HAL
open science

Transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé. Modélisation par homogénéisation et applications

Tien Dung Tran Ngoc

To cite this version:

Tien Dung Tran Ngoc. Transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé. Modélisation par homogénéisation et applications. Hydrologie. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2008. Français. NNT : . tel-00327123

HAL Id: tel-00327123

https://theses.hal.science/tel-00327123v1

Submitted on 7 Oct 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.

UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1

N° attribué par la bibliothèque
/__/__/__/__/__/__/__/__/__/__/

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1

Spécialité : ***Sciences de la Terre, de l'Univers et de l'Environnement***

préparée au

Laboratoire d'étude des **T**ransferts en **H**ydrologie et **E**nvironnement
(LTHE, UMR 5564, CNRS-INPG-IRD-UJF)

dans le cadre de l'Ecole Doctorale **«Terre, Univers, Environnement»**

présentée et soutenue publiquement par

Tien Dung TRAN NGOC

le 10 juillet 2008

TRANSPORT DE SOLUTES DANS UN MILIEU A DOUBLE-POROSITE NON SATURE. MODELISATION PAR HOMOGENEISATION & APPLICATIONS

Directeurs de thèse :

Jolanta LEWANDOWSKA & Michel VAUCLIN

JURY

Mme Azita AHMADI-SENICHAULT	MCF-HDR ENSAM, TREFLE-Bordeaux	Rapporteur
Mr Philippe ACKERER	DR CNRS, IMFS-Strasbourg	Rapporteur
Mr Jean-Louis AURIAULT	PR des Universités	Examinateur
Mr Henri BERTIN	DR CNRS, TREFLE-Bordeaux	Examinateur
Mr Yves GAGNE	PR UJF, LEGI-Grenoble	Président
Mme Jolanta LEWANDOWSKA	MCF-HDR, 3SR-Grenoble	Directrice de thèse
Mr Michel VAUCLIN	DR CNRS, LTHE-Grenoble	Co-Directeur de thèse

A toute ma famille ***TRAN NGOC*** *et al.*
Qui Nhon, Binh Dinh, Viet Nam

Remerciements

La thèse, c'est fini ...

Mais avant de tourner une nouvelle page, qu'il me soit permis d'exprimer toute ma gratitude aux personnes qui de près ou de loin ont accompagné ce travail et l'ont rendu possible.

Cette thèse a été réalisée au sein du LTHE, grâce au soutien financier du CNRS par l'octroi d'une bourse BDI-PED. Elle s'est inscrite dans le cadre du PNRH (actuellement GDR - Hydrodynamiques et Transferts dans les Hydrosystèmes Souterrains).

Permettez-moi d'exprimer toute ma profonde reconnaissance à Jolanta LEWANDOWSKA, ma directrice de thèse, qui m'a témoigné sa grande responsabilité et sa disponibilité permanente, qui m'a apporté son aide scientifique et qui, par sa patience et sa compétence m'a transmis, pas à pas, sa passion pour les milieux poreux. Grâce à elle, j'ai découvert le monde de la recherche, et acquis une méthode de travail rigoureuse. Sans elle, cette thèse n'aurait évidemment jