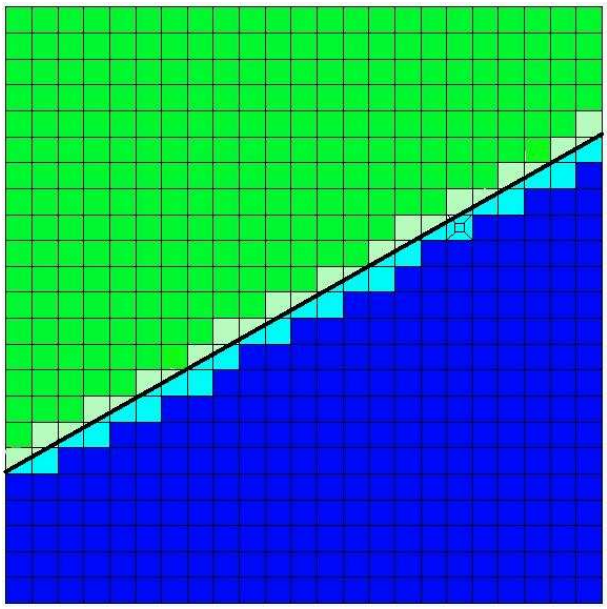


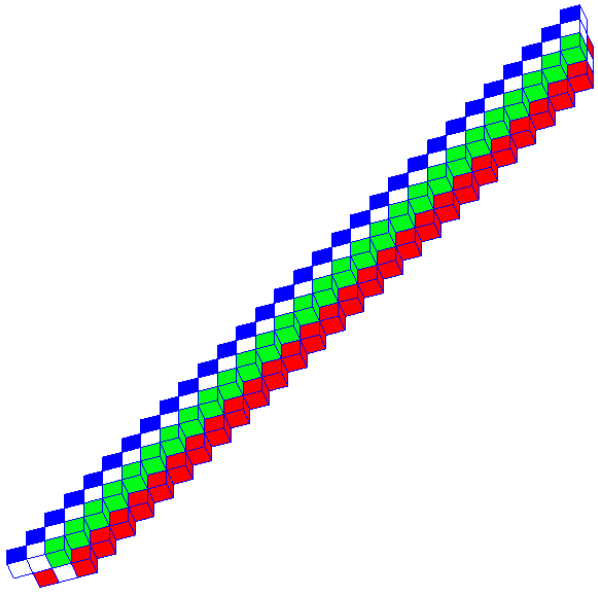
Fig. 2.7 – Génération du maillage S.F. : 1^{iere} sélection des mailles associées à la fracture

- les éléments possédant des points de distance négative, représentés par les mailles bleues et bleu clair sur la figure 2.7.
- les éléments composant la fracture étant ceux possédant à la fois des points de distance positive et des points de distance négative (éléments clairs de la figure 2.7).

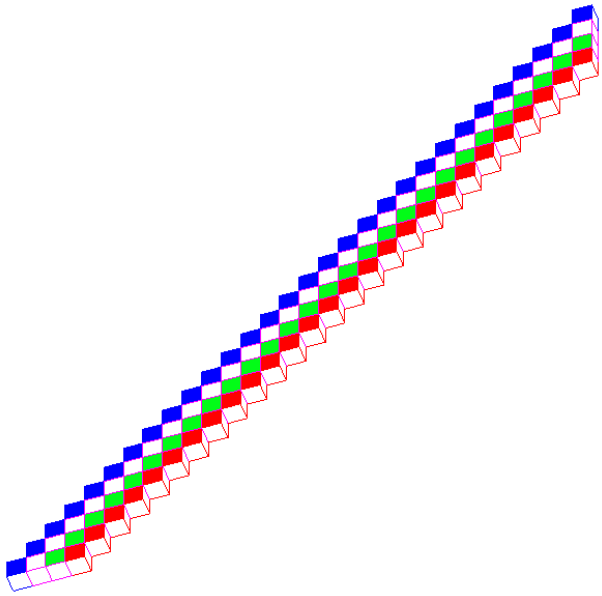
Le maillage associé aux fractures est alors constitué de strates successives mais ne peut cependant pas être utilisé tel quel.

3. Une troisième étape est en effet nécessaire afin d'assurer le respect de la propriété récurrente suivante : la connectivité entre une strate i et $i+1$ est établie de manière à ce que, uniquement les mailles formant la bordure de la strate i (mailles rouges figure 2.8a et b) soient en contact surfacique avec la strate $i+1$. Les mailles de la strate $i+1$ en contact surfacique avec des mailles de la strate i qui n'appartiennent pas à sa bordure (mailles vertes des figures 2.8a et b) sont éliminées (figures 2.8c et d). Cette propriété est nécessaire à l'établissement des caractéristiques équivalentes.

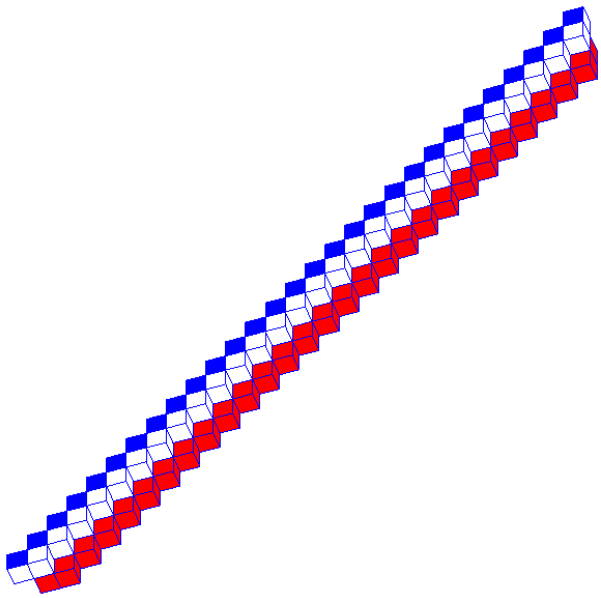
4. En suivant cette démarche, le maillage associé à la fracture est facilement généré. Cependant, si cette fracture n'est pas unique et qu'elle possède des intersections avec d'autres fractures, une quatrième étape est nécessaire afin d'enregistrer les mailles formant les intersections et de les supprimer du maillage associé à leurs fractures. De cette manière, le choix des propriétés à affecter aux intersections, (propriétés de la fracture la plus transmissive, propriétés moyennées ...), pourra être facilement modifié.



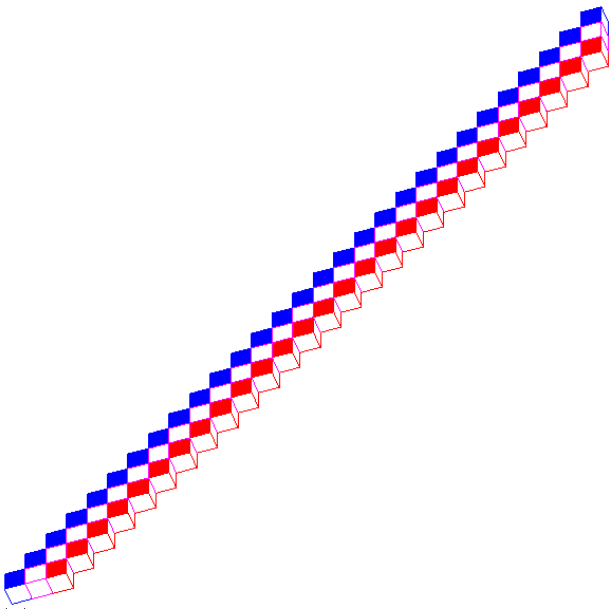
(a) Vue 3D : avant d'assurer la propriété de connectivité



(b) Projection sur un même plan avant d'assurer la propriété de connectivité



(c) Vue 3D : après avoir assuré la propriété de connectivité



(d) Projection sur un même plan après avoir assuré la propriété de connectivité

Fig. 2.8 – Génération du maillage S.F. : strate supérieure $i+1$ et strate inférieure i

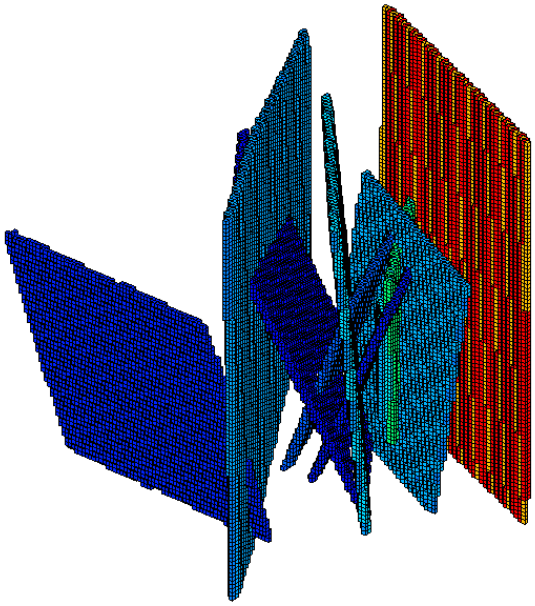


Fig. 2.9 – Maillage S.F. : application à un réseau de 11 fractures tirées des données de Äspö : échelle kilométrique

La figure 2.9 présente le maillage résultant pour la représentation 3D d'un réseau de 11 fractures.

La génération du maillage associé aux fractures étant obtenue, il va être nécessaire de déterminer les propriétés équivalentes et, pour cela, de s'intéresser à la modélisation de l'écoulement (2.40 et 2.41) par un schéma en éléments finis mixtes hybrides (EFMH). Ces propriétés sont établies en raisonnant uniquement sur le maillage associé aux fractures (maillage stratifié pour le 3D).

★ équation de Darcy

$$\vec{q} = -\bar{\bar{K}}.\vec{\nabla}h \tag{2.40}$$

★ équation de conservation de la masse (fluide incompressible et régime permanent d'écoulement)

$$\vec{\nabla}.\vec{q} = 0 \tag{2.41}$$

2.3.2 Propriétés équivalentes : scalaires ou tensorielles ?

Contrairement au cas 2D où le parcours du traceur est parfaitement défini et s'effectue dans les mailles formant le chenal coudé , en 3D le cheminement du traceur est inconnu, à priori. Dans le plan de la fracture, un traceur peut suivre un nombre varié de chemins,

dépendant des conditions aux limites imposées. La distance parcourue par le traceur dans la fracture ainsi que le flux vont donc dépendre de ces conditions aux limites et de l'orientation du gradient de charge. Suivant deux directions d'écoulement, le flux est différent. En reprenant la même méthodologie que pour le 2D (égalité des flux), les propriétés équivalentes obtenues vont dépendre de la direction du gradient de charge.
Or, l'objectif de l'approche est de déterminer ces propriétés équivalentes de manière à contrôler de manière efficace les flux indépendamment des conditions aux limites imposées. Pour cela, différentes stratégies ont été abordées.

- ⋆ Une première solution a été d'évaluer le coefficient correctif par le rapport $\frac{e}{\Delta}$. Pour cette solution les propriétés équivalentes restent des scalaires. Cette solution n'a pas été retenue, étant donné qu'une erreur, pouvant atteindre 50%, a été constatée sur les flux.

- ⋆ Une seconde solution a donc été envisagée de manière à contrôler de manière plus efficace l'erreur sur les flux. Une fracture, pour une résolution 3D, va être représentée par des strates successives, son intersection avec une face du cube va donc de nouveau former un chenal coudé. De la même manière que pour le 2D, il est possible d'évaluer des propriétés équivalentes de ce chenal. Cette intersection avec les bordure du cube n'est pas unique et une autre intersection existe sur une face perpendiculaire à la première. Les angles d'inclinaison des intersections sur ces deux faces étant en général différents, un second jeux de propriétés équivalentes va être déterminé. Des propriétés équivalentes uniques sous la forme de scalaires sont par conséquent impossible à déterminer. Néanmoins, suivant deux directions orthogonales, il est possible d'évaluer deux jeux de propriétés équivalentes.
  Ce raisonnement va donc nous conduire à rechercher une perméabilité et une dispersion sous forme orthotrope assurant la conservation des flux suivant ces deux directions. De plus, étant donné que la représentation de la fracture est en trois dimensions, le tenseur sera d'ordre trois. La troisième composante assure la communication entre les diverses strates, (figure 2.10).

Afin d'établir les expressions des flux numériques suivant deux directions, le schéma EFMH est à nouveau étudié. Ces flux établis, ils seront comparés aux flux réels attendus, afin d'évaluer les expressions des propriétés équivalentes. De la même manière que pour le 2D, les flux seront conservés dans ces deux directions. A la différence du 2D, une étape supplémentaire est nécessaire afin d'orienter correctement les tenseurs équivalents. Dans un premier temps, le chapitre suivant traitera de la formulation EFMH et de l'établissement des propriétés équivalentes, en s'appuyant sur des expressions de propriétés physiques tensorielles, orthotropes pour une orientation donnée. Puis, dans un second temps, le chapitre 2.3.6, établira comment orienter correctement les tenseurs, suivant l'inclinaison de la fracture.

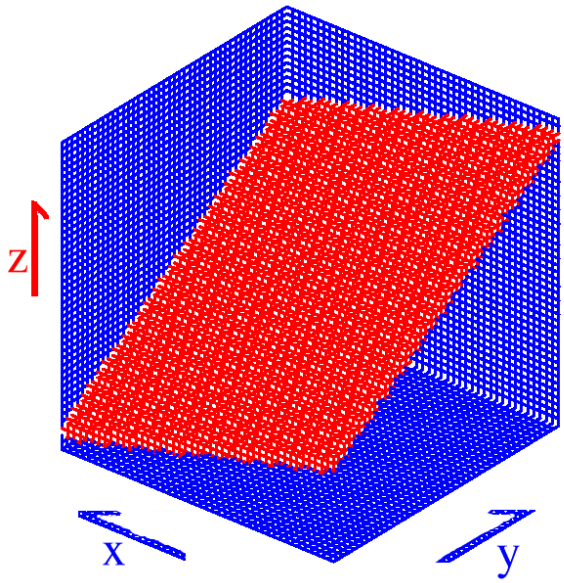


Fig. 2.10 – Maillage S.F. : directions considérées pour l'équivalence des flux (X et Y) et direction assurant la connectivité des strates (Z)

2.3.3 Formulation EFMH et applications

1. Formulation EFMH

   Les mailles constituant le maillage associé à une fracture, pour une approche Smeared Fractures, sont des cubes de côté Δ. Pour un élément cube Ω, lors d'une discrétisation en EFMH, ([Mosé et al. 1994]), seuls les points aux centre des faces et le point au centre du cube sont considérés : soit sept points. Deux degrés de liberté sont affectés à chacun des points des faces et correspondent, d'une part au flux total Q_i traversant la face i, et d'autre part, à la charge Th_i moyenne sur cette face. En outre, l'élément possède un dernier degré de liberté en son centre, correspondant à la valeur de la charge moyenne $\bar{h}$ sur cet élément. Soit un total de 13 inconnues par élément.
   A partir de la formulation variationnelle faible discrète, [Dabbene 1994] montre que le problème d'écoulement de type Darcy, en régime permanent, se traduit par un système de 7 équations :

$$Q_i^{\Omega} = \bar{h}_{\Omega}(\sum_j M_{ij}^{\Omega^{-1}}) - \sum_j (M_{ij}^{\Omega^{-1}}.Th_j^{\Omega^{-1}}) \text{ pour } i = 1..6 \tag{2.42}$$

$$\bar{h}_{\Omega} = \frac{\sum_i (\alpha_i^{\Omega} Th_i)}{\sum_i (\alpha_i^{\Omega})} \tag{2.43}$$

   avec $\alpha_i^{\Omega} = \sum_j M_{ji}^{\Omega^{-1}}$
   M^{Ω} étant la matrice de masse hybride définie par :

$$M_{ij}^{\Omega} = \int_{\Omega} (\vec{w}_i)^t \bar{\bar{K}}^{-1} \vec{w}_j d\Omega$$

avec $\vec{w}_i$ les fonctions d'interpolation telles que :

$$\iint_{F_j} \vec{w}_i . \vec{n} dF_j = \delta_{ij}$$

Ces 7 équations sont complétées par les conditions aux limites du problème et les conditions de continuité entre les éléments du maillage (continuité des flux et des traces de charges sur chaque face).

2. Application

Pour un élément cubique de côté Δ centré sur l'origine, les fonctions d'interpolations sont :

$$\vec{w}_1 = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{(z-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_2 = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{(z+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_3 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \\ 0 \end{vmatrix}$$

$$\vec{w}_4 = \begin{vmatrix} \frac{(x+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \vec{w}_5 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \vec{w}_6 = \begin{vmatrix} \frac{(x-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^3} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}$$

Dans le cas où la perméabilité des fractures est orthotrope $\bar{\bar{K}}_{sf} = \begin{vmatrix} K_1^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & K_2^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & K_3^{sf} \end{vmatrix}$, les expressions de la matrice hybride, de son inverse et des différents coefficients α_i^{Ω} sont relativement simples et permettent de déterminer une expression du flux pour chaque élément.

$$M^{\Omega} = \frac{1}{6\Delta}\begin{vmatrix} \frac{2}{K_3^{sf}} & \frac{-1}{K_3^{sf}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-1}{K_3^{sf}} & \frac{2}{K_3^{sf}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{K_2^{sf}} & 0 & \frac{-1}{K_2^{sf}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{K_1^{sf}} & 0 & \frac{-1}{K_1^{sf}} \\ 0 & 0 & \frac{-1}{K_2^{sf}} & 0 & \frac{2}{K_2^{sf}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{-1}{K_1^{sf}} & 0 & \frac{2}{K_1^{sf}} \end{vmatrix}$$

$$\Longrightarrow M^{\Omega^{-1}} = \Delta\begin{vmatrix} 4K_3^{sf} & 2K_3^{sf} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2K_3^{sf} & 4K_3^{sf} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4K_2^{sf} & 0 & 2K_2^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4K_1^{sf} & 0 & 2K_1^{sf} \\ 0 & 0 & 2K_2^{sf} & 0 & 4K_2^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2K_1^{sf} & 0 & 4K_1^{sf} \end{vmatrix}$$

$$\alpha_i^{\Omega} = 6\Delta\begin{vmatrix} K_3^{sf} \\ K_3^{sf} \\ K_2^{sf} \\ K_1^{sf} \\ K_2^{sf} \\ K_1^{sf} \end{vmatrix} \quad \bar{h} = \frac{K_3^{sf}Th_1 + K_3^{sf}Th_2 + K_2^{sf}Th_3 + K_1^{sf}Th_4 + K_2^{sf}Th_5 + K_1^{sf}Th_6}{2(K_1^{sf} + K_2^{sf} + K_3^{sf})}$$

En notant $Q = \begin{vmatrix} Q_1^{\Omega} \\ Q_2^{\Omega} \\ Q_3^{\Omega} \\ Q_4^{\Omega} \\ Q_5^{\Omega} \\ Q_6^{\Omega} \end{vmatrix}$ et $Th = \begin{vmatrix} Th_1^{\Omega} \\ Th_2^{\Omega} \\ Th_3^{\Omega} \\ Th_4^{\Omega} \\ Th_5^{\Omega} \\ Th_6^{\Omega} \end{vmatrix}$ l'équation 2.42 peut se mettre sous la forme :

$$Q = \begin{vmatrix} A_3 & B_3 & C_1 & C_2 & C_1 & C_2 \\ B_3 & A_3 & C_1 & C_2 & C_1 & C_2 \\ C_1 & C_1 & A_2 & C_3 & B_2 & C_3 \\ C_2 & C_2 & C_3 & A_1 & C_3 & B_1 \\ C_1 & C_1 & B_2 & C_3 & A_2 & C_3 \\ C_2 & C_2 & C_3 & B_1 & C_3 & A_1 \end{vmatrix} Th \tag{2.44}$$

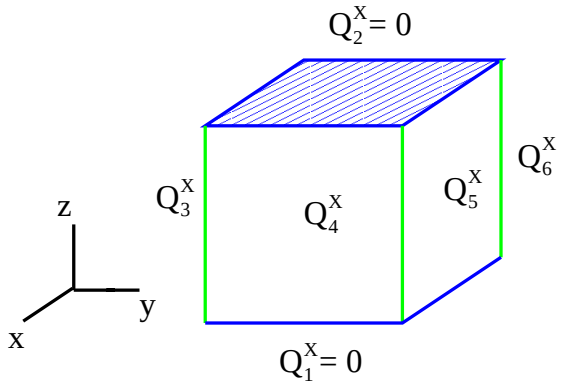


Fig. 2.11 – Maillage S.F. : l'ensemble X et ses conditions aux limites

$$\text{avec} \begin{cases} A_j = (3K_j^{sf\,2} - 4K_j^{sf} \sum_{i=1}^{3} K_i^{sf}) \frac{\Delta}{\sum_{i=1}^{3} K_i} & j = 1..3 \\ B_j = (3K_j^{sf\,2} - 2K_j^{sf} \sum_{i=1}^{3} K_i^{sf}) \frac{\Delta}{\sum_{i=1}^{3} K_i} & j = 1..3 \\ C_1 = 3K_3^{sf} K_2^{sf} \frac{\Delta}{\sum_{i=1}^{3} K_i^{sf}} \\ C_2 = 3K_3^{sf} K_1^{sf} \frac{\Delta}{\sum_{i=1}^{3} K_i^{sf}} \\ C_3 = 3K_2^{sf} K_1^{sf} \frac{\Delta}{\sum_{i=1}^{3} K_i^{sf}} \end{cases}$$

Afin d'établir les grandeurs équivalentes utilisées pour des simulations 3D, deux ensembles de mailles vont être maintenant étudiés. Pour chacun de ces ensembles, l'expression du flux est établie pour deux écoulements orientés suivant les directions horizontales $\vec{x}$ puis $\vec{y}$ formant avec la direction verticale les directions de bases du domaines.

⋆ Ensemble de mailles noté X.

L'ensemble X est constitué d'une unique maille qui a pour conditions aux limites un flux nul sur les deux faces horizontales (fig. 2.11). Dans l'exemple traité ce sera les faces 1 et 2. Soit $Q_2 = Q_1 = 0$.

- **Expression du flux pour une direction d'écoulement $\vec{x}$.**

  Soit $Q_x^X = Q_4^X = -Q_6^X$ le flux à déterminer et Δh_x la différence $Th_4 - Th_6$. L'expression du flux Q_x^X est facilement établie à partir de la formulation EFMH 2.44.

$$Q_x^X = -K_1^{sf}.\Delta.\Delta h_x \tag{2.45}$$

- **Expression du flux pour une direction d'écoulement $\vec{y}$.**

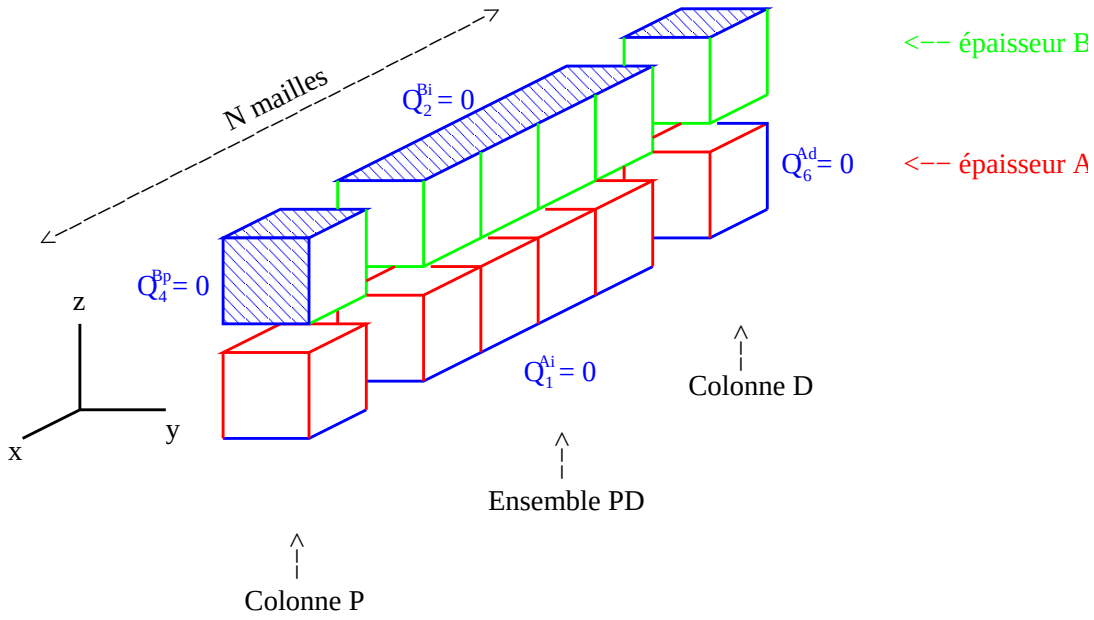


Fig. 2.12 – Maillage S.F. : l'ensemble Y et ses conditions aux limites, direction d'écoulement $\vec{x}$

Soit $Q_y^X = Q_5^X = -Q_3^X$ le flux à déterminer. En utilisant à nouveau l'expression du flux de la formulation EFMH, équation 2.44, le flux Q_y^X s'écrit :

$$Q_y^X = -K_2^{sf}.\Delta.\Delta h_y \tag{2.46}$$

où $\Delta h_y = Th_5 - Th_3$.

⋆ Ensemble de mailles noté Y.

L'ensemble Y est constitué de deux épaisseurs A et B de N mailles. Les conditions aux limites associées à cet ensemble correspondent à un flux nul sur les 2N faces horizontales ainsi que sur deux faces des mailles, non opposées, appartenant chacune à une extrémité de l'ensemble Y (faces bleues fig 2.12). Les mailles A_i et B_i correspondent respectivement à la ième maille de l'épaisseur A et de l'épaisseur B.

- **Quelques propriétés de flux et de traces de charge.**

Par définition de l'ensemble Y, les propriétés suivantes peuvent déjà être annoncées.

$$Q_1^{A_i} = Q_2^{B_i} = 0 \tag{2.47}$$
$$Q_6^{A_D} = Q_4^{B_P} = 0 \tag{2.48}$$

où P et D représentent respectivement la première et dernière colonne de l'ensemble Y (fig 2.12).
A ces propriétés s'ajoutent celles imposées par la continuité des flux et des charges à l'interface de deux mailles.

$$Q_6^{A_i} = -Q_4^{A_{i+1}} \tag{2.49}$$
$$Q_6^{B_i} = -Q_4^{B_{i+1}} \tag{2.50}$$

$$Th_6^{A_i} = Th_4^{A_{i+1}} \tag{2.51}$$
$$Th_6^{B_i} = Th_4^{B_{i+1}} \tag{2.52}$$
$$Th_2^{B_i} = Th_1^{B_i} \tag{2.53}$$

- **Expression du flux pour une direction d'écoulement $\vec{x}$.**

L'écoulement dans la direction $\vec{x}$ est obtenu en imposant :

$$Q_3^{A_i} = Q_3^{B_i} = 0 \tag{2.54}$$
$$Q_5^{A_i} = Q_5^{B_i} = 0 \tag{2.55}$$
$$Q_4^{A_P} = -Q_6^{B_D} = Q_x^Y \tag{2.56}$$

Pour ce problème, il est intéressant de décomposer l'ensemble Y en trois domaines. Le premier domaine est la première colonne notée P, le second, noté D, étant la dernière colonne. Enfin le domaine, noté PD est l'ensemble des colonnes comprises entre la première et la dernière colonne.
L'objet de cette étude est de rechercher l'expression du flux Q_x^Y en fonction de $\Delta h_x = Th_4^{A_P} - Th_6^{B_D}$.
Pour cela, le système suivant devra être résolu :

$$\begin{cases} Q_1^{A_D} - Q_2^{B_P} + Q_1^{A_P} - Q_2^{B_D} = 0 \\ Q_5^{A_D} - Q_3^{B_P} + Q_5^{A_P} - Q_3^{B_D} = 0 \\ Q_6^{A_D} - Q_4^{B_P} + Q_4^{A_P} - Q_6^{B_D} = 2Q_x^Y \end{cases}$$

Les inconnues à considérer étant :

$$\begin{cases} Q_x^Y & \\ V & = Th_1^{A_D} - Th_2^{B_P} + Th_1^{A_P} - Th_2^{B_D} \\ T & = Th_3^{A_D} - Th_5^{B_P} + Th_3^{A_P} - Th_5^{B_D} \\ & = Th_5^{A_D} - Th_3^{B_P} + Th_5^{A_P} - Th_3^{B_D} \\ \beta_1 & = X_2 - X_1 \\ \beta_2 & = \Delta h_2 - \Delta h_1 \\ \Delta h_1 & = Th_6^{B_D} - Th_4^{A_P} \\ \Delta h_2 & = Th_6^{A_D} - Th_4^{B_P} \\ X_1 & = Th_6^{B_P} - Th_4^{A_D} \\ X_2 & = Th_6^{A_P} - Th_4^{B_D} \end{cases}$$

En utilisant l'expression du flux en EFMH, relation 2.44, le système précédent s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{cases} A_3 V + 2C_1 T + C_2(\beta_1 + \beta_2) = 0 \\ C_1 V + (B_2 + A_2)T + C_3(\beta_1 + \beta_2) = 0 \\ C_2 V + 2C_3 T + B_1\beta_1 + A_1\beta_2 = 2Q_x^Y \end{cases}$$

Ce système nous permet d'obtenir une relation de Q_x^Y, T et V en fonction des inconnues β_1 et β_2.

$$\begin{cases} T = \frac{2K_1^{sf}}{4K_1^{sf}+K_3^{sf}}(\beta_1 + \beta_2) \\ V = \frac{3K_1^{sf}}{4K_1^{sf}+K_3^{sf}}(\beta_1 + \beta_2) \\ Q_x^Y = \frac{\Delta K_1^{sf}}{4K_1^{sf}+K_3^{sf}}((2K_1^{sf} - K_3^{sf})\beta_1 - 2(K_1^{sf} - K_3^{sf})\beta_2) \end{cases}$$

Cette première relation de Q_x^Y est alors complétée par quatre autres équations.
En gardant à l'esprit les propriétés 2.48 et 2.54 à 2.56 et en émettant les hypothèses 2.57 et 2.58, il est possible d'obtenir une relation entre Q_x^Y et $Q_4^{A_D}$, β_1 et β_2.

$$Q_4^{A_D} = -Q_6^{B_P} \tag{2.57}$$
$$Q_4^{B_D} = -Q_6^{A_P} \tag{2.58}$$

En effet, à partir des variations de flux entre les faces 6 et 4 des colonnes D et P, (relation 2.59), on aboutit à la relation, (relation 2.60).

$$\begin{aligned} 4(Q_4^{A_D} - Q_x^Y) &= Q_4^{A_D} - Q_6^{A_D} + Q_4^{B_P} - Q_6^{B_P} \\ &+ Q_6^{B_D} - Q_4^{B_D} + Q_6^{A_P} - Q_4^{A_P} \end{aligned} \tag{2.59}$$

$$Q_x^Y = Q_4^{A_D} + \frac{\Delta K_1^{sf}}{2}(\beta_1 - \beta_2) \tag{2.60}$$

Une seconde relation est obtenue par la résolution du système suivant. Ce système provient, d'une part, des bilans de flux sur les mailles B_P et A_D et, d'autre part, de l'hypothèse 2.57. permettant d'établir les égalités suivantes :

$$Q_2^{A_P} = Q_6^{B_P} = -Q_4^{A_D} \tag{2.61}$$
$$Q_2^{A_D} = -Q_4^{A_D} \tag{2.62}$$

Les égalités 2.61 et 2.62 permettent d'aboutir à la relation 2.63 entre $Q_4^{A_D}$, β_1 et β_2, en considérant l'égalité :

$$-4Q_4^{A_D} = 2(Q_2^{A_P} + Q_2^{A_D}) = Q_2^{A_P} - Q_1^{B_P} + Q_2^{A_D} - Q_1^{B_D}$$

$$Q_4^{A_D} = -\frac{3\Delta K_1^{sf} K_3^{sf}}{2(4K_1^{sf} + K_3^{sf})}(\beta_1 + \beta_2) \tag{2.63}$$

Les relations 2.60 et 2.63 font intervenir la variable $Q_4^{A_D}$. Afin d'éliminer cette inconnue, on émettra l'hypothèse que :

$$Q_4^{A_D} = S.Q_x^Y \tag{2.64}$$

où S sera une constante à déterminer.

Enfin, deux autres équations complètent ce système, rendant sa résolution possible. Ces deux dernières équations sont obtenues en utilisant les propriétés 2.49 à 2.53 appliquées à l'ensemble Y et à son sous-ensemble PD.

$$\begin{cases} 2NQ_x^Y & = \sum_{i\epsilon Y}((Q_4^{A_i} - Q_6^{A_i}) + (Q_4^{B_i} - Q_6^{B_i})) \\ & = 2\Delta K_1^{sf}(\Delta h_1 + \Delta h_2) \\ 2(N-2)Q_x^Y & = \sum_{i\epsilon PD}((Q_4^{A_i} - Q_6^{A_i}) + (Q_4^{B_i} - Q_6^{B_i})) \\ & = -2\Delta K_1^{sf}(X_1 + X_2) \end{cases}$$

La relation 2.65, entre Q_x^Y et $\Delta h_x = -\Delta h_1$, est obtenue alors par la résolution du système suivant :

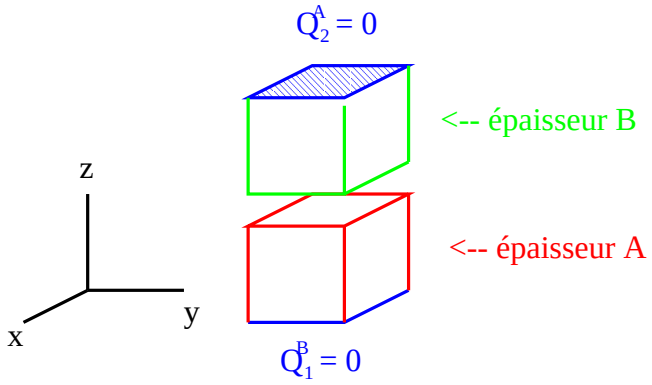


Fig. 2.13 – Maillage S.F. : l'ensemble Y et ses conditions aux limites, direction d'écoulement $\vec{y}$

$$\begin{cases} Q_x^Y = \frac{\Delta K_1^{sf}}{4K_1^{sf}+K_3^{sf}}((2K_1^{sf}-K_3^{sf})\beta_1 - 2(K_1^{sf}-K_3^{sf})\beta_2) \\ Q_x^Y = \frac{Q_4^{A_D}}{S} \\ Q_4^{A_D} = -\frac{3\Delta K_1^{sf} K_3^{sf}}{2(4K_1^{sf}+K_3^{sf})}(\beta_1+\beta_2) \\ Q_x^Y = Q_4^{A_D} + \frac{\Delta K_1^{sf}}{2}(\beta_1-\beta_2) \\ Q_x^Y = \frac{\Delta K_1^{sf}(\Delta h_1+\Delta h_2)}{N} \\ Q_x^Y = -\frac{\Delta K_1^{sf}(X_1+X_2)}{N-2} \end{cases}$$

$$Q_x^Y = -\frac{2\Delta K_1^{sf} K_3^{sf}}{(N+1-\frac{2S}{3})K_3^{sf} + \frac{4S}{3}K_1^{sf}}\Delta h_x \tag{2.65}$$

Cette expression est valable sous les hypothèses 2.57, 2.58 et 2.64. Son utilisation nécessitera donc de les vérifier.

- **Expression du flux pour une direction d'écoulement $\vec{y}$.**

Le problème sera simplifié en déterminant l'expression du flux en fonction de $\Delta h_y = Th_5^B - Th_3^A$, sur uniquement une colonne, soit deux mailles A et B (fig 2.13).
L'écoulement dans la direction $\vec{y}$ est obtenu en imposant :

$$Q_4^A = Q_4^B = 0 \tag{2.66}$$
$$Q_6^A = Q_6^B = 0 \tag{2.67}$$
$$Q_5^B = -Q_3^A = Q_y^Y \tag{2.68}$$

L'expression de Q_y^Y est obtenue en utilisant les expressions des flux aux faces, en fonction des traces de charge (équation 2.44), lors de la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} Q_5^B - Q_3^A = 2Q_y^Y \\ Q_2^B - Q_1^A = 0 \\ Q_3^B - Q_5^A = 0 \\ Q_4^B - Q_6^A = 0 \end{cases}$$

En considérant les inconnues :

$$\begin{cases} Q_y^Y & & \\ h_y & = & Th_5^B - Th_3^A \\ W & = & Th_3^B - T_5^A \\ V & = & Th_2^B - Th_1^A \\ T & = & Th_4^B - Th_6^A + Th_6^B - Th_4^A \\ & = & 2(Th_4^B - Th_6^A) \\ & = & 2(Th_6^B - Th_4^A) \end{cases}$$

L'équation 2.69 est facilement obtenue.

$$Q_y^Y = -\frac{3}{2}\Delta \frac{K_2^{sf} K_3^{sf}}{K_2^{sf} + K_3^{sf}} \Delta h_y \tag{2.69}$$

Ce flux correspond au flux sortant, pour une direction d'écoulement $\vec{y}$, pour une colonne de l'ensemble Y. L'ensemble Y étant constitué de N colonnes, le flux total de l'ensemble Y est $N.Q_y^Y$.

2.3.4 Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente

De la même manière que pour le 2D, l'approche Smeared fracture est associée à un maillage régulier. Les mailles associées à une fracture sont déterminées suivant le principe que le maillage associé à la fracture est le plus petit ensemble de mailles incluant le plan géométrique représentant cette fracture. Ce maillage est formé de strates successives. Considérons une strate i : si une maille appartient à cette strate et que les mailles voisines, en contact surfacique, appartiennent aussi à cette strate, alors cette maille appartient à l'ensemble X (en effet les flux aux faces de ses deux faces horizontales sont nuls : mailles vertes fig. 2.14).

L'ensemble des autres mailles du maillage (mailles rouges et bleues fig. 2.14) assure la connectivité entre les différentes strates. Par construction, le maillage associé à la

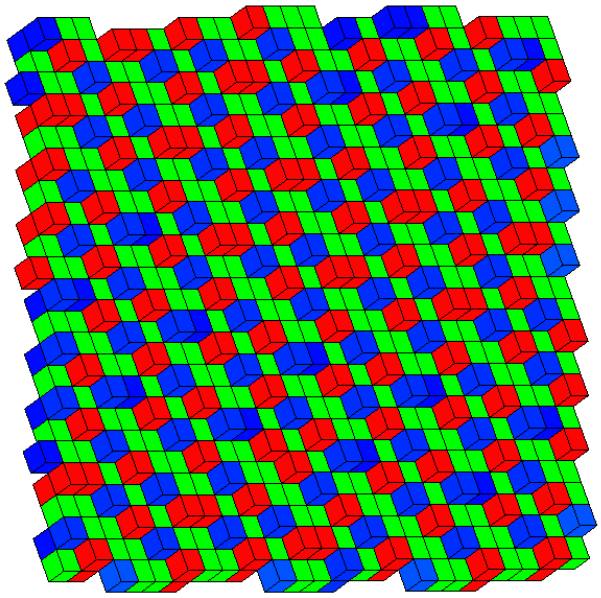


Fig. 2.14 – Maillage S.F. : ensembles X en vert et ensembles Y en bleu et rouge

fracture respecte la propriété récurrente suivante : la connectivité, entre une strate i et i+1, est établie de manière à ce qu'uniquement les mailles appartenant à la bordure de la strate i soient en contact surfacique avec la strate i+1 (fig. 2.8). Les mailles, assurant la connectivité entre la strate i et i+1, peuvent être décomposées en différents groupes de mailles connectés entre eux par une arête commune. Ces différents groupes peuvent être observés figure 2.14 où N prend, dans ce cas, les valeurs 1 ou 2. La coloration de ces différents groupes (en bleu ou rouge) permet de bien identifier ces groupes possédant une arête commune. Ces groupes possèdent en outre les caractéristiques suivantes :

- deux épaisseurs A et B de N mailles (N dépendant de l'inclinaison de la fracture)
- flux nul sur les $2N$ faces horizontales
- flux nul pour deux faces verticales appartenant chacune à une des deux extrémités.

Chacun de ces groupes appartient donc, par définition, à un ensemble Y.

Afin d'établir l'équivalence des flux, il est nécessaire de connaître la situation du plan représentant la fracture réelle dans ces différents ensembles de mailles et de se replacer dans les conditions d'écoulement de l'étude du chapitre précédent. Les angles d'inclinaison de la fracture sont tels que $45^\circ \geq \beta > \theta \geq 0^\circ$. Soit $\bar{\bar{K}}_r = \begin{vmatrix} K_1^r & 0 \\ 0 & K_2^r \end{vmatrix}$ le tenseur de perméabilité réel de cette fracture.

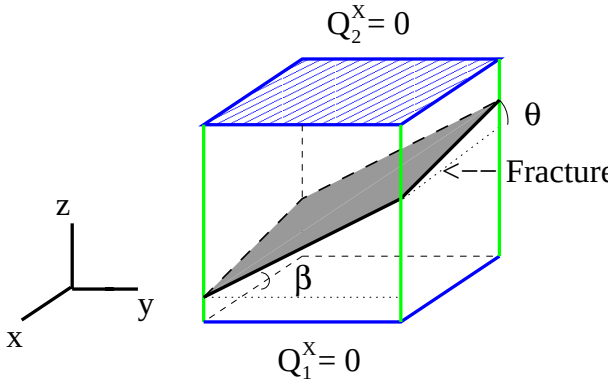


Fig. 2.15 – Position d'une fracture dans un ensemble X

⋆ Ensemble de mailles noté X.

L'ensemble X a pour propriété $Q_2^X = Q_1^X = 0$. La fracture réelle intersecte les faces 3, 4, 5 et 6 d'un ensemble X (fig. 2.15).
Le flux réel va pouvoir être évalué aux différentes faces de manière analytique pour les deux directions d'écoulement étudiées précédemment.
Pour une direction d'écoulement $\vec{x}$, la relation suivante est facilement établie :

$$Q_x^r = -K_1^r \frac{e\cos\theta}{\cos\beta}\Delta h_x \tag{2.70}$$

De la même manière, pour une direction d'écoulement $\vec{y}$, on obtient :

$$Q_y^r = -K_2^r \frac{e\cos\beta}{\cos\theta}\Delta h_y \tag{2.71}$$

La détermination du tenseur de perméabilité équivalent est obtenue par conservation des flux pour les directions $\vec{x}$ et $\vec{y}$. Les relations 2.45 et 2.70 puis 2.46 et 2.71 nous permettent de déterminer le tenseur de perméabilité équivalent pour un ensemble X.

$$\bar{\bar{K}}_{sf}^X = \begin{vmatrix} K_1^{sf,X} & 0 & 0 \\ 0 & K_2^{sf,X} & 0 \\ 0 & 0 & K_3^{sf,X} \end{vmatrix} \tag{2.72}$$

$$K_1^{sf,X} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}K_1^r \tag{2.73}$$

$$K_2^{sf,X} = \frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta}K_2^r \tag{2.74}$$

Notre équivalence possède un degré de liberté $K_3^{sf,X}$. $K_3^{sf,X}$ sera fixé arbitrairement égal à $K_2^{sf,X}$.

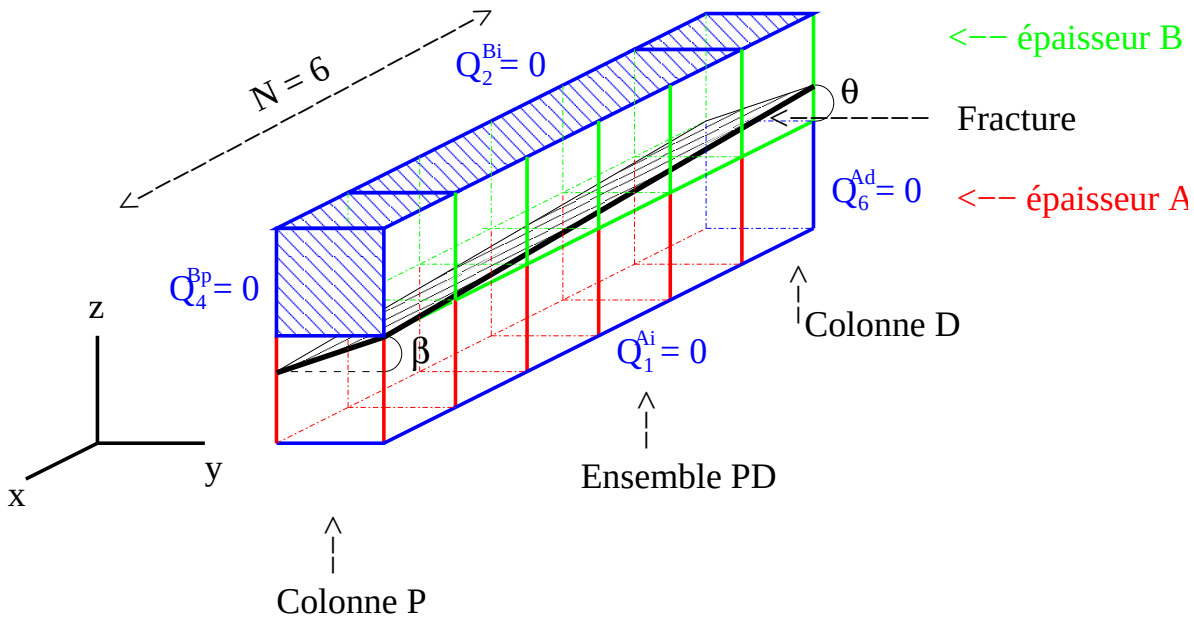


Fig. 2.16 – Position d'une fracture dans un ensemble Y

⋆ Ensemble de mailles noté Y.

L'ensemble Y possède les propriétés suivantes :

$$Q_1^{A_i} = Q_2^{B_i} = 0 \tag{2.75}$$
$$Q_6^{A_D} = Q_4^{B_P} = 0 \tag{2.76}$$

La portion de fracture incluse dans l'ensemble Y n'intersecte donc pas :

- les faces 1 des mailles A_i,
- les faces 2 des mailles B_i,
- la face 6 de la maille A_D et la face 4 de la maille B_P.

Ce qui revient à dire que les intersections de la fracture et d'un ensemble Y se situent sur les faces 3 et 5 de l'ensemble Y mais aussi sur la face 6 de la maille B_D ainsi que sur la face 4 de la maille A_P (fig. 2.16).
L'observation de la figure 2.16 permet d'exprimer N en fonction de θ et β.

$$N = |\frac{\tan\beta}{\tan\theta}| \tag{2.77}$$

⇒ Expression des flux directionnels

Pour une direction d'écoulement $\vec{x}$, le flux s'écrit sous la forme :

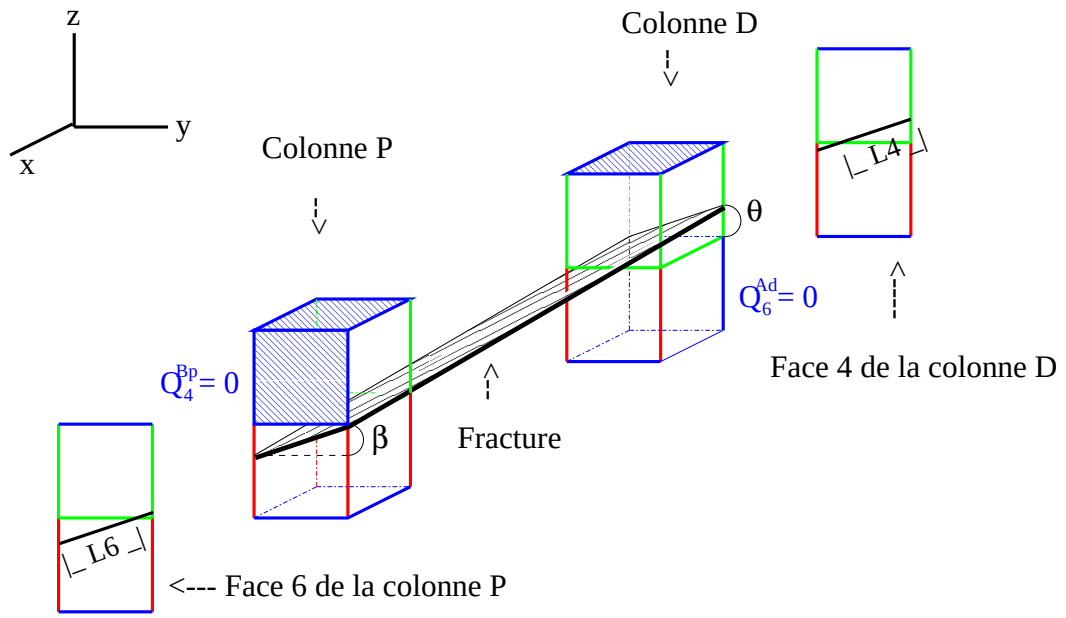


Fig. 2.17 – Ensemble Y : propriétés géométriques

$$Q_y^r = -K_1^r \frac{e\cos\theta}{N\cos\beta}\Delta h_x \tag{2.78}$$

De la même manière, pour une direction d'écoulement $\vec{y}$:

$$Q_y^r = -N.K_2^r \frac{e\cos\beta}{\cos\theta}\Delta h_y \tag{2.79}$$

$\Rightarrow$ Vérification des hypothèses 2.57, 2.58 et 2.64

Avant de pouvoir utiliser la relation 2.65, il faut vérifier les différentes hypothèses qui ont été nécessaires à sa formulation. Nous allons tout d'abord vérifier les hypothèses 2.57 et 2.58 ; c'est à dire $Q_4^{A_D} = -Q_6^{B_P}$ et $Q_4^{B_D} = -Q_6^{A_P}$. En considérant la figure 2.17, et en appliquant des concepts géométriques de base, cette relation est immédiatement obtenue (les longueurs L_6 et L_4 étant égales, les flux se répartissent de la même manière pour les deux colonnes).

Il ne nous reste plus qu'à déterminer la constante S de l'hypothèse 2.64 ($Q_4^{A_D} = S.Q_x^Y$). L'étude de l'intersection de la fracture et de la face 4, de la colonne D (fig. 2.17), permet d'estimer l'expression du flux sortant de la face 4, pour un écoulement dans la direction $\vec{x}$.

$$Q_4^{r,A_D} = Q_x^r.|\tfrac{\tan\theta}{\tan\beta}|$$

Les propriétés équivalentes sont établies par conservation des flux. L'égalité $Q_4^{A_D} = Q_4^{r,A_D}$ est imposée. Cette égalité entraîne que :

$$S = |\frac{\tan\theta}{\tan\beta}| \tag{2.80}$$

Les hypothèses sont par conséquent vérifiées. Il est dorénavant possible d'utiliser les différentes expressions du flux dans les directions $\vec{x}$ et $\vec{y}$ pour les ensembles X et Y.

$\Rightarrow$ Tenseur de perméabilité équivalent

L'égalité des relations 2.65 et 2.78 puis 2.69 et 2.79, permettent de déterminer le tenseur de perméabilité équivalent pour l'ensemble Y. En utilisant les expressions des variables N et S, en fonction de θ et β, les relations suivantes sont établies :

$$\text{Soit } \bar{\bar{K}}_{sf}^{Y} = \begin{vmatrix} K_1^{sf,Y} & 0 & 0 \\ 0 & K_2^{sf,Y} & 0 \\ 0 & 0 & K_3^{sf,Y} \end{vmatrix} \tag{2.81}$$

$$\frac{K_1^{sf,Y} K_3^{sf,Y}}{(1+\frac{1}{3}|\frac{\tan\theta}{\tan\beta}|)K_3^{sf} + \frac{4}{3}\frac{\tan^2\theta}{\tan^2\beta}K_1^{sf,Y}} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}K_1^r \tag{2.82}$$

$$\frac{K_2^{sf,Y} K_3^{sf,Y}}{K_2^{sf,Y} + K_3^{sf,Y}} = \frac{2}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta}K_2^r \tag{2.83}$$

$$\tag{2.84}$$

Pour $K_3^{sf,Y} = K_2^{sf,Y}$, les perméabilités équivalentes s'expriment par :

$$K_2^{sf,Y} = K_3^{sf,Y} = \frac{4}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta}K_2^r \tag{2.85}$$

$$K_1^{sf,Y} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}\frac{(1+\frac{1}{3}|\frac{\tan\theta}{\tan\beta}|)}{(2K_2^r - \frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta}K_1^r)}K_2^r K_1^r \tag{2.86}$$

De plus, les perméabilités fournies sont généralement sous forme scalaire. La perméabilité équivalente prend alors la forme :

$$K_2^{sf,Y} = K_3^{sf,Y} = \frac{4}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta}K^r \tag{2.87}$$

$$K_1^{sf,Y} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}\frac{(1+\frac{1}{3}|\frac{\tan\theta}{\tan\beta}|)}{(2-\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta})}K^r \tag{2.88}$$

Quelques commentaires sur les expressions des composantes du tenseur équivalent de perméabilité :

$\Rightarrow$ Ces propriétés ont été établies pour $45^\circ \geq \beta > \theta \geq 0^\circ$. Le dénominateur $(2 - \frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta})$ ne peut donc pas s'annuler. Il sera par contre nécessaire de réorienter le tenseur équivalent afin de traiter les différentes configurations d'inclinaison.

$\Rightarrow$ Le cas $\beta = \theta = 0$ n'est pas problématique car il correspond à une situation où la fracture n'est composée que d'ensembles X. La correction obtenue correspond au rapport $\frac{e}{\Delta}$.

$\Rightarrow$ Pour $\beta = \theta$, les composantes du tenseur équivalent sont toutes égales. Ceci est dû au fait que dans ce cas là $N = 1$ et par conséquent quelle que soit la direction considérée l'écoulement dans un ensemble Y, entrant par une face inférieure ressort par la face opposée supérieure. Le comportement identique de l'écoulement quelle que soit la direction considérée explique l'égalité des composantes du tenseur équivalent.

L'équivalence du flux étant établie pour l'écoulement, l'étape suivante concerne l'établissement des propriétés équivalentes du transport.

2.3.5 Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien

L'équation générale traduisant le transport d'un champ de concentration peut se mettre sous la forme :

$$\omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} = \vec{\nabla}.(\omega_r.\bar{\bar{D}}^*_r.\vec{\nabla}C_r - C_r.\vec{q}) \tag{2.89}$$

Où C_r représente la concentration, $\bar{\bar{D}}^*_r = \begin{vmatrix} D_1^{*,r} & 0 \\ 0 & D_2^{*,r} \end{vmatrix}$ est le tenseur de dispersion. Les coefficients de dispersion longitudinale et transversale $D_1^{*,r}$ et $D_2^{*,r}$ sont donnés par les relations $D_1^{*,r} = d + \alpha_1.\frac{|\vec{q}_r|}{\omega_r}$ et $D_2^{*,r} = d + \alpha_2.\frac{|\vec{q}_r|}{\omega_r}$. Les coefficients de dispersivité longitudinale et transversale sont notés respectivement α_1 et α_2. On utilisera, par ailleurs, les notations, $\bar{\bar{D}} = \omega.\bar{\bar{D}}^*$, $D_1 = \omega.D_1^*$, $D_2 = \omega.D_2^*$. L'indice "*" indique de cette maniére que les définitions classiques sont utilisées tandis que sa suppression indique la multiplication par ω.

Tenseur de dispersion équivalent

Une modélisation par l'approche Smeared Fractures débute par la génération du maillage puis par la résolution de l'écoulement dans les fractures. La vitesse de Darcy obtenue ne correspond pas à la réalité ($\vec{q}_{sf} \neq \vec{q}_r$). En effet, les propriétés équivalentes sont obtenues grâce à la conservation des flux convectifs entraînant des vitesses de Darcy

différentes.

Lors de la modélisation du transport le tenseur de dispersion $\bar{\bar{D}}_r = \begin{vmatrix} D_1^r & 0 \\ 0 & D_2^r \end{vmatrix}$ doit être corrigé. Les coefficients de dispersion longitudinale et transversale D_1^r et D_2^r sont donnés par les relations $D_1^r = \omega_r.d + \alpha_1.|\vec{q}_r|$ et $D_2^r = \omega_r.d + \alpha_2.|\vec{q}_r|$. Ces coefficients sont exprimés en fonction de la vitesse de Darcy réelle. Or, la modélisation de l'écoulement par l'approche Smeared Fractures aboutit à la vitesse $\vec{q}_{sf}$. Par conséquent les coefficients de dispersion doivent donc être exprimés en fonction de cette vitesse.
Étudions de nouveau les deux directions d'écoulement pour lesquelles les flux sont conservés.

★ direction d'écoulement $\vec{x}$

L'équivalence des flux hydriques Q^{sf} et Q^r nous permet d'établir la relation suivante :
$q_{sf}\Delta L_{sf}^{\beta} = q_r e L_r^{\beta}$. La vitesse de Darcy réelle q_r peut donc être exprimée en fonction de la vitesse de Darcy de l'approche Smeared Fractures.

$$q_r = \frac{\Delta}{e}(|\cos\beta| + |\sin\beta|)q_{sf} \tag{2.90}$$

Cette expression permet l'obtention du premier coefficient de dispersion $D_1^{r'}$.

$$D_1^{r'} = \omega_r.d + \alpha_1.|\vec{q}_r| \tag{2.91}$$
$$= \omega_r.d + \alpha_1\frac{\Delta}{e}(|\cos\beta| + |\sin\beta|)|\vec{q}_{sf}| \tag{2.92}$$

★ direction d'écoulement $\vec{y}$

En tenant le même raisonnement que précédemment il est possible d'établir :

$$q_r = q_{sf}\frac{\Delta L_{sf}^{\theta}}{eL_r^{\theta}} \tag{2.93}$$
$$q_r = q_{sf}\frac{V_{sf}}{V_r}\frac{L_r^{\beta}}{L_{sf}^{\beta}} \tag{2.94}$$
$$q_r = q_{sf}\frac{V_{sf}}{V_r.(|\cos\beta| + |\sin\beta|)} \tag{2.95}$$

Le coefficient $D_2^{r'}$ s'écrit alors :

$$D_2^{r'} = \omega_r.d + \alpha_2.|\vec{q}_r| \tag{2.96}$$
$$= \omega_r.d + \alpha_2\frac{V_{sf}}{V_r.(|\cos\beta| + |\sin\beta|)}|\vec{q}_{sf}| \tag{2.97}$$

Ainsi le tenseur $\bar{\bar{D}}_r' = \begin{vmatrix} D_1^{r'} & 0 \\ 0 & D_2^{r'} \end{vmatrix}$, obtenu à partir de $\bar{\bar{D}}_r$, est exprimé en fonction de $\vec{q}_{sf}$. Il nous est maintenant possible de proposer un tenseur équivalent pour l'approche Smeared Fractures.

La similitude des rôles entre dispersion et perméabilités (entrant tous deux dans un terme diffusif) permet d'utiliser un tenseur de dispersion modifié selon le même type de correction que celui établi pour la perméabilité.

$\Rightarrow$ Ensemble de type X

$$\bar{\bar{D}}_{sf}^X = \begin{vmatrix} D_1^{sf,X} & 0 & 0 \\ 0 & D_2^{sf,X} & 0 \\ 0 & 0 & D_3^{sf,X} \end{vmatrix} \tag{2.98}$$

$$D_1^{sf,X} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta} D_1^{r'} \tag{2.99}$$

$$D_2^{sf,X} = D_3^{sf,X} = \frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} D_2^{r'} \tag{2.100}$$

$$\tag{2.101}$$

$\Rightarrow$ Ensemble de type Y

$$\bar{\bar{D}}_{sf}^Y = \begin{vmatrix} D_1^{sf,Y} & 0 & 0 \\ 0 & D_2^{sf,Y} & 0 \\ 0 & 0 & D_3^{sf,Y} \end{vmatrix} \tag{2.102}$$

$$D_2^{sf,Y} = D_3^{sf,Y} = \frac{4}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} D_2^{r'} \tag{2.103}$$

$$D_1^{sf,Y} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta} \frac{(1+\frac{1}{3}|\frac{\tan\theta}{\tan\beta}|)}{(2D_2^{r'} - \frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta} D_1^{r'})} D_2^{r'} D_1^{r'} \tag{2.104}$$

$$\tag{2.105}$$

Les propriétés équivalentes ont été obtenues pour une orientation particulière des strates. Cette orientation représente une configuration parmi six. Un critère devra donc nous permettre d'orienter correctement nos tenseurs de perméabilité et dispersion équivalents.

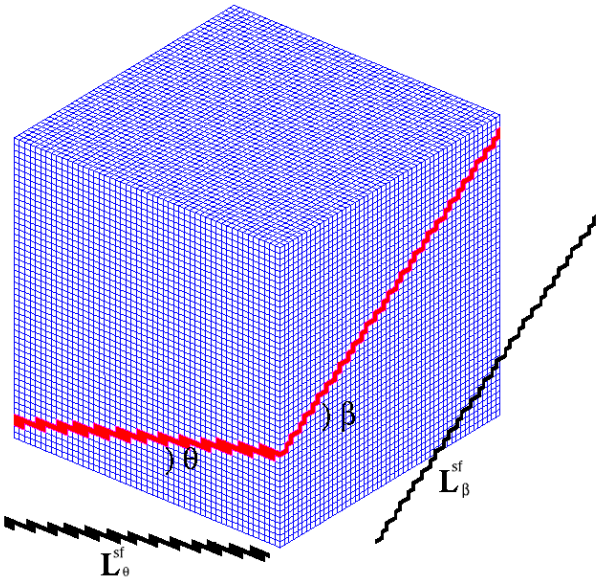


Fig. 2.18 – Fracture unique : longueurs L_θ^{sf} et L_β^{sf}

Correction de la porosité : rapport des différents volumes

La correction appliquée à la porosité équivalente est obtenue de la même manière que pour le 2D.
A partir de l'équation de transport, on va s'intéresser à la conservation de la masse. L'intégration de l'équation de transport 2.89, sur le volume de la fracture, conduit à l'équation suivante :

$$\iiint_{Vr} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} dv = Q_d + Q_m \tag{2.106}$$

La détermination des coefficients équivalents est établie à partir de la conservation des flux massiques dispersif Q_d et convectif Q_m. Dans le cadre de la résolution de l'équation de transport avec le modèle Smeared Fractures, le second membre de l'équation 2.106 est donc correctement évalué. Il ne nous reste qu'à nous intéresser au premier membre de cette équation. Soit ω_{sf} et ω_r respectivement la porosité équivalente et réelle de la fracture. Afin d'établir l'égalité 2.107, une relation entre ω_{sf} et ω_r reste à déterminer.

$$\iiint_{V_{sf}} \omega_{sf} \frac{\partial C_r}{\partial t} dv = \iiint_{V_r} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} dv \tag{2.107}$$

L'expression de la porosité équivalente est immédiatement obtenue :

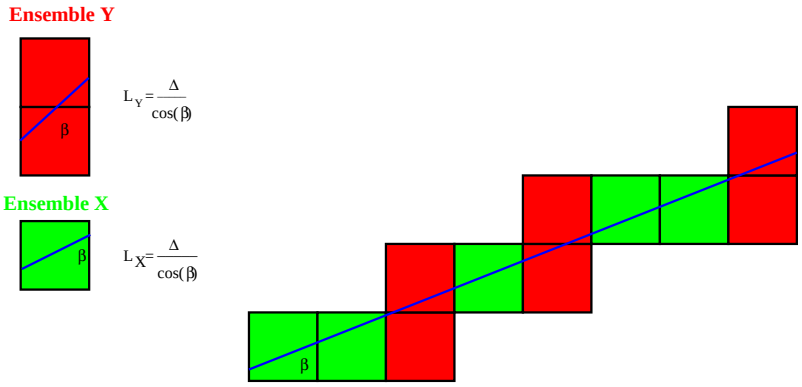


Fig. 2.19 – Fracture unique : détermination de la longueur L_β^{sf}

$$\omega_{sf} = \frac{V_r}{V_{sf}}\omega_r \tag{2.108}$$

Bien que pouvant déterminer ces volumes, il est possible d'obtenir une bonne approximation de cette porosité en fonction des angles d'inclinaison de la fracture. L'expression de la longueur, L_β^{sf} (fig. 2.18) d'un des côtés de la fracture modélisée par une approche Smeared Fractures, peut être approchée en fonction de la longueur réelle, L_β^r. Les expressions suivantes peuvent être établies à partir de la figure 2.19.

$$L_\beta^r = \frac{\Delta}{\cos\beta}(N_X + N_Y) \text{et} L_\beta^{sf} = \Delta(N_X + 2N_Y) \tag{2.109}$$

$$\Rightarrow \quad L_\beta^{sf} = L_\beta^r.|\cos\beta| + \Delta N_Y \tag{2.110}$$

Il ne nous reste plus qu'à déterminer le nombre d'ensembles Y, N_Y. N_Y peut être approché par $N_Y = \frac{L_\beta^r.|\sin\beta|}{\Delta}$. De cette manière l'expression 2.111 est facilement obtenue.

$$L_\beta^{sf} = (|\cos\beta| + |\sin\beta|)L_\beta^r \tag{2.111}$$

Cette longueur reste sensiblement identique lorsque l'on se déplace le long de L_θ^{sf}. Ainsi le volume V_{sf} peut être évalué par :

$$V_{sf} = \Delta.L_\beta^{sf}.(L_\theta^r.|\cos\theta|) \tag{2.112}$$

$$V_{sf} = \frac{\Delta}{e}|\cos\theta|(|\cos\beta| + |\sin\beta|)V_r \tag{2.113}$$

La porosité est par conséquent proche de :

$$\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta} \frac{1}{|\cos\theta|(|\cos\beta| + |\sin\beta|)} \omega_r \tag{2.114}$$

Malgré cette bonne évaluation, la porosité implémentée est celle établie à partir des rapports de volumes.

2.3.6 Orientation des tenseurs équivalents

Afin de bien orienter les tenseurs équivalents, il est essentiel de comprendre l'influence de l'inclinaison de la fracture sur l'orientation des ensembles X et Y.
L'orientation des tenseurs est associée à l'orientation des ensembles Y. Les tenseurs, définis actuellement, correspondent à une orientation telle que les surfaces formées par les $2N$ mailles d'un ensemble Y, appartiennent au plan ($\vec{x}$, $\vec{z}$) et les extrémités aux plans ($\vec{y}$, $\vec{z}$).
Afin de différencier les 5 autres cas, il est nécessaire de s'intéresser à l'équation de la fracture et plus exactement aux composantes de la normale.
Le tableau 2.2 présente ces différentes configurations et l'orientation des tenseurs associée ($\bar{\bar{P}}^{sf}$ représentant soit $\bar{\bar{K}}^{sf}$ soit $\bar{\bar{D}}^{sf}$).

En considérant uniquement les composantes de la normale, il est possible de distinguer trois groupes de configurations. Suivant que la composante maximale, notée n_{max}, du vecteur normal est n_x, n_y ou n_z, un indice temporaire est affecté, correspondant aux configurations 1, 3 ou 5. On note n_{min} et n_{int} les deux autres composantes, telles que $n_{min} < n_{int} < n_{max}$. Il est alors possible d'exprimer β et θ en fonction des composantes de la normale à la fracture.

$$\beta = \arctan \frac{n_{int}}{n_{max}} \tag{2.115}$$

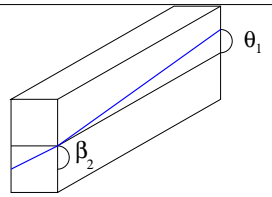
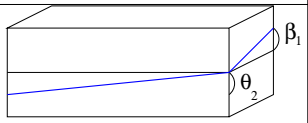
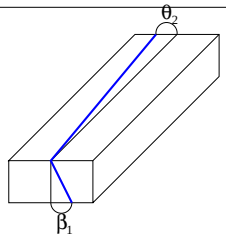
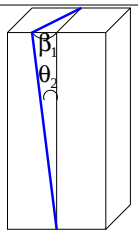
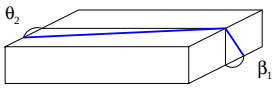
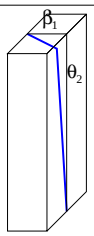
$$\theta = \arctan \frac{n_{min}}{n_{max}} \tag{2.116}$$

Afin de distinguer de manière définitive les six configurations, il suffit de d'identifier quel axe porte la composante minimale de la normale et, suivant le cas, de majorer ou non l'indice temporaire d'une unité. L'indice obtenu fournit la configuration étudiée ainsi que l'orientation des tenseurs (tableau 2.2).

2.3.7 Critères de monotonie

Comme pour le 2D, afin d'assurer la monotonie du schéma deux critères doivent être respectés pour la convection et la diffusion. Le premier critère à considérer pour la convection porte sur le nombre de Péclet P_e et doit être tel que ce nombre soit inférieur à 2 :

$$P_e = \frac{q\Delta}{D} < 2 \tag{2.117}$$

Indice	Configuration	tenseur résultant	expression des angles d'inclinaison
1		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_1^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_2^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_3^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_z$ et $n_{min} = n_y$ $\beta = \arctan \frac{n_x}{n_z}$ $\theta = \arctan \frac{n_y}{n_z}$
2		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_2^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_1^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_3^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_z$ et $n_{min} = n_x$ $\beta = \arctan \frac{n_y}{n_z}$ $\theta = \arctan \frac{n_x}{n_z}$
3		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_1^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_3^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_2^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_y$ et $n_{min} = n_z$ $\beta = \arctan \frac{n_x}{n_y}$ $\theta = \arctan \frac{n_z}{n_y}$
4		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_2^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_3^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_1^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_y$ et $n_{min} = n_x$ $\beta = \arctan \frac{n_z}{n_y}$ $\theta = \arctan \frac{n_x}{n_y}$
5		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_3^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_1^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_2^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_x$ et $n_{min} = n_z$ $\beta = \arctan \frac{n_y}{n_x}$ $\theta = \arctan \frac{n_z}{n_x}$
6		$\bar{\bar{P}}^{sf} = \begin{vmatrix} P_3^{sf} & 0 & 0 \\ 0 & P_2^{sf} & 0 \\ 0 & 0 & P_1^{sf} \end{vmatrix}$	$n_{max} = n_x$ et $n_{min} = n_y$ $\beta = \arctan \frac{n_z}{n_x}$ $\theta = \arctan \frac{n_y}{n_x}$

Tab. 2.2 – Indices de configuration d'un ensemble Y et tenseurs associés

Un second critère associé au phénomène de diffusion porte sur le nombre de Fourier F_o et nécessite de se placer dans des conditions telles que le nombre de Fourier soit supérieur à $\frac{1}{6}$, [H.Hoteit et al. 2002] ou [H.Hoteit 2002].

$$F_o = \frac{d\Delta t}{\Delta^2} > \frac{1}{6} \tag{2.118}$$

Ce second critère impose de raffiner l'interface fracture-matrice de manière importante lorsque la diffusion matricielle, est faible.

2.3.8 Bilan de l'approche 3D

Les tenseurs équivalents ont été établis pour une fracture unique. Le tableau 2.3 récapitule leurs expressions ainsi que les contraintes dont elles découlent. Ces grandeurs ont été établies à partir du schéma en éléments finis mixtes hybrides de manière à obtenir les flux exacts, pour une fracture unique, suivant deux directions principales. Ceci constitue un des apport important de notre travail ; les autres approches ne vérifient pas cette propriété. Un second apport important est l'extension de l'approche à la résolution du transport.

Ces propriétés sont à affecter à chaque maille de la fracture. Avant cela, il est, cependant, nécessaire de s'intéresser à quelques détails :

$\Rightarrow$ Propriétés à affecter aux intersections.
La prise en compte de plusieurs fractures nécessite de s'intéresser aux éventuelles intersections. Comme pour le 2D, notre choix a été d'affecter au niveau des intersections les propriétés de la fracture la plus transmissive.

$\Rightarrow$ Propriétés à affecter aux blocs matriciels.
La résolution de l'écoulement est uniquement effectuée dans le maillage des fractures. L'écoulement dans les blocs matriciels est toujours considéré comme négligeable. Pour le transport, par contre, de la masse peut diffuser dans ces blocs. Les propriétés affectées à ces blocs sont les propriétés réelles du bloc. L'influence de ce choix sur les résultats est étudié dans le chapitre 3.4. La variation de la géométrie de l'interface fracture-matrice peut en effet entraîner une erreur de modélisation de la diffusion matricielle (la surface de l'interface étant sur-évaluée).

$\Rightarrow$ Temps de sortie en convection pure.
Les propriétés équivalentes ont été établies de manière à conserver les flux, d'une part, et le bilan de masse, d'autre part. Le temps de sortie en convection pure est, par conséquent, correctement estimé. L'étude du chapitre suivant démontrera cette affirmation.

Par la suite, chapitre 3.4, l'approche est validée sur différentes géométries et différentes conditions d'écoulements.

Ensemble	Propriété	Contrainte	Expression
X	Perméabilité	Conservation du flux	$K_2^{sf,X} = K_3^{sf,X} = \frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} K_2^r$ $K_1^{sf,X} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta} K_1^r$
Y	Perméabilité	Conservation du flux	$K_2^{sf,Y} = K_3^{sf,Y} = \frac{4}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} K^r$ $K_1^{sf,Y} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}\frac{(1+\frac{1}{3}\lvert\frac{\tan\theta}{\tan\beta}\rvert)}{(2-\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta})} K^r$
X	Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_2^{sf,X} = D_3^{sf,X} = \frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} D_2^{r'}$ $D_1^{sf,X} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta} D_1^{r'}$
Y	Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_2^{sf,Y} = D_3^{sf,Y} = \frac{4}{3}\frac{e\cos\beta}{\Delta\cos\theta} D_2^{r'}$ $D_1^{sf,Y} = \frac{e\cos\theta}{\Delta\cos\beta}\frac{(1+\frac{1}{3}\lvert\frac{\tan\theta}{\tan\beta}\rvert)}{(2D_2^{r'}-\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\beta}D_1^{r'})} D_2^{r'} D_1^{r'}$
X et Y	Porosité	Bilan de masse	$\omega_{sf} = \frac{V^r}{V^{sf}}.\omega_r$

Tab. 2.3 – Expression des propriétés équivalentes pour le 3D

2.3.9 Cohérence du temps de sortie en convection pure

L'équivalence du flux convectif a été établie dans deux directions d'écoulement. On va donc estimer le temps de sortie du maximum de concentration dans ces deux directions afin de déterminer le rapport $\frac{\omega^{sf}}{\omega^r}$.
On notera L^β et L^θ la longueur du côté de la fracture appartenant respectivement au plan $(\vec{y}\ ,\ \vec{z})$ et $(\vec{x}\ ,\ \vec{z})$.
Pour une direction d'écoulement suivant $\vec{x}$:

$$\tau_{sf} = \frac{\omega_{sf} L^\theta_{sf}}{q_{sf}} \tag{2.119}$$

$$\tau_r = \frac{\omega_r L^\theta_r}{q_r} \tag{2.120}$$

Étant donné que $Q^{sf}_c = Q^r_c$, on a aussi :

$$q_{sf} \Delta L^\beta_{sf} = q_r e L^\beta_r$$

Ce qui permet d'établir que

$$\frac{\omega_{sf}}{\omega_r} = \frac{V_r}{V_{sf}} \tag{2.121}$$

Le calcul du temps pour une direction d'écoulement $\vec{y}$ fournit le même rapport $\frac{\omega^{sf}}{\omega^r}$ qui correspond à celui précédemment obtenu en raisonnant sur l'équation de transport.
Ainsi avec ces coefficients équivalents l'approche Smeared Fractures conserve dans deux directions les flux hydrique et massique ainsi que le temps de sortie en convection pure.

2.3.10 Implémentation, travail informatique dans CAST3M

La stratégie d'implémentation a bénéficié de l'expérience du 2D afin d'optimiser et faciliter une modélisation par l'approche Smeared Fractures. Ainsi, pour une modélisation 3D, le programme principal fait appel à cinq procédures.

$\Rightarrow$ Génération du maillage.
La génération du maillage s'appuie sur deux procédures :

- "MAILFR" consiste à générer l'ensemble des fractures du milieu fracturé. Comme pour le 2D, elle utilise comme entrée les tables "Tabfrac" et "Esmmail". Dans la première, toutes les informations du milieu modélisé ont été enregistrées : inclinaison, centre, étendue et ouverture des fractures ainsi que les propriétés

physiques du milieu, perméabilité, porosité, coefficients de diffusion, coefficients de dispersivité de la fracture et de la matrice. La seconde est liée aux caractéristiques du maillage en fournissant la dimension du maillage ainsi que le pas de discrétisation choisi. Un paramètre "Penetra" a été rajouté par rapport au 2D dans un souci d'optimisation de l'approche. Ce paramètre est la profondeur de pénétration du soluté estimée dans la matrice. Les mailles de la matrice entourant une fracture et comprises entre plus ou moins cette valeur sont conservées.
La table résultante de cette procédure, "Tabmail", regroupe le maillage des fractures divisées en ensemble X et en ensemble Y, le maillage de la matrice fonction du paramètre "Penetra". Enfin les volumes réel et modélisé de chaque fracture sont aussi enregistrés avec les angles d'inclinaison de la fractures et la configuration d'inclinaison à laquelle ils sont associés.

- "MAILINT" s'appuie sur la table "Tabmail" obtenue avec la procédure "MAILFR" et sur la table Tabfrac. Cette procédure génère les intersections entre les fractures enregistrées dans "Tabmail". Cette procédure modifie la table "Tabmail" en supprimant les intersections dans les maillages de fractures et en complétant cette table par l'ensemble des maillages intersections (toujours en différenciant les ensembles X des ensembles Y).

Un des objectif de l'approche est de pouvoir effectuer des études de sensibilité à la géométrie du milieu. C'est la raison pour laquelle, la procédure maillage est divisée en deux entités. Grâce à cette structure, il est facile d'étudier, par exemple, la sensibilité de l'écoulement, au nombre de fractures, d'éliminer les fractures jouant un faible rôle pour l'écoulement ou le transport, rajouter des fractures...

$\Rightarrow$ Génération des champs de propriétés.
La génération des champ de propriétés s'effectue à partir de deux procédures.

- "SMEQK3D" génère le champ de propriétés équivalentes liées à l'écoulement. C'est à dire le champ de perméabilité équivalente. Toujours à partir des deux tables principales "Tabmail" et "Tabfrac", la procédure effectue le calcul et l'affectation à chaque ensemble de la perméabilité tensorielle équivalente. Ce champ de perméabilité est stocké dans la table "TabSF". Contrairement au 2D où l'écoulement était résolu directement dans cette procédure, pour le 3D, afin de fournir à l'utilisateur une meilleure vue d'ensemble, l'écoulement est résolu après "SMEQK3D" dans le programme principal.

- "SMEQD3D" génère le champ de propriétés équivalentes liées au transport. Elle possède les même tables d'entrée que "SMEQK3D" avec comme entrée supplémentaire le champ de flux convectif calculé dans le programme principal. Cette procédure ajoute à la table "TabSF" les champs de porosité et de dispersion équivalents.

$\Rightarrow$ Résolution du transport.
La résolution du transport est obtenue par la procédure "TRANSGEN" précédemment présentée.

Chapitre 3

Qualification et Validation de l'approche Smeared Fractures

Après avoir établi les propriétés équivalentes de manière à avoir un bon contrôle de l'erreur commise sur les flux (hydriques et massiques), l'approche va maintenant être validée. On s'intéressera en particulier :

⇒ à la cohérence des résultats lorsque plusieurs fractures entrent en jeu.
Les propriétés équivalentes ont, en effet, été établies pour une fracture unique. L'influence du passage à un réseau de fractures sur la qualité des résultats est à établir.

⇒ à l'influence de la matrice pour différents écoulements.
La précision des résultats permettra de valider le choix de ne pas corriger les propriétés de la matrice lors d'une modélisation avec l'approche Smeared Fractures.

De cette manière, les erreurs commises et le domaine d'application de l'approche seront identifiés.

3.1 Stratégie pour la qualification et la validation de l'approche

Les outils de résolution des équations de Darcy et de transport du code CAST3M, s'appuyant sur des schémas en EFMH, [Dabbene et al. 1998], ont été validés sur différents cas tests, [Bernard-Michel et al. 2004]. Leur utilisation pour la modélisation de transferts en milieux fracturés est donc parfaitement justifiée. Partant de cette constatation, l'approche Smeared Fractures est validée par comparaison des résultats obtenus avec des résultats dits de 'références'. Ces résultats de références sont obtenus :

★ en modélisant les transferts avec les mêmes outils de résolution utilisés par l'approche Smeared Fractures

★ en utilisant un maillage explicite du bloc fracturé : la géométrie du milieu fracturé est par conséquent parfaitement respectée, en particulier la surface de contact fracture-matrice. La discrétisation est, de plus, suffisamment fine pour modéliser correctement l'ensemble des phénomènes physiques rencontrés.

★ les propriétés physiques considérées sont les propriétés réelles du bloc modélisé.

Le code CAST3M ne possédant pas de mailleur dédié aux géométries des milieux fracturés, une procédure a été implémentée afin de générer facilement un maillage explicite d'un bloc fracturé 2D. Le chapitre suivant présente les principes de création de ce maillage.

3.2 Génération du maillage dédié 2D

La génération d'un maillage dédié à un milieu fracturé est un problème complexe et souvent coûteux. Jusqu'à présent, chaque géométrie 2D était traitée de manière indépendante. Étant donné les différentes géométries abordées pour la validation de l'approche Smeared Fractures, les bases d'une procédure de génération de maillage 2D ont été posées. S'inspirant du travail de [Dabbene et Dada 1995], la génération du maillage se décompose en deux phases :

1. création des mailles intersections
2. création des fractures et des zones matricielles

1. Création des mailles intersections

Une fracture i est caractérisée par son centre C_i (X_i^c, Y_i^c), son inclinaison θ_i, son ouverture e_i et sa longueur L_i. Avant toute chose, il est important de déterminer l'intersection, $P_0(X_0, Y_0)$, entre deux fractures.
Soit $\vec{U} = \begin{pmatrix} u^1 = cos\theta_i \\ u^2 = sin\theta_i \end{pmatrix}$ et $\vec{V} = \begin{pmatrix} v^1 = cos\theta_j \\ v^2 = sin\theta_j \end{pmatrix}$ les vecteurs directeurs des deux fractures. Le point d'intersection de ces deux fractures a pour expression :
$P_0 = \begin{pmatrix} X_0 = X_i^c + b_1.u^1 \\ Y_0 = Y_i^c + b_1.u^2 \end{pmatrix}$
avec $b_1 = \frac{v^1(Y_i^c - Y_j^c) - v^2(X_i^c - X_j^c)}{a}$ et $a = u^1v^2 - u^2v^1$.

Soit $P_i^+ = \begin{pmatrix} X_0 - \frac{e_i}{2}sin\theta_i \\ Y_0 + \frac{e_i}{2}cos\theta_i \end{pmatrix}$ et $P_i^- = \begin{pmatrix} X_0 + \frac{e_i}{2}sin\theta_i \\ Y_0 - \frac{e_i}{2}cos\theta_i \end{pmatrix}$

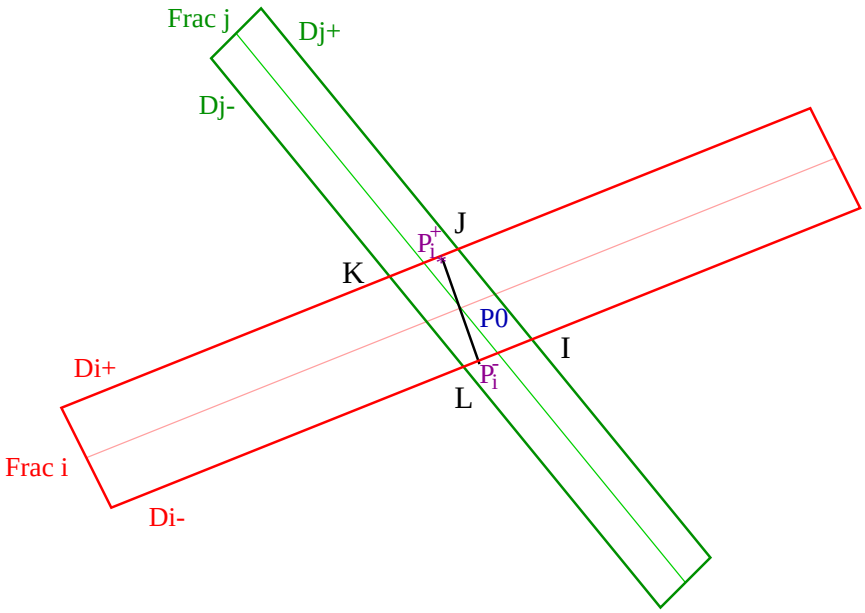


Fig. 3.1 – Points utiles à la création des intersections

les projections orthogonales de P_0 sur les bords de la fracture i (fig. 3.1).

Connaissant ces points, la détermination des points formant la maille intersection (I, J, K, L) est alors possible. Les points I, J, K, L, correspondent en effet aux intersections des droites D_i^+, D_i^-, parallèles à la fracture i, passant par les points P_i^+ et P_i^- avec les droites D_j^+, D_j^-, parallèles à la fracture j, passant par les points P_j^+ et P_j^-. Les composantes de ces points s'expriment comme suit :

$$I = D_j^+ \cap D_i^- = \left(\begin{array}{l} X_I = X_{P_i^-} + \delta.u^1 \\ Y_I = Y_{P_i^-} + \delta.u^2 \\ \delta = \frac{v^1(Y_{P_i^-} - Y_{P_j^+}) - v^2(X_{P_i^-} - X_{P_j^+})}{a} \end{array} \right)$$

$$J = D_j^+ \cap D_i^+ = \left(\begin{array}{l} X_J = X_{P_i^+} + \delta.u^1 \\ Y_J = Y_{P_i^+} + \delta.u^2 \\ \delta = \frac{v^1(Y_{P_i^+} - Y_{P_j^+}) - v^2(X_{P_i^+} - X_{P_j^+})}{a} \end{array} \right)$$

$$K = D_j^- \cap D_i^+ = \left(\begin{array}{l} X_K = X_{P_i^+} + \delta.u^1 \\ Y_K = Y_{P_i^+} + \delta.u^2 \\ \delta = \frac{v^1(Y_{P_i^+} - Y_{P_j^-}) - v^2(X_{P_i^+} - X_{P_j^-})}{a} \end{array} \right)$$

$$L = D_j^- \cap D_i^- = \left(\begin{array}{l} X_L = X_{P_i^-} + \delta.u^1 \\ Y_L = Y_{P_i^-} + \delta.u^2 \\ \delta = \frac{v^1(Y_{P_i^-} - Y_{P_j^-}) - v^2(X_{P_i^-} - X_{P_j^-})}{a} \end{array} \right)$$

La maille formée par les points I, J, K, L correspond à l'intersection des deux fractures. La géométrie de cette maille dépend bien des directions et des ouvertures des deux fractures i et j. Des compteurs sont nécessaires afin de mémoriser les fractures intervenant pour chaque intersection.

2. Création du maillage associé aux fractures

   Une fois l'ensemble des intersections créé, il devient possible de générer le maillage associé à chacune des fractures. Pour chaque fracture, toutes ses intersections sont identifiées. Le maillage de la fracture est obtenu en reliant ces différentes mailles. La combinaison de l'ensemble des maillages des fractures forme alors le réseau fracturé. L'ensemble des segments formant les fractures est enregistré afin de pouvoir en les reliant créer les différentes zones matricielles.

3.3 Qualification et validation : approche 2D

Afin de valider l'approche Smeared Fracture, différents systèmes allant du plus simple (fracture unique) au plus complexe (réseau de onze fractures) sont considérés. Différents aspects vont être testés comme l'influence de l'inclinaison de la fracture, de la diffusion matricielle ainsi que l'influence de la discrétisation. Différents régimes sont simulés pour différentes valeurs du coefficient de diffusion.

3.3.1 Influence de l'inclinaison : fracture unique 2D

- Objectif : vérification de la validité des propriétés équivalentes quelle que soit l'inclinaison de la fracture.
- Géométrie : une fracture avec sa matrice, se référer au tableau 3.1 pour les caractéristiques de la fracture.
- Condition d'écoulement : différence de charge de $1m$ imposée entre l'entrée et la sortie de la fracture.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à une distance de 14.3 mètres de l'entrée de la fracture, concentration nulle à l'entrée de la fracture, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et à la sortie de la fracture.

Une première validation consiste à vérifier que la variation de l'inclinaison d'une fracture unique n'influe pas sur la précision des résultats. L'écoulement et le transport dans

Fracture	angle	longueur	centre	ouverture	perméabilité	porosité
ref.	30	57.8	(25. 25.)	0.4	1.10^{-7}	1
sf.	0	57.8	(25. 25.)	0.4	$7.96.10^{-8}$	0.79
sf.	30	58.089	(25. 25.)	0.4	$8.22.10^{-8}$	0.59
sf.	45	57.8	(25. 25.)	0.4	$7.43.10^{-8}$	0.56
sf.	60	58.089	(25. 25.)	0.4	$8.22.10^{-8}$	0.59

Tab. 3.1 – Caractéristiques de la fracture

un bloc traversé par une fracture unique sont donc modélisés pour différentes inclinaisons de la fracture. Le tableau 3.1 présente les propriétés de la fracture modélisée ainsi que les valeurs des propriétés obtenues pour le modèle smeared fractures à partir de l'équation de la perméabilité équivalente 2.11. Il est à noter que, pour cette étude de sensibilité, la fracture n'a rien de réaliste, étant donné l'importance de son ouverture (l'ouverture des fractures modélisées se situe généralement autour de 10^{-4} m pour une porosité de 1). Néanmoins, cette surestimation de l'ouverture de la fracture n'a pas de conséquences sur la validation des résultats. La modélisation tiendra compte de la convection, dispersion dans la fracture, ainsi que de la diffusion dans la matrice (coefficient de diffusion matricielle $D_m = 10^{-13}\ m^2.s^{-1}$).

La figure 3.2 présente les courbes de flux massiques obtenues à la sortie de la fracture pour les différents angles (0°, 30°, 45° et 60°). Les pas de discrétisation spatiale et temporaire sont similaires dans les deux modèles. La courbe bleue correspond au résultat de référence obtenu avec le maillage dédié. Quel que soit l'angle de la fracture modélisée, les courbes de flux massiques présentent une forme symétrique autour du temps du maximum. Quelle que soit l'inclinaison de la fracture, les courbes ne varient que de quelques pour cent par rapport au calcul de référence (figure 3.2). Les temps de sortie du maximum ainsi que ses valeurs sont similaires quels que soient le modèle et l'inclinaison. L'approche Smeared Fractures fournit par conséquent des résultats tout à fait acceptables (erreur maximale de l'ordre de quelques pour cent sur le maximum du pic). La faible influence de l'inclinaison de la fracture sur la précision des résultats est due à la prise en compte du nombre de mailles X et Y par les propriétés équivalentes. Ces nombres de mailles étant directement reliés à l'inclinaison de la fracture, l'estimation des flux massiques reste exacte à quelques pour cent quelle que soit l'inclinaison de la fracture. La porosité équivalente, quant à elle, prend en compte les variations de dimension de la fracture assurant ainsi la bonne estimation des temps de sortie du pic.

3.3.2 Transport : influence des phénomènes modélisés

Après avoir testé l'influence de la géométrie des fractures, il est maintenant nécessaire d'évaluer la sensibilité des résultats à la discrétisation spatiale, pour différents phénomènes physiques dominants. Dans un premier temps, les cas où seule la fracture ou le réseau de fractures est actif en écoulement et transport sont traités. La matrice n'est pas prise en

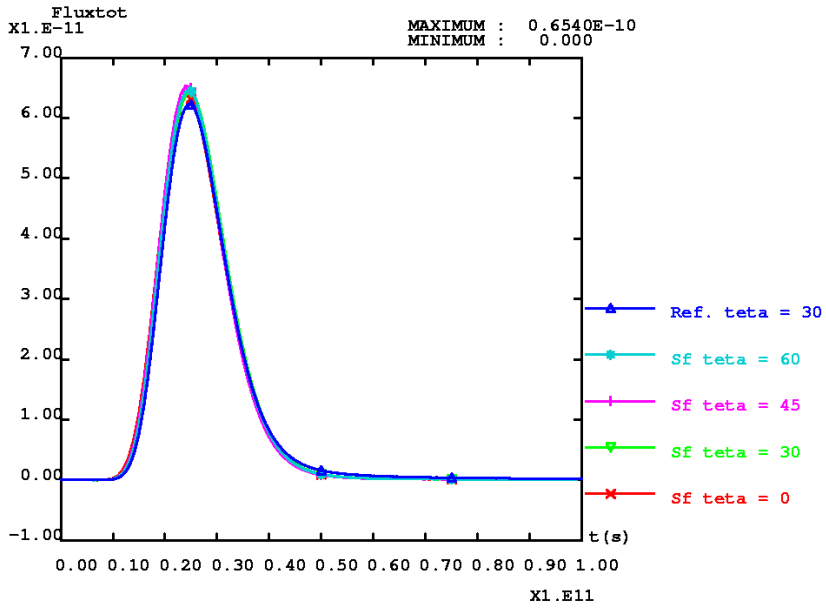


Fig. 3.2 – Influence de l'inclinaison : flux massique total sortant de la fracture

compte. Le passage à la modélisation de la diffusion matricielle est abordé dans un second temps après qu'une étude de l'influence de la géométrie de l'interface fracture-matrice (ligne brisée par rapport à ligne droite) ait été faite. Lors de la prise en compte des zones matricielles, diverses études de sensibilité ont été effectuées concernant :

- ⋆ les régimes d'écoulements : trois régimes d'écoulement avec prise en compte de la diffusion matricielle
- ⋆ l'importance de la diffusion matricielle : différents coefficients de diffusion matricielle D_m

Une vue d'ensemble des géométries, ainsi que des tests de sensibilité aux vitesses d'écoulement et au coefficient de diffusion, est présentée figure 3.3.

Transport sans diffusion matricielle

Pour une simulation en régime convectif-dispersif, le problème est résolu uniquement dans les fractures (les zones matricielles ne sont pas maillées).

$\Rightarrow$ Fracture Unique

- Objectif : étude de sensibilité à la discrétisation.
- Géométrie : une fracture sans la matrice, se référer au tableau 3.1 pour les caractéristiques géométriques de la fracture avec une inclinaison à 30°. Perméabilité de 10^{-8} $m.s^{-1}$, porosité de 1. Le coefficient de dispersion est de l'ordre du mètre.

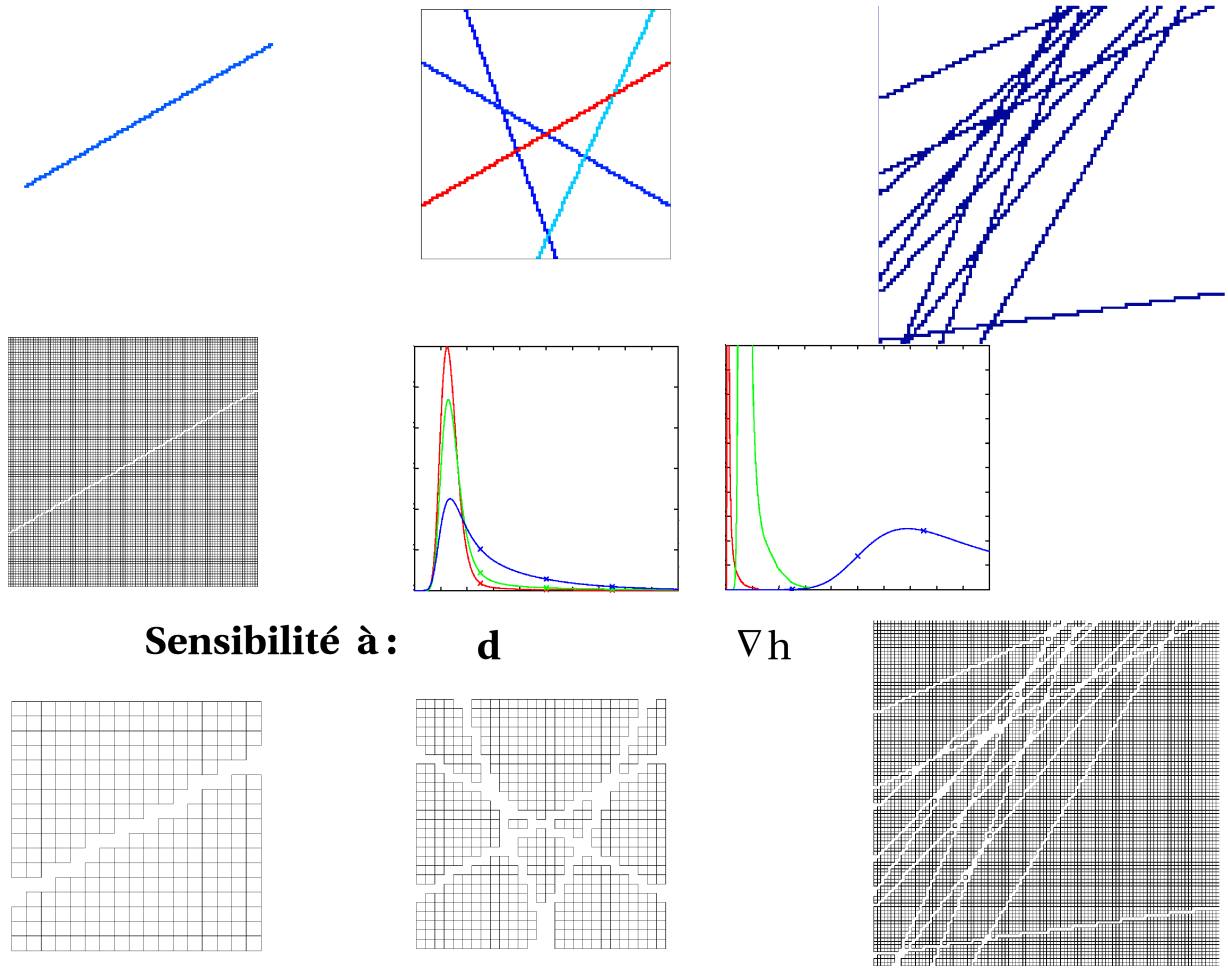
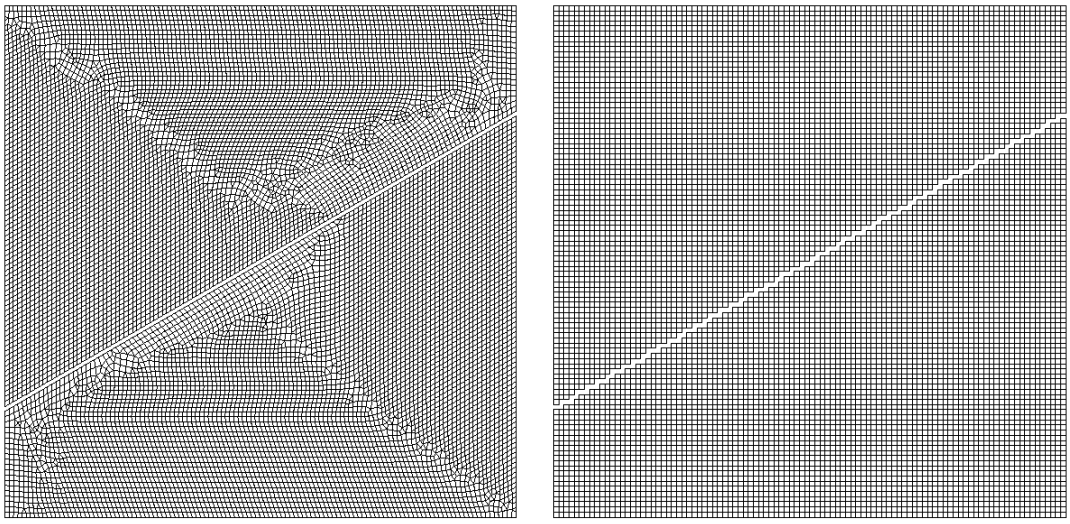


Fig. 3.3 – Ensembles des géométries et tests de sensibilité effectués



(a) Maillage de référence (200x200m) (b) Maillage S.F. (200x200m)

Fig. 3.4 – Fracture unique : maillage des deux modèles

- Conditions d'écoulement : différence de charge de $1m$ imposée entre l'entrée et la sortie de la fracture.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à une distance de 14.3 mètres de l'entrée de la fracture, concentration nulle à l'entrée de la fracture, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et à la sortie de la fracture.

Dans un premier temps, considérons une fracture unique inclinée de 30° (figure 3.4). La modélisation de l'écoulement et du transport est effectuée dans la fracture seule : les zones matricielles ne sont pas modélisées. Les courbes, figure 3.5, illustrent l'évolution du flux massique pour différentes discrétisations. De cette manière, pour des discrétisations semblables, les résultats du modèle de référence (maillage dédié à la géométrie) et du modèle Smeared Fractures pourront être comparés. De plus, étant donné que l'on cherchera à utiliser l'approche Smeared Fractures avec des discrétisations les plus grossières possibles afin de limiter les coûts de calcul, l'étude de sensibilité à la discrétisation apportera des informations sur la dispersivité de la solution obtenue liée au caractère dispersif des EFMH. La courbe bleue, figure 3.5, correspond au résultat obtenu à partir du modèle de référence (fig. 3.4). Les courbes obtenues sont toutes symétriques par rapport aux temps d'arrivée de leur maximum. Ce temps, quels que soient la discrétisation et le modèle, reste semblable à quelques pour cent près. Pour les différentes courbes obtenues avec le modèle Smeared Fractures, le maximum diminue quand la discrétisation est plus grossière. Cette chute de la valeur du maximum est accompagnée par un étalement plus important des courbes.

Il est possible d'évaluer le temps de sortie du maximum du pic du flux massique, à partir de l'expression du temps $t_w = \frac{L_{parcours}.\omega_{fr}}{q_{fr}}$, pour un régime convectif pur. En considérant les propriétés de la fracture précédente, le temps de sortie du maximum du pic est de $2.5.10^{11}$ secondes (soit 7900 ans).

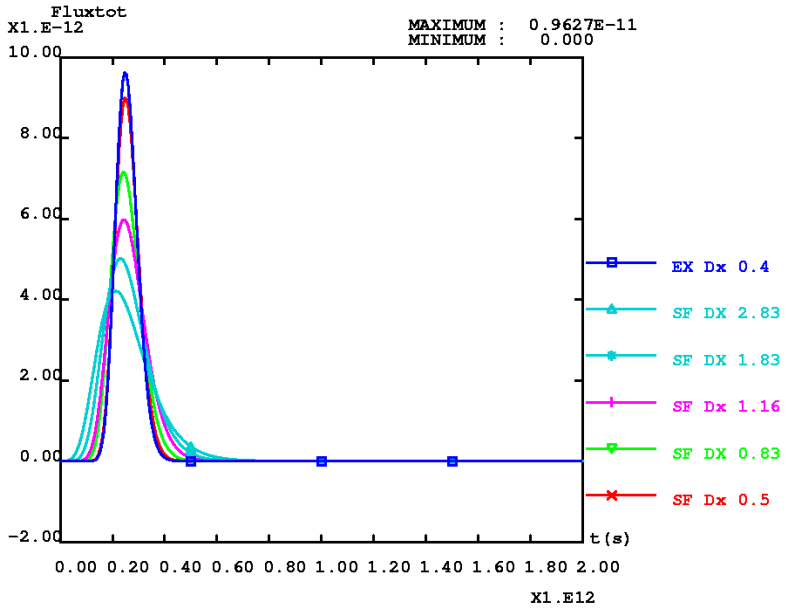


Fig. 3.5 – Fracture unique sans matrice : Flux massique total sortant

★ Ce temps correspond bien au temps du maximum du flux massique des différentes courbes mis à part les courbes turquoises pour lesquelles un temps d'arrivée précoce est obtenu (fig. 3.5). La variation de discrétisation est donc correctement prise en compte, par les paramètres gérant le temps de sortie du traceur, c'est à dire la perméabilité et la porosité.

★ La chute du maximum de pic ainsi que l'étalement des courbes sont une conséquence directe de la variation de la discrétisation et de la dispersivité des éléments finis mixtes hybrides. Les résultats obtenus sont alors plus dispersifs lorsque la discrétisation est plus grossière. La précision des résultats est donnée par le tableau 3.2. Pour une fracture unique, la sensibilité à la discrétisation influe uniquement sur l'étalement des courbes. Plus la discrétisation est grossière, plus les solutions obtenues sont dispersives, conséquence de la dispersivité des EFMH. Le raffinement de la discrétisation temporelle permet une réduction des erreurs.

★ Cependant la dispersivité des EFMH n'explique pas le décalage des temps d'arrivée des courbes turquoises. La dispersivité des EFMH n'influence, en effet, que l'étalement des courbes et pas le temps d'arrivée du pic. Ce décalage indique une légère erreur de correction des propriétés équivalentes liée à un effet de bord du maillage. En considérant la figure 3.6, on constate qu'en bordure de maillage (en rouge sur la figure 3.6) deux configurations sont possibles :
  - Une maille X forme la bordure. Dans cette configuration, les propriétés équivalentes sont correctement estimées.
  - Deux mailles Y forment la bordure. Dans ce cas, le traceur sort par la première maille Y atteinte. La seconde maille Y n'est pas traversée par le

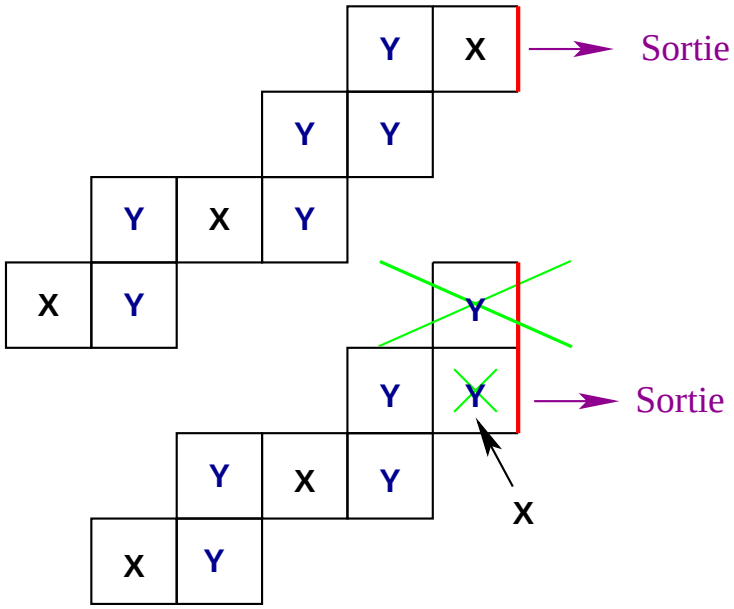


Fig. 3.6 – Maillage Smeared Fractures : effet de bord

	$\Delta X = 0.5$	$\Delta X = 0.83$	$\Delta X = 1.16$	1.83	2.83
Précision maximum de flux	4%	18%	26%	33%	39%

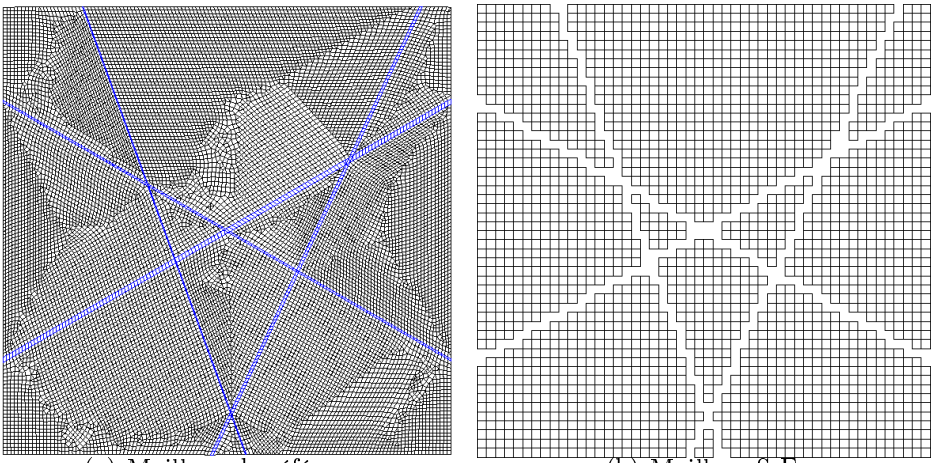
Tab. 3.2 – Fracture unique : Précision des résultats

traceur. Ainsi lorsque l'on va calculer les propriétés équivalentes, la première maille Y est comptée comme une maille Y alors qu'elle se comporte comme une maille X et la seconde est comptée en trop étant donné qu'elle n'intervient pas dans l'écoulement et le transport, (figure 3.6). Cette erreur est surtout visible lorsque la fracture possède peu de mailles ce qui entraîne une erreur importante. Lorsque la discrétisation est fine l'erreur est négligeable.

Comme attendu, les résultats sont tout à fait acceptables et en parfait accord avec le temps estimé de sortie du pic. Le modèle Smeared Fractures fournit des résultats similaires au modèle de référence lorsque les discrétisations spatiale et temporelle sont proches.

$\Rightarrow$ Réseau de quatre fractures

- Objectif : validation de la résolution de l'écoulement et du transport dans un réseau de quatre fractures.
- Géométrie : 4 fractures sans la matrice, se référer au tableau 3.3 pour les caractéristiques des fractures. Le coefficient de dispersion est de l'ordre du mètre.



(a) Maillage de référence (b) Maillage S.F.

Fig. 3.7 – Réseau de 4 fractures : maillage des deux modèles

	Fracture 1	Fracture 2	Fracture 3	Fracture 4
Ouverture	0.5	0.2	0.3	0.1
Angle	30	150	65	110
Longueur	57.8	57.8	55.3	53.3
Porosité	1.	1.	1.	1.
Perméabilité	10^{-2}	10^{-3}	5.10^{-3}	3.10^{-3}

Tab. 3.3 – Réseau de quatre fractures : propriétés

- Conditions d'écoulement : les charges imposées aux entrées et sorties des fractures sont présentées figure 3.8.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 4, figure 3.8, concentration nulle aux entrées des fractures, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et aux sorties des fractures.

Le réseau étudié est constitué de quatre fractures (fig. 3.7). Le tableau 3.3 présente les propriétés de ces fractures. Ce cas test, comme le précédent, est assez éloigné des réseaux de fractures pouvant être rencontrés en milieux naturels. Les angles de fracturation, ainsi que les ouvertures des fractures ont été pris arbitrairement et cette étude a uniquement comme objectif l'analyse du comportement de l'approche sur une géométrie plus complexe que celle d'une fracture unique.

La validation de l'approche s'effectue toujours par la comparaison des résultats du modèle de référence, maillage 3.7a, avec ceux du modèle Smeared Fractures, maillage 3.7b. Les cartes du champ de vitesse obtenues pour ces deux modèles sont présentées figures 3.9c et 3.9d. La direction de l'écoulement est orientée du coin inférieur gauche au coin supérieur droit du domaine. Les fractures 1 et 3 participent activement à cet écoulement tandis que la fracture 4 permet de créer un lien entre

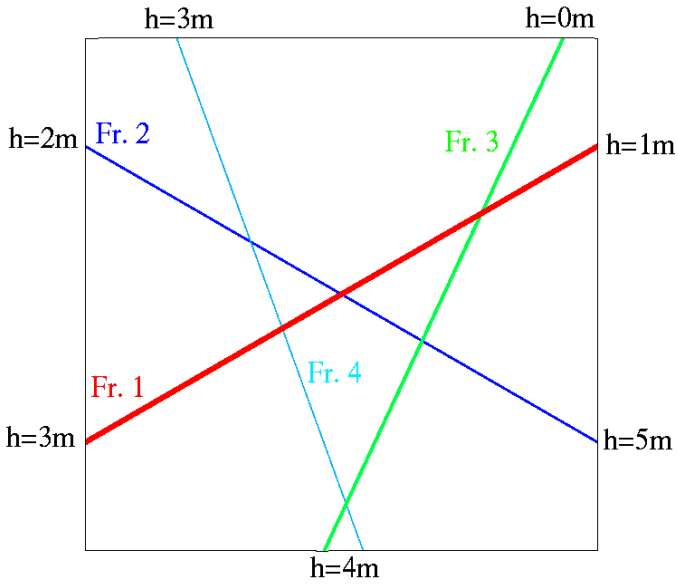
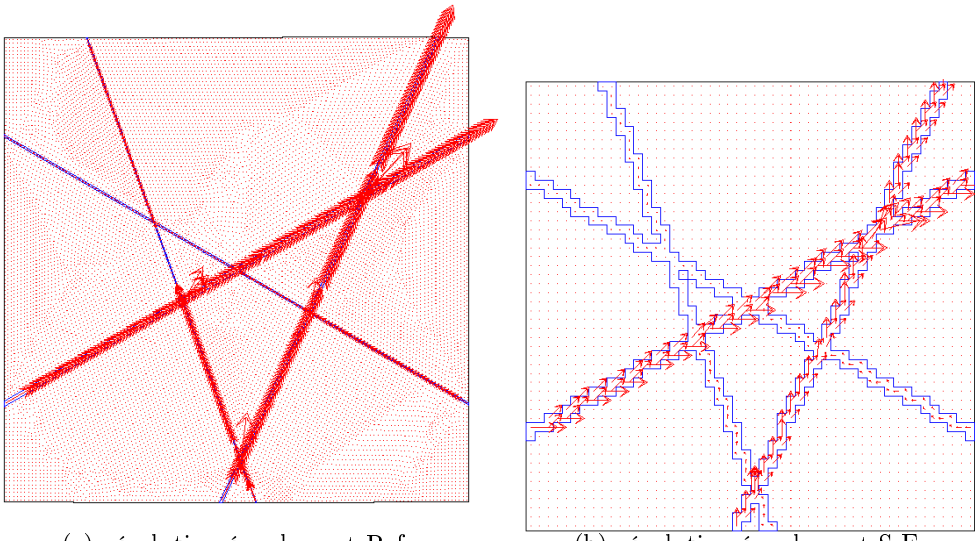


Fig. 3.8 – Réseau de 4 fractures : conditions en charge



(a) résolution écoulement Ref. (b) résolution écoulement S.F.

Fig. 3.9 – Réseau de 4 fractures : champs de vitesse obtenus

ces deux fractures.

Les courbes 3.10 représentent les flux massiques en sortie sur tout le contour, pour différentes discrétisations ; la courbe de référence étant en bleu. Un pic principal est présent dans toutes les courbes obtenues. Quels que soient la discrétisation et le modèle choisi, le temps d'arrivée de ce pic est comparable. Un faible pic secondaire est visible. L'étalement des courbes augmente toujours, tandis que la valeur du maximum du pic chute, lorsque la discrétisation devient plus grossière. Deux courbes (courbes bleu clair) présentent un comportement différent des

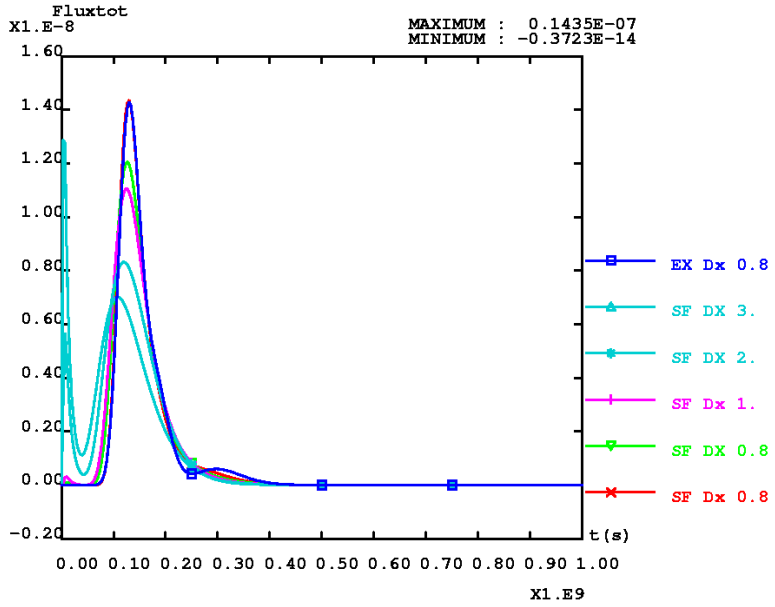
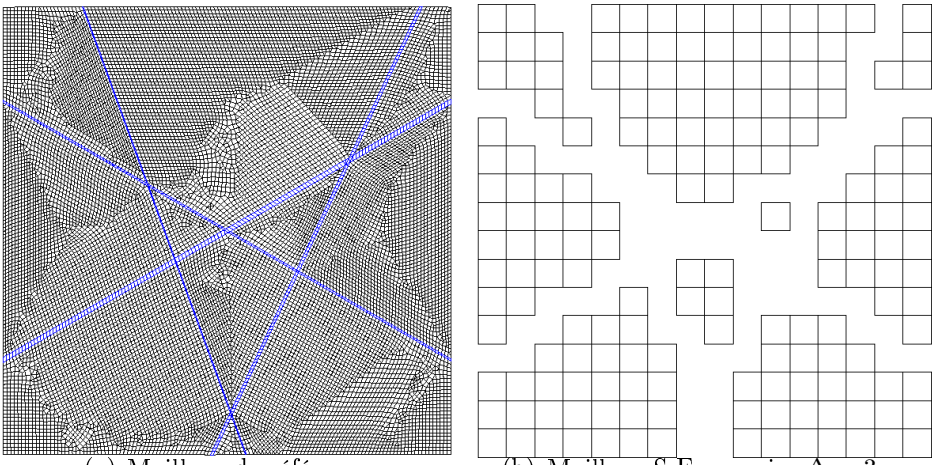


Fig. 3.10 – Réseau de 4 fractures : flux massique total en sortie

autres courbes avec un premier pic surprenant. A partir de ces observations, deux remarques peuvent être formulées :

- L'approche Smeared Fractures fournit des propriétés équivalentes quelle que soit la discrétisation. Cependant, une discrétisation trop grossière peut aboutir à des résultats faux. En effet, pour une taille de maille supérieure à la taille des zones matricielles, la géométrie des fractures obtenue n'est plus représentative (fig. 3.11) de la géométrie réelle. Le problème résolu dans ce cas est différent du problème initial. Les courbes turquoises (fig. 3.10), obtenues pour des discrétisations grossières, illustrent cette notion. Elles sont, en effet, obtenues à partir d'un maillage trop grossier, ce qui explique leur comportement singulier.

- La présence de deux pics indique plusieurs chemins de sortie possibles. Le pic secondaire, autour du temps $0.3.10^9$ s, correspondant au chemin le plus long ou le moins rapide, est lissé lors d'une modélisation Smeared Fractures. En effet, les études précédentes effectuées sur une fracture unique ont montré qu'une variation de la discrétisation influe sur l'étalement de la solution. Cet étalement est une conséquence du caractère dispersif des EFMH. Lors de simulation d'un réseau de fractures par une approche Smeared Fractures, les pics secondaires trop faibles peuvent donc être lissés par un étalement de la courbe. C'est pourquoi le second pic, présent dans la courbe de référence (courbe bleue fig. 3.10), n'est pas présent dans les autres courbes.



(a) Maillage de référence (b) Maillage S.F. grossier $\Delta = 3$ m

Fig. 3.11 – Conséquence d'une sous-discrétisation : perte de la géométrie du milieu fracturé

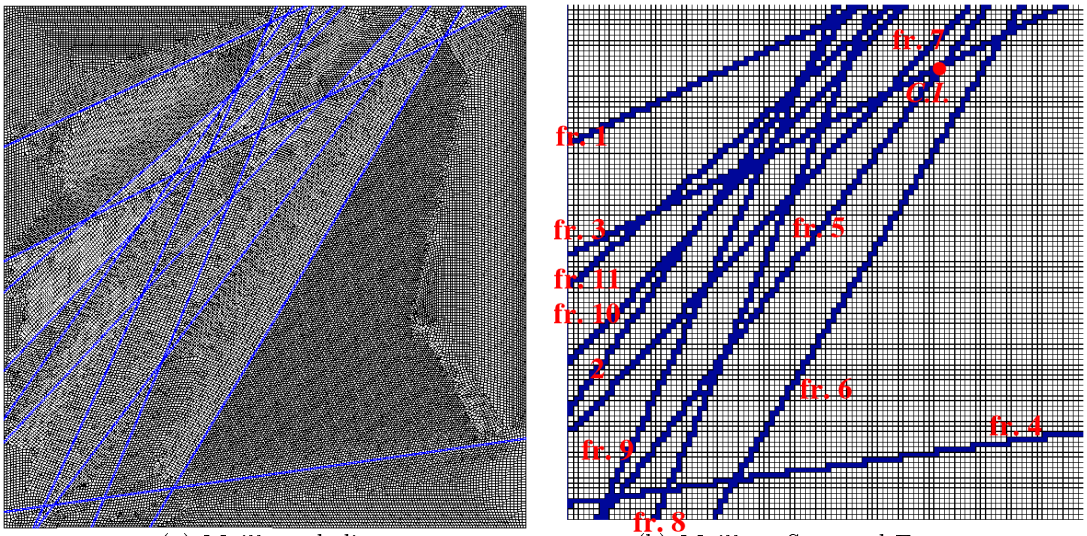
Taille de la maille (m)	$\Delta X = 0.5$	$\Delta X = 0.8$	$\Delta X = 1.$
Précision maximum de flux	0%	15%	22%

Tab. 3.4 – Réseau de 4 fractures : Précision des résultats

Classiquement, la précision des calculs dépend de la discrétisation. C'est ce qu'illustre le tableau 3.4. Pour une discrétisation similaire au modèle de référence, l'erreur est de quelques pour cent. Par contre, lorsque le raffinement est moins précis, l'erreur est plus importante mais reste raisonnable (inférieure à 20%). Il est intéressant de noter que les erreurs commises sont similaires à celles déterminées pour la fracture unique précédente, tableau 3.2. Ces erreurs s'expliquent comme précédemment par la dispersivité des EFMH. Pour une discrétisation assez fine, les résultats obtenus, avec l'approche Smeared Fractures, sont similaires à ceux obtenus avec l'approche de référence. L'approche Smeared Fractures reste cohérente avec les temps de sortie et avec la valeur du maximum de flux massique, pour peu que la discrétisation ne soit pas trop grossière. Cette étude a de plus permis de mettre en évidence un point important lorsque l'approche Smeared Fractures est utilisée : la discrétisation doit être suffisamment fine pour rendre compte de la géométrie réelle du milieu fracturé, sous peine d'obtenir des résultats incohérents.

$\Rightarrow$ Réseau de 11 fractures : détermination des critères de discrétisation

- Objectif : déterminer les critères de discrétisation.
- Géométrie : 11 fractures (Type I) sans matrice, se référer aux tableaux 3.5 et 3.6, pour les caractéristiques des fractures.
- Conditions d'écoulement : gradient de charge variable, 10^{-3}.



(a) Maillage dédié (b) Maillage Smeared Fractures

Fig. 3.12 – Maillage des 11 Fractures

- Condition de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.12b, concentration nulle sur tout le contour du bloc.

Précédemment, un critère géométrique est apparu. Ce critère impose un choix de discrétisation de façon à conserver la géométrie du milieu fracturé. Cependant, à ce critère s'ajoutent des contraintes numériques, assurant la convergence et la monotonie des solutions. Nous allons nous intéresser à un réseau de 11 fractures (fig. 3.12) et déterminer les critères nécessaires pour assurer la monotonie de la solution. Les propriétés de ces fractures sont présentées aux tableaux 3.5 et 3.6. Contrairement aux études précédentes, ce réseau de fractures est tout à fait réaliste et s'appuie sur les données fournies par [Dershowitz et al. 2003].

L'utilisation des éléments finis mixtes hybrides impose, pour des raisons de monotonie :

$$N_c = \frac{q.\Delta t}{\omega_{fr}.\Delta} < 1 \tag{3.1}$$

$$P_e^{fr} = \frac{q\Delta}{D_{ii}} < 2 \tag{3.2}$$

$$\Rightarrow F_O^{fr} = \frac{D_{ii}\Delta t}{\omega_{fr}\Delta^2} > \frac{1}{2} \tag{3.3}$$

avec N_c le nombre de courant, F_O^{fr} le nombre de Fourier, P_e^{fr} le nombre de Péclet pour la fracture et $D_{ii} = \omega.d + \alpha.q$ le coefficient de dispersion où α est la dispersivité et d le coefficient de diffusion de pore.

Fracture	angle	longueur	centre	ouverture (réelle)	ouverture (type I)	ouverture (type II)
1	25.	127.74	57.88 173.	$2.917.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
11	41	167.12	63. 145.	$2.010.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
3	27.	215.22	96. 151.	$1.437.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
2	55.	193.2	55. 121.	$7.941.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
10	47.	191.1	65. 130.	$5.404.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
9	65.	220.68	58. 100.	$1.469.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
7	47.	228.62	78. 116.	$1.740.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
8	67.	217.24	76. 100.	$1.129.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
5	53.	250.44	88. 100.	$6.807.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
6	59.	233.32	116. 100.	$1.874.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
4	8.	201.96	100. 20.	$1.342.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}

Tab. 3.5 – Caractéristiques géométriques des fractures

Fracture	transmissivité	porosité (type I)	porosité (type II)
1	$4.02.10^{-7}$	0.059	0.21
11	$1.91.10^{-7}$	0.056	0.21
3	$9.76.10^{-8}$	0.053	0.21
2	$2.98.10^{-8}$	0.051	0.21
10	$1.38.10^{-8}$	0.05	0.21
9	$1.02.10^{-7}$	0.054	0.21
7	$1.43.10^{-7}$	0.055	0.21
8	$6.02.10^{-8}$	0.052	0.21
5	$2.19.10^{-8}$	0.051	0.21
6	$1.66.10^{-7}$	0.055	0.21
4	$8.51.10^{-8}$	0.053	0.21

Tab. 3.6 – Caractéristiques physiques des fractures

En des termes plus physiques, $N_c < 1$ signifie que Δt doit être inférieur ou égal au temps mis pour parcourir une maille à la vitesse de l'écoulement $\frac{\vec{q}}{\omega_{fr}}$. Généralement, N_c est pris égal à 1 (critère de CFL). Le second critère, $F_O^{fr} > \frac{1}{2}$ signifie qu'il suffit que le soluté se propage, sur plus de la moitié de la longueur de la maille, pendant un temps Δt, pour que la monotonie soit respectée.

Dans la fracture, l'écoulement convectif domine par rapport aux phénomènes diffusifs qui peuvent être négligés. D_{ii} peut donc s'écrire $D_{ii} \simeq \alpha_L.q$. La combinaison des deux critères précédents, nous conduit donc à l'inégalité suivante :

$$\text{Critère I} : P_e^{fr} = \frac{\Delta}{\alpha} < 2 \tag{3.4}$$

Ainsi, il suffit de choisir Δ tel que $\frac{\Delta}{\alpha} < 2$ puis de respecter le critère de CFL afin d'obtenir des résultats monotones.

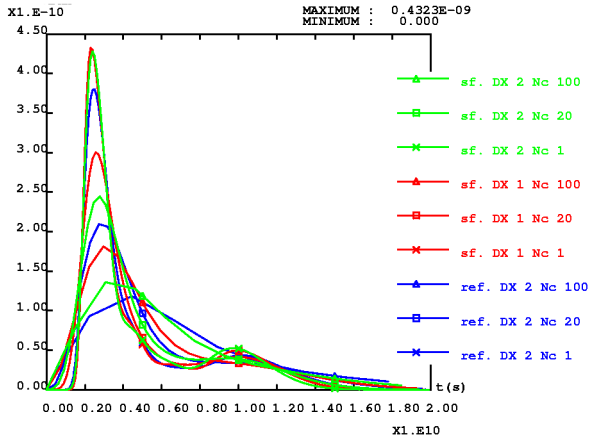
Les courbes 3.13 résultent d'une étude de sensibilité au nombre de courant ainsi qu'à la discrétisation.

Cette étude a été menée en respectant le critère I. Aussi, la monotonie est respectée pour tous les pas d'espace et nombres de courant. Les courbes présentent différents pics et un étalement plus ou moins important, suivant la discrétisation spatiale et temporelle. Si seules les courbes du modèle de référence sont étudiées, la variation du nombre de courant, c'est à dire du pas de temps, entraîne une précision plus ou moins importante des résultats. Ainsi, pour un pas de temps suffisamment petit, les différents pics de la courbe des flux massiques sont bien capturés et le maximum du flux massique est assez élevé tandis que, plus la discrétisation temporelle est grossière, plus le maximum de pic décroît et les pics secondaires disparaissent. Ce comportement est analogue aux résultats obtenus par l'approche Smeared Fractures, pour les différentes discrétisations. La masse négative, crée dans le système, reste infime (courbes 3.13c). Les explications de ces résultats sont les mêmes que celles précédemment énoncées lors de l'étude de la fracture unique et du réseau de 4 fractures. Les différents pics correspondent à différents parcours, tandis que l'étalement est lié au choix des discrétisations. Ainsi, le respect du critère I, équation 3.4, assure bien la monotonie des résultats.

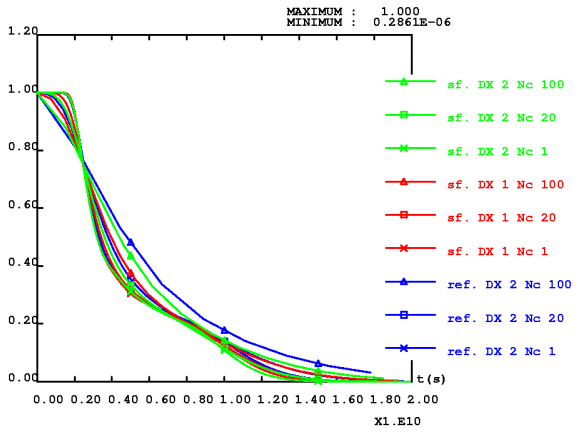
Influence de la géométrie de l'interface fracture-matrice

- Objectif : déterminer l'influence sur la diffusion matricielle de la géométrie de l'interface fracture-matrice quand celle ci est une ligne brisée au lieu d'être une ligne continue.
- Géométrie : matrice uniquement (0 fracture), $d = 10^{-11}\ m^2.s^{-1}$
- Condition aux limites : concentration de 1 sur la bordure inférieure, flux diffusif nul sur le contour.

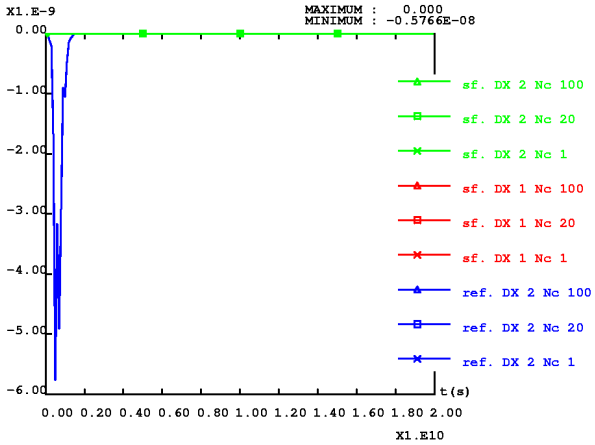
★ Influence de la géométrie.



(a) Flux massique total sur le contour du bloc

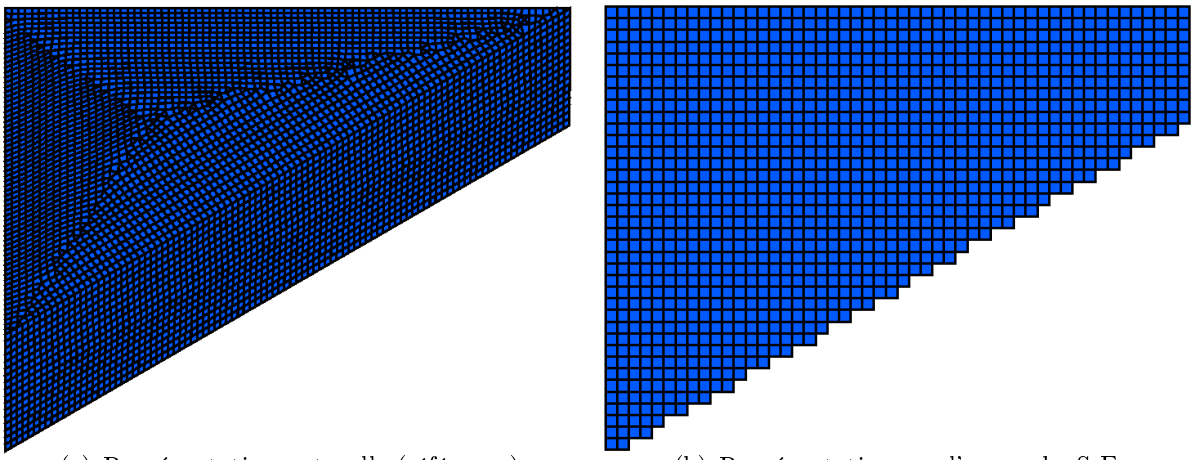


(b) Evolution de la masse dans le bloc



(c) Monotonie : évolution du pourcentage de masse négative dans le bloc

Fig. 3.13 – Masse et flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle) : étude de sensibilité



(a) Représentation naturelle (référence) (b) Représentation par l'approche S.F.

Fig. 3.14 – Bloc matriciel

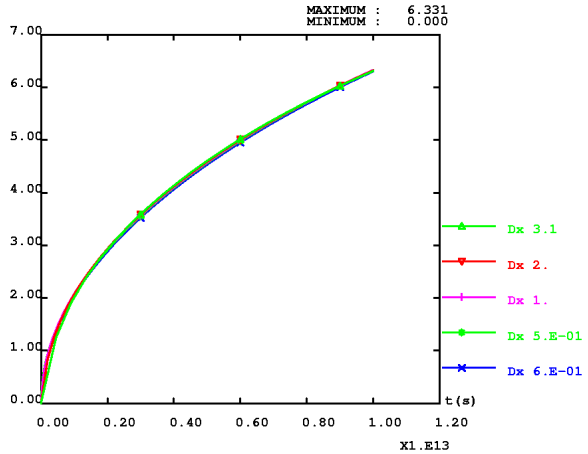
Avant de modéliser la diffusion dans la matrice, il est important d'étudier l'influence de la géométrie d'une fracture représentée par l'approche smeared fractures. En effet, une fracture représentée sur un maillage régulier forme un chenal coudé. La surface de contact entre la fracture et la matrice est par conséquent sur-évaluée. Cette surface de contact étant de longueur plus importante que celle existante, la masse transitant par diffusion matricielle peut être mal évaluée. Afin de tester cette influence, la modélisation du phénomène de diffusion, dans un bloc matriciel est effectuée avec une surface de contact inclinée à 30°. Cette surface de contact est représentée :

- linéairement dans le cas de référence (fig. 3.14a)
- de manière discontinue, conséquence d'une modélisation par une approche smeared fractures, pour différentes discrétisations (fig. 3.14b).

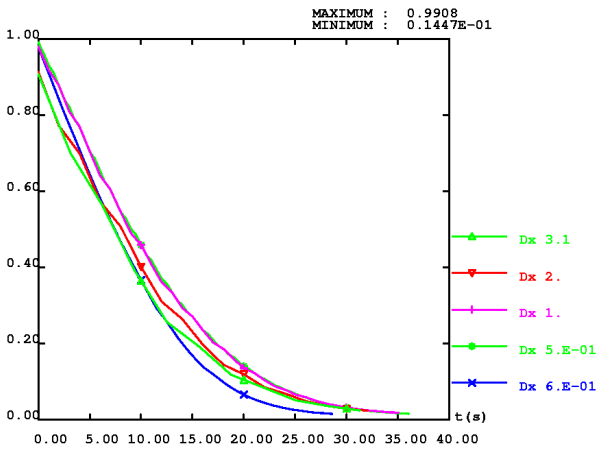
Une concentration unitaire est imposée sur cette surface et un flux nul est imposé sur tout le contour du bloc.

L'évolution de la masse, ainsi que les profils de concentration, obtenus pour un nombre de Fourier de 1, sont présentés courbes 3.15.

Quels que soient la discrétisation choisie et le modèle considéré, les résultats obtenus sont similaires (courbe 3.15a). La matrice se remplit de manière identique et à la même vitesse, quel que soit le modèle considéré. La durée de la simulation n'est pas suffisante pour constater le remplissage complet du bloc (les courbes de masse ne tendent pas vers une valeur constante). Les écarts constatés pour les concentrations, figure 3.15b, le long d'un axe perpendiculaire à la surface de contact, sont une conséquence des différentes localisations des points de cet axe variant suivant la discrétisation et le modèle (figure 3.16a et b). Néanmoins, ces courbes présentent des formes similaires, indiquant une évolution semblable quels que soient la discrétisation et le modèle considérés. Lors de modélisations des transferts en milieux fracturés, le soluté pourra diffuser dans la matrice, en particulier en écoulements naturels (écoulements lents). Cependant, la profondeur de pénétration dans la ma-

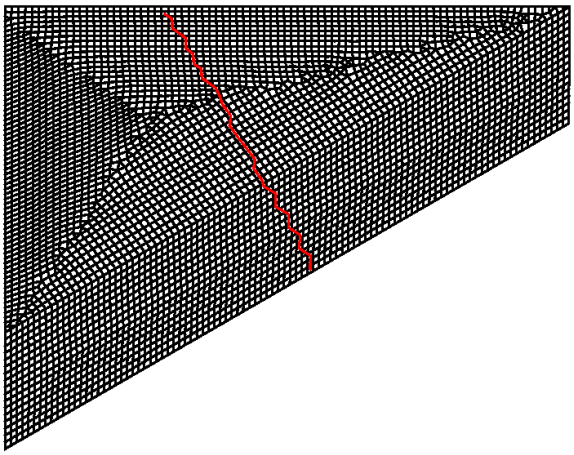


(a) Evolution de la masse dans le bloc

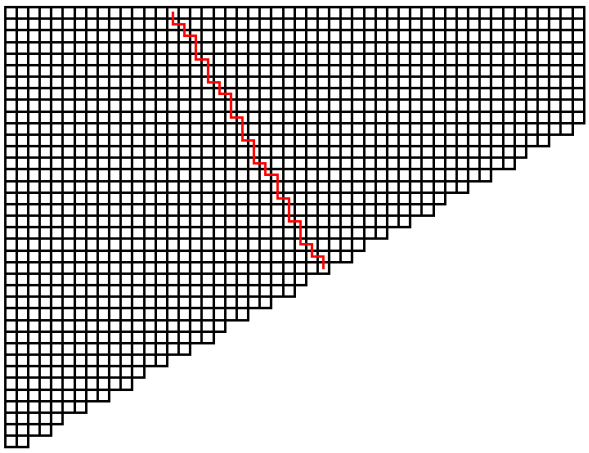


(b) Evolution de la concentration le long de l'axe présenté à la figure 3.16

Fig. 3.15 – Diffusion matricielle : sensibilité à la discrétisation



(a) Axe considéré pour le tracé de l'évolution de concentration (référence)



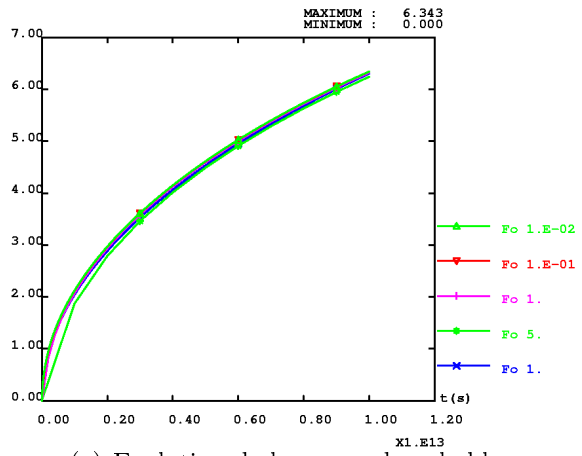
(b) Axe considéré pour le tracé de l'évolution de concentration (S.F.)

Fig. 3.16 – Bloc matriciel

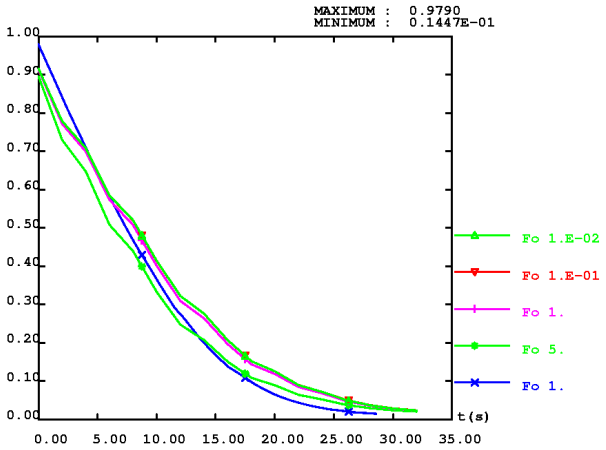
trice restera limitée (en particulier pour le granite). Aussi, dans cette étude c'est plutôt la précision au temps court qui est intéressante et l'on constate qu'à ces temps, les différences restent mineures.

★ Influence du nombre de Fourier.

Les résultats précédents, bien qu'encourageants, ne nous permettent pas encore d'envisager une prise en compte de la diffusion matricielle immédiate. En effet, un aspect numérique lié au schéma utilisé nécessite, lui aussi, une étude de sensibilité. En effet, précédemment, deux critères ont été introduits afin d'assurer la monotonie des résultats, le nombre de courant et le nombre de Fourier. Les vitesses d'écoulement rapides dans les fractures et le respect du nombre de courant peuvent conduire à des nombres de Fourier dans la matrice petits, nécessitant une



(a) Evolution de la masse dans le bloc



(b) Evolution de la concentration le long de l'axe présenté à la figure 3.16

Fig. 3.17 – Diffusion matricielle : sensibilité au nombre de Fourier

discrétisation fine de la matrice. Afin d'étudier leur influence sur la diffusion matricielle, les deux modèles étudiés précédemment (fig. 3.17), vont de nouveau être considérés en s'intéressant, cette fois ci, à l'influence du nombre de Fourier. Pour cela, la discrétisation des deux modèles est identique, tandis que l'on fera varier la discrétisation temporelle. Comme dans le cas précédant, une concentration unitaire est imposée sur la surface inclinée et un flux nul est imposé sur tout le contour du bloc.

L'analyse des résultats montre que la matrice se remplit de manière identique indépendemment du modèle considéré. Les profils de concentration présentent des formes similaires avec, cependant, un décalage, dépendant de la position des points formant l'axe sur lequel la concentration est mesurée. Les résultats obtenus sont peu influencés par une variation du nombre de Fourier compris entre 10^{-2} et 1. Ces valeurs faibles de Fourier sont rencontrées dans les cas défavorables où la diffusion matricielle est modélisée mais ne joue qu'un faible rôle de rétention.

Les deux cas tests précédents indiquent que la modélisation de la diffusion matricielle diffère peu, lorsque l'interface fracture-matrice est modélisée par une ligne brisée ou une ligne droite quelle que soit la discrétisation et pour un nombre de Fourier compris entre 10^{-2} et 1. Une modélisation de l'écoulement et du transport, dans laquelle la diffusion matricielle est susceptible de jouer un rôle important, peut donc être envisagée.

Prise en compte de la diffusion matricielle

Pour des modélisations du transport dans un bloc fracturé, avec la prise en compte de la diffusion matricielle, des processus de temps caractéristiques différents entrent en jeu : des processus à temps caractéristiques courts dans les fractures (convection) et des processus à temps caractéristiques longs dans la matrice (diffusion). Ainsi, dans une approche

mono-domaine, où les différentes zones sont maillées de façon explicite, il est nécessaire de mailler finement les interfaces fractures matrices afin de bien rendre compte des gradients de concentration [Grenier et al. 1999], [Genty et al. 1998] et [Grenier et Mouche 1997]. Le fait de travailler sur un maillage fixe présente le désavantage de ne pas pouvoir raffiner le maillage à ces interfaces. Ce problème représente le défaut majeur de l'approche Smeared Fractures. Pour un phénomène de diffusion matricielle jouant un rôle peu actif lors du transport, une discrétisation fine est nécessaire au niveau de l'interface. L'approche Smeared Fractures utilisant un maillage régulier, l'ensemble du domaine doit être maillé finement ce qui se révèle très coûteux. L'importance des phénomènes diffusifs et la vitesse des écoulements dans le réseau de fractures vont donc jouer un rôle important dans la précision des résultats. Les études effectuées sur différentes géométries de bloc fracturé ont été présentées à l'occasion de deux conférences, [Fourno et al. 2004a] et [Fourno et al. 2004b].

$\Rightarrow$ Fracture unique : sensibilité à la cinétique de la fracture

- Objectif : sensibilité des résultats de l'approche smeared fractures aux vitesses d'écoulement dans la fracture.
- Géométrie : 1 fracture avec la matrice, se référer au tableau 3.1, pour les caractéristiques géométriques de la fracture pour une inclinaison de 30°. Perméabilité de $10^{-8}\ m.s^{-1}$ porosité de 1. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre. Coefficient de diffusion dans la matrice : $D_m = 10^{-13}\ m^2.s^{-1}$.
- Condition d'écoulement : différence de charge de 1, 10^{-1}, $10^{-2}m$ imposée à l'entrée et la sortie de la fracture.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à une distance de 14.3 mètres de l'entrée de la fracture, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et à la sortie de la fracture, concentration nulle à l'entrée.

Les résultats de modélisation, pour une fracture unique, avec différents coefficients de transmissivité, ont été présentés lors du "second international symposium on dynamics of fluids in fractured rock" organisé par le 'Lawrence Berkeley National Laboratory' (Californie) en février 2004, [Fourno et al. 2004a]. Les différents régimes étudiés vont d'un régime rapide à lent.

$\star$ Étude des courbes de sorties en flux massique.
Suivant les cinétiques dans les fractures, les courbes de sorties de flux massiques des figures 3.18 présentent des formes différentes. Le maximum du flux massique décroît avec la vitesse moyenne d'écoulement dans la fracture. Le temps d'arrivée du pic n'est pas proportionnel à la variation des gradients de charge. Pour la vitesse lente, ce temps est beaucoup plus long que celui attendu. De plus, plus la cinétique est lente plus la pente de la queue de la courbe est faible. L'inclinaison de la queue de ces courbes traduit l'influence, plus ou moins importante, de la diffusion matricielle. Ainsi, pour une vitesse rapide, (courbes de la figure 3.19a), la courbe de flux massique est symétrique, par rapport au maximum de pic, et de pente élevée.

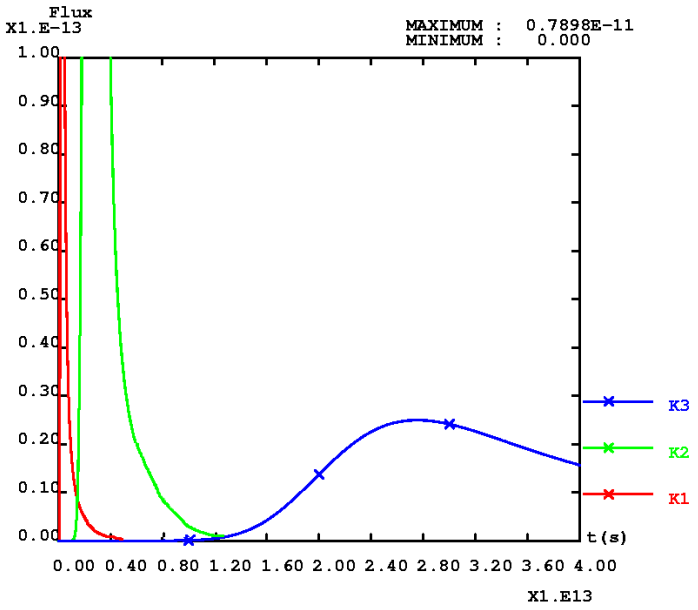
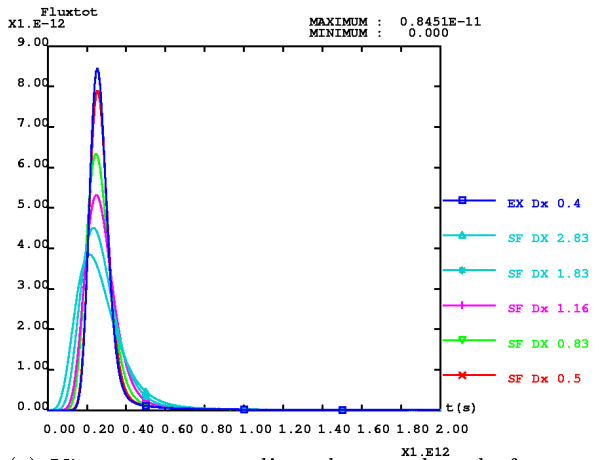


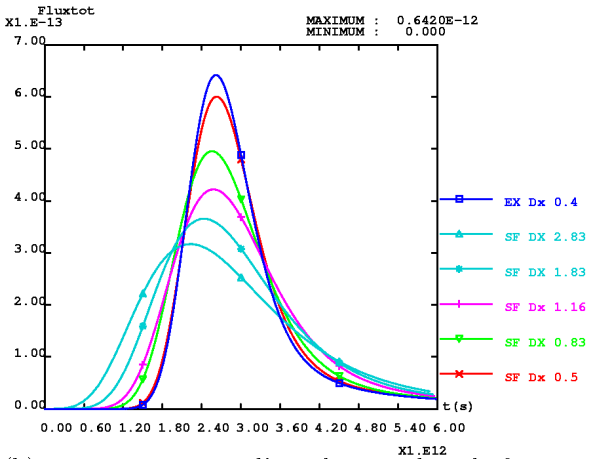
Fig. 3.18 – Fracture unique : flux massique total sortant pour différentes cinétiques

L'influence de la diffusion matricielle est faible. Pour une vitesse plus lente, (courbes fig. 3.19b et courbes 3.19c), la courbe du flux massique décroît plus lentement vers zéro. Ce phénomène est dû au rôle de rétention joué par la matrice. Une partie du traceur est prélevée par la matrice pour être restituée par la suite. La lenteur de ce phénomène explique la faible décroissance de la courbe du flux massique, la valeur plus faible de son maximum ainsi que le retard constaté dans l'arrivée du pic, pour la cinétique lente. Ces formes de courbes ont, précédemment, été étudiées au chapitre 1.2.3.

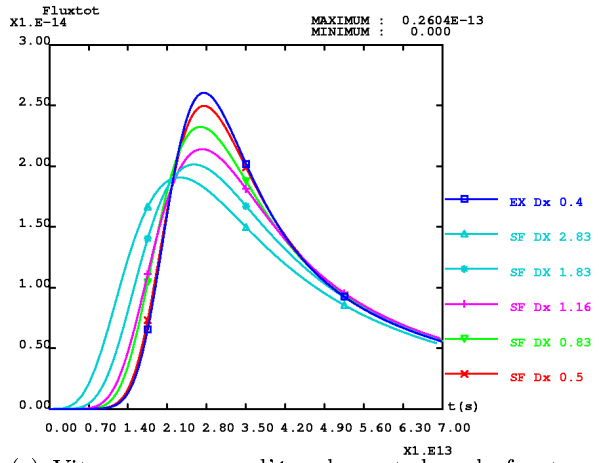
★ Comportement de l'approche Smeared Fractures
Les différentes courbes, obtenues par l'approche Smeared Fractures, présentent quel que soit le régime d'écoulement, un étalement plus ou moins prononcé, suivant la discrétisation. Néanmoins, quelles que soient les vitesses moyennes d'écoulement dans la fracture, le temps du maximum de pic est bien modélisé. L'erreur commise sur ce temps surtout visible sur les courbes turquoises est à relier à l'effet de bord du maillage vu au chapitre 3.3.2. Une dispersivité plus importante est toujours constatée (maximum de pic plus faible pour les discrétisations les plus grossières). Cette dispersion plus importante s'explique de la même manière que lors des différentes modélisations, pour lesquelles la diffusion matricielle était négligée. L'importance de cette dispersion est moins prononcée pour les régimes lents (tableau 3.7). La bonne estimation des temps de sortie semble indiquer que l'approche restitue correctement l'influence des phénomènes de convection-dispersion dans la fracture et de diffusion dans la matrice. Le meilleur comportement de l'approche, lorsque les phénomènes diffusifs sont plus marqués, permet l'utilisation de discrétisations plus grossières et de pas de temps plus impor-



(a) Vitesse moyenne d'écoulement dans la fracture rapide



(b) Vitesse moyenne d'écoulement dans la fracture intermédiaire



(c) Vitesse moyenne d'écoulement dans la fracture lente

Fig. 3.19 – Flux massique total pour différentes vitesses moyennes d'écoulement dans la fracture et différentes discrétisations

K_{fr}	$\Delta X = 0.5$	$\Delta X = 0.83$	$\Delta X = 1.16$	$\Delta X = 1.83$	$\Delta X = 2.83$
K_1	6%	24%	36%	46%	53%
K_2	6%	22%	33%	42%	50%
K_3	4%	10%	18%	23%	27%

Tab. 3.7 – Précision du modèle S.F. vs modèle de référence (influence de K_{fr})

tants.

Aux résultats présentés à Berkeley, s'ajoutent ceux présentés, en juin 2004, à la "XV international conference on computational methods in water resources", à Chapel Hill en Caroline du Nord. L'article des proceedings de cette conférence, ([Fourno et al. 2004b]), présente les résultats obtenus sur les géométries suivantes :

- ⋆ Fracture unique : influence de la diffusion matricielle.
- ⋆ Réseau de quatre fractures : influence de la cinétique dans les fractures.

⇒ Fracture unique : sensibilité au coefficient de diffusion matricielle

- Objectif : sensibilité des résultats de l'approche smeared fractures au coefficient de diffusion.
- Géométrie : une fracture avec sa matrice, se référer au tableau 3.1, pour les caractéristiques géométrique de la fracture avec une inclinaison à 30°. Perméabilité de 10^{-7} $m.s^{-1}$ porosité de 1. Coefficients de diffusion dans la matrice $D_1 = 10^{-13}$, $D_2 = 10^{-12}$, $D_3 = 10^{-11}$, $m^2.s^{-1}$, coefficient de dispersion voisin de un mètre.
- Condition d'écoulement : différence de charge de $1m$ imposée à l'entrée et la sortie de la fracture.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à une distance de 14.3 mètres de l'entrée de la fracture, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et aux sorties des fractures, concentration nulle aux entrées des fractures.

L'influence de la variation du coefficient de diffusion matricielle a été étudiée en considérant trois coefficients de diffusion. La figure 3.20 montre que le maximum des courbes de flux massique, ainsi que leur étalement, sont influencés par le coefficient de diffusion de la matrice. Plus celui-ci est important, plus le maximum décroît et la forme de la courbe est étalée, avec une décroissance des flux massiques aux temps longs plus faible. Pour le coefficient de diffusion D3, il est même possible d'observer un léger décalage dans le temps d'arrivée du pic. Les remarques faites sur les courbes 3.20 traduisent le rôle plus ou moins important de la matrice. Plus la matrice est diffusive, plus la masse échangée est importante. Le maximum des courbes va donc décroître et les courbes s'étaler. La sensibilité à la discrétisation, figures 3.21a, b et c, s'accompagne

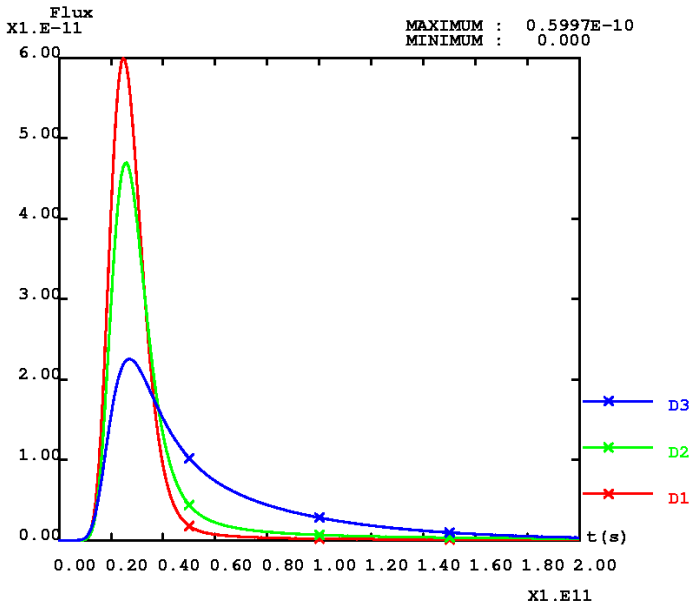


Fig. 3.20 – Fracture unique : flux massique total sortant pour différentes valeurs du coefficient D_m

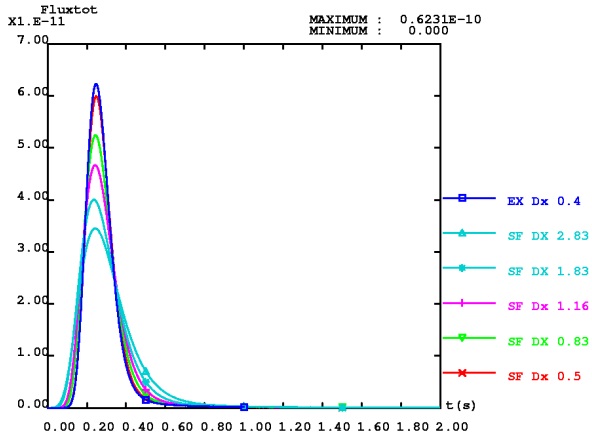
D_m	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 0.83$	$\Delta = 1.16$	$\Delta = 1.83$	$\Delta = 2.83$
D_1	3%	15%	24%	35%	44%
D_2	3%	14%	23%	33%	41%
D_3	2%	8%	13%	19%	27%

Tab. 3.8 – Précision du modèle S.F. vs modèle de référence (influence de D_m)

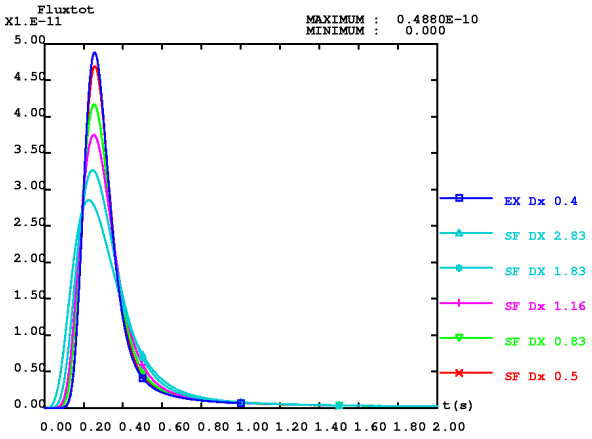
toujours d'une chute du maximum et d'un étalement plus important des courbes, lorsque le pas d'espace augmente. Les temps d'arrivée du maximum des flux massiques restent similaires quels que soient le modèle ou la discrétisation. La dispersivité des courbes est, comme précédemment à associer à la dispersivité du modèle numérique. Ainsi, le maillage le plus fin fournit les résultats les plus précis tandis que, pour les discrétisations plus grossières, les courbes sont plus étalées. La précision des résultats est liée à l'importance des phénomènes diffusifs. Plus la diffusion matricielle joue un rôle important plus la discrétisation peut être grossière sans pénaliser la qualité des résultats, (fig. 3.21 et tab. 3.8).

$\Rightarrow$ Réseau de quatre fractures : influence de la vitesse moyenne d'écoulement dans les fractures.

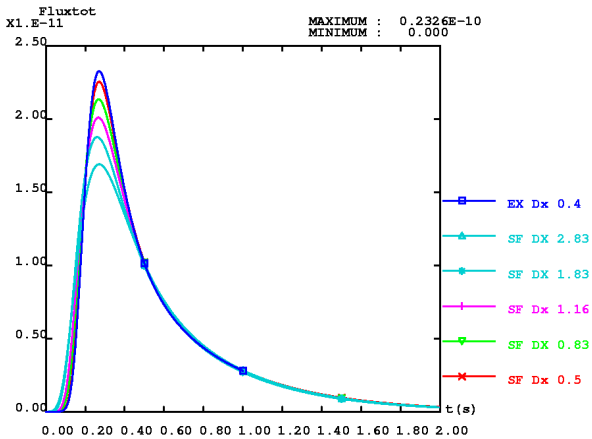
- Objectif : valider la résolution de l'écoulement et du transport dans un bloc de quatre fractures.
- Géométrie : quatre fractures avec la matrice, se référer au tableau 3.3 pour les caractéristiques des fractures. Coefficient de dispersion de l'ordre du



(a) $D_1 = 10^{-13}$, $m^2.s^{-1}$



(b) $D_2 = 10^{-12}$, $m^2.s^{-1}$



(c) $D_3 = 10^{-11}$, $m^2.s^{-1}$

Fig. 3.21 – Fracture unique : influence de la discrétisation sur le flux massique sortant

mètre.

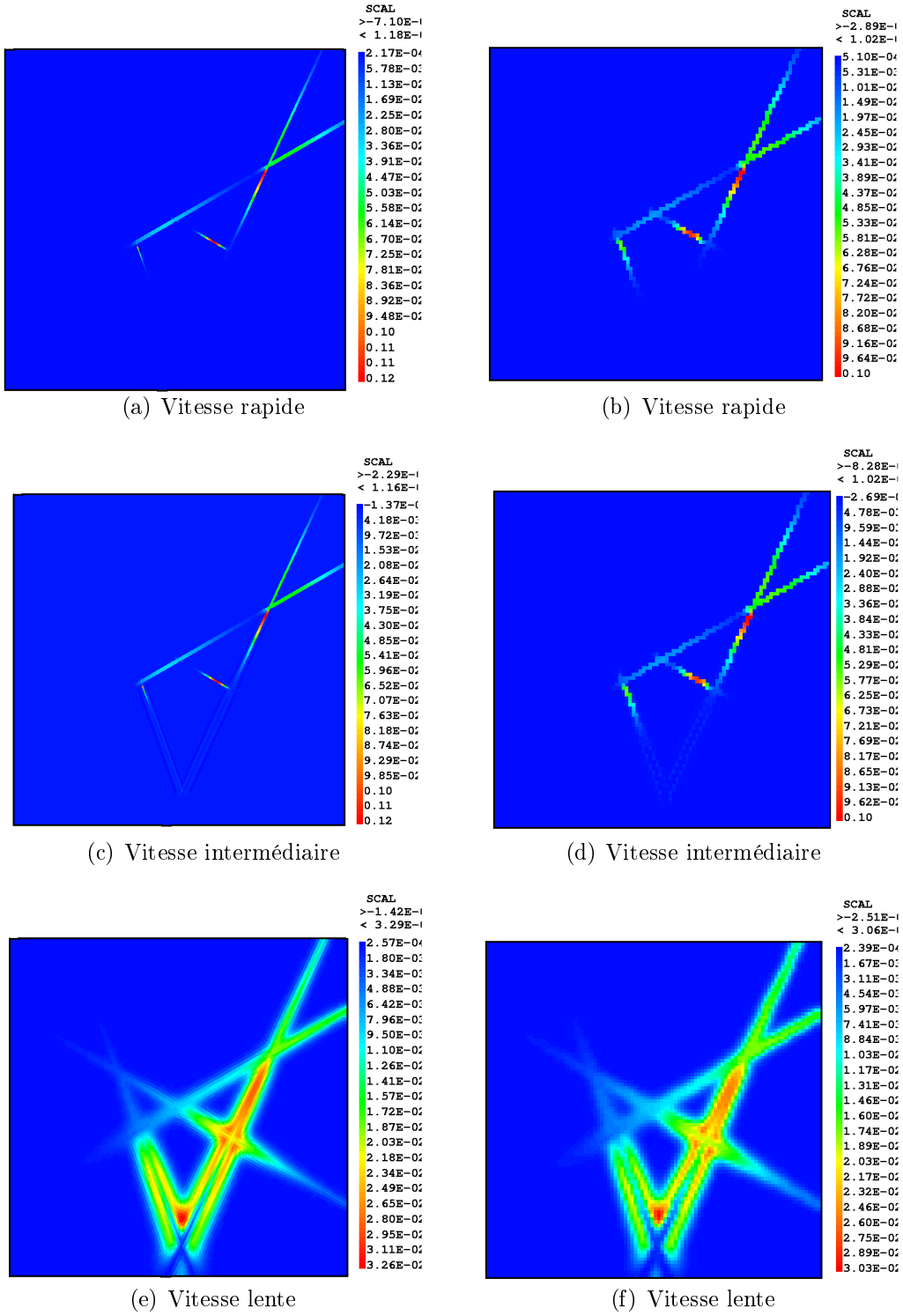
- Condition d'écoulement : les charges imposées aux entrées et sorties des fractures sont présentées figure 3.8. Les différentes vitesses d'écoulement des fractures sont simulées en appliquant un coefficient de valeur 10^3 (vitesse rapide), 1 (vitesse intermédiaire), 10^{-3} (vitesse lente), aux perméabilités des fractures.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 4, figure 3.8, flux diffusif nul sur le contour de la matrice et aux sorties des fractures, concentration nulle aux entrées des fractures.

Les champs de concentration, figures 3.22, permettent de visualiser l'importance du phénomène diffusif dans la matrice pour les différentes vitesses d'écoulement dans les fractures. Ainsi, plus la vitesse d'écoulement dans la fracture est lente, plus la zone explorée dans la matrice par le traceur est importante.

Pour la vitesse rapide et intermédiaire, les courbes de flux massique présentent la même forme (fig. 3.23a et b) : forme symétrique autour du temps du maximum. Pour ces deux vitesses, un second pic d'amplitude assez faible est présent. Pour la vitesse lente, (fig. 3.23c), les courbes sont moins symétriques : présence d'une queue plus prononcée après le maximum traduisant une action prononcée de la diffusion matricielle. Quel que soit le régime, le maximum diminue lorsque le pas de discrétisation augmente. Le pic secondaire des courbes, (fig. 3.23a et b), arrivant après le pic principal, est la conséquence des chemins plus ou moins rapides empruntés par le traceur. La forme symétrique des courbes indique que la diffusion matricielle joue un rôle très limité dans le transport du traceur. Le champ de concentration, (figure 3.22), montre en effet que, pour ces régimes, la pénétration du traceur dans la matrice est faible. La présence d'une queue dans la courbe de flux massique du régime lent indique, qu'au contraire des deux régimes précédents, la matrice a une influence sur le transport du traceur. Ainsi, la profondeur de pénétration est bien visible sur les champs de concentration (figure 3.22). Le pic secondaire n'apparaît plus pour ce régime. Il a été lissé par l'action de la diffusion matricielle. L'influence de la discrétisation se traduit toujours par l'étalement des courbes de flux massique obtenues par l'approche Smeared Fractures. Cet étalement est dû à la dispersion numérique du modèle. La précision des résultats augmente avec la discrétisation (tab. 3.10). La vitesse lente (fig. 3.23c) permet de constater, une fois de plus, que la précision des résultats est meilleure pour les vitesses lentes et permet un gain informatique non négligeable (tab. 3.10).

$\Rightarrow$ Réseau de 11 fractures : détermination des critères de discrétisation

- Objectif : déterminer les critères de discrétisation.
- Géométrie : 11 fractures (Type I ou II) avec la matrice, se référer aux tableaux 3.5 et 3.6 pour les caractéristiques des fractures. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.

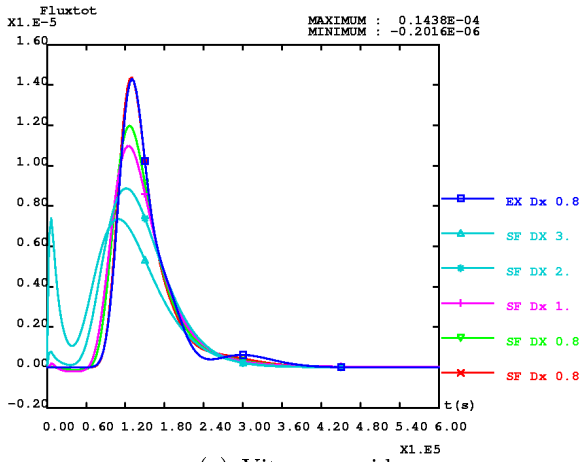


(a) Vitesse rapide (b) Vitesse rapide

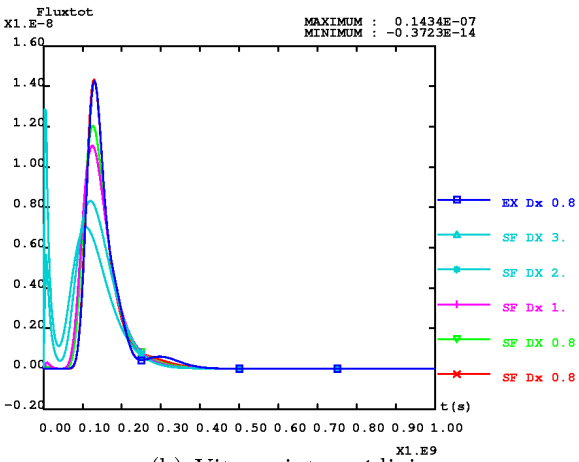
(c) Vitesse intermédiaire (d) Vitesse intermédiaire

(e) Vitesse lente (f) Vitesse lente

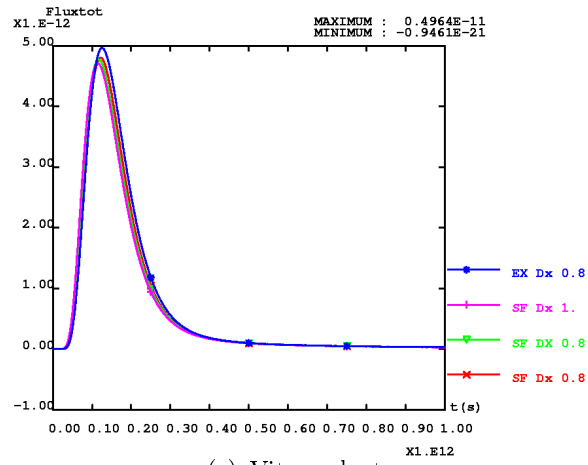
Fig. 3.22 – Réseau de 4 fractures : champ de concentrations (modèle de référence à gauche, modèle S.F. à droite) $\Delta = 0.5$ m



(a) Vitesse rapide



(b) Vitesse intermédiaire



(c) Vitesse lente

Fig. 3.23 – Réseau de 4 fractures : influence de la discrétisation sur le flux massique sortant

K_r	$\Delta X = 0.5$	$\Delta X = 0.8$	$\Delta X = 1.$
K_1	0%	16%	23%
K_2	0%	15%	21%
K_3	3%	4%	5%

Tab. 3.9 – Précision obtenue : modèle S.F. vs modèle de référence (étude influence K_r)

Discrétisation	Maillage	Écoulement	Transport (temps par itération)
ref. $\Delta = 0.4$	15	0.8	2
sf. $\Delta = 0.5$	11	0.5	1.4
sf. $\Delta = 0.8$	3	0.2	0.8
sf. $\Delta = 1.$	2	0.15	0.6
sf. $\Delta = 2.$	0.5	0.06	0.3
sf. $\Delta = 3.$	0.3	0.03	0.2

Tab. 3.10 – Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures (discrétisations spatiale et temporelle semblables pour les 2 modèles)

- Condition d'écoulement : gradient de charge de, 10^{-3}.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.12, concentration nulle sur tout le contour du bloc.

L'utilisation des éléments finis mixtes hybrides impose, pour des raisons de monotonie :

$$F_O^m = \frac{D_m \Delta t}{\omega_m \Delta^2} > \frac{1}{6} \tag{3.5}$$

avec F_O^m le nombre de Fourier de la matrice et $D_m = \omega_m.d$, d étant le coefficient de diffusion de pore.

En d'autres termes, $F_O^m > \frac{1}{6}$ signifie, que pour un problème diffusif, il suffit que le soluté se propage sur plus de un sixième de la longueur de la maille, pendant un temps Δt, pour que la monotonie soit respectée. Le choix du pas d'espace va donc dépendre directement de la pénétration, $\eta = \sqrt{2d.\Delta t}$, du soluté dans la matrice pour un certain temps de contact entre la masse transportée par les fractures et la matrice. Si uniquement les phénomènes convectifs dans la fracture sont considérés, le temps de transite d'un soluté est $\tau_w = \frac{L_{traj}\omega_{fr}}{q}$, L_{traj} désignant la longueur de parcours. Soit une vitesse d'écoulement $\frac{q}{\omega_{fr}}$ et un temps de contact $\Delta t = \frac{5\tau_w}{N_{iter}}$, avec $N_{iter} = 100$ le nombre de pas de temps, (on considère qu'au bout de $5\tau_w$ l'ensemble de la masse est sortie du bloc et la solution est bien approchée après 100 itérations). Le respect d'un nombre de Fourier, $F_O^m > \frac{1}{6}$, compte tenu de notre choix de Δt, implique de choisir Δ tel que :

$$\Delta < \sqrt{\frac{3d\tau_w}{10}} \tag{3.6}$$

Maintenant, étudions la cohérence de l'expression 3.6. L'équation de transport dans les fractures, en tenant compte de la diffusion matricielle, s'écrit ([Bear et al. 1993]) :

$$\omega_{fr}\frac{\partial C_{fr}}{\partial t} = \vec{\nabla}.(\bar{\bar{D}}_{fr}.\vec{\nabla}C_{fr} - C_{fr}.\vec{q}) + \frac{2D_m}{e}\frac{\partial C_m}{\partial z}|_{z=0} \tag{3.7}$$

Ainsi, si l'ouverture e de la fracture diminue, le terme source $S = \frac{2D_m}{e}\frac{\partial C_m}{\partial z}|_{z=0}$ augmente. Le phénomène de diffusion dans la matrice augmente donc pour une variation décroissante de l'ouverture. Étant donné que la diffusion matricielle affecte les temps de sortie, la propagation du soluté dans la fracture est aussi affectée. Le choix du pas du maillage doit donc être sensible à une variation de l'ouverture. Or, le critère 3.6 ne subit aucune influence lors de la variation de l'ouverture. Il doit donc être encore amélioré.

Le critère 3.6 a été établi pour un temps de parcours lié à la convection dans la fracture. Or, ce temps de sortie est affecté par la diffusion matricielle et par conséquent sous-estimé dans la formulation précédente. En tenant uniquement compte des phénomènes de convection dans la fracture (dispersion nulle dans la fracture) et de diffusion dans la matrice, Neretnieks dans [Bear et al. 1993], propose la solution suivante en réponse à une injection continue de concentration C_0 à l'entrée de la fracture :

$$\frac{C(t,t_w)}{C_0} = erfc(\frac{\omega_m\sqrt{d}\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{t-\tau_w}}) \tag{3.8}$$

A partir de cette solution, il est possible de déterminer la solution en réponse à un créneau de taille t_0.

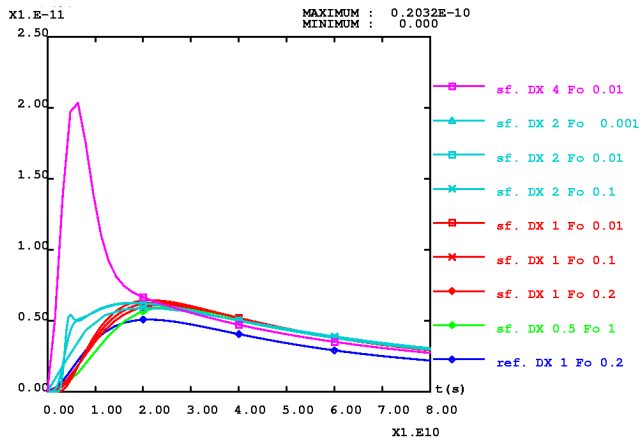
$$\frac{C(t,t_w)}{C_0} = erfc(\frac{\omega_m\sqrt{d}\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{t-\tau_w}}) - erfc(\frac{\omega_m\sqrt{d}\tau_w}{e\omega_{fr}\sqrt{t-t_0-\tau_w}}) \tag{3.9}$$

En dérivant cette équation, en déterminant le temps annulant cette dérivée et enfin en effectuant un développement limité en supposant t_0 petit, il est possible de déterminer le temps de sortie, τ_s, du maximum de concentration en fonction du temps obtenu en convection pure τ_w et d'un coefficient de retard R_p, équations 1.8 et 1.7.

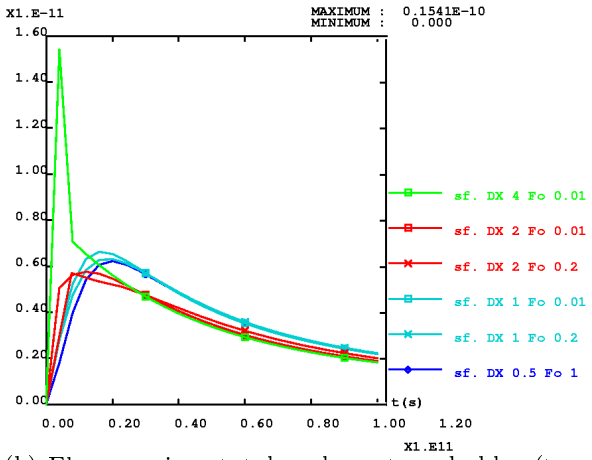
$$R_p = (1 + \frac{2}{3}\frac{\omega_m D_m}{\omega_{fr}^2 e^2}\tau_w)$$
$$\tau_s = \tau_w.R_p$$

En tenant compte du critère portant sur le nombre de Fourier, le critère à considérer pour choisir le pas d'espace est donc :

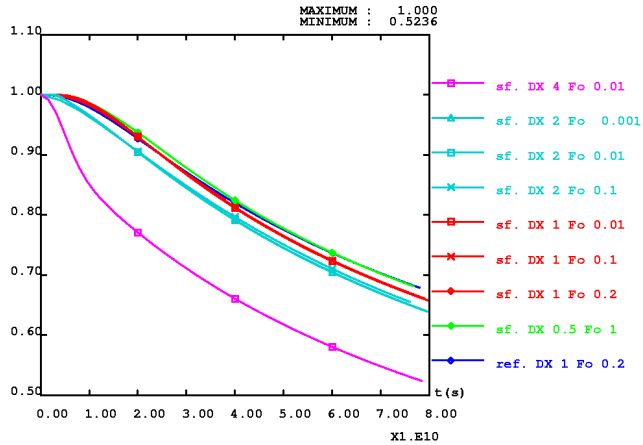
$$\text{Critère II} : \Delta < \sqrt{\frac{3}{10}d.R_p.\tau_w} \tag{3.10}$$



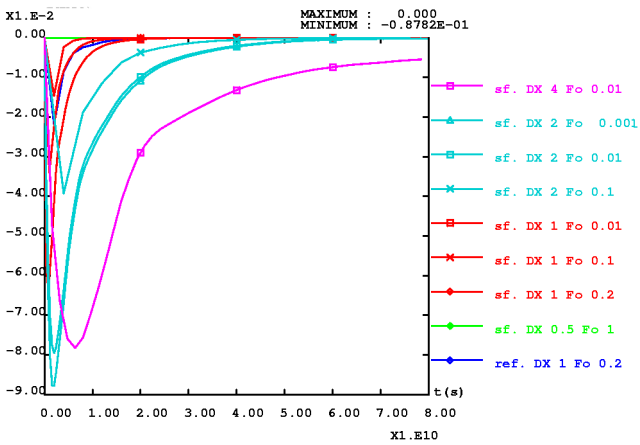
(a) Flux massique total sur le contour du bloc (type I)



(b) Flux massique total sur le contour du bloc (type II)



(c) Evolution de la masse dans le bloc (type I)



(d) Monotonie : évolution du pourcentage de masse négative dans le bloc (type I)

Fig. 3.24 – Masse et flux massique pour un réseau de 11 fractures : étude de sensibilité

La géométrie constituée de 11 fractures de type I est modélisée pour un gradient de charge de 5.10^{-4}. Pour cette configuration, les résultats obtenus sont bons pour $\Delta < 1$. En effet, pour un $\Delta > 1$, le temps τ_s ne correspond pas à celui attendu. Pour Δ voisin de 1 m, τ_s, légèrement sous-évalué, est obtenu avec une bonne approximation. Enfin, pour Δ proche de 0.5 m, le maximum de concentration de la solution est obtenu au temps τ_s attendu (courbes 3.24a). Or, le critère II, équation 3.10, impose $\Delta < 0.7$ voisin de l'intervalle obtenu numériquement.

L'analyse des courbes 3.24 permet de vérifier l'importance et le bon choix du critère II. En effet, pour des maillages avec $\Delta > 1$, le phénomène de diffusion matricielle n'est pas modélisé correctement :

- maximum du pic de flux massique surestimé,
- temps de sortie associé sous-estimé (courbes 3.24a).
- Masse prélevée par la matrice moins importante (pentes des évolutions de la masse trop importantes, courbes 3.24b).

Ces mauvais choix du pas d'espace se traduisent aussi par une non-monotonie des résultats (courbes 3.24d). Ainsi, une masse négative va rester présente pendant un temps important. Pour un choix de Δ convergeant vers celui imposé par le critère II, le pourcentage de masse négative diminue ainsi que son temps de présence. Pour $\Delta = 1$ (courbes bleues), la diffusion est bien prise en compte. Le faible temps de présence d'une faible masse négative influence peu les résultats. Le choix de la discrétisation temporelle correspond à des nombres de courant moyens de 3, 30 et 70 dans les fractures, ce qui correspond à un nombre de Fourier de 10^{-2},10^{-1} et 2.10^{-1}. Le régime étant ici fortement diffusif, le nombre de courant peut être élevé sans porter préjudice à la qualité des résultats. Le respect d'un nombre de Fourier supérieur à un sixième permet de faire chuter le maximum de masse négative présente dans le bloc. Les résultats obtenus, pour un bon choix de pas d'espace, sont toujours cohérents par rapport à la courbe bleue obtenue avec le modèle de référence. La validité du critère II peut encore être vérifié en considérant la même géométrie, mais avec des fractures de type II. Le critère II impose un $\Delta < 0.7$. Pour les discrétisations respectant ce choix, les résultats obtenus sont tout à fait satisfaisants (courbes 3.24b).

Il est intéressant de noter que, pour ces études :

★ Si la diffusion est importante (temps de retard sur les temps d'arrivée), l'utilisation d'un maillage ne respectant pas le critère II conduit à sous-estimer le temps d'arrivée du pic. Le phénomène de diffusion dans la matrice n'est pas correctement modélisé et son rôle est sous-estimé. Le choix d'une discrétisation trop grossière, dans le cas où la diffusion matricielle est modélisée, revient, par conséquent, à favoriser le transport dans les fractures et sous-évaluant l'action de la matrice.

★ Si la diffusion joue un rôle moins important (pas d'influence sur les temps d'arrivée), le temps d'arrivée du pic est toujours bien estimé quelle que soit

la discrétisation. La discrétisation influe uniquement sur l'étalement de la courbe liée à la dispersivité des EFMH.

3.3.3 Synthèse sur la validation de l'approche Smeared Fracture 2D

Les études menées sur une fracture unique ont permis de constater que les résultats sont tout à fait satisfaisants que ce soit pour des études de sensibilité aux :

- variations d'inclinaison des fractures
- variations de discrétisation
- variations des propriétés du milieu modélisé

Lors de la résolution du transport dans les fractures, seules ou avec la matrice, la physique des milieux fracturés est correctement modélisée. On constate, néanmoins, que la dispersion des courbes obtenues avec l'approche Smeared Fractures augmente avec le pas de discrétisation. Cette dispersion est directement liée à la dispersivité des EFMH. Cependant, le raffinement en temps conduit à une bonne précision des résultats. Les différentes études de sensibilité, sur la cinétique de la fracture ou le coefficient de diffusion matricielle, tendent à montrer que plus la diffusion matricielle joue un rôle important moins l'utilisation d'un raffinement important est nécessaire. L'étude du réseau de quatre fractures, outre le fait d'avoir confirmé les observations précédentes, a permis de déterminer un premier critère géométrique pour le choix de la discrétisation : le pas de discrétisation doit être suffisamment fin pour conserver la géométrie réelle du réseau de fractures. En outre, les gains en temps de calculs sont tout à fait intéressant (jusqu'à 70% de gain). Enfin, grâce à la dernière étude d'un réseau de 11 fractures, deux critères ont pu être établis de manière à modéliser correctement les phénomènes physiques :

★ pour la résolution du transport dans le réseau de fractures seul : $\Delta < 2\alpha$

★ pour la résolution du transport dans les fractures et la matrice : $\Delta < \sqrt{\frac{3}{10} d.R_p.\tau_w}$

avec
- α le coefficient de dispersivité (m)
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore $(m^2.s^{-1})$
- R_p le coefficient de retard lié à la diffusion matricielle $(-)$
- $\tau_w = \frac{L_{traj}\omega_{fr}}{q}$ le temps d'arrivée du pic pour un écoulement purement convectif (s)
- L_{traj} la longeur estimée de parcours du soluté (m)
- ω_{fr} la porosité de la fracture $(-)$
- q la vitesse de Darcy $(m.s^{-1})$

.

La qualité des résultats précédents ainsi que la maniabilité de l'approche, pour la résolution de l'écoulement et du transport en 2D, permet d'envisager le passage au 3D.

Transmissivité $m^2.s^{-1}$	ouverture m	porosité
$1.43.10^{-07}$	$1.74.10^{-04}$	0.055

Tab. 3.11 – Fracture unique 3D : Propriétés issues de [Dershowitz et al. 2003]

Loin d'être évident, ce changement de dimension a nécessité de revoir la conception du maillage. Contrairement au 2D, la détermination des flux (hydrique et massique) est exacte uniquement dans deux directions. Un travail de validation est donc nécessaire afin de déterminer l'erreur commise sur les flux, suivant les directions de l'écoulement.

3.4 Qualification et validation : approche 3D

La stratégie de qualification et validation de l'approche 3D est la même que celle suivie pour le 2D. Les résultats, obtenus avec l'approche Smeared Fractures, sont :

- ⋆ pour l'écoulement, confrontés à une solution analytique.
- ⋆ pour le transport, confrontés à des résultats obtenus avec un maillage dédié à la géométrie.

Cependant, ces études sont moins poussées que pour le 2D, le maillage explicite d'un réseau de fractures 3D se révélant trop complexe. On se contente d'étudier l'écoulement et le transport dans un bloc possédant une fracture unique afin de valider et qualifier cette approche.

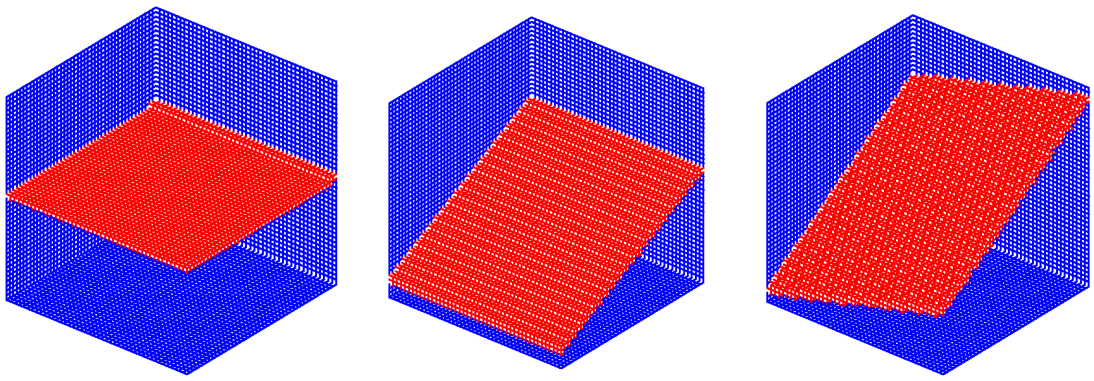
3.4.1 Fracture unique 3D

Les propriétés de cette fracture sont présentées dans le tableau 3.11. Les propriétés équivalentes utilisées sont celles obtenues au chapitre 2.3.

Différents tests sont effectués pour différentes inclinaisons de la fracture, (figure 3.25) et différentes directions de gradient de charge.

3.4.2 Ecoulement

- Objectif : estimation de l'erreur commise sur les flux hydriques.
- Géométrie : une fracture sans la matrice, se référer aux tableaux 3.11 pour les caractéristiques de la fracture, inclinaison variable (fig. 3.25). Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.
- Conditions aux limites : gradient de charge de directions variables suivant le scénario modélisé, mais constant dans le temps (écoulement en régime permanent).



(a) $\theta = 0.$, $\beta = 0.$ (b) $\theta = 0.$, $\beta = 26.57$ (c) $\theta = 14.57$, $\beta = 32.62$

Fig. 3.25 – Validation de l'écoulement et du transport 3D : configurations étudiées

L'estimation de l'erreur commise sur les flux hydriques est obtenue par le rapport $|\frac{Q_{sf}-Q_r}{Q_r}|$ où $Q_r = \int_S \vec{q}.\vec{n}\partial S$ correspond au flux hydrique réel sortant dans la direction $\vec{x}$ ou $\vec{y}$ et Q_{sf} le flux hydrique simulé. Les indices x et y (par exemple Q_r^x et Q_r^y) sont utilisés afin d'indiquer la direction considérée. La valeur du flux hydrique réel est donnée par les solutions analytiques suivantes :

$$Q_r^x = T_r.\frac{L_{bloc}}{\cos\beta}.\vec{n_x}.\vec{\nabla}h \tag{3.11}$$

$$Q_r^y = T_r.\frac{L_{bloc}}{\cos\theta}.\vec{n_y}.\vec{\nabla}h \tag{3.12}$$

L_{bloc} correspond à la longueur du bloc, ($L_{bloc} = 200$ m dans nos tests de validation), et $\vec{n_x}$ et $\vec{n_y}$ aux normales extérieures à la fracture, dans les directions x et y. Ces normales s'expriment dans le repère lié au bloc en fonction de la normale extérieure à la fracture, n_f, par :

$$\vec{n_x} = \begin{pmatrix} 0. \\ \cos\beta \\ \sin\beta \end{pmatrix} \wedge n_f \text{ et } \vec{n_y} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ 0. \\ \sin\theta \end{pmatrix} \wedge n_f$$

$$\text{avec } n_f = \frac{1}{(\sin^2\theta\cos^2\beta+\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} -\cos\beta\sin\theta \\ -\sin\beta\cos\theta \\ \cos\beta\cos\theta \end{pmatrix}$$

Les expressions suivantes sont finalement obtenues :

$$n_x = \frac{1}{(\sin^2\theta\cos^2\beta+\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} \cos\theta \\ -\sin\beta\sin\theta\cos\beta \\ \cos^2\beta\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$n_y = \frac{1}{(\sin^2\theta\cos^2\beta+\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\theta\sin\beta \\ -\cos\beta \\ -\cos^2\theta\sin\beta \end{pmatrix}$$

Le tableau 3.12 présente les erreurs commises sur les flux hydriques, dans une direction $\vec{x}$ et $\vec{y}$, suivant la variation de l'inclinaison de la fracture et de la direction de l'écoulement. La notation '$-$' indique que le flux hydrique réel est nul et que le flux hydrique simulé obtenu est négligeable. Du tableau 3.12 trois informations importantes peuvent être tirées.

1. Un premier groupe de résultats correspond aux résultats obtenus pour les directions de charge $\vec{\nabla}h = (1.,\ 0,\ 0)$ et $\vec{\nabla}h = (0,\ 1,\ 0)$. Ces directions correspondent aux directions principales pour lesquelles les tenseurs équivalents ont été déterminés. Pour ces directions d'écoulement, l'estimation du flux hydrique reste proche du flux hydrique réel quelle que soit l'inclinaison de la fracture. Le tableau 3.12 indique que l'erreur commise reste, comme attendu, inférieure à 10%.

2. Un second groupe de résultats correspond à des directions d'écoulement différentes des directions principales. Suivant ces directions, les conditions aux limites de certains ensembles X et Y ne sont pas respectées. En effet, l'hypothèse que le flux hydrique entrant par une maille d'un ensemble X ou Y est égale aux flux hydrique sortant par la maille opposée n'est plus vérifiée. Les erreurs commises sur les flux hydriques sont donc plus élevées que celles commises pour les directions d'écoulement correspondant aux directions principales.

3. L'erreur augmente aussi avec l'inclinaison de la fracture (tableau 3.12). Pour les directions principales, la variation de l'erreur est faible, étant donné que c'est pour ces directions qu'ont été établis les tenseurs de perméabilité. Pour les autres directions, le nombre des ensembles X ou Y enfreignant les hypothèses permettant d'établir l'équivalence des tenseurs, va augmenter avec l'inclinaison de la fracture et ainsi détériorer la précision des résultats.

Il faut cependant s'attendre à une erreur de l'ordre de 20%, tableau 3.12, sur les vitesses de convection pour le transport ce qui peut ne pas être négligeable, sauf lorsque la diffusion dans la matrice masque ces effets.

La direction de l'écoulement et l'inclinaison de la fracture jouent un rôle important dans la précision des calculs. Les variations de la précision des résultats traduisent le fait que les tenseurs équivalents sont obtenus de manière à conserver les flux hydriques, pour uniquement deux directions principales. Néanmoins, les erreurs constatées ne sont pas uniquement dues à l'estimation des tenseurs équivalents. En effet, il faut aussi étudier le rôle de la discrétisation et son influence sur l'erreur commise. Le cas de la fracture précédente, dont les angles d'inclinaison sont $\theta = 14.57$, $\beta = 32.62$, est de nouveau considéré. L'influence de la discrétisation sur la précision des résultats est présentée au

$\Delta = 5.$ m	$\theta = 0.$, $\beta = 0.$	$\theta = 0.$, $\beta = 26.57$	$\theta = 14.57$, $\beta = 32.62$
$\vec{\nabla}h = (1., 0, 0)$	5.% , –	5.% , –	1.% , –
$\vec{\nabla}h = (0, 1., 0)$	– , 5.%	– , 6.%	– , 8.%
$\vec{\nabla}h = (0, 0, 1)$	– , –	– , 2.%	4.% , 1.%
$\vec{\nabla}h = \frac{1.}{\sqrt{2}}(1., 1., 0.)$	9.% , 9.%	8.% , 14.%	5.% , 19.%
$\vec{\nabla}h = \frac{1.}{\sqrt{3}}(1., 1., 1.)$	10.% , 10.%	8.% , 8.%	3.% , 11.%

Tab. 3.12 – Erreurs commises sur les flux hydriques pour les directions x,y : sensibilité à la direction de l'écoulement et à l'inclinaison de la fracture

$\theta = 14.57$, $\beta = 32.62$	$\Delta = 2.$ m	$\Delta = 5.$ m	$\Delta = 10.$ m
$\vec{\nabla}h = (1., 0, 0)$	2.% , –	1.% , –	6.% , –
$\vec{\nabla}h = (0, 1., 0)$	– , 5.%	– , 8.%	– , 15.%
$\vec{\nabla}h = \frac{1.}{\sqrt{2}}(1., 1., 0.)$	1.% , 10.%	5.% , 19.%	15.% , 35.%
$\vec{\nabla}h = \frac{1.}{\sqrt{3}}(1., 1., 1.)$	1.% , 0.%	10.% , 10.%	11.% , 18.%

Tab. 3.13 – Erreur commise sur les flux hydriques pour les directions x,y : sensibilité à Δ

tableau 3.13.
A partir de ce tableau, deux remarques peuvent être formulées.

1. Quelle que soit la direction de l'écoulement, le raffinement du maillage conduit à une meilleure estimation des flux hydriques de sortie.
2. Pour des directions d'écoulement correspondant aux directions principales, l'erreur de quelques pour cent, commise sur le flux hydrique, reste inférieure à celles des autres directions. Ce résultat était attendu. Ce sont, en effet, les deux directions qui ont servi à déterminer les tenseurs équivalents. Les erreurs commises dans les autres directions restent toutefois acceptables.

En résumé, afin d'optimiser les performances de cette approche, il est possible :

$\Rightarrow$ d'orienter le maillage régulier de manière à minimiser l'inclinaison des fractures.

$\Rightarrow$ de raffiner, autant que possible, de manière à diminuer l'erreur de géométrie.

Néanmoins, quelle que soit la configuration considérée, la modélisation de l'écoulement par cette approche est tout à fait acceptable étant donné les précisions obtenues. La validation du transport fournira un critère supplémentaire pour juger de la qualité de l'estimation de flux.

3.4.3 Transport

L'approche fournissant des résultats corrects pour l'écoulement et étant donné que le tenseur de dispersion est évalué de la même manière que le tenseur de perméabilité, l'évaluation du flux massique devrait être, elle aussi, satisfaisante. Afin de le vérifier et de

Transmissivité $m^2.s^{-1}$	porosité	diffusion	ouverture m	Inclinaison
$1.43.10^{-07}$	0.055	$1.74.10^{-04}$	10^{-9}	$\theta = 0.$, $\beta = 26.57$

Tab. 3.14 – Fracture unique 3D : Propriétés

valider la correction apportée au coefficient de porosité, les résultats de la modélisation du transport par l'approche Smeared Fractures vont être évalués par comparaison avec ceux obtenus par une modélisation classique d'une fracture unique (modélisée par un plan horizontal).

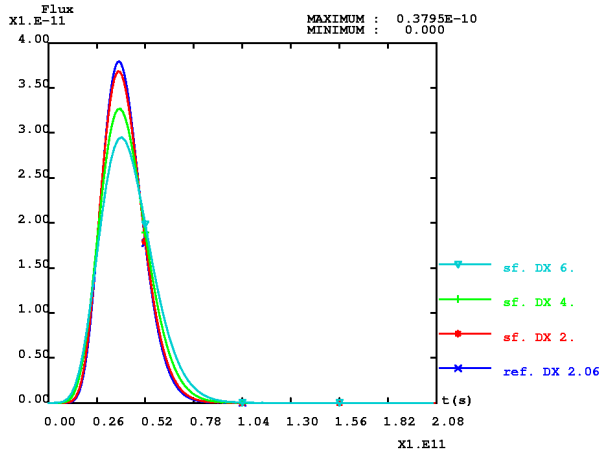
Transport sans diffusion matricielle

- Objectif : Qualification du transport.
- Géométrie : une fracture sans la matrice, se référer aux tableaux 3.11 pour les caractéristiques de la fracture, inclinaison : $\theta = 0$ $\beta = 26.57$. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.
- Condition d'écoulement : gradient de charge variable.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée dans la fracture, concentration nulle sur les faces d'entrée du flux.

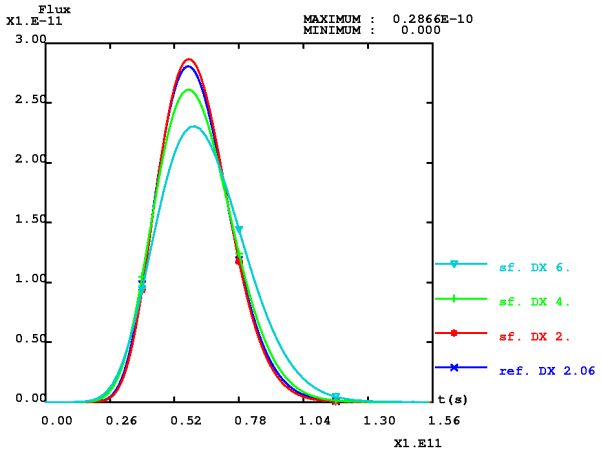
La validation du transport est effectuée en considérant la fracture précédente avec des angles d'inclinaison $\theta = 0.$ et $\beta = 26.57$ (tableau 3.14). L'évaluation du flux massique étant obtenue de la même manière que celle du flux hydrique, la modélisation du transport, en négligeant le phénomène de diffusion matricielle, ne devrait pas poser de difficulté. Afin d'évaluer la qualité des résultats, les flux massiques simulés sortant de la fracture sont comparés à ceux obtenus pour une représentation plane de la fracture à laquelle sont affectées les propriétés (perméabilité, porosité, coefficient de dispersion) classiquement corrigées d'un facteur $\frac{e}{\Delta}$. Cette correction vient de ce que la fracture est modélisée avec une ouverture Δ et non e. Ayant constaté que la précision de l'approche dépendait de la direction de l'écoulement dans la fracture, différentes directions d'écoulement sont considérées.

Les courbes 3.26 présentent les flux massiques obtenus à la sortie de la fracture pour les différentes directions d'écoulement. La courbe bleue correspond toujours au calcul de référence.

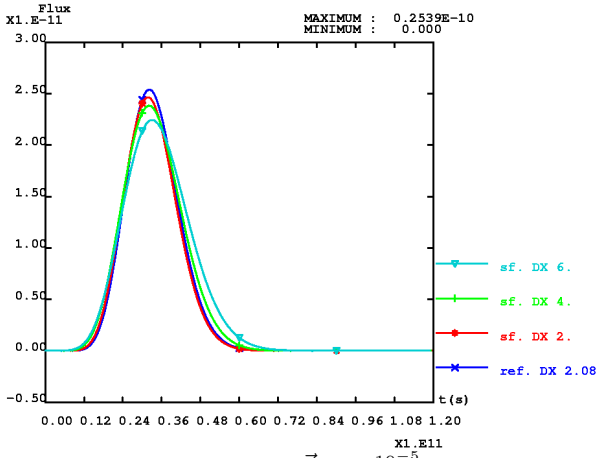
Pour des gradients de charge orientés suivant les directions principales utilisées lors du calcul des tenseurs équivalents, écoulement 1 et 2, les courbes de flux massiques sont symétriques par rapport au temps de maximum de pic. Conformément aux observations en 2D, la variation de la discrétisation se traduit par une chute du maximum accompagnée par un étalement des courbes (figures 3.26a et b). Pour un gradient de charge de composantes non nulles suivant les directions principales, direction d'écoulement 3, les mêmes constatations peuvent être formulées. A la différence des écoulements 1 et 2, le traceur



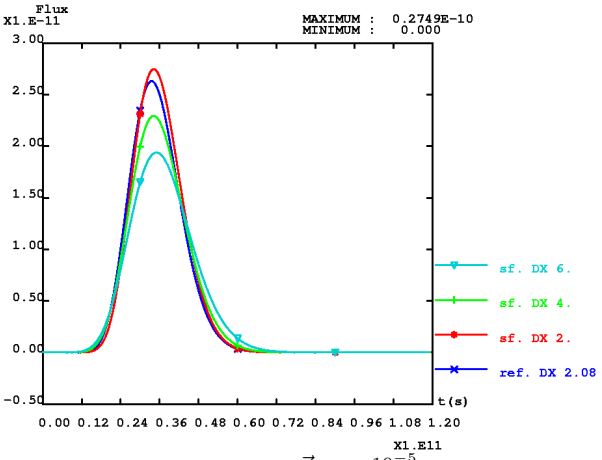
(a) Ecoulement 1 : $\vec{\nabla} h = \frac{10^{-5}}{\sqrt{3}}(1., 0, 0)$



(b) Ecoulement 2 : $\vec{\nabla} h = \frac{10^{-5}}{\sqrt{3}}(0, 1., 0)$



(c) Ecoulement 3 : $\vec{\nabla} h = \frac{10^{-5}}{\sqrt{3}}(1., 1., 1.)$



(d) Ecoulement 3 : $\vec{\nabla} h = \frac{10^{-5}}{\sqrt{3}}(1., 1., 1.)$

Fig. 3.26 – Flux massique sortant pour la direction x (gauche), pour la direction y (droite)

peut s'échapper par deux faces de la fracture, expliquant ainsi la présence de deux flux massiques (figures 3.26c et d) pour la direction d'écoulement 3. Les champs de concentrations, figure 3.27, montrent, en effet, que la trajectoire du traceur s'effectue suivant une diagonale de la fracture du haut vers le bas et s'échappe par le bas (suivant la direction y) et le fond (suivant la direction x) de la fracture. Quel que soit le modèle considéré, le comportement est semblable.

A partir de ces courbes, différentes remarques peuvent être formulées :

$\Rightarrow$ De la même manière que pour le 2D, la dispersivité des EFMH augmente avec le pas de discrétisation entraînant une chute du maximum de flux massique ainsi qu'un étalement des courbes. Néanmoins, la précision augmente lorsque la discrétisation est plus fine.

$\Rightarrow$ Afin d'éviter l'apparition de concentration négative, le critère à respecter pour conserver la monotonie des résultats reste le même qu'en 2D :

$$P_e^{fr} = \frac{\Delta}{\alpha} < 2 \tag{3.13}$$

$\Rightarrow$ L'évaluation du temps de sortie du maximum de pic est estimée avec une bonne précision (à quelques pour cent près). Les faibles écarts constatés sont dus à l'estimation approchée des dimensions du domaine consécutive à l'utilisation d'un maillage régulier.

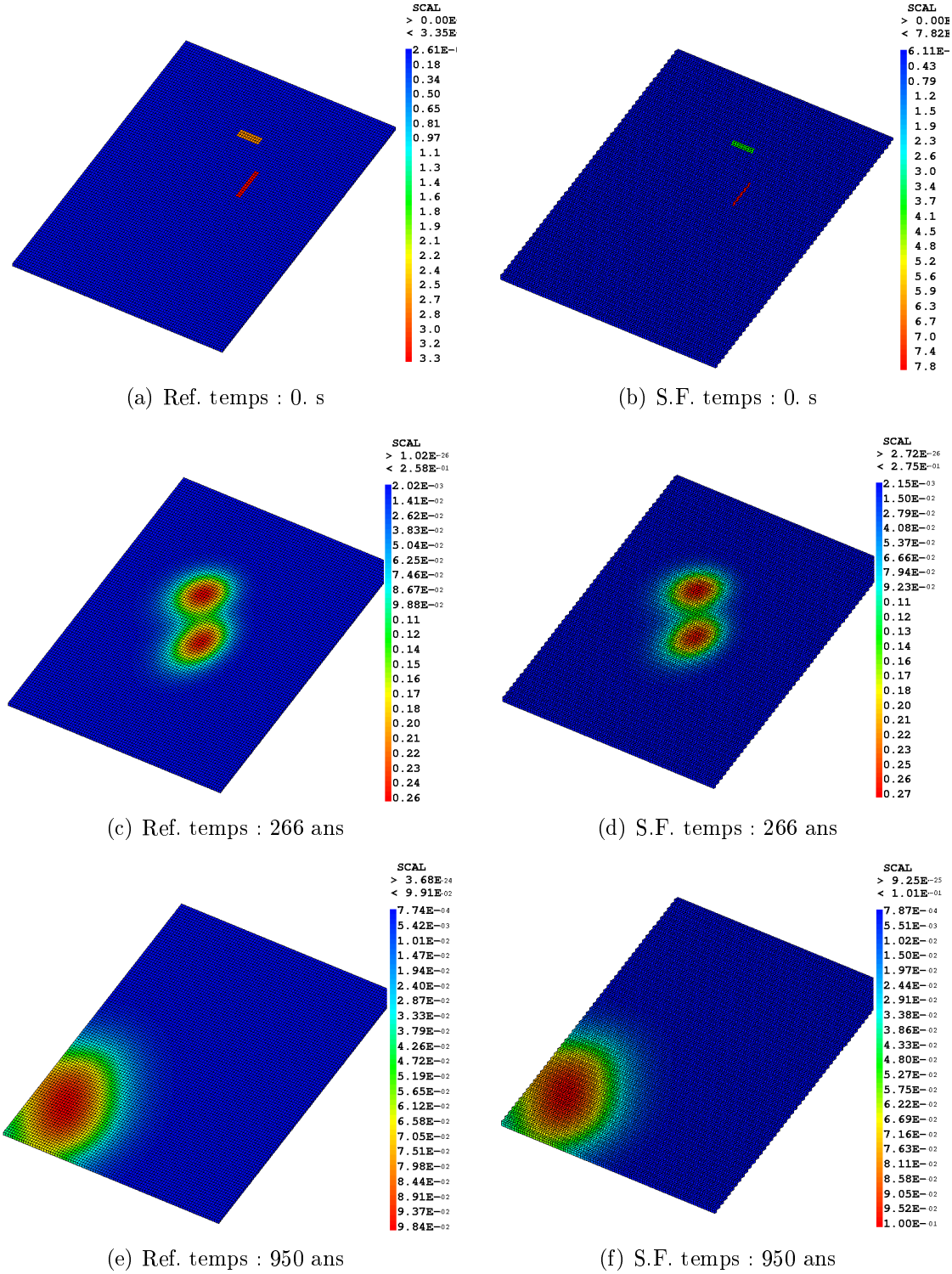
$\Rightarrow$ Pour un gradient de charge oblique par rapport aux directions principales, le pic ainsi que la répartition du flux massique sur les deux faces de sortie, est correctement modélisé.

Quelle que soit la direction de l'écoulement, la modélisation de l'écoulement et du transport est envisageable avec cette approche dans un réseau de fractures ; la diffusion matricielle étant pour l'instant négligée. Intégrons maintenant la diffusion matricielle au transport. Dans un premier temps, une étude sur l'influence de la surface de contact entre la matrice et la fracture va être abordée. Comme pour le cas 2D, on cherche les effets d'un maillage régulier sur la surface d'échange entre matrice et fracture pour la diffusion.

Influence d'une interface stratifiée sur la diffusion matricielle

- Objectif : déterminer l'influence de la surface de l'interface fracture-matrice sur la diffusion matricielle, quand celle ci est une surface brisée au lieu d'être une surface plane.
- Géométrie : matrice uniquement (0 fracture), $d = 10^{-11}\ m^2.s^{-1}$
- Conditions aux limites : concentration de 1 sur la bordure inférieure, flux diffusif nul sur le contour.

La surface de contact entre la fracture et la matrice est sur-évaluée dans l'approche Smeared Fractures. Cette erreur, en 3D, est plus importante, (élevée au carré), que celle commise en 2D car elle apparaît dans deux directions. Le bon comportement du code 2D



(a) Ref. temps : 0. s

(b) S.F. temps : 0. s

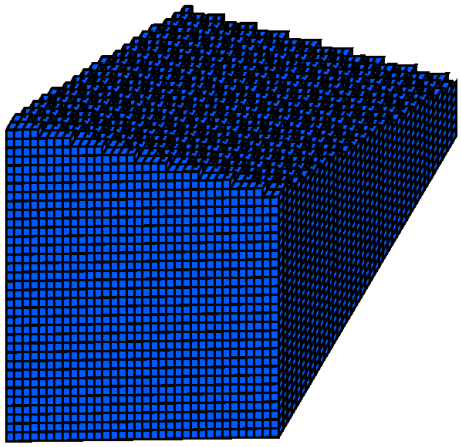
(c) Ref. temps : 266 ans

(d) S.F. temps : 266 ans

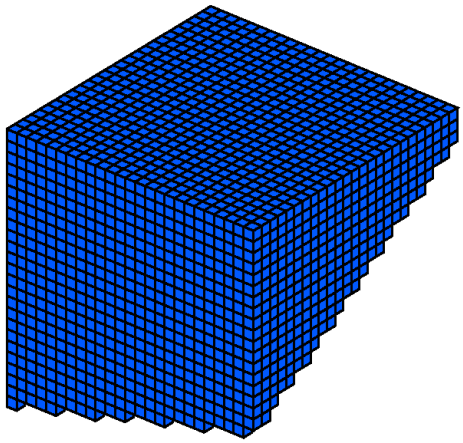
(e) Ref. temps : 950 ans

(f) S.F. temps : 950 ans

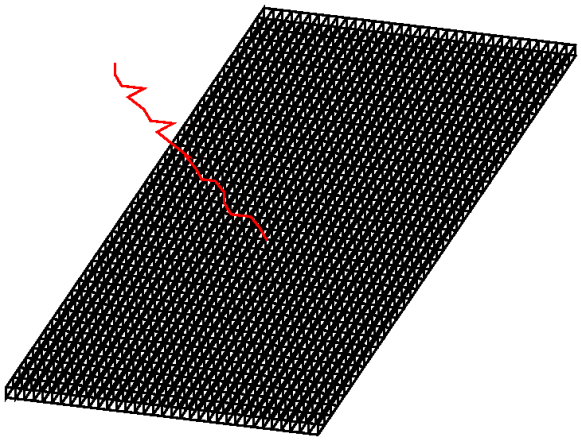
Fig. 3.27 – Fracture unique 3D : champ de concentrations, $\Delta = 2$ m, sans diffusion dans la matrice, direction d'écoulement 3



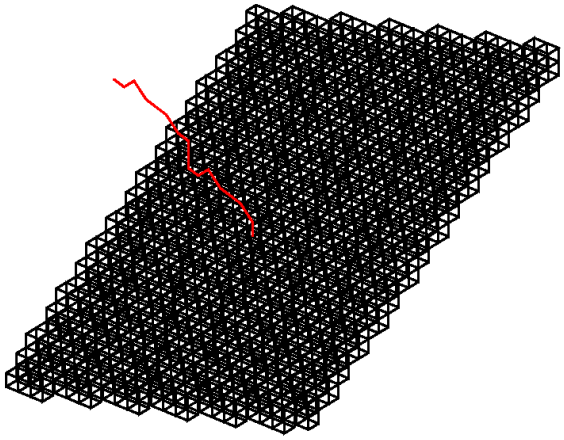
(a) Représentation naturelle (référence)



(b) Représentation par l'approche S.F.



(c) Axe considéré pour le tracé de l'évolution de concentration (référence)



(d) Axe considéré pour le tracé de l'évolution de concentration (S.F.)

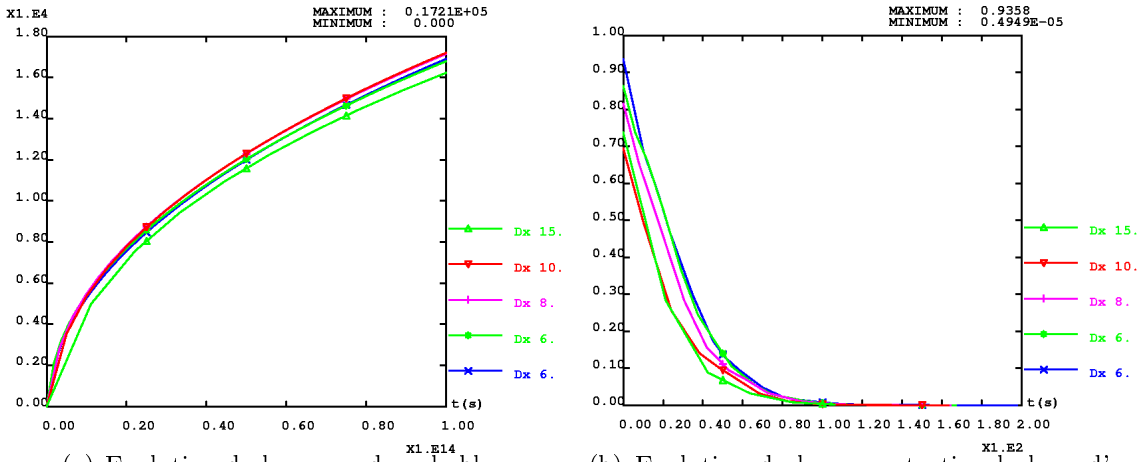
Fig. 3.28 – Bloc matriciel

n'implique pas un bon comportement pour des modélisations 3D. Ainsi, la modélisation du phénomène de diffusion, dans un bloc matriciel, est étudiée pour une surface de contact inclinée de 14.57° par rapport à l'axe x et de 32.62° par rapport à l'axe y. La modélisation de la diffusion pure dans ce bloc s'appuie sur deux modèles qui se différencient par la représentation de la surface de contact :

- représentée comme une surface plane dans le cas de référence (fig. 3.28a)
- puis de manière discontinue, (conséquence d'une modélisation par une approche Smeared Fractures) pour différentes discrétisations (fig. 3.28b).

Les résultats, obtenus pour un nombre de Fourier de 1, sont illustrés par les courbes 3.29.

Quels que soient la discrétisation et le modèle choisis, les résultats obtenus sont similaires (courbe 3.29a). La matrice se remplit de manière identique et à la même vitesse, quel que soit le modèle considéré. Une erreur est cependant commise. Cette erreur est liée



(a) Evolution de la masse dans le bloc

(b) Evolution de la concentration le long d'un axe présenté à la figure 3.28

Fig. 3.29 – Diffusion matricielle : sensibilité à la discrétisation

à la représentation d'une fracture sur un maillage régulier qui conduit à :

- une sur-évaluation de la surface de contact matrice-fracture. Précédemment, il a été établi (équation 2.113) :

  $$V_{sf} = \frac{\Delta}{e}|\cos\theta|(|\cos\beta| + |\sin\beta|)V_r$$

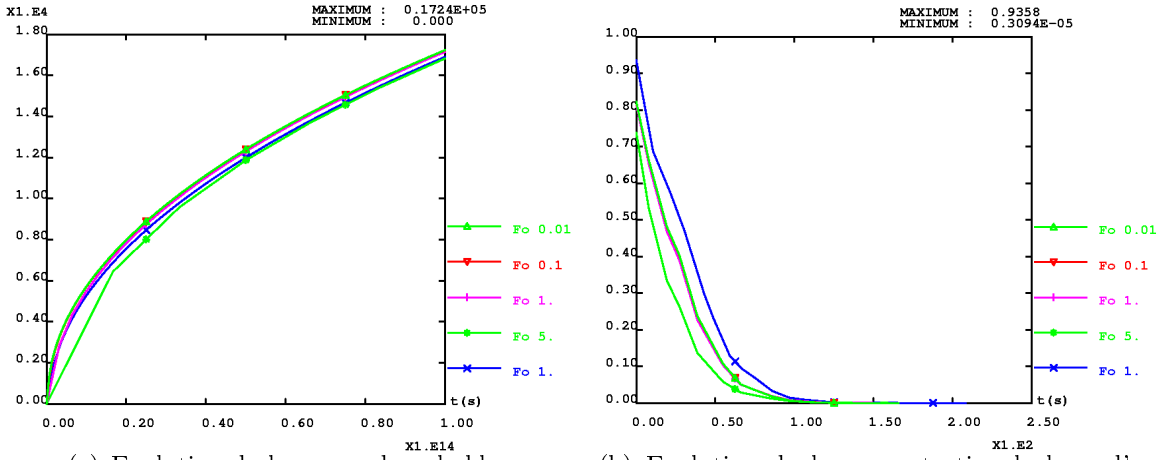
  L'erreur,Er, commise sur la surface de contact s'exprime donc en fonction de θ et β.

  $$Er = 1 - (|\cos\beta| + |\sin\beta|)|\cos\theta|$$

  Dans notre cas $Er = 34\%$.

- une sous-évaluation du volume de la matrice.
  L'utilisation d'un maillage régulier implique le choix de l'ouverture équivalente de la fracture. Plus le maillage est grossier, plus l'ouverture équivalente de la fracture est grande. Bien que prise en compte dans les propriétés équivalentes, cette variation d'ouverture conduit à sous-évaluer les volumes des blocs matriciels.

Les écarts constatés pour les concentrations (figure 3.29b) le long d'un axe perpendiculaire à la surface de contact sont une conséquence de la localisation différente des points de cet axe, variant suivant la discrétisation et le modèle (figure 3.28c et d). Néanmoins, ces courbes présentent des formes similaires indiquant une évolution semblable quels que soient la discrétisation et le modèle considérés. Lors de modélisation des transferts en milieux fracturés, le soluté pourra diffuser dans la matrice, en particulier en écoulements naturels (écoulements lents). Cependant, la profondeur de pénétration dans la matrice restera limitée (en particulier pour le granite). Aussi, dans cette étude c'est plutôt la précision au temps court qui est intéressante et l'on constate qu'à ces temps, les différences restent mineures.



(a) Evolution de la masse dans le bloc

(b) Evolution de la concentration le long d'un axe présenté à la figure 3.28

Fig. 3.30 – Diffusion matricielle : sensibilité au nombre de Fourier

Influence du nombre de Fourier

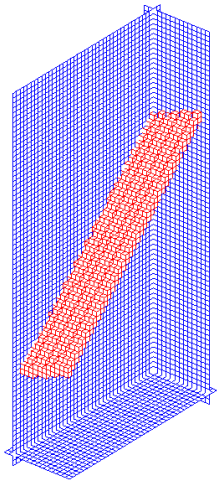
Les résultats 2D se sont avérés peu sensibles à la variation du nombre de Fourier, il devrait en être de même pour le 3D. Les deux modèles étudiés précédemment (fig. 3.28) vont de nouveau être considérés en s'intéressant, cette fois-ci, à l'influence du nombre de Fourier.

Comme précédemment, les résultats obtenus (courbes 3.30) sont peu influencés par une variation du nombre de Fourier. La modélisation de la diffusion matricielle, pour des géométries 3D, bien que moins précise que pour le 2D, semble donc être envisageable.

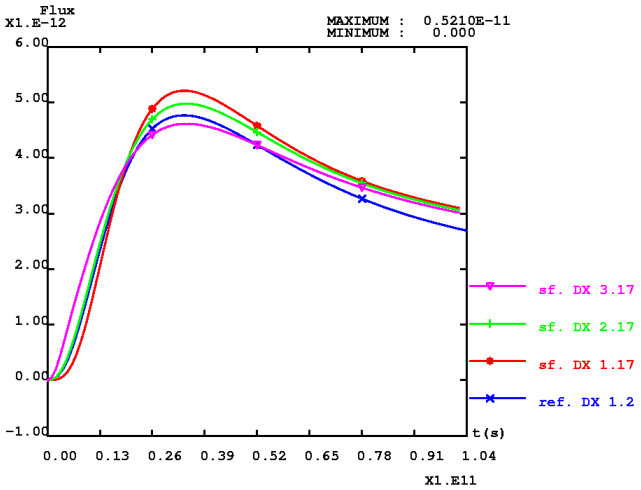
Transport avec diffusion matricielle

- Objectif : Qualification du transport.
- Géométrie : une fracture avec la matrice, se référer au tableau 3.11 pour les caractéristiques de la fracture, inclinaison : $\theta = 20.38^{\circ}$ $\beta = 44.56^{\circ}$. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.
- Condition d'écoulement : gradient de charge d'intensité variable, de direction $\vec{y}$.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée dans la fracture, concentration nulle sur les faces d'entrée du flux.

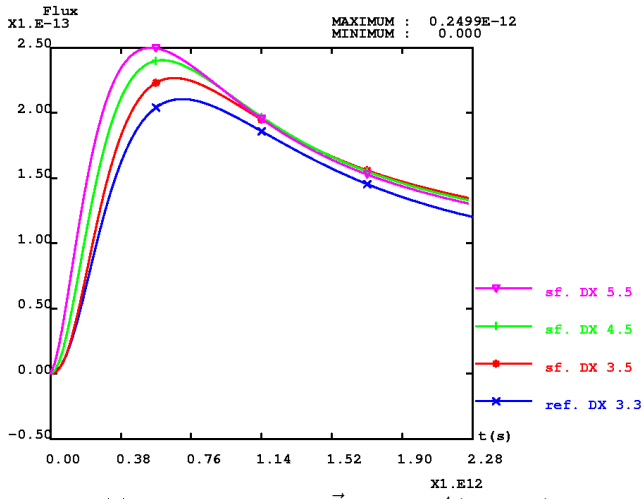
Les résultats précédents ont montré un bon comportement lors d'une modélisation par l'approche Smeared Fractures de l'écoulement et du transport quand la diffusion matricielle était supposée inexistante. La géométrie de l'interface, (non rectiligne), n'a que peu d'effets sur la modélisation de la diffusion dans la matrice. Ces deux résultats nous permettent d'envisager la modélisation de l'écoulement et du transport dans une fracture, en prenant en compte l'influence de la matrice. Cette modélisation est effectuée



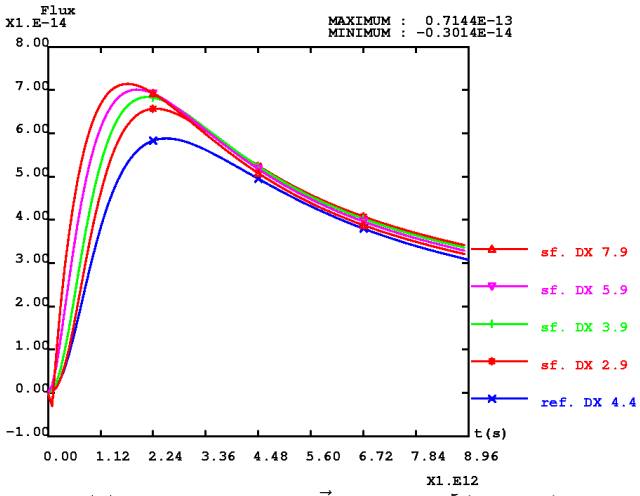
(a) Fracture considérée



(b) Ecoulement 1 : $\vec{\nabla}h = 5.10^{-4}(0., 1, 0)$



(c) Ecoulement 2 : $\vec{\nabla}h = 10^{-4}(0., 1, 0)$



(d) Ecoulement 3 : $\vec{\nabla}h = 5.10^{-5}(0., 1, 0)$

Fig. 3.31 – Flux massique sortant direction y

pour une fracture d'inclinaison quelconque, ($\theta = 20.38^{\circ}$, $\beta = 44.56^{\circ}$, fig. 3.31a), pour différentes intensités de gradient de charge.

Suivant la vitesse de l'écoulement dans la fracture, le maximum des courbes de flux massique est plus ou moins important. La valeur du maximum du flux massique décroît, en effet, avec la vitesse d'écoulement. Cette décroissance s'accompagne d'un étalement des courbes ainsi que d'un retard dans le temps d'arrivée du maximum du flux massique (figure 3.31b,c et d). Les résultats obtenus avec l'approche smeared fractures présentent des maximums supérieurs à celui obtenu par le modèle de référence. Suivant l'intensité de l'écoulement, deux comportements de l'approche Smeared Fractures peuvent être identifiés.

- Un premier type, figure 3.31b, rejoint le comportement précédemment observé, lors

de la modélisation du transport sans la matrice. Le maximum des courbes de flux massique obtenues avec l'approche Smeared Fractures chute, tandis que la discrétisation est plus grossière. La chute du maximum s'accompagne d'un étalement des courbes.

- Le deuxième type de comportement, figures 3.31c et d, au contraire du premier, voit le maximum du flux massique diminuer avec la discrétisation. Le temps d'arrivée du maximum est retardé tandis que la forme générale des courbes est plus étalée. Les courbes obtenues par l'approche Smeared Fractures convergent vers la solution de référence pour une discrétisation suffisamment fine.

La forme plus ou moins étalée des courbes, suivant l'écoulement, traduit l'importance de la diffusion matricielle (déjà commenté précédemment). L'influence de la matrice est visible en traçant les champs de concentration. Pour l'écoulement 3, le soluté pénètre de manière importante dans la matrice (figure 3.32).

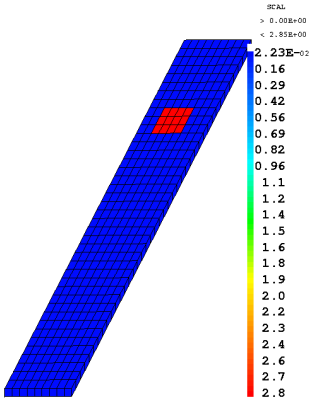
Ces deux comportements ont déjà été observés en 2D. Suivant que le transport est plus ou moins influencé par la diffusion matricielle et le maillage adapté aux phénomènes modélisés, les temps d'arrivée sont plus ou moins bien estimés.
Pour une diffusion matricielle importante, (figures 3.31c et d), un mauvais choix de la discrétisation se traduit par une mauvaise modélisation de la diffusion matricielle. Ainsi, le temps du maximum de pic est sous-évalué tandis que le maximum est beaucoup trop important, ce qui signifie, entre autre, que la masse diffusant dans la matrice n'est pas bien modélisée. Pour des discrétisations respectant le critère II énoncé en 2D, relation 3.14, le temps d'arrivée est correctement modélisé et les courbes convergent vers la solution de référence.

$$\text{Critére II } \Delta < \sqrt{\frac{3}{10} d.R_p.\tau_w} \tag{3.14}$$

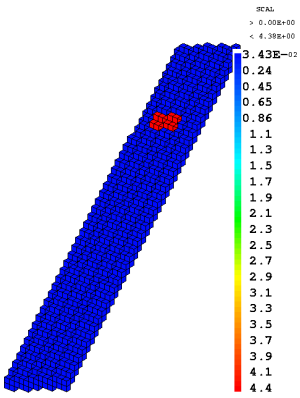
Si la diffusion matricielle n'est pas suffisante pour contrôler le transport, le temps d'arrivée va être correctement estimé. Le raffinement entraîne la convergence des résultats. Le critère II reste toujours valable pour une bonne modélisation de la diffusion matricielle. La diffusion jouant un rôle moins important, le non respect de ce critère, moins pénalisant pour l'estimation des temps d'arrivée, conduit à une mauvaise estimation du maximum du flux massique.
De manière générale, l'approche Smeared Fractures semble quelque peu sous-évaluer l'importance de la diffusion matricielle, le maximum des courbes de flux massique reste, en effet, supérieur à celui du modèle de référence tandis que leurs pentes sont supérieures.

3.4.4 Synthèse sur la validation de l'approche Smeared Fracture 3D

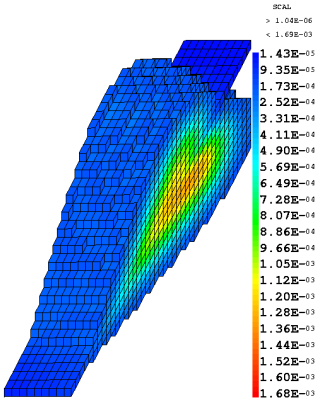
Les différents tests de validation de l'approche Smeared Fractures indiquent que celle-ci fournit des résultats tout à fait acceptables pour :



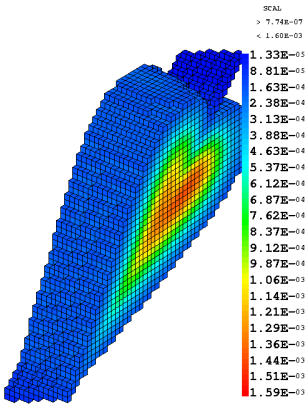
(a) Ref. temps : 0. s



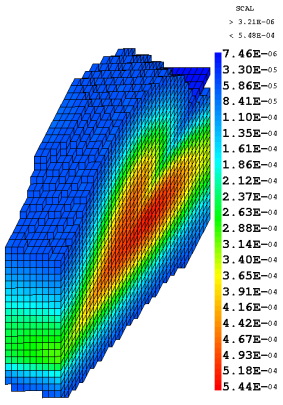
(b) S.F. temps : 0. s



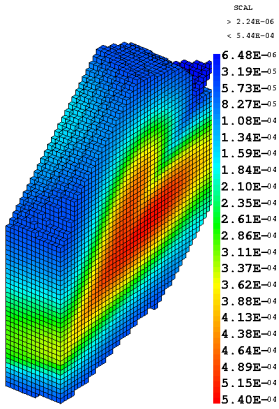
(c) Ref. temps : 266 ans



(d) S.F. temps : 25000 ans



(e) Ref. temps : 63000 ans



(f) S.F. temps : 63000 ans

Fig. 3.32 – Fracture unique 3D : champ de concentrations, $\Delta = 4$ m, condition d'écoulement 3

- ⋆ l'estimation des flux hydriques quelles que soient la discrétisation et l'orientation du gradient de charge (erreur inférieurs à 20%)
- ⋆ l'estimation des temps de sortie du maximum de flux massique (erreur de quelques pour cent).

La valeur du maximum du flux massique dépend quant à elle de la discrétisation spatiale et temporelle choisie. En effet, la dispersivité liée à l'utilisation des EFMH, conduit à un étalement plus prononcé des courbes de flux massiques. Néanmoins, dans des conditions de régimes dispersifs dans les fractures ou pour une diffusion matricielle importante, cette dispersivité numérique est masquée.
Cette approche a été développée afin de modéliser les transferts en milieux fracturés en écoulements naturels, dans le cadre des études liées à la faisabilité des stockages de déchets radioactifs. Dans ces études, la diffusion matricielle est importante et justifie donc l'utilisation de ce type d'approche.
Pour le transport, le respect des deux critères, précédemment établis pour le 2D, est nécessaire à la conservation de la monotonie de la solution et à la bonne modélisation de la diffusion matricielle. Ainsi,

- ⋆ pour la résolution du transport dans le réseau de fractures seul : $\Delta < 2\alpha$
- ⋆ pour la résolution du transport dans les fractures et la matrice : $\Delta < \sqrt{\frac{3}{10} d.R_p.\tau_w}$

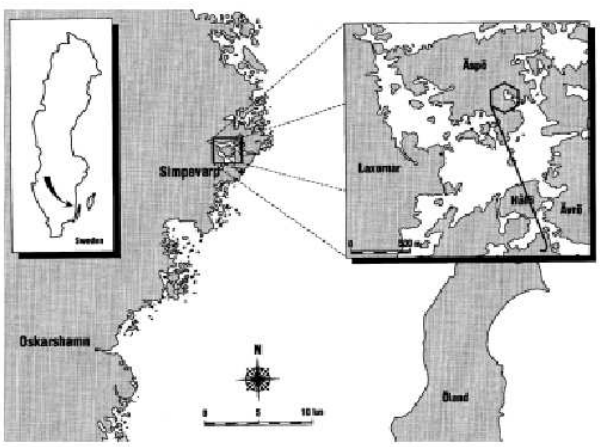
Chapitre 4

Application au site expérimental de Äspö

Dans le cadre de la problématique du stockage de produits radioactifs à vie longue, différents sites expérimentaux ont été créés afin de caractériser des milieux susceptibles d'accueillir un stockage de déchets nucléaires, d'établir une base de données nécessaires à la compréhension des phénomènes physiques présents, de fournir aux modélisateurs les informations nécessaires au conditionnement des modèles ou encore de tester en grandeur réelle les prototypes pouvant être utilisés sur le site. La prédiction des sorties d'éléments radioactifs d'un site de stockage repose, en effet sur la modélisation et nécessite de gros efforts de caractérisation de site. La France ne disposant pas de laboratoire implanté en milieu granitique, l'ANDRA collabore pour ce type de roche encaissante avec des laboratoires étrangers, entre autres le SKB (Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, SKB) sur le site d'Äspö en Suède.

4.1 Présentation du site de Äspö

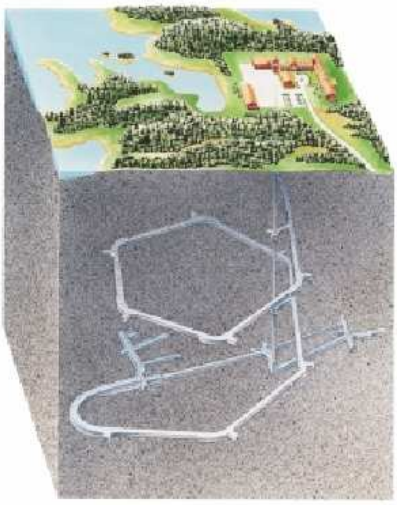
Après des investigations géologiques autour de l'île de Äspö commencées en 1986, celle-ci fut choisie en 1988 pour accueillir le futur laboratoire souterrain. L'île de Äspö se situe à proximité de Oskarshamn dans le sud-est de la Suède (fig. 4.1). Le laboratoire, dont la construction s'échelonna d'octobre 1990 à l'été 1995, comprend des bureaux, un espace public et un tunnel souterrain atteignant la profondeur de 460 m (fig. 4.1). Il fut construit dans le but de constituer un site réaliste, pour la recherche, le développement et informer la population sur la problématique des sites de stockage de déchets radioactifs. Dans un but expérimental, ce site a été choisi pour son aspect fracturé et ses vitesses d'écoulements rapides, permettant de limiter la durée des différentes expériences. Un grand nombre d'expériences sont conduites dans les branches du tunnel avec l'objectif de comprendre l'action des différentes barrières (enveloppe de cuivre entourant les déchets, bouchon d'argile, barrière géologique) sur la rétention des substances radioactives (fig.



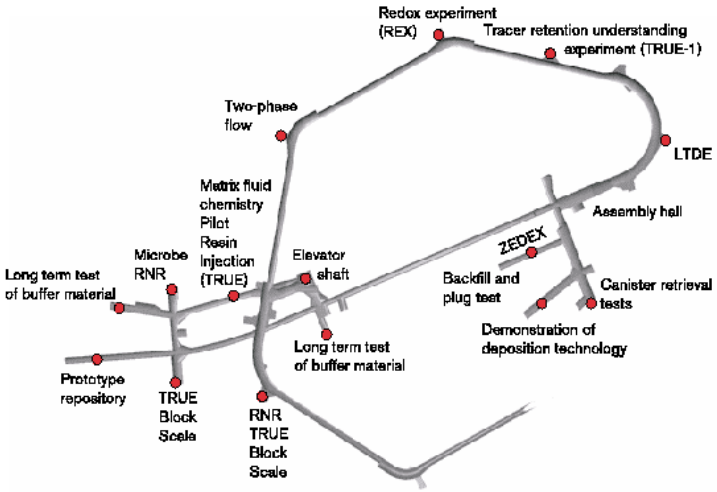
(a) Position géographique de Äspö.

(b) Village scientifique de Äspö.

Fig. 4.1 – Localisation de l'île de Äspö



(a) Le 'Äspö Hard Rock Laboratory' : tunnel de 3.600 m de long et de profondeur maximale de 460 m.



(b) Localisation de différentes expériences.

Fig. 4.2 – Le laboratoire expérimental de Äspö

4.2).
SKB, qui gère ce site, propose un accès à différentes organisations nationales travaillant sur le thème du stockage des déchets nucléaires (ANDRA pour la France, JNC pour le Japon, POSIVA pour la Finlande, NAGRA pour la Suisse...). Ainsi, les résultats, les différentes approches de calcul et d'analyse de chaque équipe, peuvent être confrontés.

Différentes Tâches successives se sont échelonnées tout au long de l'exploitation du site. Chaque organisation propose une ou plusieurs équipes de modélisation suivant l'intérêt porté à la Tâche en cours. Actuellement, ces Tâches sont au nombre de six et couvrent

différents aspects des problèmes rencontrés en milieux fracturés (tab. 4.1). On peut par exemple citer la Tâche 4 qui portait sur la modélisation de l'expérience TRUE-1, à l'échelle d'une fracture ou la Tâche 6 qui s'appuie sur les données de TRUE-BLOCK-SCALE à l'échelle d'un bloc fracturé de 200x200x200 m pour différentes échelles de temps, (temps courts : test de traçage et temps longs : condition de fermeture de site). D'autres Tâches ont aussi été lancées afin de traiter des aspects hydrogéochimiques, Tâche 5, de l'influence de la construction d'un tunnel sur l'hydraulique du site, Tâche 3. Aujourd'hui, seule la tâche 6 est encore active. Le choix des approches de modélisation reste à l'initiative des différentes équipes. Il existe, ainsi, une large représentation des différentes approches de modélisation des transferts en milieux fracturés, [Selroos et al. 2002]. Ces approches et les résultats obtenus sont discutés, commentés et comparés par les membres de la TASK-FORCE, nom donné à l'ensemble des équipes travaillant sur Äspö. Cette TASK-FORCE constitue un des meilleurs forums d'intercomparaison et de discussion des approches de modélisation des milieux fracturés.

L'approche Smeared Fractures fait partie de ces approches et sera donc utilisée et confrontée aux autres approches dans le cadre de la Tâche 6. Des modélisations de l'écoulement et du transport dans un bloc fracturé sont effectuées pour des géométries 2D et 3D.

4.2 Tâche 6

La Tâche 6 intitulée "Performance Assessment Modeling Using Site Characterisation Data (PASC)" est entreprise dans le but de prédire le transport d'un contaminant dans un bloc fracturé à l'échelle hectométrique. Plusieurs objectifs sont visés, [Benabderrahmane et al. 2000] :

⇒ Déterminer quelles simplifications peuvent être apportées au modèle de caractérisation de site, (modèle de caractérisation de site, SC), afin de construire le modèle utilisé pour la prédiction, (modèle de performance, PA).

⇒ Evaluer l'intérêt des informations issues de tests de traçage (écoulements rapides), lorsque l'on se place dans les conditions de fermeture de site (écoulements lents).

⇒ Déterminer les données nécessaires à l'utilisation du modèle PA.

⇒ Comprendre l'écoulement et le transport du site grâce au modèle SC.

Les conditions de travail de cette Tâche peuvent être de deux types : des conditions d'écoulements forcés (test de traçage) ou des conditions dites 'de fermeture de site', c'est à dire des conditions d'écoulements peu rapides dans lesquelles se trouveront les déchets nucléaires après fermeture du site de stockage. Après avoir stocké les déchets radioactifs, le site de stockage est en effet rebouché. Les conditions hydrauliques du site de stockage redeviennent alors celles imposées par le milieu naturel. En conditions naturelles, les processus sont beaucoup plus lents et les tests de traçage ne sont plus envisageables (temps beaucoup trop longs). L'idée retenue est donc de :

	Tâche 1 : Tests de pompage, de traçage et de dilution à l'échelle kilométrique et évaluation des modélisations	Tâche finie (1992-1994)
	Tâche 2 : Expériences de traçage à l'échelle métrique	Tâche finie (1992-1994)
	Tâche 3 : Impact de la construction du tunnel sur l'hydraulique du site	tâche finie (1994-1996)
	Tâche 4 : Expérience TRUE-1 (Tracer Retention and Understanding Experiments)	Tâche finie (1996-1998)
	Tâche 5 : Intégration de l'hydrogéologie et hydrogéochimie dans l'étude de l'impact de la construction du tunnel sur le site de Äspö	Tâche finie (1998-2002)
	Tâche 6 : Construction d'un modèle d'évaluation de performance de confinement (modèles PA) utilisant les données de caractérisations du site	En cours

Tab. 4.1 – Les différentes Tâches effectuées à Äspö

- ⋆ caractériser, dans un premier temps, l'environnement des déchets par des tests de traçage en écoulement forcé
- ⋆ construire, dans un second temps, les modèles d'évaluation de site (modèles PA), afin de prédire les sorties des produits radioactifs.

Les expériences de traçages en écoulement rapide ne sont pas (ou peu) sensibles aux processus lents éventuellement présents en écoulement naturel. Par conséquent, l'apport de ces tests, pour la modélisation en conditions naturelles, reste limité. Plus largement, la Tâche 6 vise à faire le pont entre les modèles de caractérisation de site (SC) utilisés pour les conditions expérimentales et les modèles d'évaluation de site (PA) utilisés pour les conditions naturelles. De fait, il faut évaluer les simplifications utilisées dans les modèles PA, évaluer les contraintes imposées par les tests de traçage, rechercher les données nécessaires aux simulations à l'échelle du site en condition naturelle. Les simulations effectuées portent sur le bloc fracturé (Tâche 6C, 6D et 6E) du site de l'expérience TRUE-BLOCK-SCALE, figure 4.2b. Il fait 200 m de coté et regroupe 11 fractures déterministes, 25 fractures synthétiques et 5660 fractures de fond. Il a été construit à partir d'une combinaison de fractures réelles et de fractures générées de manière stochastique, après analyse de différents tests de traçage effectués sur le site de TRUE-BLOCK-SCALE. La géométrie, les propriétés hydrauliques et de transport sont fournies, [Dershowitz et al. 2003].

4.3 Etude d'un réseau 2D de fractures

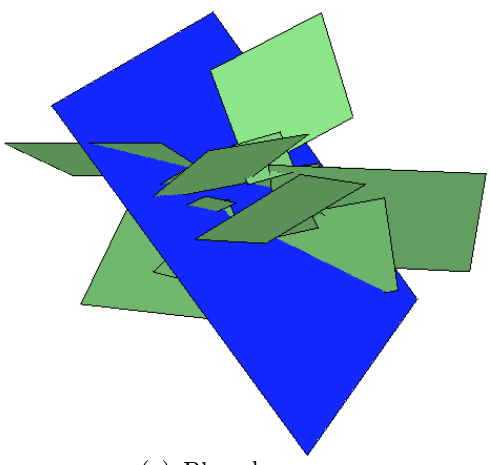
L'objectif est de démontrer, d'une part, les possibilités d'utilisation de l'approche Smeared Fractures, appliquée à un bloc fracturé composé des 11 fractures déterministes, de propriétés et de géométries rencontrées en milieu naturel. On regardera d'autre part, les influences de deux types de fractures ainsi qu'une comparaison entre l'action d'une matrice altérée et non altérée. Deux difficultés vont donc être abordées :

$\Rightarrow$ difficultés géométriques liées au milieu modélisé

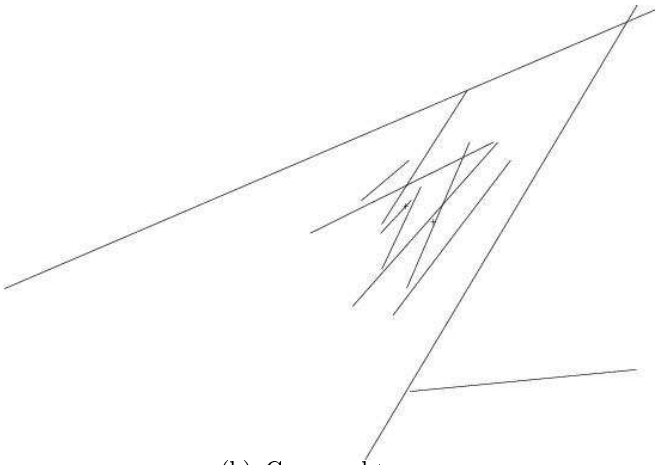
$\Rightarrow$ difficultés liées à l'hétérogénéité du milieu

La géométrie 2D de cette simulation est obtenue à partir d'une coupe de la géométrie 3D du bloc fracturé, figures 4.3a et b, fournie par la Tâche 6C. Étant donné qu'en 3D, les fractures sont connectées, une connectivité maximale, obtenue en étendant les longueurs des fractures jusqu'aux limites du domaine, est considérée, figures 4.3c et d.

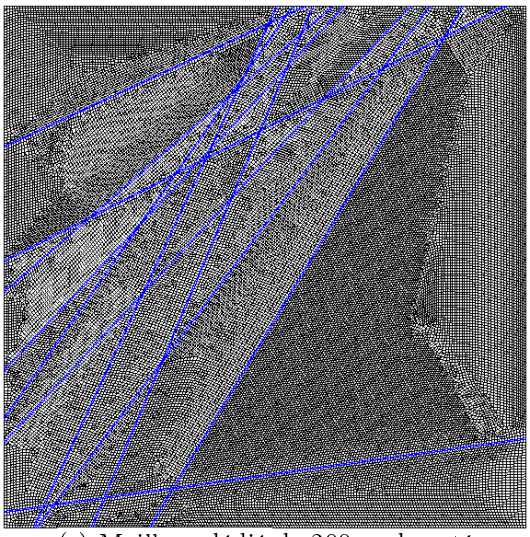
A partir de cette géométrie, un maillage Smeared Fractures et un maillage dédié sont générés. Ce dernier permettra de réaliser des calculs servant de référence. [Dershowitz et al. 2003] fournissent les caractéristiques des fractures classées en deux types (fig. 4.4 et 4.5). Ces deux types de fracture se différencient par les matériaux entourant les fractures. Quatre matériaux différents entourent les fractures de types I (bordure de fracture, matériaux de remplissage, cataclasite, granite altéré), alors que deux matériaux seulement sont présents autour des fractures de type II (bordure de fracture et granite altéré). La différence entre ces deux types de fracturation est liée à leur mode de formation : les fractures de type I se classent plutôt dans la catégorie des fractures



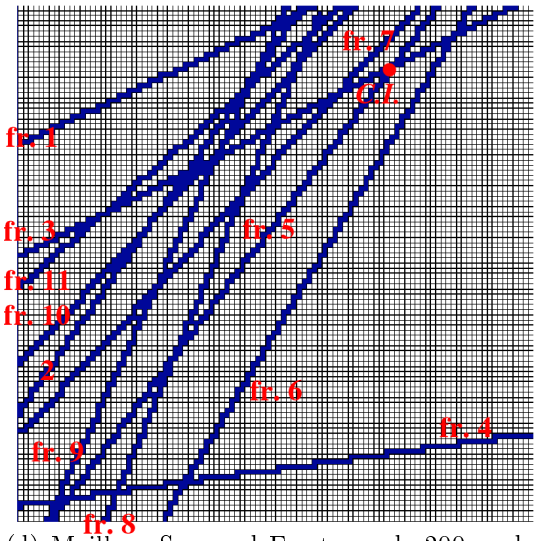
(a) Plan de coupe



(b) Coupe obtenue



(c) Maillage dédié de 200 m de coté



(d) Maillage Smeared Fractures de 200 m de coté

Fig. 4.3 – Création du maillage Smeared Fractures

Fracture	angle	longueur	centre	ouverture (réelle)	ouverture (type I)	ouverture (type II)
1	25.	127.74	57.88 173.	$2.917.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
11	41	167.12	63. 145.	$2.010.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
3	27.	215.22	96. 151.	$1.437.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
2	55.	193.2	55. 121.	$7.941.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
10	47.	191.1	65. 130.	$5.404.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
9	65.	220.68	58. 100.	$1.469.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
7	47.	228.62	78. 116.	$1.740.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
8	67.	217.24	76. 100.	$1.129.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
5	53.	250.44	88. 100.	$6.807.10^{-5}$	0.026	6.10^{-4}
6	59.	233.32	116. 100.	$1.874.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}
4	8.	201.96	100. 20.	$1.342.10^{-4}$	0.026	6.10^{-4}

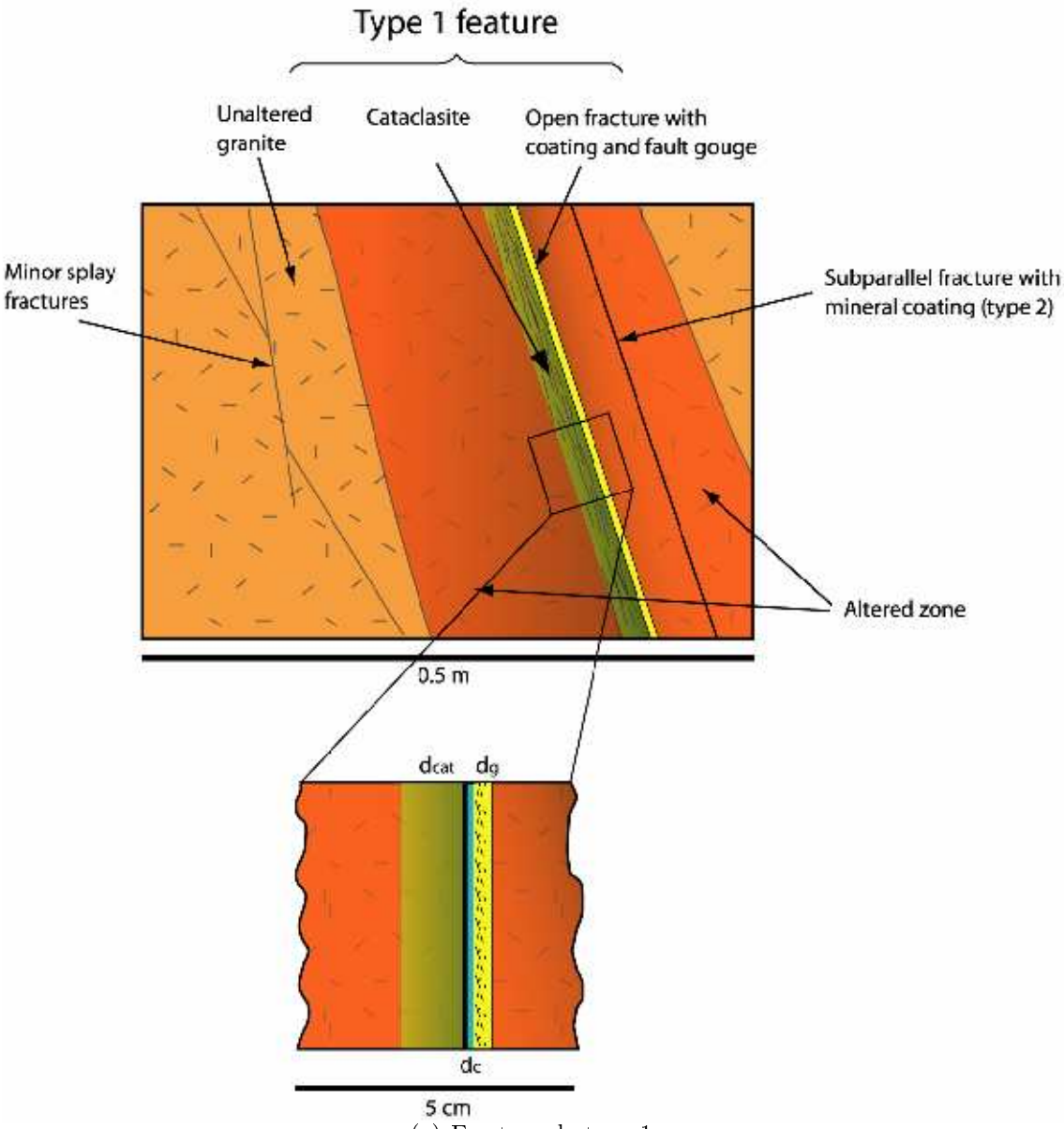
Tab. 4.2 – Caractéristiques géométriques des fractures

de cisaillement, tandis que les fractures de type II plutôt comme des fractures dilatées. Ainsi, à chaque fracture est associé un facteur de complexité traduisant la répartition des différents types de fracturation la composant. Lors de cette modélisation, différentes configurations vont être étudiées pour lesquelles toutes les fractures vont être prises de type I puis de type II constituant les cas extrêmes de répartition des différents types de fracturation. Suivant le type de fracturation, la diffusion dans la matrice va être plus ou moins favorisée. Cette étude va donc permettre de déterminer la rétention minimale et maximale des différentes zones voisines des fractures.

A partir des caractéristiques des différentes zones constituant les types de fractures, une homogénéisation incorporant les zones de cataclasite, gouge et fracture coating, va être effectuée. En écoulement lent, le traceur envahit immédiatement ces différentes zones. Ces zones ont, par conséquent, le même comportement que la fracture, justifiant ainsi cette homogénéisation. Pour l'écoulement, la conservation du flux hydrique implique la conservation de la transmissivité $T_{eq} = T_{fr}$. Pour le transport, la variation du volume de la fracture va être corrigée en affectant une porosité équivalente $\omega_{eq} = \frac{e\omega_{fr}+\sum_i e_i\omega_i}{e_{eq}}$ avec e_{eq} l'ouverture équivalente, $e_{eq} = \sum e_i$. Les ouvertures variant peu d'une fracture à l'autre, une ouverture équivalente moyenne est affectée à l'ensemble des fractures, $e_{eq} = 0.026$ pour le type I et $e_{eq} = 6.10^{-4}$ m pour le type II. Ainsi, suivant le type de fractures considéré, deux jeux de paramètres vont être utilisés. Les tableaux 4.2b et 4.3b présentent les caractéristiques des fractures suivant le type modélisé. Les caractéristiques des différents matériaux proches des fractures sont présentées par les tableaux des figures 4.4b et 4.5b.

Les conditions aux limites imposées sont :

- Dirac de concentration (masse unitaire) stocké à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 4.3d.
- Concentration nulle sur tout le contour du bloc.
- Gradient de charge variable, 10^{-3} ou 5.10^{-4} : vitesses lentes typiques des écoulements après fermeture du site de Äspö.

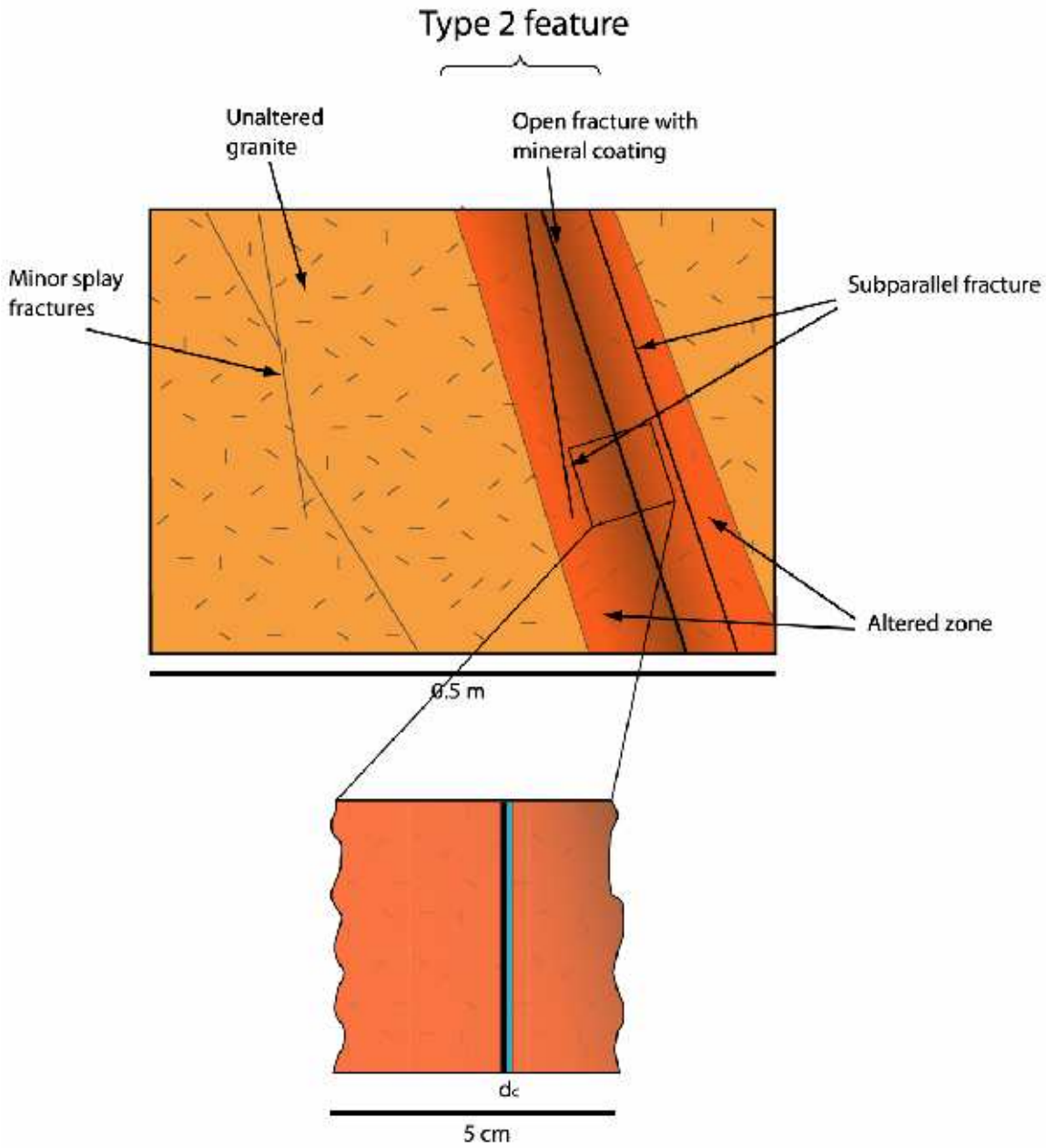


(a) Fracture de type 1

Rock type	Extent (cm)	Porosity (%)	Formation factor ( )
Intact wall rock		0.3	7.E-5
Altered zone	20	0.6	2.E-4
Cataclasite d_{cat}	2	1	5.E-4
Fault gouge d_g	0.5	20	5.E-2
Fracture coating d_c	0.05	5	6.E-3

(b) Propriétés de la fracture de type 1

Fig. 4.4 – Caractéristiques des fractures de type 1



(a) Fracture de type 2

Rock type	Extent (cm)	Porosity (%)	Formation factor ( )
Intact wall rock		0.3	7.E-5
Altered zone	10	0.6	2.E-4
Fracture coating d_c	0.05	5	6.E-3

(b) Propriétés de la fracture de type 2

Fig. 4.5 – Caractéristiques des fractures de type 2

Fracture	transmissivité	porosité (type I)	porosité (type II)
1	$4.02.10^{-7}$	0.059	0.21
11	$1.91.10^{-7}$	0.056	0.21
3	$9.76.10^{-8}$	0.053	0.21
2	$2.98.10^{-8}$	0.051	0.21
10	$1.38.10^{-8}$	0.05	0.21
9	$1.02.10^{-7}$	0.054	0.21
7	$1.43.10^{-7}$	0.055	0.21
8	$6.02.10^{-8}$	0.052	0.21
5	$2.19.10^{-8}$	0.051	0.21
6	$1.66.10^{-7}$	0.055	0.21
4	$8.51.10^{-8}$	0.053	0.21

Tab. 4.3 – Caractéristiques physiques des fractures

Afin de mieux comprendre le comportement du traceur dans le bloc fracturé, deux études ont été menées, avec ou sans la prise en compte de la diffusion dans la matrice.

Transport sans diffusion matricielle

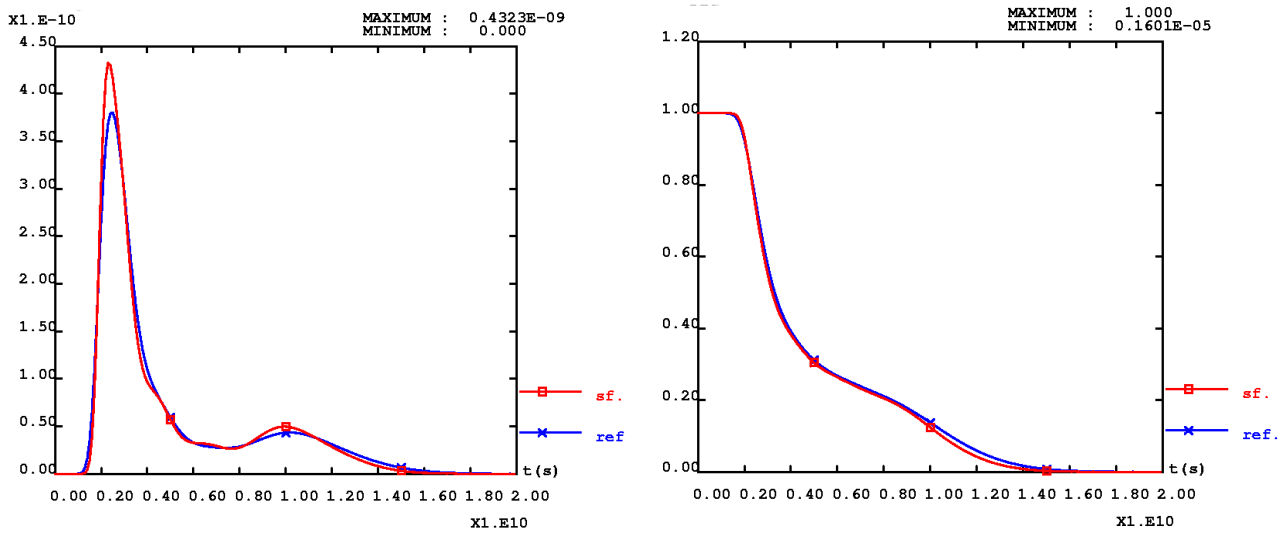
- Objectif : étude du comportement d'un traceur dans un réseau de 11 fractures.
- Géométrie : 11 fractures Type I sans matrice, se référer aux tableaux 4.2 et 4.3 pour les caractéristiques des fractures. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.
- Condition initiale : Masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 4.3d.
- Conditions aux limites : gradient de charge de, 10^{-3}, concentration nulle sur tout le contour du bloc.

La discrétisation a été établie à partir du critère I.

1. Dans un premier temps, les résultats de l'étude du comportement d'un traceur dans le réseau de 11 fractures vont être commentés.
   Les commentaires s'appuieront sur les résultats du modèle associé à l'approche Smeared Fractures.
2. Dans un second temps, le bon comportement de l'approche à un niveau de détail inférieur, (bonne précision sur les courbes de flux massiques sortant pour chaque fracture), sera établi. Cette analyse sera effectuée par la comparaison des courbes issues de le l'approche SF et celles obtenues en référence sur le maillage dédié.

1. Etude du comportement d'un traceur dans le réseau de 11 fractures.

   La courbe de sortie du flux massique, pris sur tout le contour du domaine, possède deux pics (courbes 4.6a). Le plus important des deux pics est aussi celui qui



(a) Flux massique sortant du contour du bloc

(b) Evolution de la masse présente dans le bloc

Fig. 4.6 – Evolution de la masse totale présente dans le bloc et du flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle)

arrive le premier. Une analyse plus poussée montre que ce premier pic est en fait la combinaison de différents pics arrivant par différentes fractures autour de 2.10^9 secondes (63 années). Cette même analyse permet d'identifier les principales fractures entrant en jeu pour le transport du traceur. Une simplification du modèle à ces seules fractures pourrait, par exemple, constituer une première étape dans la construction d'un modèle PA. En se référant toujours à la figure 4.3d, les fractures contribuant à la formation du premier pic sont par ordre d'importance :

- la fracture 7 : maximum de 74% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 4.7b).
- la fracture 9 : maximum de 17% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 4.7e).
- la fracture 4 : maximum de 16% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 4.7a).
- les fractures 11, 5 et 3 : maximum de 8% du maximum du premier pic du flux massique total.

Le second pic correspondant à des chemins d'écoulement de temps de séjours plus longs (1.10^{10} secondes, 317 ans) provient des contributions suivantes :

- fracture 8 : maximum de 40% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 4.7c),
- fracture 9 : maximum de 27% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 4.7d),

- fracture 4 : maximum de 13% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 4.7a),
- fractures 5 et 10 : maximum de 13% et 6% du maximum du deuxième pic du flux massique total.

Les arrivées de ces pics se traduisent, sur la courbe de sortie en masse (courbes 4.6b), par une augmentation des pentes des courbes. Cette augmentation de la pente indique une sortie importante de soluté.
A partir de ces résultats, différents chemins d'écoulement peuvent être déterminés. Ceci illustre le degré d'information que l'on peut obtenir avec l'approche Smeared Fractures. Introduisons la notation [3,4,9] pour indiquer par exemple que le traceur circule dans la fracture 3 puis 4 pour enfin sortir par la fracture 9. Les principaux parcours pour le premier pic sont :

- $[3, 7]$, $[3, 8, 7]$, et $[3, 9, 7]$ pour la sortie fracture 7
- $[3, 9]$ pour la sortie fracture 9
- $[3, 9, 4]$ pour la sortie fracture 4.

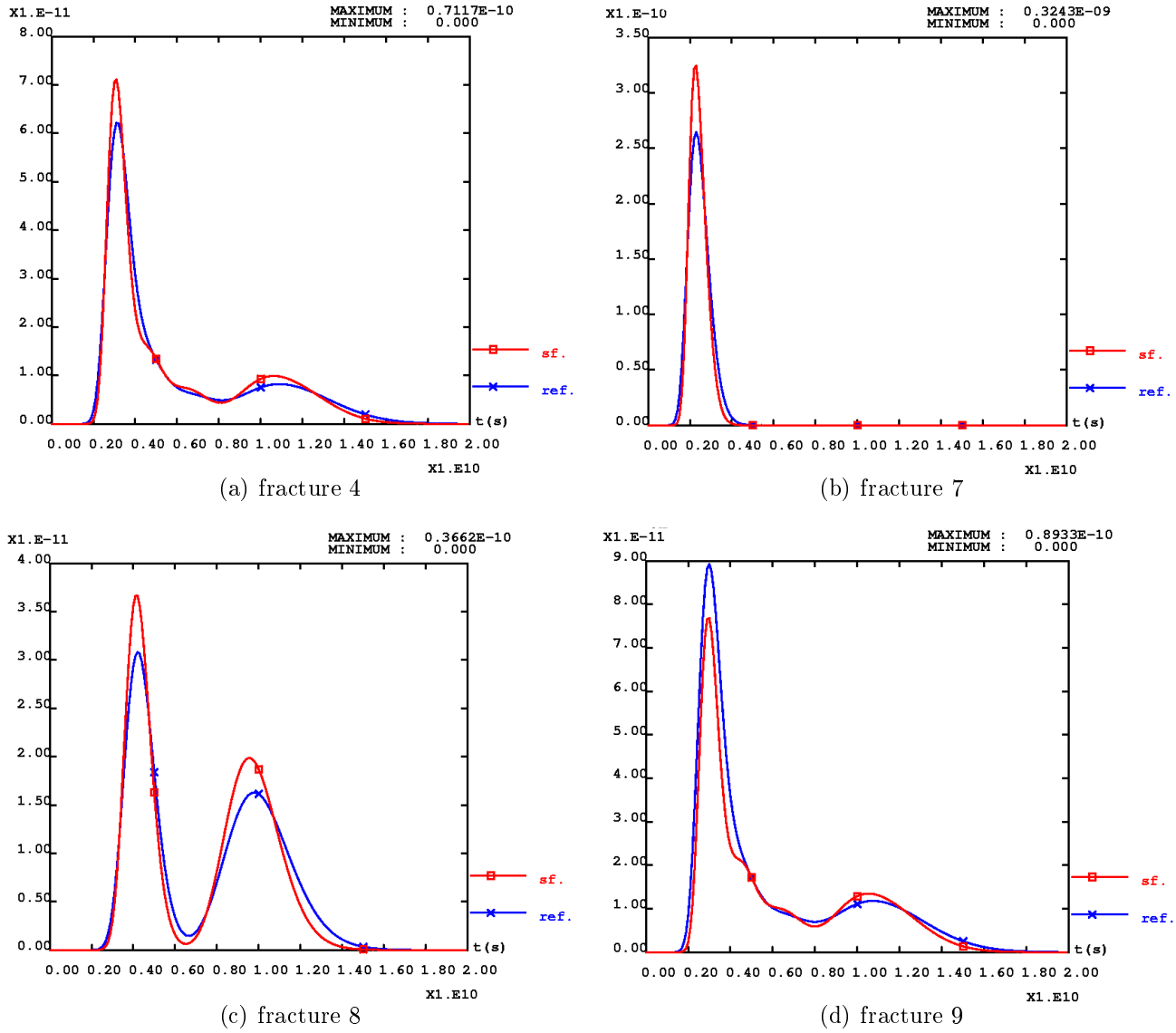
et pour le second pic :

- $[5, 8]$ pour la sortie fracture 8,
- $[5, 4, 9]$ pour la sortie fracture 9,
- $[5, 4]$ pour la sortie fracture 4,
- $[5]$ pour la sortie fracture 5.

Ainsi, les deux différents temps de sortie pour les deux pics sont directement liés à la différence de vitesse d'écoulement entre la fracture 3 (vitesse élevée) et la fracture 5 (vitesse lente). Pour cette position d'injection (intersection fracture 3 et 5) seules les fractures 3, 4, 5, 7, 8 et 9 jouent un rôle important.

2. Apports des résultats obtenus avec le maillage explicite de la géométrie, (courbes en bleu sur les figures concernées).

Les courbes obtenues avec le maillage de références illustrent le bon comportement de l'approche Smeared Fractures. Les validations de l'approche Smeared Fractures, effectuées précédemment, ont montré un bon comportement général de l'approche. Les courbes du modèle de référence montrent, ici, que le comportement de l'approche est aussi bon à un niveau de détail inférieur, correspondant à la modélisation du transport dans chaque fracture. Il est intéressant de constater que les similitudes entre l'approche Smeared Fractures et le calcul sur maillage dédié sont obtenues que ce soit pour les valeurs du flux massique total ou les valeurs des flux massiques locaux (sortant de fractures particulières), (courbes 4.7 et 4.8). Ainsi, pour les fractures 4,



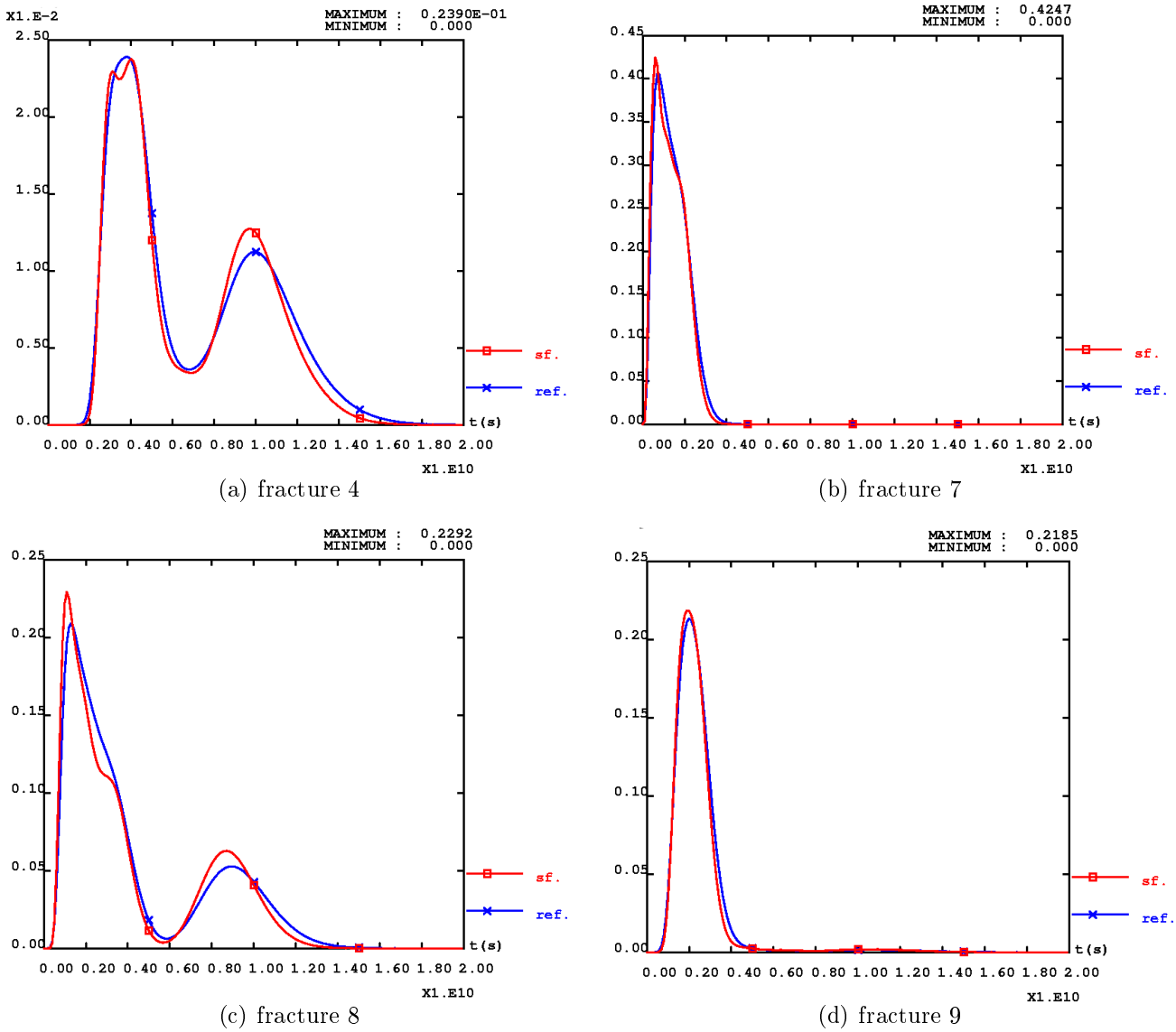
(a) fracture 4 (b) fracture 7

(c) fracture 8 (d) fracture 9

Fig. 4.7 – Evolution du flux massique dans différentes fractures du réseau de 11 fractures

7, 8 et 9, les temps d'arrivée des différents pics sont similaires suivant l'approche Smeared Fractures (courbes rouges) ou l'approche de référence (courbes Bleues), figures 4.7 et 4.8. Les valeurs des maximums de flux massique ou de masse sont obtenus avec une erreur de quelques pour cent.

Le bon comportement général de l'approche Smeared Fractures permet de calculer à moindre coup un scénario de transport sur plusieurs fractures et ainsi d'identifier : le comportement du traceur dans le réseau de fractures, les exutoires principaux ainsi que les fractures parcourues par le traceur.



(a) fracture 4

(b) fracture 7

(c) fracture 8

(d) fracture 9

Fig. 4.8 – Evolution de la masse dans différentes fractures du réseau de 11 fractures

	porosité	coefficient de diffusion, $D = \omega.d\ m^2.s^{-1}$
Granite altéré	0.6%	3.10^{-13}
Granite non-altéré	0.3%	10^{-13}

Tab. 4.4 – Caractéristiques physiques de la matrice

Transport avec diffusion matricielle

La prise en compte de l'action de la matrice va modifier les transferts dans le bloc. Aussi, deux études sont menées.

★ Dans un premier temps, on étudie l'influence du type de fracture (I ou II).

★ Dans un second temps, on regarde l'influence du matériau, granite altéré ou granite non-altéré, constituant la matrice. Les caractéristiques de ces deux matériaux sont données dans le tableau 4.4.

L'approche Smeared Fractures ayant été suffisamment validée, les études suivantes sont effectuées uniquement avec cette approche sans être comparées à des calculs effectués sur un maillage dédié du milieu.

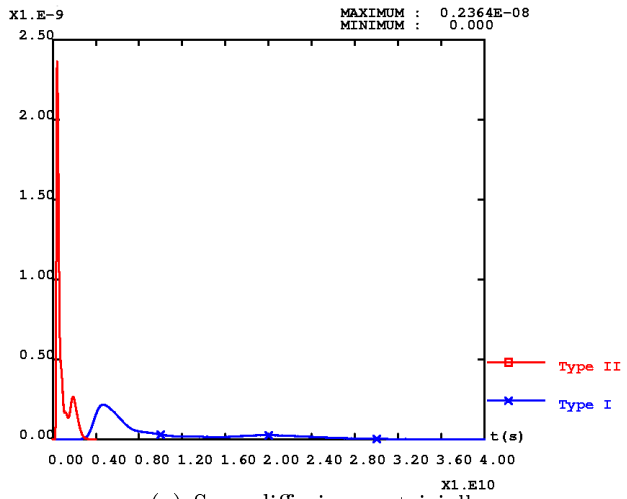
★ Comportement des différents types de fractures.

- Objectif : étude de l'influence des différents types de fracturation.
- Géométrie : 11 fractures Type I et II avec sa matrice (granite altéré), se référer aux tableaux 4.2 et 4.3 pour les caractéristiques des fractures. Les caractéristiques de la matrice sont données dans le tableau 4.4.
- Condition d'écoulement : gradient de charge de, 5.10^{-4}.
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 4.3d, concentration nulle sur tout le contour du bloc.

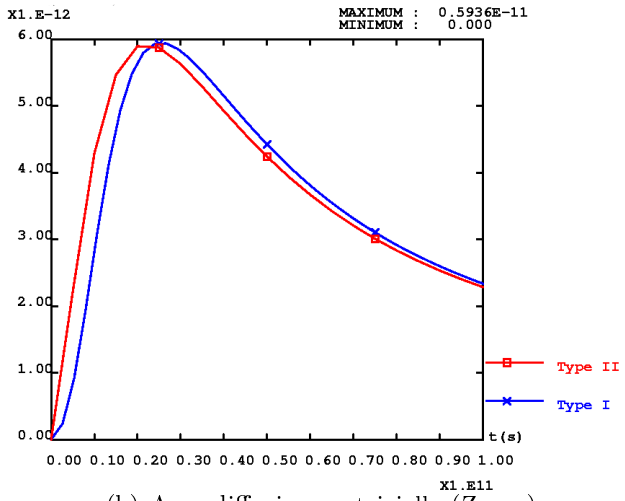
La modélisation va s'appuyer sur la géométrie précédente en considérant toutes les fractures de type I puis toutes les fractures de type II (figures 4.4 et 4.5). Les caractéristiques retenues pour la matrice sont celles du granite altéré, constituant le matériau directement au contact les fractures homogénéisées. La modélisation de l'écoulement et du transport est effectuée pour un gradient de charge de 5.10^{-4}.

Les vitesses d'écoulement obtenues dans le réseau de fractures sont très différentes suivant le type de fractures considéré.

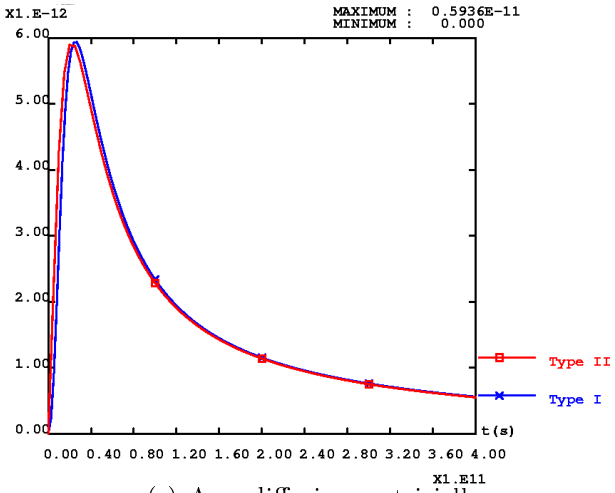
$\Rightarrow$ Ainsi, pour une modélisation du transport, sans diffusion matricielle et avec des fractures de type II, le pic principal arrive au temps $4.6.10^8$ secondes (14 ans) tandis que pour des fractures de type I ce temps est multiplié par un facteur 10 soit $4.7.10^9$ secondes (150 ans) (courbes 4.9a). Les fractures de type II sont donc les plus rapides.



(a) Sans diffusion matricielle



(b) Avec diffusion matricielle (Zoom)

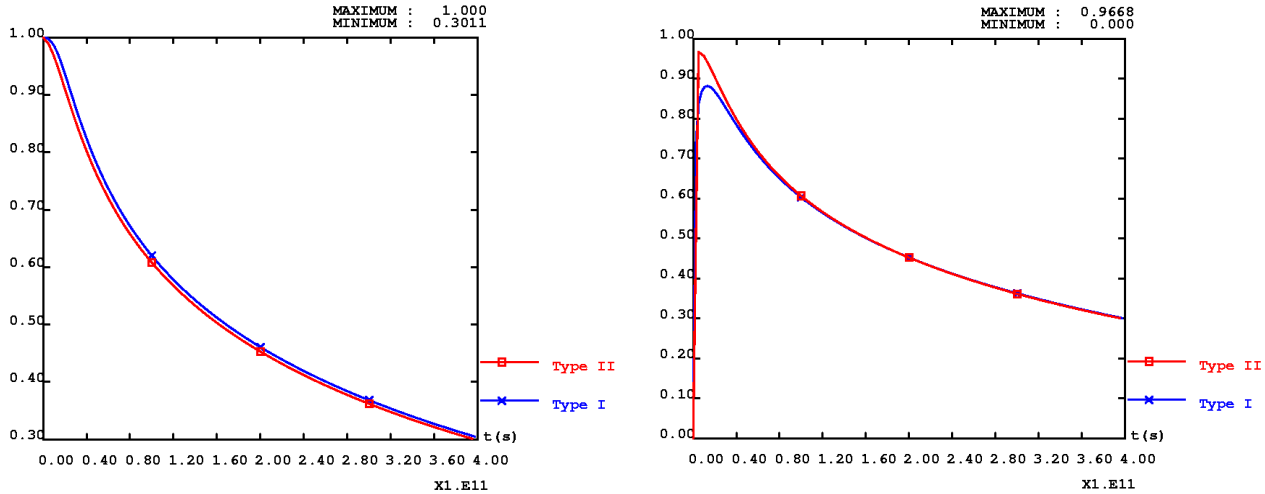


(c) Avec diffusion matricielle

Fig. 4.9 – Etude des différents types de fracturation : courbes de flux massique pris sur tout le contour du bloc

⇒ Néanmoins, lorsque la diffusion matricielle est prise en compte, un coefficient de retard peut être évalué pour chaque type de fractures. Une estimation de la longueur moyenne de parcours du traceur dans le réseau de fracture fournit une valeur de 230 m. Pour des fractures de type I, le coefficient de retard est voisin de 5, tandis que pour des fractures de type II, il est proche de 40. Entre ces deux coefficients de retard, il existe de nouveau un facteur 10. La fracture de type II, la plus rapide, est aussi la plus retardée.

Ainsi, lors de la prise en compte de la diffusion matricielle, les temps de sortie sont similaires : 2.10^{10} secondes (634 ans) pour le type II et $2.5.10^{10}$ secondes (793 ans) pour le type I (courbes 4.9b et c). Ces temps sont comparables à ceux obtenus à partir de l'expression du temps de sortie, équation 4.1, pour une longueur de



(a) Masse totale (b) Masse dans la matrice

Fig. 4.10 – Etude des différents types de fracturation : courbes de masse

parcours de 230 mètres (distance entre le point d'injection et le bord inférieur du bloc).

$$\tau_s = R_p.\tau_w \tag{4.1}$$

$$R_p = 1 + \frac{2}{3}\frac{\omega_m^2.d}{\omega_{fr}^2.e^2}\tau_w \tag{4.2}$$

avec
- R_p coefficient de retard lié à la diffusion matricielle $(-)$
- τ_w le temps de sortie convectif (s)
- ω_m la porosité de la matrice$(-)$
- ω_{fr} la porosité de la fracture$(-)$
- e l'ouverture (m)
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore $(m^2.s^{-1})$

Ainsi, pour les fractures de type II, la rétention due à la diffusion matricielle est plus importante que pour les fractures de type I, se traduisant par une diffusion plus importante dans les zones matricielles (courbes 4.10b) et un temps de sortie supérieur à celui obtenu pour la modélisation du transport dans les fractures seules (courbes 4.9).

Dans cette étude, les deux types de fracturation ont un rôle comparable dans le transport de soluté. Pour un écoulement quelconque, l'action de ces différents types de fracturation dépend des vitesses d'écoulement. Ainsi, pour des écoulements lents (gradients de charge de 5.10^{-4}), les deux types de fracturation jouent des rôles équivalents, comme l'illustrent les champs de concentrations figure 4.11, avec des

temps de sortie similaires. Si l'on considère un écoulement plus rapide leurs rôles peuvent alors être différents. Si l'équation 4.1, est exprimée en fonction du gradient de charge alors :

$$\tau_s = \frac{1}{\nabla h^2}[\frac{\omega_{fr} L_{traj}}{K_{fr}}.(\nabla h + \frac{2}{3}\frac{\omega_m.D_m.L_{traj}}{\omega_{fr}.e^2.K_{fr}})] \tag{4.3}$$

avec
- ∇h le gradient de charge $(-)$
- L_{traj} la longueur de parcours du soluté (m)
- K_{fr} la perméabilité de la fracture$(m.s^{-1})$
- ω_m la porosité de la matrice$(-)$
- ω_{fr} la porosité de la fracture$(-)$
- e l'ouverture (m)
- D_m le coefficient de diffusion matricielle efficace $(m^2.s^{-1})$

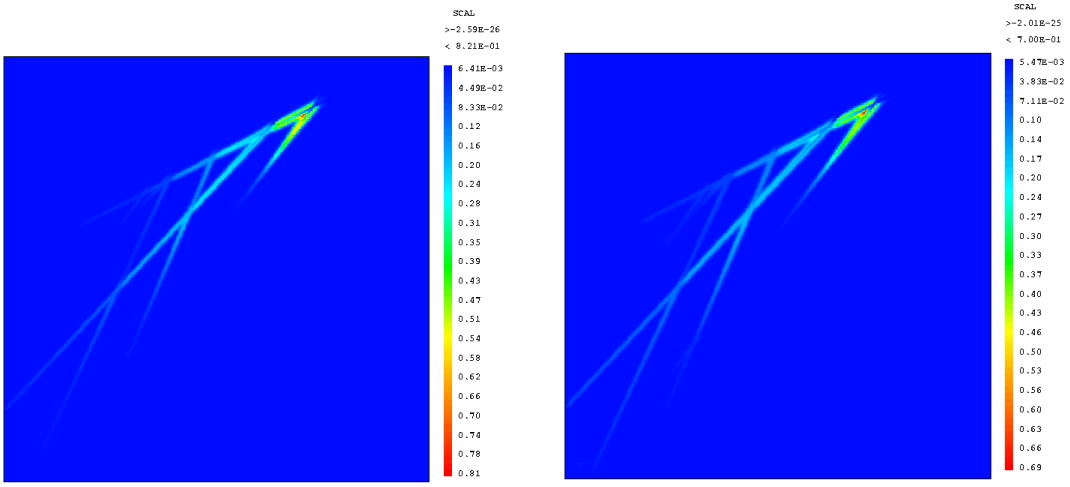
Le temps de sortie peut alors être mis sous la forme $\tau_s = \frac{C_1}{\nabla h^2}(\nabla h + C_2)$ avec :

- le coefficient $C_1 = \frac{\omega_{fr} L_{traj}}{K_{fr}}$. Ce coefficient traduit l'influence du transport dans les fractures.

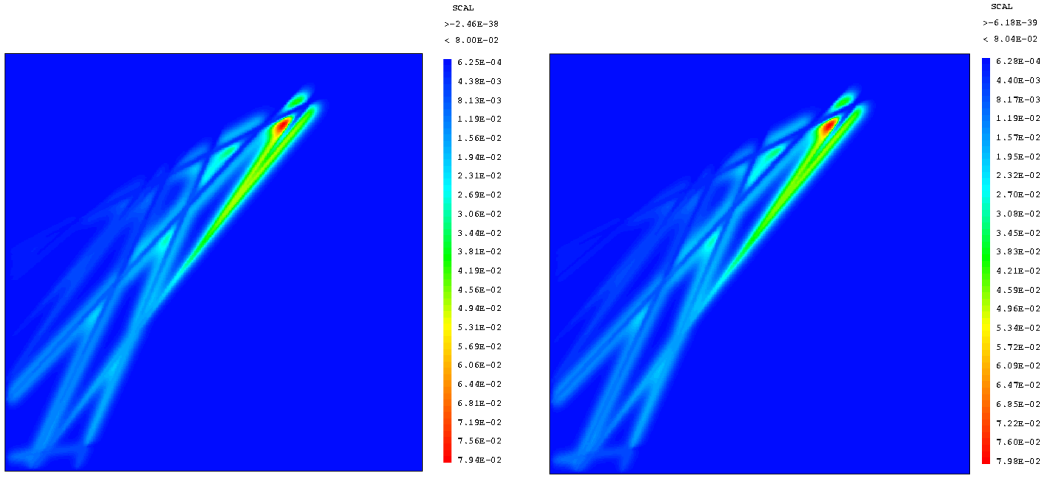
- le coefficient $C_2 = \frac{2}{3}\frac{\omega_m.D_m.L_{traj}}{\omega_{fr}.e^2.K_{fr}}$. Ce deuxième coefficient traduit, quant à lui, l'action de la diffusion matricielle.

Grâce à ces deux coefficients, il devient possible de déterminer pour quel gradient de charge les temps de sortie du maximum de concentration sont similaires. Une application numérique permet de constater que, entre le type I et le type II, le coefficient C_1 varie d'un facteur 10^{-1} tandis que le coefficient C_2 varie d'un facteur 10. Ainsi, pour un gradient de charge inférieur à la valeur du minimum du coefficient C_2 des deux types de fracturation, les deux facteurs existant entre les constantes C_1 et C_2 se compensent. Ces considérations ne fournissent, cependant, pas d'indication sur la forme des courbes. Pour un tel gradient de charge (dans notre application voisin de $C_2 = 10^{-3}$) le temps τ_s^{typII} représente 65% du temps τ_s^{typI}. Pour un gradient de charge de 5.10^{-4}, correspondant à la situation étudiée, le temps τ_s^{typII} représente 78% du temps τ_s^{typI}. En écoulement lent, une simplification intéressante du problème serait de considérer que l'ensemble des fractures sont de type II. Bien que risquant de sous-évaluer quelque peu les temps de sortie du soluté, cette simplification permettrait d'obtenir une estimation correcte de ce temps de sortie.

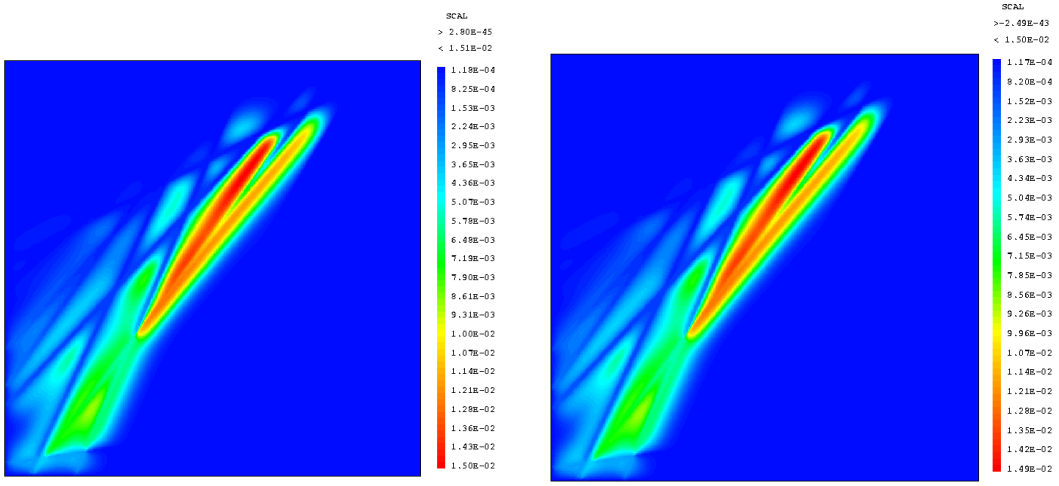
★ Blocs sains et blocs altérés : influence sur la diffusion matricielle.



(a) Type I : temps 317 ans (b) Type II : temps 317 ans



(c) Type I : temps 3170 ans (d) Type II : temps 3170 ans



(e) Type I : temps 12700 ans (f) Type II : temps 12700 ans

Fig. 4.11 – Etude des différents types de fracturation : champs de concentrations

- Objectif : étude de l'influence de la constitution de matrice.
- Géométrie : 11 fractures Type I avec matrice, se référer aux tableaux 4.2 et 4.3 pour les caractéristiques des fractures. Les caractéristiques de la matrice sont données dans le tableau 4.4.
- Condition d'écoulement : gradient de charge de, 10^{-3} (condition d'écoulement du site de Äspö).
- Conditions de transport : masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 4.3d, concentration nulle sur tout le contour du bloc.

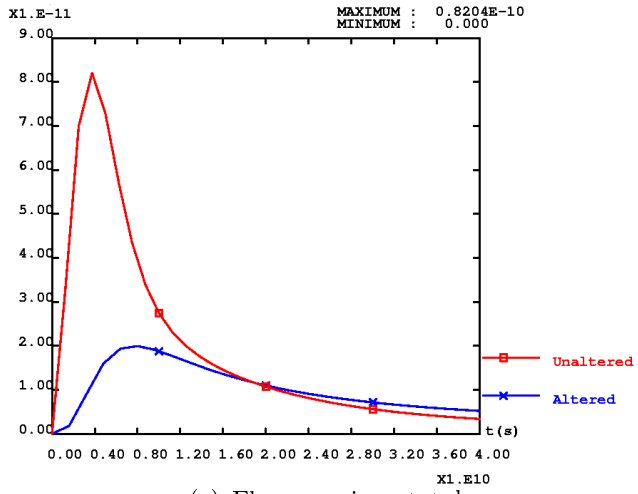
Suivant la portion de fracture étudiée, la matrice peut être soit de la roche altérée soit de la roche saine. Dans notre modèle, seul un type de matrice est pris en compte. Aussi, l'influence des différents matériaux constituant la matrice va maintenant être étudiée. Pour cela, la modélisation du transport va être effectuée en affectant, dans un premier temps, les propriétés de la roche altérée, puis dans un second temps, celles de la roche saine. Les fractures sont toutes de type I et le gradient de charge considéré est de 10^{-3}.

Comme prévu, la roche altérée se révèle être celle pour laquelle la diffusion matricielle joue un rôle plus important et engendre un retard sur le déplacement du soluté, (courbes 4.12a). Le coefficient de retard, obtenu à partir de la relation 1.8, est, en effet, de 2.4 pour la roche altérée tandis qu'il n'est que de 1.07 pour la roche saine. Le temps de sortie du pic maximum est ainsi de 3.10^9 secondes (95 ans) pour la roche saine tandis qu'il atteint 7.10^9 secondes (221 ans) pour la roche altérée. L'importance de la diffusion dans la matrice est aussi mise en évidence par les courbes de masse. Pour la roche altérée, la masse totale présente dans le système décroît plus faiblement que dans le cas de la roche saine, indiquant l'existence d'un phénomène important qui ralentit la sortie du soluté, (courbes 4.12b). Dans le même temps, la masse présente dans la matrice est deux fois plus importante pour de la roche altérée comparée à celle de la roche saine (courbes 4.12c). La roche saine a peu d'influence sur les temps de sorties, contrairement à la roche altérée dont la modélisation mérite par conséquent d'être soignée.

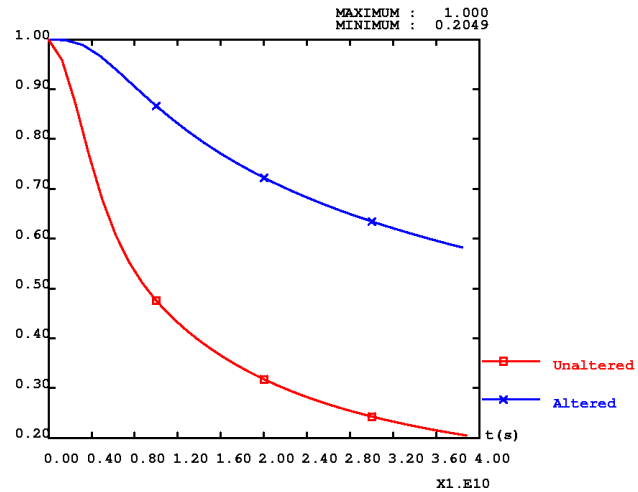
De ces études 2D, les bilans suivants peuvent être tirés :

$\Rightarrow$ La répartition des différents types de fracture doit être bien modélisée. Bien que les plus rapides, les fractures de type II sont, aussi, les plus influencées par la matrice. Selon les vitesses d'écoulement, le rôle joué par chaque type de fractures est différent. Dans notre étude, le rôle de la matrice est dominant.

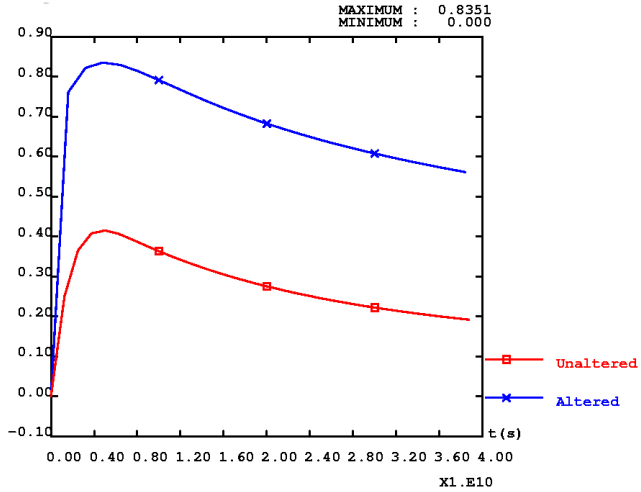
$\Rightarrow$ L'action de la roche altéré comparée à la celle de la roche non-altéré est, comme attendu, beaucoup plus importante.



(a) Flux massique total



(b) Masse présente dans le bloc



(c) Masse présente dans la matrice

Fig. 4.12 – Etude des différents types de matrice : courbes de flux massique et de masse

$\Rightarrow$ La modélisation de la matrice non-altérée nécessite de gros efforts de discrétisation. Il est, cependant, envisageable de modéliser son influence par un couplage avec une solution analytique pour le traitement de la diffusion (modèle double porosité). De cette manière, l'approche Smeared Fractures couvrirait l'ensemble des configurations rencontrées lors de la modélisation de la diffusion matricielle, en étant moins pénalisée en termes de coûts de calcul.

$\Rightarrow$ La résolution de manière continue du transport dans les fractures et dans la roche altérée est directement opérationnelle.

$\Rightarrow$ L'approche Smeared Fractures fournit de bons résultats globaux mais permet aussi de comprendre, en détail, l'écoulement et le transport dans des fractures particulières.

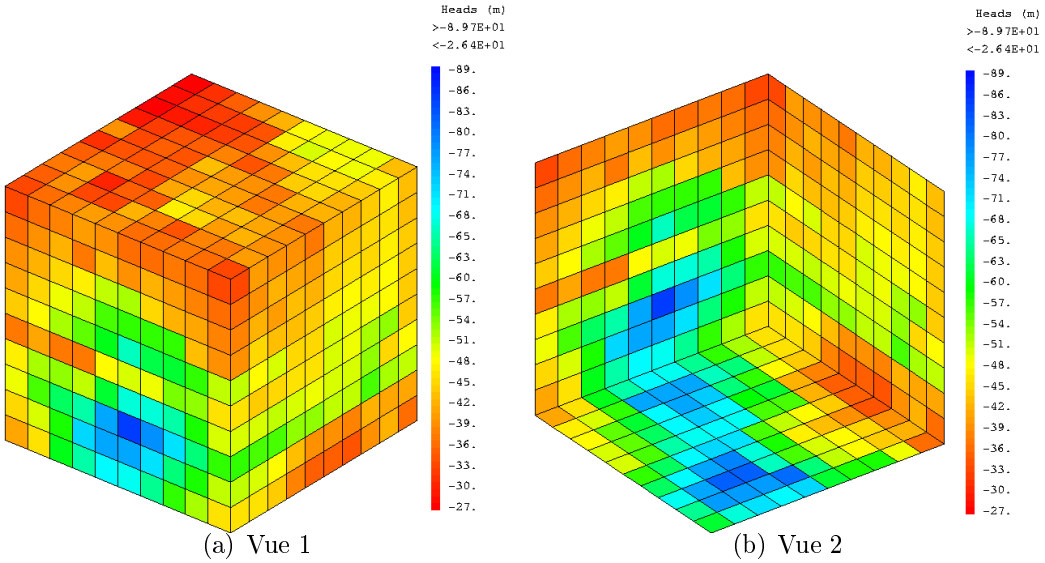
4.4 Modélisation 3D : Tâche 6D (test de traçage)

Le but de la Tâche 6D est d'identifier les zones d'écoulement ainsi que les paramètres de transport associés aux principales fractures composant le bloc fracturé à l'échelle de 200 m. L'identification de ces paramètres s'appuie sur un test de traçage (le test C2).

L'écoulement est donc forcé (débit de pompage de $3.25.10^{-5}$ $m^3.s^{-1}$) et les vitesses d'écoulement dans les fractures sont importantes (gradient de charge estimé à 30%). Les conditions en charge autour du bloc sont fournies sur un maillage régulier, figure 4.13. Ces conditions d'écoulement sont très éloignées de celles rencontrées en écoulement naturel (gradient de charge voisin de 10^{-3}). Seules quatre fractures sont traversées par les traceurs, formant un chemin direct entre le point d'injection et le point de pompage. La stratégie de modélisation proposée est, [Grenier et al. 2004] :

1. de modéliser l'écoulement en condition de pompage dans les 11 fractures par l'approche Smeared Fractures (figures 4.14). Pour l'écoulement, un raffinement important n'est pas nécessaire.

2. Ensuite, les quatre fractures intervenant dans le test de traçage sont modélisées grâce à un maillage dédié avec une faible épaisseur de zones matricielles (figure 4.15). La matrice est composée d'une zone unique étant donné que l'information fournit par le test porte sur une moyenne des propriétés des différents matériaux la formant. La carte de charge obtenue précédemment avec l'approche Smeared Fractures pour le réseau de 11 fractures sert de conditions aux limites à ce modèle de quatre fractures lors de la modélisation du transport des solutés.



(a) Vue 1 (b) Vue 2

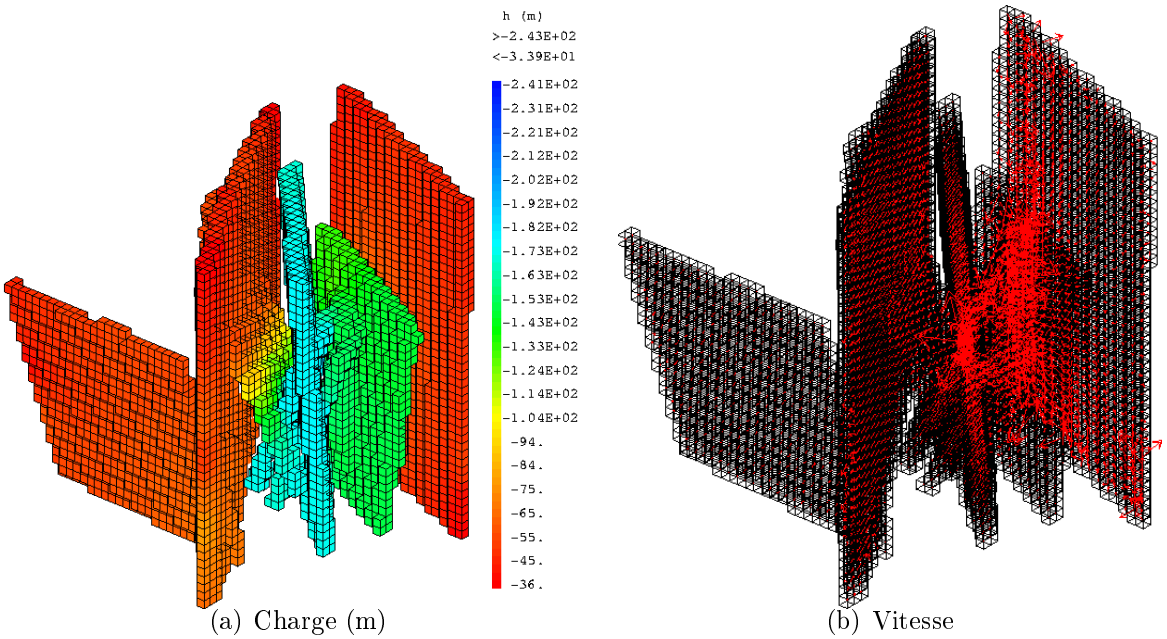
Fig. 4.13 – Tâche 6D : condition en charges

La raison pour laquelle cette modélisation n'est pas uniquement effectuée avec l'approche Smeared Fractures réside dans le fait que, pour ce test, la diffusion matricielle ne joue pas un rôle dominant. La pénétration dans la matrice est faible ce qui nécessite, pour une approche Smeared Fractures, une discrétisation fine et un coût informatique important, chapitre 3.3.2. La prise en compte de la matrice avec l'approche Smeared Fracture n'est donc pas possible.

Néanmoins, les résultats obtenus par l'approche Smeared Fractures pour l'écoulement peuvent servir de conditions aux limites à la modélisation du transport et être appliquées aux quatre fractures modélisées de façons déterministes (figures 4.16). La modélisation de l'écoulement permet d'obtenir une charge au puits de -243 m.

La modélisation du transport peut alors être effectuée sur le second modèle, avec comme conditions aux limites, les charges obtenues par l'approche Smeared Fractures. Les paramètres considérés pour la calibration des courbes sont les quatre ouvertures des fractures ainsi que le coefficient de diffusion de pore et la porosité de la matrice. L'épaisseur de la matrice est suffisamment importante pour que la diffusion du traceur dans la matrice ne soit pas influencée par les conditions aux limites. Dans un premier temps, la calibration est effectuée en jouant sur le coefficient de diffusion de pore et la porosité de la matrice, puis, dans un second temps, sur le coefficient de retard traduisant le caractère plus ou moins sorbant des traceurs. Les résultats de cette calibration sont fournis par la figure 4.17 ainsi que par les tableaux 4.5 et 4.6.

Les résultats de calibration sont tout à fait acceptables (courbes 4.17), [Grenier et al. 2004]. Les valeurs calibrées des propriétés de la matrice sont proches de celles associées aux matériaux de remplissage ("gouge"). Ce résultat n'est pas surprenant étant donné que c'est le matériau le plus proche des zones ouvertes de la fracture à écoulement libre. Les points expérimentaux fournis pour le Cesium ne sont, cependant, pas



(a) Charge (m) (b) Vitesse

Fig. 4.14 – Tâche 6D : charges et vitesses dans les 11 fractures

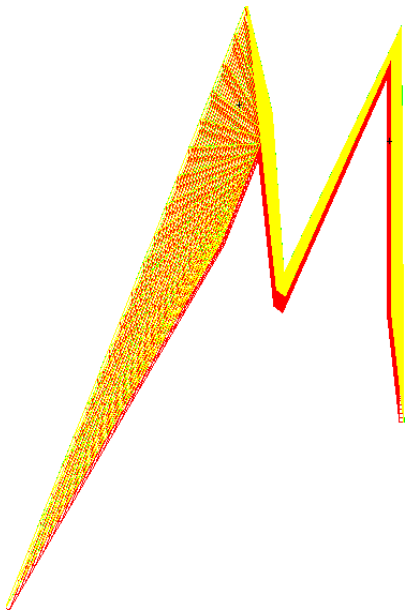
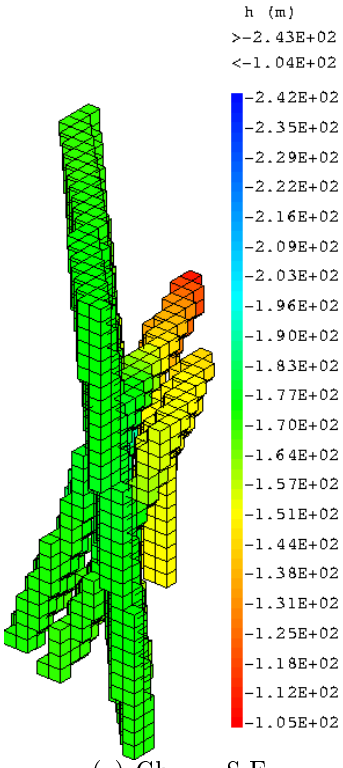
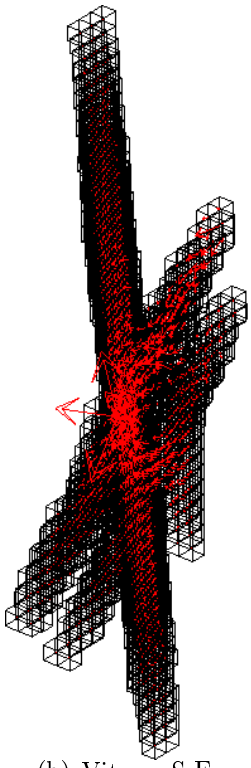


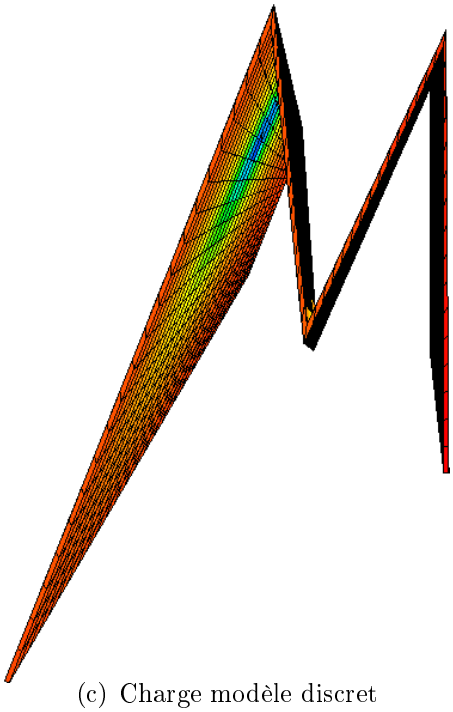
Fig. 4.15 – Tâche 6D : maillage du modèle discret



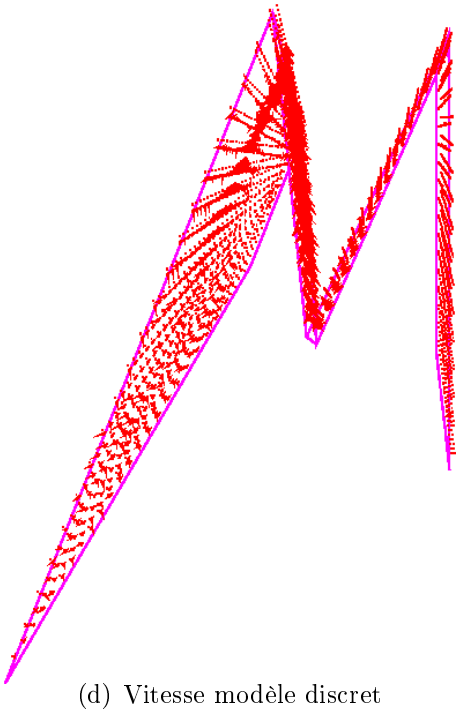
(a) Charge S.F



(b) Vitesse S.F.

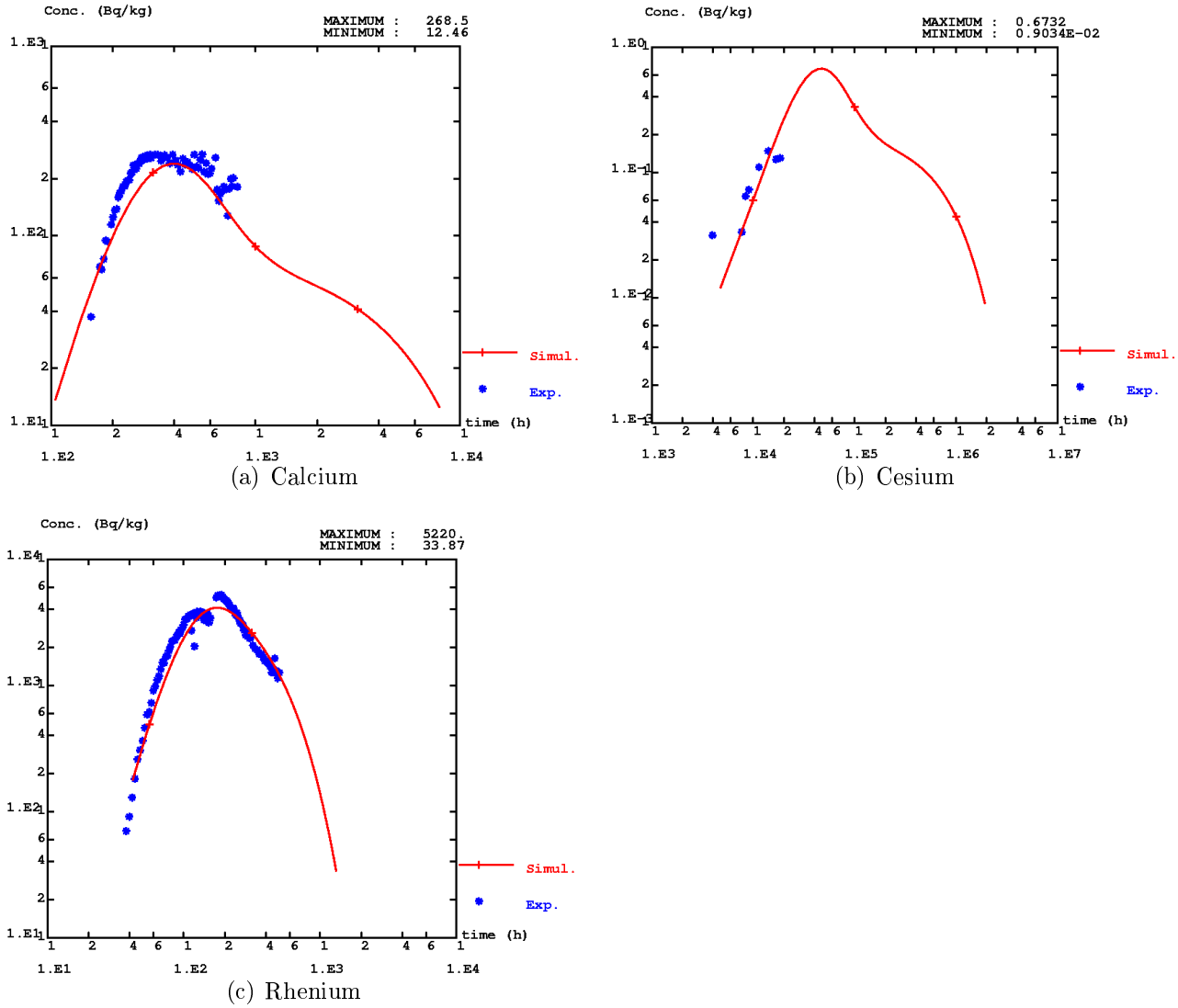


(c) Charge modèle discret



(d) Vitesse modèle discret

Fig. 4.16 – Tâche 6D : résultats S.F. et du modèle discret pour les 4 fractures



(a) Calcium

(b) Cesium

(c) Rhenium

Fig. 4.17 – Tâche 6D : résultats de calibration

Nom de la fracture	Transmissivité ($m^2.s^{-1}$)	Épaisseur initiale	Épaisseur calibrée
20	$1.43.10^{-7}$	$1.74.10^{-4}$	id.
21	$6.02.10^{-8}$	$1.129.10^{-4}$	id.
22	$2.19.10^{-8}$	$6.807.10^{-5}$	(x2.5)
23	$1.66.10^{-7}$	$1.874.10^{-4}$	(x2.5)

Tab. 4.5 – Tâche 6D : transmissivité, épaisseur initiale et calibrée des fractures

	Coefficient de diffusion de pore ($m^2.s^{-1}$)	Porosité
Calibration	2.10^{-10}	2%

Tab. 4.6 – Tâche 6D : propriétés de la matrice

suffisants pour contraindre la calibration.

En ce qui concerne l'approche Smeared Fractures, quelques remarques peuvent être formulées :

⇒ La simulation de l'écoulement est tout à fait opérationnelle quelles qu'en soient les conditions générales.

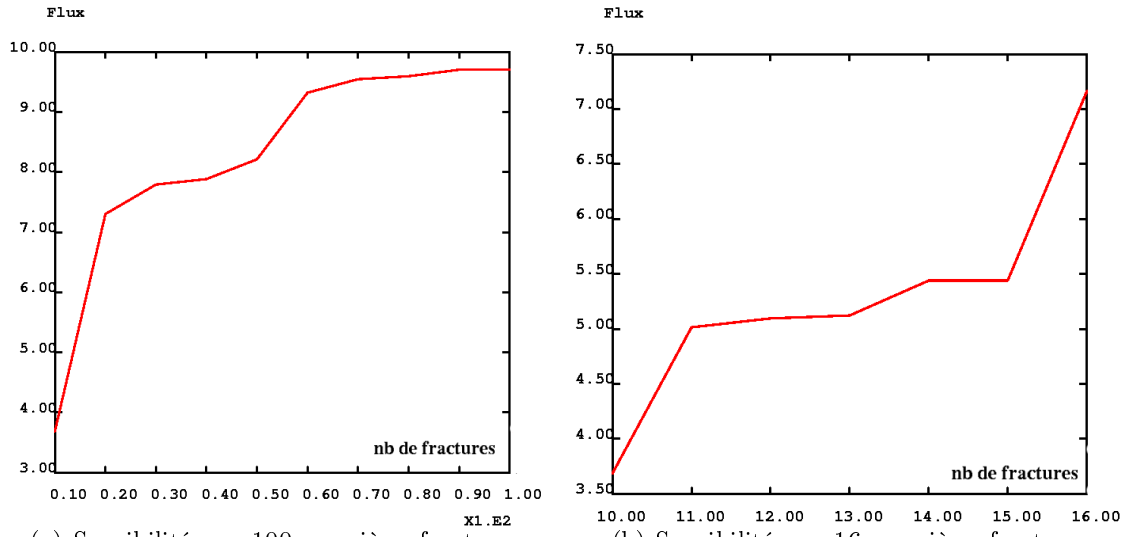
⇒ Bien que non adaptée à la modélisation de tests de traçage, (vitesses élevées, dispersion numérique importante, discrétisation fine et par conséquent coûteuse de la matrice...), l'approche a permis de résoudre correctement l'écoulement de manière à fournir les conditions aux limites nécessaires à la résolution du transport sur un modèle à maillage dédié.

⇒ En perspective, l'extension à la résolution du transport dans les cas où la matrice joue un rôle peu important est à envisager. La résolution du transport dans les fractures seules et la prise en compte de l'action de la matrice via un terme source, évalué à partir d'une solution numérique de l'équation de diffusion 1D orthogonale, est tout à fait possible.

4.5 Modélisation 3D : Tâche 6E

L'objectif de la Tâche 6E est d'étendre les calculs de transport de la Tâche 6D aux échelles de temps et aux conditions rencontrées après fermeture du site. Le système étudié reste le bloc de 200x200x200 m étudié précédemment. Aux 11 fractures déterministes de ce bloc sont associées 25 fractures synthétiques et 5660 fractures de fond, chapitre 4.2. Une charge de 1m est affectée au coté est du cube (X=2000 m) et une charge nulle au coté ouest (X=1800 m). Ces conditions de charge conduisent à créer un gradient de charge orienté est-ouest d'intensité 0.5%. La zone d'injection du traceur est identique à celle utilisée pour la Tâche 6D. Elle est située dans la fracture 23D, à proximité du centre du bloc. La modélisation de l'écoulement et du transport est effectuée dans ce bloc pour différents traceurs. Les équipes travaillant sur cette tâche doivent fournir les temps de sortie de ces traceurs ainsi que les courbes du flux massique à travers trois plans. Le but est de prédire les temps de sorties d'éléments radioactifs en écoulements naturels.

La stratégies de modélisation choisie est, dans un premier temps, de classer l'ensemble des fractures dans l'ordre croissant de surfaces. Une étude de sensibilité au nombre de fractures, pour l'écoulement, est alors effectuée afin de déterminer l'influence des fractures sur le flux hydrique sortant. Les principales fractures jouant un rôle dans l'écoulement vont être ainsi identifiées. Dans un deuxième temps, à partir des résultats de sensibilité, le réseau de fracture va être simplifié. Seules les fractures ayant une influence importante sur la variation du flux hydriques sortant sont conservées. Le calcul du transport est alors



(a) Sensibilité aux 100 premières fractures (b) Sensibilité aux 16 premières fractures

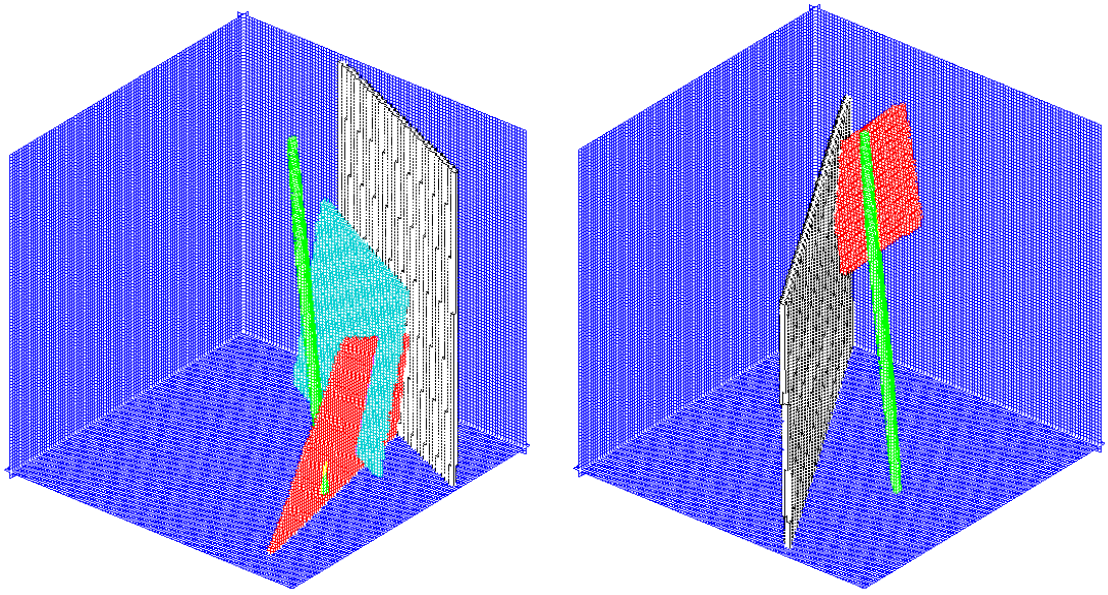
Fig. 4.18 – Tâche 6E : sensibilité du flux sortant au nombre de fractures

effectué sur ce réseau simplifié. Les études de sensibilité et de transport sont effectuées avec l'approche Smeared Fractures développée durant ce travail, le maillage régulier utilisé facilitant ce type d'exercice. Seules les 100 fractures les plus importantes sont considérées dans l'étude de sensibilité. Un nombre supérieur de fractures est, en effet, préjudiciable à la qualité des résultats. Pour une densité de fracturation trop importante, l'utilisation de mailles régulières induit une connection artificielle de fractures qui ne s'interceptent pas sur la géométrie réelle du réseau.

4.5.1 Sensibilité au nombre de fractures

L'étude de sensibilité au nombre de fractures est menée en faisant varier le nombre de fractures de 10 en 10. Le flux hydrique sortant par le coté ouest du bloc (X=1800 m) est calculé à chaque itération. La courbe du flux hydrique, tracée en fonction du nombre de fractures (courbes 4.18a), croît avec l'augmentation du nombres de fractures. Cette croissance est très importante lors de l'ajout des vingts plus grosses fractures (le flux hydrique passe de 3.7 à 7.2 $m^3.h^{-1}$) puis se fait plus régulière jusqu'à une valeur de flux hydrique proche de 9.5 atteinte pour une soixantaine de fractures. Cette croissance est liée à l'augmentation de la connectivité du réseau de fractures. Cette dernière valeur subit peu de variation lorsque les quarantes dernières fractures sont ajoutées (courbes 4.18a).

Une étude plus précise de l'évolution du flux hydrique pour les 20 premières fractures, courbes 4.18b, conduit à l'identification de deux fractures dont la présence fait croître fortement l'écoulement. Il s'agit des fractures $7S$ et $2292B$ respectivement à la 11 ième et 16 ième position. La présence de la fracture $7S$ induit une augmentation du flux hydrique de 3.7 à 5 $m^3.h^{-1}$ tandis que la fracture $2292B$ le fait passer de 5.44 à 7.2 $m^3.h^{-1}$ (courbe 4.18b). Ces fractures, en augmentant la connectivité du réseau de fractures, jouent par



(a) Fracture 7S en rouge, fracture 5D en noir, fracture 20D en vert, fracture 7D en turquoise

(b) Fracture 2292B en rouge, fracture 19D en noir, fracture 20D en vert

Fig. 4.19 – Tâche 6E : connectivité des fractures 7S et 2292B

conséquent un rôle très important dans l'écoulement.

En étudiant leur position et leur connectivité avec le réseau, on s'aperçoit que :

$\Rightarrow$ la fracture $7S$ est à peu près parallèle aux cotés est et ouest du cube et met en relation les fractures, $5D$, $20D$ et $7D$, orientées est-ouest correspondant à la direction de l'écoulement (figure 4.19a). La fracture $5D$ est, de plus, une des fractures sur le coté de laquelle une charge de 1 m a été imposée. C'est donc une des fracture par l'intermédiaire de laquelle le fluide va pouvoir pénétrer dans le bloc, ce qui globalement augmente l'écoulement en créant de nouveaux chemins.

$\Rightarrow$ la fracture $2292B$, orientée est-ouest, crée elle aussi un nouveau chemin d'écoulement, reliant les fractures $19D$ et $20D$. Son orientation est parallèle à l'écoulement. Sa présence facilite, par conséquent, l'écoulement entre les faces est et ouest du bloc. Ceci se traduit à l'échelle du bloc par une augmentation des flux, (figure 4.19b).

Ainsi, pour un nombre de 50 fractures, le flux hydrique sortant représente prés de 85% du flux hydrique total. Lors de la modélisation du transport, la stratégie choisie est de conserver les 50 plus grosses fractures pour lesquelles le flux hydrique marque un premier palier, figure 4.19a.

Paramètre	Point 1	Centre	Point 2
Est	1930.758	1929.741	1928.724
Nord	7193.742	7194.84	7195.938
Hauteur	-476.100	-476.100	-476.100

Tab. 4.7 – Tâche 6E : localisation de la source d'injection

Kd_i	I	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
Coating	0.	$2.3.10^{-4}$	$5.2.10^{-2}$	$4.6.10^{-2}$	0.2	0.5
Gouge	0.	$7.1.10^{-4}$	$1.6.10^{-1}$	$1.4.10^{-1}$	0.2	0.5
Cataclasite	0.	$6.7.10^{-7}$	$1.5.10^{-2}$	$1.3.10^{-2}$	0.2	0.5

Tab. 4.8 – Tâche 6E : coefficient d'adsorption, $m^3.kg^{-1}$

4.5.2 Modélisation du transport

A partir des 50 fractures précédemment identifiées, on simplifie tout d'abord légèrement le réseau en éliminant 6 fractures isolées. Parmi les 44 structures restantes, toutes les fractures déterministes sont présentes. La localisation de la zone d'injection du traceur correspond au point d'injection du test de traçage C2, il est localisé dans la fracture 23D et identique à celui de la tâche 6D, (tableau 4.7).

La quantité de traceur injectée est modélisée par un Dirac avec une masse totale injectée unitaire. Les différents traceurs considérés sont l'Iodine (I-129), le Calcium (Ca-47), le Cesium (Cs-137), le Radium (Ra-226), le Technetium (Tc-99) et l'Americium (Am-241). Le tableau 4.8 présente les caractéristiques de ces traceurs au sein des différents matériaux entourant la fracture.

Une fracture est considérée soit de type I soit de type II comme il est indiqué au cahier des charges, [Dershowitz et al. 2003]. Les phénomènes physiques modélisés sont la convection-dispersion dans la fracture ainsi que l'adsorption. La décroissance radioactive n'est pas prise en compte. Afin de modéliser les actions des différents matériaux (bordure des fractures, matériau de remplissage, et cataclasite) proches des fractures, un processus d'homogénéisation va être effectué. Seuls l'influence de ces matériaux est modélisée, (la diffusion matricielle dans les blocs altérés et non-altérés n'est pas prise en compte). L'ouverture de la fracture homogénéisée correspond à la somme des épaisseurs :

$$e = \sum_i e_i \tag{4.4}$$

La variation du volume de la fracture est pris en compte par une porosité équivalente :

$$\omega = \frac{\sum_i \omega_i e_i}{\sum_i e_i} \tag{4.5}$$

Le coefficient de retard équivalent dû, à l'adsorption instantanée des différents matériaux, a quant à lui l'expression suivante :

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5 (années)	–	–	–	–	–	600.
t_{50} (années)	0.9	3.	600.	600.	3000.	7200.
t_{95} (années)	1.8	9.	2000.	1800.	9000.	25500.
Flux massique maximum	0.6	0.16	$8.4.10^{-4}$	$9.4.10^{-4}$	$2.25.10^{-4}$	$1.2.10^{-4}$

Tab. 4.9 – Tâche 6E : plan X=1920 m

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5 (années)	1.8	10.	2600.	2400.	13500.	34500.
t_{50} (années)	5.1	30.	8000.	7000.	39600.	1.10^5
t_{95} (années)	7.8	48.	12000.	11000.	61200.	$1.6.10^5$
Flux massique maximum	0.17	$2.6.10^{-2}$	$9.96.10^{-5}$	$1.1.10^{-4}$	$1.99.10^{-5}$	$8.2.10^{-6}$

Tab. 4.10 – Tâche 6E : plan X=1880 m

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5 (années)	5.1	27.	7500.	6500.	39600.	1.10^5
t_{50} (années)	10.8	63.	16800.	14400.	86400.	$2.1.10^5$
t_{95} (années)	22.2	135.	36000.	32400.	$1.8.10^5$	$4.5.10^5$
t_{max} (années)	9.9	57.	15600.	13200.	79200.	$1.98.10^5$
Flux massique maximum	$9.4.10^{-02}$	$1.46778.10^{-2}$	$5.5.10^{-5}$	$6.3.10^{-5}$	$1.1.10^{-5}$	$4.6.10^{-6}$

Tab. 4.11 – Tâche 6E : plan X=1800 m

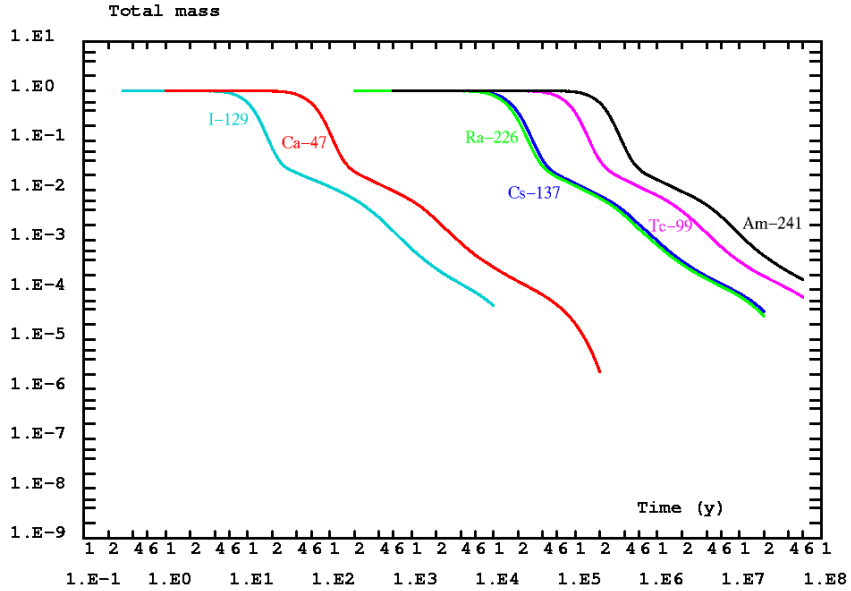
$$R = 1 + \frac{\sum_i \beta_i e_i}{\sum_i \omega_i e_i} \tag{4.6}$$

avec $\beta_i = (kd_i * \rho * (1 - \omega_i))$ et $\rho = 2600\ kg.m^{-3}$.

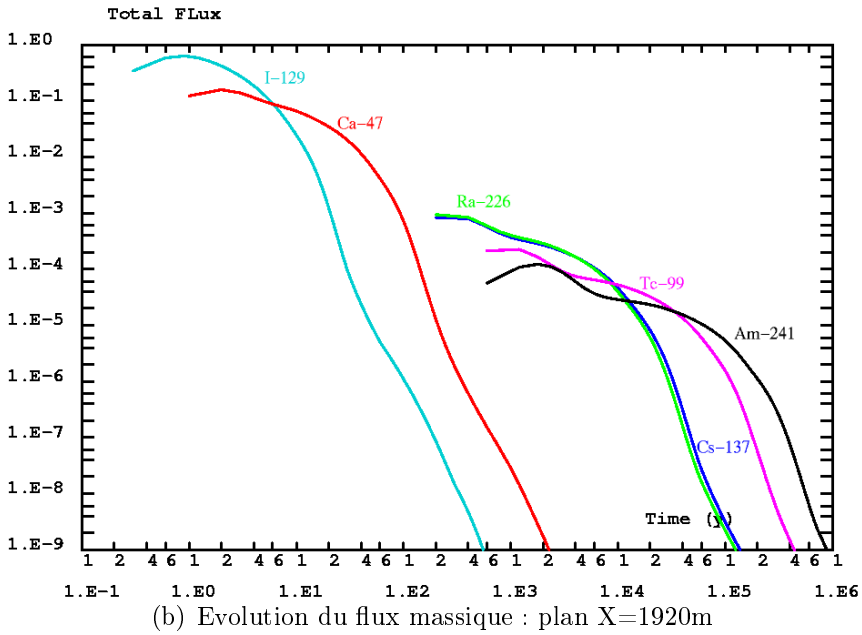
Les résultats obtenus sont illustrés par les courbes de masse et de flux massique des différents traceurs, figures 4.20 et 4.21. Les courbes de flux massique ont été déterminées en trois positions à l'intérieur du bloc (X=1920m, X=1880m, X=1880m). La valeur des temps de sortie de 5%, 50% et 95%, notés respectivement t_5, t_{50} et t_{95}, sont fournis, (tableaux 4.9, 4.10 et 4.11).

Les temps d'arrivée des traceurs dépendent, selon toute attente, de leur caractère plus ou moins sorbant. Ainsi, l'Iode, dont les coefficients d'adsorption sont nuls, est le premier traceur à s'échapper du bloc au temps $t = 5$ ans (figure 4.20b). Il est suivi du Calcium, du Radium, du Cesium, du Technetium puis enfin de l'Americium. Le comportement du Radium est similaire à celui du Cesium (temps de sortie et valeur des maximums proches, figures 4.20 et 4.21).

En suivant le maximum de concentration au cours du temps, il est possible de déterminer les différentes fractures à travers lesquelles les traceurs vont circuler. Ainsi pour l'Iode,

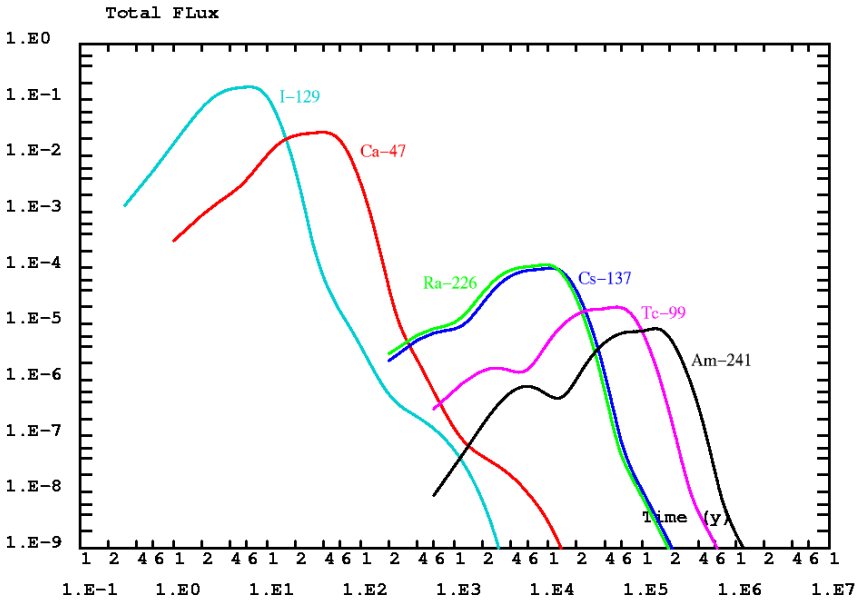


(a) Evolution de la masse présente dans le bloc

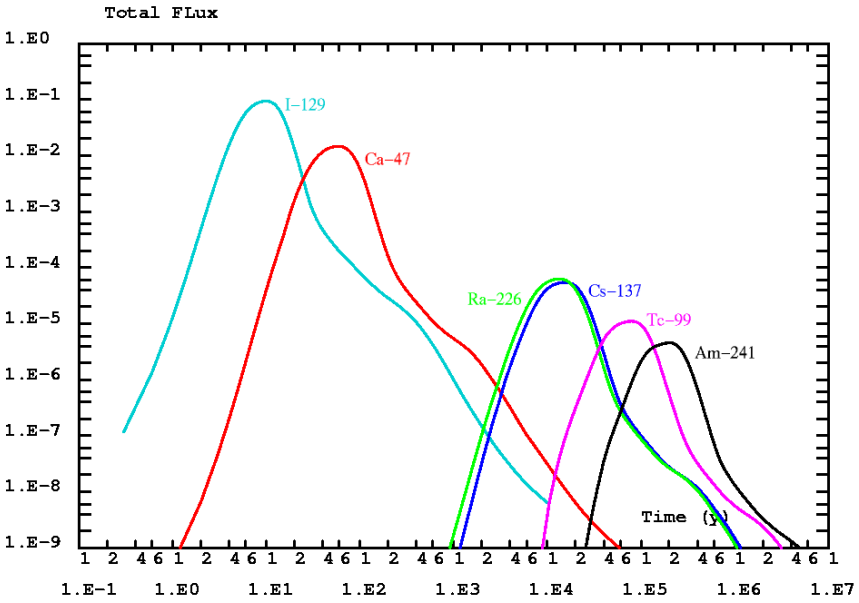


(b) Evolution du flux massique : plan X=1920m

Fig. 4.20 – Tâche 6E : évolution de la masse et du flux massique



(a) Evolution du flux massique : plan X=1880m



(b) Evolution du flux massique : plan X=1880m

Fig. 4.21 – Tâche 6E : évolution du flux massique

les champs de concentrations, figures 4.22, permettent d'évaluer le chemin d'écoulement. Le chemin suivi par le traceur est assez direct rejoignant rapidement le plan X=1800 par lequel il s'évacue.

Plus précisément, il est possible de déterminer le nom des fractures intervenant dans le transport. L'ensemble du milieu vu par le traceur est présenté, figure 4.23a. Ce milieu (mailles rouge figure 4.23b) ne représente qu'une infime partie du réseau fracturé total (mailles noires figure 4.23b). En effet, seules 16 fractures sont parcourues par le traceur. Ces fractures, présentées figure 4.23c, sont facilement identifiables et sont les fractures 19D, 20D, 13D, 17S, 21D, 6D, 25S, 2292B, 22D, 9S, 2107B, 1925B, 2460B, 1072B, 23D, 823B.

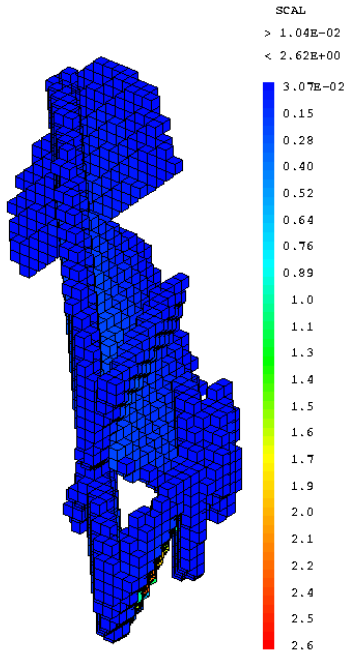
Le bilan de cette étude permet de tirer les conclusions suivantes :

$\Rightarrow$ l'approche Smeared Fractures facilite les études de sensibilité aux nombres de fractures.

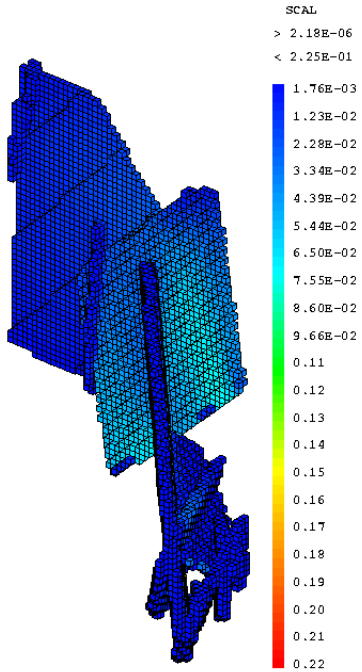
$\Rightarrow$ le transport dans le réseau des 50 plus grosses fractures se réduit à un nombre de 16 fractures parcourues par le traceur, pour l'injection considérée. Une autre injection aurait certainement "vu" autre chose.

$\Rightarrow$ l'extension de l'approche à des traceurs sorbants n'a pas posé de difficultés. Les temps de sortie des différents traceurs traduisent leurs caractères plus ou moins sorbants.

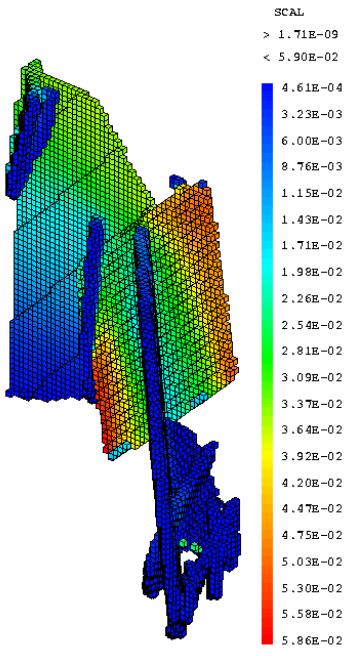
$\Rightarrow$ il est possible d'envisager la prise en compte d'une fracturation inférieure conduisant à un écoulement dans la matrice. Cette fracturation ne devrait pas créer de nouveaux chemins principaux à l'échelle du bloc mais augmenterait le nombre d'itinéraires d'échelle inférieur de chaque chemin, favorisant ainsi la rétention.



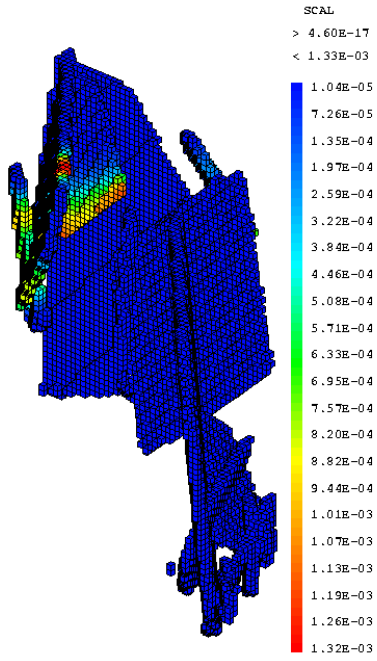
(a) Concentration au temps : 1.8 années



(b) Concentration au temps : 5.1 années

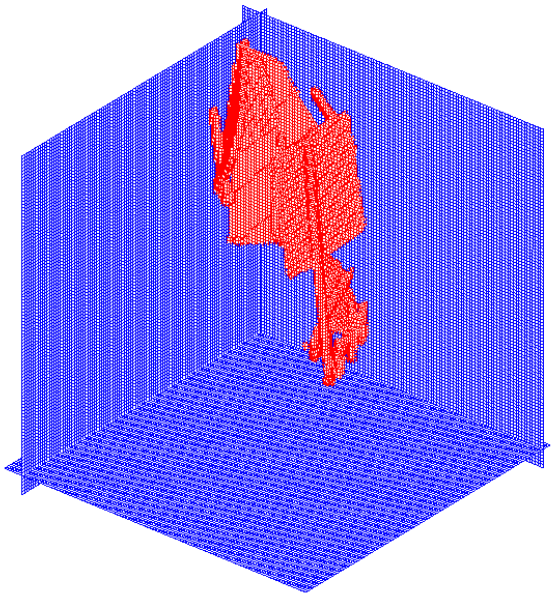


(c) Concentration au temps : 9.9 années

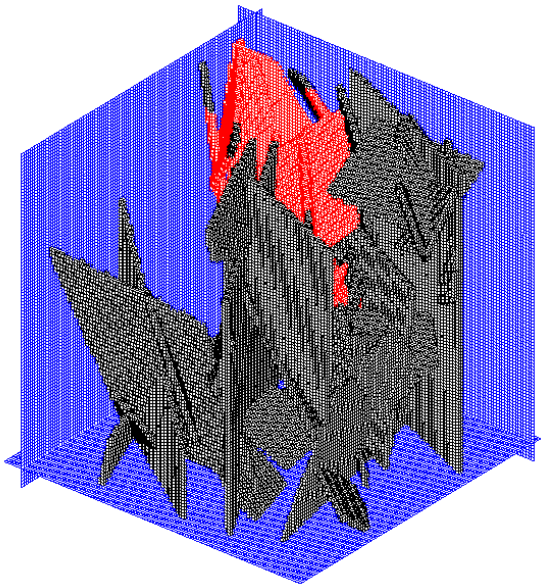


(d) Concentration au temps : 300 années

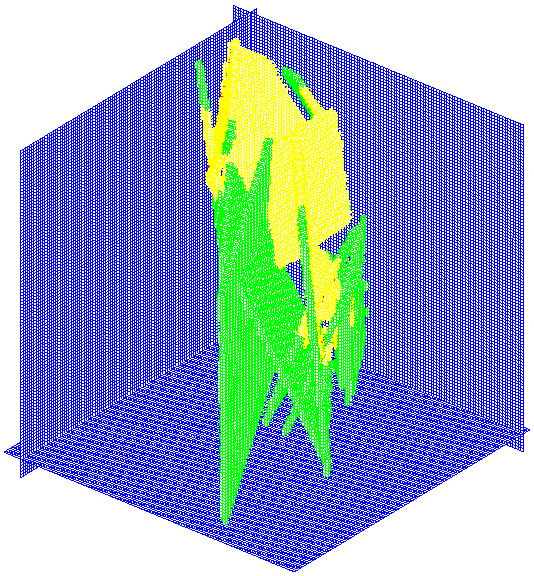
Fig. 4.22 – Tâche 6E : évolution de la concentration dans le bloc



(a) Milieu vu par le traceur (rouge)



(b) Réseau de fractures étudié et Milieu vu par le traceur (rouge)



(c) Les fractures participant au transport avec leurs extensions complètes (vert)

Fig. 4.23 – Tâche 6E : cheminement du traceur et les fractures importantes

Chapitre 5

Conclusions

Ce travail avait pour objet le développement d'une nouvelle approche Smeared fractures pour la résolution de l'écoulement et le transport en milieu fracturé. Le milieu fracturé est représenté par un champ hétérogène de propriétés distribuées sur un maillage régulier avec une résolution numérique des équations selon un formalisme en éléments finis mixtes hybrides. A la différence des autres approches existantes et pour lesquelles les propriétés physiques équivalentes étaient estimées par des rapports de volumes, (l'erreur sur les flux étant vérifiée à posteriori), l'approche Smeared fractures, développée durant cette thèse,

- ⋆ garantit un bon contrôle des flux hydriques et massiques obtenus grâce à des propriétés équivalentes déterminées par comparaison de l'expression du flux analytique et du flux du modèle numérique, pour une fracture unique.

- ⋆ présente, de plus, l'avantage de travailler sur un maillage régulier. Cette caractéristique permet de pouvoir :

  - ⇒ modifier rapidement un maillage en changeant, par exemple, l'inclinaison de certaines fractures, en rajoutant ou en enlevant des fractures, en faisant varier les propriétés de différentes zones... Ainsi, différentes études de sensibilité aux nombres de fractures, aux propriétés physiques du milieu, sont tout à fait abordables sans pour autant monopoliser d'importantes ressources informatiques.

  - ⇒ de limiter le nombre de mailles. Une représentation discrète d'un milieu fracturé nécessite souvent un nombre de mailles important. Avec un maillage régulier, le nombre de mailles du système est facilement géré, ce qui est déterminant pour les temps de calcul d'une simulation. Souvent, un maillage régulier a un nombre de mailles inférieur à celui d'un maillage explicite et, par conséquent, des temps de calculs inférieurs, comme le montre le tableau 5.1 dans le cas d'un réseau de quatre fractures.

Discrétisation	Maillage	Écoulement	Transport (temps par itération)
ref. $\Delta = 0.4$	15	0.8	2
sf. $\Delta = 0.5$	11	0.5	1.4
sf. $\Delta = 0.8$	3	0.2	0.8
sf. $\Delta = 1.$	2	0.15	0.6
sf. $\Delta = 2.$	0.5	0.06	0.3
sf. $\Delta = 3.$	0.3	0.03	0.2

Tab. 5.1 – Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures (discrétisations spatiale et temporelle semblables pour les 2 modèles)

$\Rightarrow$ Le pas de discrétisation choisi dépend directement de la géométrie du milieu et des phénomènes modélisés. Il peut être associé de manière naturelle au volume élémentaire représentatif du milieu pour peu qu'il n'entraine pas une dispersion numérique trop importante.

$\star$ a été étendue à la résolution du transport réactif et non-réactif.

La validation et la qualification de l'approche ont été effectuées sur différentes géométries ainsi que pour différentes situations dans lesquelles la diffusion matricielle jouait un rôle plus ou moins important. Ces études ont, tout d'abord, porté sur des problèmes 2D, afin d'évaluer le comportement général du modèle, l'influence des mécanismes de transport pris en compte, et, enfin, de définir des critères d'utilisation.
Ainsi, pour des modélisations dans lesquelles la diffusion matricielle peut être négligée, l'approche fournit des résultats de bonne précision (quelques pour cent) sur l'estimation des flux massiques. Deux critères d'utilisation sont cependant nécessaires afin de garantir la qualité des résultats.

$\Rightarrow$ Le premier critère, qualifié de géométrique, stipule que la discrétisation spatiale soit suffisamment fine pour conserver la connectivité du réseau de fractures.

$\Rightarrow$ Le second critère est, quant à lui, d'ordre numérique afin d'assurer la monotonie des résultats. Il impose un choix de discrétisation tel que $P_e^{fr} = \frac{\Delta}{\alpha} < 2$.

$\Rightarrow$ Dans le cas de modélisations pour lesquelles la diffusion dans la matrice est à prendre en compte, l'approche fournit, là encore, des résultats tout à fait satisfaisants pour peu qu'un troisième critère soit respecté. Ce critère impose un choix de discrétisation tel que $\Delta < \sqrt{\frac{3}{10} d.R_p.\tau_w}$.

Ainsi, pour des situations dans lesquelles la diffusion dans la matrice est peu importante, ce critère impose une discrétisation fine. Dans ces conditions, l'approche Smeared Fractures se révèle très coûteuse informatiquement, voire impossible à mettre en oeuvre sans négliger

l'influence de la matrice. A l'inverse, pour des régimes ou la profondeur de pénétration du soluté dans la matrice est importante, la modélisation de l'écoulement et du transport, dans l'ensemble du milieu fracturé, est opérationnelle. Ces conditions sont typiquement celles rencontrées lors de modélisation en conditions naturelles après fermeture d'un site de stockage. Conditions pour lesquelles l'approche a été mise au point.
L'approche proposée pour le 3D présente le même comportement que l'approche 2D. Cependant, à la différence du 2D, où les propriétés équivalentes étaient exprimées sous forme scalaire, le 3D a nécessité une détermination sous forme tensorielle. Cette expression tensorielle est imposée par la géométrie 3D du réseau SF qui diffère de celle du réseau réel constitué de plans qui s'intersectent.

Dans le but de confronter l'approche à des applications concrètes et d'aborder quelques problèmes physiques, différentes applications ont été testées sur la base des données du laboratoire souterrain de Äspö (Suède) dans le cadre de la tâche 6 (échelle d'un bloc de 200m).

- ⋆ Une première modélisation a consisté en la calibration d'un modèle d'écoulement et de transport sur les données d'un test de traçage à plusieurs traceurs. Les vitesses d'écoulement des tests de traçage étant très rapides, la profondeur de pénétration du traceur dans la matrice est faible et, par conséquent, la modélisation du transport s'est révélée inabordable par l'approche Smeared Fractures. Néanmoins, les résultats obtenus pour l'écoulement par l'approche Smeared Fractures ont été utilisés afin de servir de conditions aux limites d'un modèle avec un maillage dédié. Les résultats des différents traceurs ont parfaitement pu être calés par rapport aux courbes expérimentales.

- ⋆ Une seconde application a abordé les points suivants :
  - ⇒ l'influence du nombre de fractures sur l'écoulement a été testée.
    Pour des conditions aux limites identiques, on s'est intéressé à la variation du flux hydrique sortant du domaine en fonction du nombre de fractures présentes dans le réseau. Ces fractures ont été, au préalable, classées suivant leur extension. A partir des résultats obtenus, il a été facile de comprendre l'augmentation brutale du flux sortant en présence de certaines fractures.
  - ⇒ Enfin, à partir d'un réseau de cinquante fractures, une modélisation du transport de différents traceurs a été effectuée.
    Les principales fractures, parcourues par le traceur, ont été identifiées. Les temps de sortie et les courbes de flux des différents traceurs, ont été évalués en différents points.

L'approche Smeared Fractures est un outil souple et parfaitement opérationnel pour la modélisation de l'écoulement et du transport dans un milieu fracturé. La modélisation de l'écoulement et du transport par ce type d'approche peut être comparée au travail de Paul Klee (1879-1940) pour la peinture, figure 5.1. Il n'est pas forcément nécessaire de représenter à l'identique un objet pour le reconnaître, en comprendre son utilité.

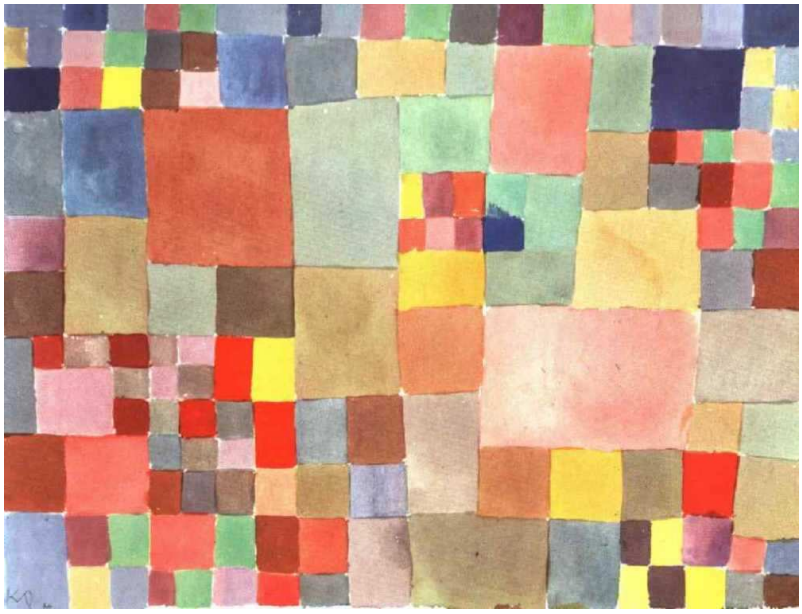


Fig. 5.1 – Paul Klee, 1927 : Flora on Sand

D'autres modélisations appliquées au site Äspö sont en cours.

Chapitre 6

Perspectives

Le bon comportement de l'approche Smeared Fractures que ce soit lors de la qualification et la validation ou dans les applications au site d'Äspö permet d'envisager de nombreuses perspectives.

★ les enrichissements dont la mise en oeuvre est rapide :

⇒ Prise en compte de l'hétérogénéité.
Une fracture naturelle est en réalité assez éloignée de la représentation simplifiée d'un plan de propriétés homogènes. En effet, les propriétés d'une fracture sont en réalité fortement hétérogènes. On peut par conséquent être amené à représenter, voire simplifier cette hétérogénéité. Les propriétés équivalentes, que ce soit pour le 2D ou le 3D, peuvent être exprimées par maille. La prise en compte de l'hétérogénéité d'une fracture ne nécessite pas de développements supplémentaires étant donné que la correction dépend des groupes de mailles et de leurs propriétés associées.
De plus, dans le cadre d'études statistiques afin de déterminer les propriétés du milieu (problèmes inverses), on est souvent contraint d'utiliser des processus de Monte Carlo. En d'autres termes, de nombreuses simulations d'un même scénario sont lancées, pour differents jeux de caractéristiques (inclinaison, ouverture, orientation, propriétés physiques des fractures ou leur nombre). Pour cela, l'approche utilisée doit être rapide et maniable. Or, l'utilisation d'un maillage régulier permet d'envisager facilement toutes ces variations. L'approche Smeared Fractures est donc parfaitement adaptée aux processus de type Monte Carlo.

⇒ Monotonie de la solution.
En envisageant, par exemple, d'effectuer un couplage transport-chimie via l'approche Smeared Fractures, les problèmes de non-monotonie de la solution (concentrations négatives) représentent une difficulté importante. Afin d'éviter les problèmes de monotonie, une reformulation de l'approche

pour un schéma numérique en volumes finis (VF) semble être tout à fait intéressantes. Pour cela, il existe un moyen rapide de passer d'un schéma en éléments finis mixtes hybrides à un schéma en volumes finis. Cette technique appelée "mass lumping" consiste à évaluer les fonctions d'interpolations par des formules de quadrature. Cette approximation revient à sommer la valeur absolue des termes des lignes de la matrice hybride et à affecter cette somme aux termes diagonaux. La matrice diagonale obtenue est identique à celle obtenue par un schéma VF. Néanmoins, quel que soit le modèle, un raffinement important du maillage est nécessaire à la capture d'une diffusion matricielle faible. De plus, le passage à un shéma VF n'apporte pas de solution à la diffusion numérique rencontrée avec les EFMH étant lui aussi dispersif.

★ les enrichissements nécessitant des développements plus importants :

⇒ Modélisation d'une diffusion matricielle faible.
L'approche Smeared Fractures est parfaitement opérationnelle pour la modélisation de l'écoulement et du transport dans les fractures seules ou dans les fractures et la matrice lorsque la diffusion matricielle est importante (décalage des temps d'arrivée des maximums de concentration). La configuration où la diffusion matricielle ne joue qu'un rôle de lissage des courbes n'est pas traitée de manière satisfaisante par l'approche Smeared Fractures. Aussi, un travail est en cours de développement, permettant de palier à cette lacune.
Étant donné le bon comportement de l'approche pour la modélisation du transport dans les fractures seules, l'idée retenue pour les cas de faible diffusion matricielle est de calculer l'écoulement et le transport uniquement dans les fractures. L'action de la matrice est, alors, modélisée par un terme source évalué à partir d'une solution analytique 1D, basée sur l'hypothèse d'une diffusion matricielle 1D orthogonale.
De cette manière, l'approche couvrirait l'ensemble des conditions rencontrées en milieux naturels, allant d'une faible diffusion matricielle à une diffusion matricielle importante.

⇒ Modélisation de l'écoulement dans la matrice.
L'écoulement dans un granite non-altéré est par hypothèse nul. Il existe cependant de nombreux matériaux où une fracturation à petite échelle et/ou une porosité connectée font de la matrice rocheuse un milieu potentiellement soumis aux écoulements. Une refonte du code Smeared Fractures actuel permettrait d'intégrer ces écoulements dans la matrice. Cette refonte reste possible attendu que la matrice est, de fait, maillée.

⇒ En écoulements forcés, des travaux ont montré l'aspect chenalisé de l'écoulement dans une fracture, le traceur suivant alors des chemins préférentiels.

Dans une perspective de détermination des propriétés du milieu (problème inverse), un choix de modélisation peut alors être de représenter la fracture par différents chenaux.
En suivant une philosophie de modélisation différente pour la résolution de l'écoulement et du transport en 3D, le développement d'une version chenalisée est tout à fait envisageable via une approche Smeared Fractures. Le flux, pour un chenal, peut être déterminé de manière exacte en suivant le même raisonnement que lors de la détermination des propriétés équivalentes pour le 2D. Les expressions des propriétés équivalentes affectées à chaque chenal seraient alors proches de celles mises au point pour l'approche 2D.

Table des figures

1.1 (a) La fracture et son front de propagation (b) les trois modes fondamentaux joints (mode I) and faults (mode II ou III) tirés de [Pollard et Aydin 1988]. 12

1.2 Série de modèles conceptuels montrant la géométrie de fractures à différentes échelles [Mazurek et al. 2003]. 14

1.3 Représentation conceptuelle d'une fracture 15

1.4 Formation de fractures dilatées cisaillées. (a) et (c) fractures dilatées originales, (b) et (d) fractures dilatées cisaillées d'aprés [Pollard et Aydin 1988]. 16

1.5 Illustration du problème de la fracture unique. 19

1.6 Evolution de la concentration à la sortie de la fracture : influence de la diffusion matricielle. 21

2.1 Représentation des fractures par une approche S.F. 38

2.2 Illustration de la terminologie "Smeared" 38

2.3 Génération du maillage : mailles à associer à la fracture 41

2.4 Maille X et ses conditions aux limites 43

2.5 Maille Y et ses conditions aux limites 44

2.6 Trajectoire d'une particule (tracé bleu) dans des éléments de maillage Smeared Fractures 51

2.7 Génération du maillage S.F. : 1^{iere} sélection des mailles associées à la fracture 57

2.8 Génération du maillage S.F. : strate supérieure $i+1$ et strate inférieure i . 58

2.9 Maillage S.F. : application à un réseau de 11 fractures tirées des données de Äspö : échelle kilométrique 59

2.10 Maillage S.F. : directions considérées pour l'équivalence des flux (X et Y) et direction assurant la connectivité des strates (Z) 61

2.11 Maillage S.F. : l'ensemble X et ses conditions aux limites 64

2.12 Maillage S.F. : l'ensemble Y et ses conditions aux limites, direction d'écoulement $\vec{x}$ 65
2.13 Maillage S.F. : l'ensemble Y et ses conditions aux limites, direction d'écoulement $\vec{y}$ 69
2.14 Maillage S.F. : ensembles X en vert et ensembles Y en bleu et rouge 71
2.15 Position d'une fracture dans un ensemble X 72
2.16 Position d'une fracture dans un ensemble Y 73
2.17 Ensemble Y : propriétés géométriques 74
2.18 Fracture unique : longueurs L_θ^{sf} et L_β^{sf} 79
2.19 Fracture unique : détermination de la longueur L_β^{sf} 80

3.1 Points utiles à la création des intersections 91
3.2 Influence de l'inclinaison : flux massique total sortant de la fracture 94
3.3 Ensembles des géométries et tests de sensibilité effectués 95
3.4 Fracture unique : maillage des deux modèles 96
3.5 Fracture unique sans matrice : Flux massique total sortant 97
3.6 Maillage Smeared Fractures : effet de bord 98
3.7 Réseau de 4 fractures : maillage des deux modèles 99
3.8 Réseau de 4 fractures : conditions en charge 100
3.9 Réseau de 4 fractures : champs de vitesse obtenus 100
3.10 Réseau de 4 fractures : flux massique total en sortie 101
3.11 Conséquence d'une sous-discrétisation : perte de la géométrie du milieu fracturé 102
3.12 Maillage des 11 Fractures 103
3.13 Masse et flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle) : étude de sensibilité 106
3.14 Bloc matriciel 107
3.15 Diffusion matricielle : sensibilité à la discrétisation 108
3.16 Bloc matriciel 108
3.17 Diffusion matricielle : sensibilité au nombre de Fourier 109
3.18 Fracture unique : flux massique total sortant pour différentes cinétiques . . 111
3.19 Flux massique total pour différentes vitesses moyennes d'écoulement dans la fracture et différentes discrétisations 112

3.20 Fracture unique : flux massique total sortant pour différentes valeurs du coefficient D_m . . . 114
3.21 Fracture unique : influence de la discrétisation sur le flux massique sortant 115
3.22 Réseau de 4 fractures : champ de concentrations (modèle de référence à gauche, modèle S.F. à droite) $\Delta = 0.5$ m . . . 117
3.23 Réseau de 4 fractures : influence de la discrétisation sur le flux massique sortant . . . 118
3.24 Masse et flux massique pour un réseau de 11 fractures : étude de sensibilité 121
3.25 Validation de l'écoulement et du transport 3D : configurations étudiées . . 125
3.26 Flux massique sortant pour la direction x (gauche), pour la direction y (droite) . . . 129
3.27 Fracture unique 3D : champ de concentrations, $\Delta = 2$ m, sans diffusion dans la matrice, direction d'écoulement 3 . . . 131
3.28 Bloc matriciel . . . 132
3.29 Diffusion matricielle : sensibilité à la discrétisation . . . 133
3.30 Diffusion matricielle : sensibilité au nombre de Fourier . . . 134
3.31 Flux massique sortant direction y . . . 135
3.32 Fracture unique 3D : champ de concentrations, $\Delta = 4$ m, condition d'écoulement 3 . . . 137

4.1 Localisation de l'île de Äspö . . . 140
4.2 Le laboratoire expérimental de Äspö . . . 140
4.3 Création du maillage Smeared Fractures . . . 144
4.4 Caractéristiques des fractures de type 1 . . . 146
4.5 Caractéristiques des fractures de type 2 . . . 147
4.6 Evolution de la masse totale présente dans le bloc et du flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle) . . . 149
4.7 Evolution du flux massique dans différentes fractures du réseau de 11 fractures 151
4.8 Evolution de la masse dans différentes fractures du réseau de 11 fractures . 152
4.9 Etude des différents types de fracturation : courbes de flux massique pris sur tout le contour du bloc . . . 154
4.10 Etude des différents types de fracturation : courbes de masse . . . 155
4.11 Etude des différents types de fracturation : champs de concentrations . . . 157
4.12 Etude des différents types de matrice : courbes de flux massique et de masse 159

4.13 Tâche 6D : condition en charges 161
4.14 Tâche 6D : charges et vitesses dans les 11 fractures 162
4.15 Tâche 6D : maillage du modèle discret 162
4.16 Tâche 6D : résultats S.F. et du modèle discret pour les 4 fractures 163
4.17 Tâche 6D : résultats de calibration 164
4.18 Tâche 6E : sensibilité du flux sortant au nombre de fractures 166
4.19 Tâche 6E : connectivité des fractures 7S et 2292B 167
4.20 Tâche 6E : évolution de la masse et du flux massique 170
4.21 Tâche 6E : évolution du flux massique 171
4.22 Tâche 6E : évolution de la concentration dans le bloc 173
4.23 Tâche 6E : cheminement du traceur et les fractures importantes 174

5.1 Paul Klee, 1927 : Flora on Sand 178

Liste des tableaux

1.1 Expression des paramètres de transport pour la fracture et la matrice . . . 18

1.2 Valeur du coefficient de retard : sensibilité au gradient de charge ($e = 2.6.10^{-2}$ m) . . . 20

1.3 Valeur du coefficient de retard : sensibilité à l'ouverture de fracture ($\nabla h = 10^{-2}$) . . . 20

2.1 Expression des propriétés équivalentes pour le 2D . . . 49

2.2 Indices de configuration d'un ensemble Y et tenseurs associés . . . 82

2.3 Expression des propriétés équivalentes pour le 3D . . . 84

3.1 Caractéristiques de la fracture . . . 93

3.2 Fracture unique : Précision des résultats . . . 98

3.3 Réseau de quatre fractures : propriétés . . . 99

3.4 Réseau de 4 fractures : Précision des résultats . . . 102

3.5 Caractéristiques géométriques des fractures . . . 104

3.6 Caractéristiques physiques des fractures . . . 104

3.7 Précision du modèle S.F. vs modèle de référence (influence de K_{fr}) . . . 113

3.8 Précision du modèle S.F. vs modèle de référence (influence de D_m) . . . 114

3.9 Précision obtenue : modèle S.F. vs modèle de référence (étude influence K_r) 118

3.10 Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures (discrétisations spatiale et temporelle semblables pour les 2 modèles) 119

3.11 Fracture unique 3D : Propriétés issues de [Dershowitz et al. 2003] . . . 124

3.12 Erreurs commises sur les flux hydriques pour les directions x,y : sensibilité à la direction de l'écoulement et à l'inclinaison de la fracture . . . 127

3.13 Erreur commise sur les flux hydriques pour les directions x,y : sensibilité à Δ 127

3.14 Fracture unique 3D : Propriétés . . . 128

4.1 Les différentes Tâches effectuées à Äspö 142
4.2 Caractéristiques géométriques des fractures 145
4.3 Caractéristiques physiques des fractures 148
4.4 Caractéristiques physiques de la matrice 153
4.5 Tâche 6D : transmissivité, épaisseur initiale et calibrée des fractures 164
4.6 Tâche 6D : propriétés de la matrice 164
4.7 Tâche 6E : localisation de la source d'injection 168
4.8 Tâche 6E : coefficient d'adsorption, $m^3.kg^{-1}$ 168
4.9 Tâche 6E : plan X=1920 m 169
4.10 Tâche 6E : plan X=1880 m 169
4.11 Tâche 6E : plan X=1800 m 169

5.1 Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures (discrétisations spatiale et temporelle semblables pour les 2 modèles) 176

Bibliographie

[Anderson et al. 2002] P. Anderson, J. Byegard, B. Dershowitz, T. Doe, J. Hermanson, P. Meier, E.L. Tullborg, A. Winberg. Final report of the TRUE Block Scale project. SKB, Technical Report TR-02-13, Avril 2002.

[1] www.andra.fr.

[BET ANDRA 2002] Recherches pour le stockage des déchets radiactifs à haute activité at à vie longue. Bilan de Etudes et Travaux 2002.

[2] Rock Fractures and Fluid Flow : contemporary understanding and applications. National research council committee onf fracture characterization and fluid flow. National academy press, Washington.D.C. 1996.

[Baecher 1983] G.B. Baecher Statistical analysis of rock mass fracture, Jour. Inter. Associ. Math. Geol., vol. 15, No 2, pp. 329-348, 1983.

[Barenblatt et al. 1960] G.I. Barrenblatt, I.P. Zheltov et I.N. Kochina. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks (strata), Prikl. Mat. Mekh. 24, pp. 852-864; J. Appl. Math. Mech. 24, pp. 1286-1303, 1960.

[Barten 1996] W. Barten. Linear response concept combining advection end limited rock matrix diffusion in a fracture network transport model. Water Ressources Research, Vol. 32, No. 11, pp. 3285-3296, 1996.

[Barton 1978] C. Barton. Two-dimensional fracture network model. Proceedings of the internationnal symposium on fundamentals of rock joints, pp. 303-310, 1978.

[Bear et al. 1993] J. Bear, C.-F. Tsang, G. de Marsily. Flow and contaminant transport in fractured rock. Academic Press, 1993.

[Benabderrahmane et al. 2000] H. Benabderrahmane, B. Dershowitz, J. Selroos, Uchida, A. Winberg. Task 6 : 'Performance Assessment Modeling Using Site Characterisation Data (PASC). Disponible sur le site www.skb.se, 2000.

[Berkowitz 1994] B. Berkowitz. Modeling flow and contaminant transport in fractured media. Advances in Porous Media. Volume 2. Corapcioglu Ed. Elsevier, 1994.

[Bernard-Michel 2004] G. Bernard-Michel. Développement d'un nouvel outil de calcul du transport de radio-nucléides en milieux poreux dans Cast3m. Rapport DM2S. SFME/MTMS/RT/04/007/A. 2004.

[Bernard-Michel et al. 2004] G. Bernard-Michel, C. Le Potier, A. Beccantini, S. Gounand et M. Chraibi. The ANDRA Couplex 1 test case : Comparaisons between finite-element, mixed hybrid finite element and finite volume element discretizations. Computational Geosciences 8 : pp. 187-201. Kluwer Academic Publishers 2004.

[Bibby 1981] R. Bibby. Mass transport of solutes in dual porosity media. Water Ressources Research, Vol. 17, No 8, pp. 1225-1236, 1998.

[Bodin et al. 2003] J. Bodin, G. Porel, F. Delay. Simulation of solute transport in discrete fracture networks using the time domain random walk method. Earth and Planetary Science Letters 208, pp. 297-304, 2003.

[Brown 2002] G.O. Brown. Henry Darcy and the making of a law. Water Ressources Research, Vol. 38, No 7, pp 11 1-12, 2002.

[Cacas et al. 1990a] M.C. Cacas, E. Ledoux, G. De Marsilly, B. Tillie. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network : Calibration and validation 1. The flow model. Water Ressources Research, Vol. 26, No. 3, pp. 479-489, 1990.

[Cacas et al. 1990b] M.C. Cacas, E. Ledoux, G. De Marsilly, A. Barbreau, P. Calmels, B. Gaillard, R. Margritta. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network : Calibration and validation 1. The transport model. Water Ressources Research, Vol. 26, No. 3, pp. 491-500, 1990.

[Carrera et al. 1998] J.Carrera, X.Sanchez-Vila, I.Benet, A.Medina, G.Galarza, J.Guimera. On matrix diffusion : formulations, solution methods and qualitative effects. Hydrogeology Journal, 6, pp. 178-190, 1998.

[Carslaw et Jaeger 1959] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger. Conduction of heat in solids, 2nd ed., Oxford University Press, new York, 1959.

[Chan et al. 2001] T. Chan, F.W. Stanchell, R.M. Srivastava, N.W. Scheier. Stochastic conditional flow and transport simulations of tracer test No.2 (TT2) of the moderately fractured rock experiment at the underground research laboratory : a geostatistics case study. Ontario Power Generation. Report No : 06819-REP-01200-10039-R00. 2001.

[Dabbene et Dada 1995] F. Dabbene, L. Dada. Résolution des équations de Darcy dans un massif fracturé par une méthode d'élements finis mixtes hybrides. Rapport DMT 95/558, 1995.

[Dabbene et al. 1998] F. Dabbene, H. Paillere et J.P. Magnaud. Mixed-hybrid finite elements for transport of polluant by underground water. 10th Int. Conf. on Finite Elements in fluids, Tucson, Arizona, 1998.

[Dabbene 1994] F. Dabbene. Mise en oeuvre des éléments finis mixtes hybrides 3D : application à la résolution des équations de Darcy. Rapport DMT 94/565, 1994.

[Dabbene 1995] F. Dabbene. Schémas de diffusion-convection en éléments finis mixtes hybrides. Rapport DMT 95/613, 1995.

[Delay et Bodin 2001] F. Delay, J. Bodin. Time domain random walk method to simulate transport by advection-dispersion and matrix diffusion in fracture networks. Geophysical research letters, Vol. 28, No. 21, pp. 4051-4054, 2001.

[Delay et al. 2004] Delay, F., G. Porel, and S. Bernard. 2004. Analytical 2D model to invert hydraulic pumping tests in fractured rocks with fractal behavior. Geophysical Research Letters 31, no. 16, 10.1029/2004GL020500.

[Dershowitz et al. 2003] B. Dershowitz, A. Winberg, J. Hermanson, J. Byegard, E. Tullborg, P. Anderson, M. Mazurek. Asemi-synthetic model of block scale conductive structures at the ÄspÖ hard rock laboratory. ÄspÖ task force IPR-03-13, 2003.

[Dershowitz 1985] W.S. Dershowitz. Rock joint systems, Ph.D. Thesis, Departement of civil Engineering, Massachussets Institute of Thechnology, 1985.

[Dverstorp et al. 1992] B. Dverstorp, J. Anderson, W. Nordqvist. Discrete fracture network interpretation of field tracer migration in sparsely fractured rock. Water Ressources Research, Vol. 28, No. 9, pp. 2327-2343, 1992.

[Ezzedine 1994] S. Ezzedine. Modélisation des écoulements et du transport dans des milieux fissurés. Approches continues et discontinues. Thèse de l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris. 1994.

[Fourno et al. 2002] André Fourno, Christophe Grenier. Qualification and validity of a Smeared Fractures modeling approach for flow and transport in fractured media. XIV international conference on computatonal methods in water resources, Delft, Hollande. Proceedings CMWR2002, pp. 319-326, 2002.

[Fourno et al. 2004a] André Fourno, Christophe Grenier. "Qualification and validity of a Smeared Fractures modeling approach for transfers in fractured media". Proceedings du 'Second International Symposium on Dynamics of Fluids in Fractured Rock', Lawrence Berkeley National Laboratory. 2004.

[Fourno et al. 2004b] André Fourno, Christophe Grenier. "Smeared fractures : a promising approach to model transfers in fractured media". XV international conference on computatonal methods in water resources, Chapel Hill, Caroline du Nord. Proceedings CMWR2004, 2004.

[Genty et al. 1998] A. Genty, C. Grenier, E. Mouche, E. Tevissen. Influence of matrix diffusion on solute transport in a 3D fracture network. Proceedings du congrés Computional Methods in Water Resources XII, Crète. 1998.

[Gomez-Hernandez et al. 1999] J. Gomez-Hernandez, H.Henricks Franssen, A. Sahuquillo, J. Capilla. Calibration of 3D transient groundwater flow models in fractured rocks. Proceedings of the ModelCare'99 conference. Calibration and reliability in ground water modelling - coping with uncertainty, Zurich, pp. 20-23, 1999.

[Grenier et Mouche 1997] C. Grenier, E. Mouche, E. Tevissen. Modélisation du transport d'un traceur réactif dans une fracture isolée. Rapport DMT 97/596, 1997.

[Grenier et al. 1999] C. Grenier, E. Mouche, E. Tevissen. Dual porosity approaches for transport in fractured media : a numerical investigation at the block scale. Proceedings du meeting Geotrap, Carlsbad, Nouveau Mexique, 1999.

[Grenier 2000] C. Grenier. Modélisation du transport dans un bloc fracturé par approches double porosité. Rapport DMT. SEMT/MTMS/RT/00-029/A, 2000.

[Grenier et al. 2004] C. Grenier, A. Fourno, E. Mouche, F. Delay, H. Benabderrahmane. Assessment of retention processes for transport in a fractured system at Äspö (Sweden) granitic site : from short-time experiments to long-time predictive models. 2004.

[H.Hoteit et al. 2002] H.Hoteit, R.Mosé, B.Philippe, Ph. Ackerer and J.Erhel, About the maximum principle violations of the mixed-hybrid finite element method applied to diffusion equations, Internat. J. Numer. Methods Engrg. 55 pp. 1373-1390, 2002.

[H.Hoteit 2002] H.Hoteit Simultation d'écoulement et de transports de polluants en milieu poreux : application à la modélisation de la sûreté des dépôts de déchets radioactifs. Thèse de l'université de Rennes 1, 2002.

[Huyakorn et al. 1983] P. Huyakorn, B. H. Lester et J. W. Mercer. An efficient finite element technique for modeling transport in fractures porous media. Single species transport. Water Ressources Research, Vol. 19, No. 3, pp. 841-854, 1983.

[Koudina et al. 1998] N. Koudina, R. Gonzalez Garcia, J.F Thovert, P.M. Adler. Permeability of three-dimensional fracture networks. Physical Rewiew E Vol. 57, Num. 4 pp. 4466-4479, 1998.

[Law et Wilshaw 1975] B.R. Law and T.R. Wilshaw. Fracture of brittle silids. Cambridge : Cambridge University Press, pp 204, 1975.

[Le Borgne et al 2004] Le Borgne, T., O. Bour, J.R. de Dreuzy, P. Davy, and F. Touchard. 2004. Equivalent mean flow models for fractured aquifers : Insights for a pumping test scaling interpretation. Water Resources Research 40, no. 3, doi : 10.1029/2003WR002436.

[Long et al. 1982] J.C.S Long, J.S. Remer C.R. Wilson, P.A. Witherspoon. Porous media equivalent for networks of discontinous fractures, Water Ressources Research, Vol. 18, No. 3, pp. 645-658. 1982.

[McKenna et Reeves 1999] S.A. McKenna, P.C. Reeves. Fractured continuum approach to stochastic permeability modeling. AAPG Geostatistics and Stochastic Modeling 2^{nd} ed. 1999.

[Maloszewski et Zuber 1985] P. Maloszewski, A. Zuber. On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix. Journal of Hydrology, 79 (1985) pp 333-358, 1985.

[Maloszewski et Zuber 1990] P. Maloszewski, A. Zuber. Mathematical modeling of tracer behavior in short-term experiments in fissured rocks. Water Ressources Research, Vol. 26, No. 7, pp. 1517-1528, 1990.

[De Marsily 1981] G. de Marsily. Hydrogéologie quantitative. Collection sciences édition Masson. 1981.

[De Marsily et Renard 1997] G. de Marsily, Ph. Renard. Calculating equivalent permeability : a review. Advances in Water Ressources. Vol. 20, No. 5-6, pp. 253-278, 1997.

[Mazurek et al. 1996] M. Mazurek, P. Bossart, T. Eliasson. Classification and characterization of water-conducting features at Äspö : results of investigations on the outcrop scale. SKB International Cooperation Report 97-01, 1996.

[Mazurek et al. 2003] M. Mazurek, A. Jakob, P. Bossart. Solute transport in crystalline rocks at Äspö I : Geological basis and model calibration. Journal of Contaminant Hydrology, 61 (2003) pp. 157-174, 2003.

[Moreno et Neretnieks 1993] Fluid flow and solute transport in a network of channels. Journal of Contaminant Hydrology, 25, pp. 283-298, 1993.

[Mosé et al. 1994] R. Mosé, Ph. Ackerer, P. Siegel, G. Chavent. Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model : Luxury or necessity ? Water Ressources Research, Vol. 30, pp. 3001-3012, 1994.

[Neretnieks 1980] I. Neretnieks. Diffusionin the rock matrix : an important factor in radionuclide retardation ? Journal of Geophysical Research, Vol. 85, No B8, pp4379-4397, 1980.

[Neretnieks 1982] I. Neretnieks. Tracer movement in a single fissure in granitic rock : some experimental results and their interpretation. Water Ressources Research, Vol. 18. No. 4, pp. 849-858. 1982.

[Neuman 1988] S.P. Neuman. A proposed conceptual framework and methodology for investigating flow and transport in Swedish crystalline rocks. SKB, Arbetsrapport 88-37, 1998.

[Norman 1992] S. Norman. HYDRASTAR a code for stochastic simulation of groundwater flow. SKB, TR 92-12. 1992.

[Oda 1986] M. Oda. An equivalent continuum model for coupled stress and fluid flow analysis in jointed rock masses. Water Ressources Research, Vol. 22, No. 13, pp. 1845-1856, 1986.

[Pinder et al. 1993] G. F. Pinder, P. S. Huyakorn, E. A. Sudicky. Simulation of flow and transport in fractures porous media. Flow and contaminant transport in fractured rock. Ed. Jacob Bear, Chin-Fu Tsang, Ghislain de Marsily, 1993.

[Pirson 1953] S.J. Pirson. Performance of fractured oil reservoirs, Bull. Am. Assoc. Petrol. Geologist 37, pp. 232-244, 1953.

[Pollock 1988] D.W. POLLOCK. Semianalytical computation of pathlines for finite differential models, Groundwater, 26(6), pp. 743-750, 1988.

[Pollard et Aydin 1988] D.D. Pollard and A. Aydin, Progress in understanding jointing over past century. Geological Society of America Bulletin, 100 :1181-1204, 1988.

[Renard 1997] Ph. Renard. Modélisation des écoulements en milieux poreux hétérogènes. Calcul des perméabilités équivalentes. Rapport de Thèse Ecole des Mines de Paris, Centre d'informatique Géologique. Numéro 32, 1997.

[Sanchez-Villa et al. 1995] X. Sanchez-Villa, J. P. Girardi, J. Carrera. A synthesis of approaches to upscaling of hydraulic conductivities. Water Ressources Research. Vol. 31, No. 4, pp. 867-882, 1995.

[Selroos et al. 2002] J. Selroos, D.D. Walker, A. Ström, B. Gylling, S. Follin. Comparison of alternative modelling approaches for groundwater flow in fractured rock. Journal of Hydrology, 257, pp. 174-188, 2002.

[Sudicky et Frind 1982] E. A. Sudicky et E. O. Frind. Contaminant transport in fractured porous media : analytical solutions for a system of parallel fractures. Water Ressources Research. Vol. 18. No. 6, pp. 1634-1642, 1982.

[Svensson 1999a] U. Svensson. Representation of fracture networks as grid cell conductivities. Technical report SKB. TR-99-25, 1999.

[Svensson 1999b] U. Svensson. A laboratory scale analysis of groundwater flow and salinity distribution in the Aspo area. Technical report SKB. TR-99-24, 1999.

[Svensson 2001] U. Svensson. A continuum representation of fracture networks. Part I : Method and basic test cases. Journal of Hydrology, 250, pp. 170-186, 2001.

[Tanaka et al. 1996] Y. Tanaka, K. Minyakawa, T. Igarashi, Y. Shigeno. Application of three-dimensional smeared fracture model to the hydraulic impact of the Aspo tunnel. International cooperation report SKB. ICR 96-07, 1996.

[Tang et al. 1981] D. H. Tang, E. O. Frind, E. A. Sudicky, Contaminant transport in fractured porous media : analytical solution for a single fracture. Water Ressources Research, Vol. 17, No. 3, pp. 555-564, 1981.

[Thouvenin et Grenier 2000] G. Thouvenin et C. Grenier. Represnetation des milieux fracturés naturels par des approches de types champs continus hétérogènes - modélisation des transports par une approche smeared fractures. Rapport DMT. SEMT/MTMS/RT/00-024/A, 2000.

[Tsang et al. 1996] Y.W. Tsang, C.F. Tsang, F.V. Hale. Tracer transport in a stochastic continuum model of fractured media. Water Ressources Research Vol. 32, No. 10, pp. 3077-3092, 1996.

[Warren et Root 1963] J.E. Warren et P.J. Root. The behaviour of naturally fractured reservoirs, Soc. Petrol. Eng. J.3, pp. 245-255, 1963.

[Widén et Walker 1999] H. Widén, D. Walker. SR 97. alternative models project : stochastic continuum modelling of Aberg, SKB Report R-99-42. Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co., Stockholm, Sweden.

[Winberg et al. 2000] A.Winberg, P.Andersson, J.Hermanson, J.Byegard, V.Cvetkovik, L.Birgersson. Äspö Hard Rock Laboratory, final report of the first stage of the tracer retension understanding experiments. Technical Report TR-00-07, 2000.

Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturés : application au site de Äspö (Suède)

Dans le cadre de la problématique de l'enfouissement des déchets nucléaires, la barrière géologique constitue la dernière zone de transfert des radio-éléments. Cette barrière pouvant être fracturée des recherches sont menées pour faire progresser la modélisation des transferts en milieu fracturé. La complexité du milieu, les contrastes existant entre les différentes zones et les incertitudes liées aux propriétés physiques rendent cette tâche complexe. De plus, après fermeture du site, les écoulements lents dans le milieu favorisent des phénomènes diffusifs dans la roche qui contribuent à augmenter le temps de transit des radio-éléments. Dans ce contexte, une approche Smeared Fractures a été développée pour un schéma en Eléments Finis Mixtes Hybrides et implémentée dans le code Cast3M. Cette approche permet une représentation explicite des fractures principales alors que la fracturation de plus petite échelle est homogénéisée. L'utilisation d'un maillage régulier permet, en outre, d'éviter un maillage explicite coûteux. La présence des fractures est prise en compte par un champ hétérogène de propriétés. Ces propriétés sont affectées de manière à respecter les critères de conservation des flux (hydraulique et massique) à l'échelle de la fracture. Pour l'écoulement, l'approche Smeared Fractures présente des performances comparables à celles obtenues avec des approches discrètes tandis que le caractère 3D de la géométrie des blocs matriciels est respecté lors de la résolution du transport. Le choix des discrétisation spatiale et temporelle doit respecter des critères qui ont été établis. Néanmoins, à l'intérieur de ces limites, et suivant la précision désirée, l'approche permet de réduire les temps de calcul. Les résultats de validation et de qualification de l'approche appliquée à des géométries 2D et 3D, synthétiques et réalistes, sont présentés pour différents jeux de paramètres physiques. Des applications de l'approche au site d'Äspö (Suède) clôturent ce travail.

Multi-scale modelling of transfers in fractured media - Application to the Äspö site (Sweden)

In the field of nuclear waste storage, the geological barrier is the last transfer zone for radio-elements. Since fractures are to be found in geological media, especially for granitic fractured media, special emphasis is put on improving modeling approaches to transfer processes in fractured media. It remains a challenging task due to the large contrasts in the properties of different units of the medium, the geometrical complexity of the system and strong level of uncertainties for flow and transport parameters. In addition, for post closure natural flow conditions, flow is slow and diffusion processes play a major role contributing to the retention of the plume. In this context, a Smeared Fractures approach was developed for a Mixed and Hybrid Finite Element scheme and implemented in our code, Cast3M. This approach allows for explicit representation of major fractures while adopting an homogenized representation of lower levels of fracturation. This Smeared Fracture approach doesn't require explicit meshing of the complex fracture network geometry. The fractured block is represented on regular mesh, the presence of the fracture being taken into account through an heterogeneous field of parameters. Considering conservation of flow and mass fluxes for each fracture, these parameters are derived. The performances of Smeared Fractures approach are comparable to discrete modeling for flow and presents in addition the advantage of taking full 3D matrix block geometry into account for transport. The size of the mesh as well as temporal discretization have to comply with criteria that were established. Nevertheless, within these boundaries coarser discretization is possible allowing for notable computing costs. The validation and qualification phase was conducted for 2D and 3D cases. These include results on synthetics and realistic systems, for different flow regimes and parameter values. The approach is finally applied on several cases from the Äspö site, Sweden.

Mots clefs : Milieux fracturés, poreux, granite, modélisation, écoulement, transport, stockage, déchets radioactifs, Äspö, éléments finis mixtes hybrides.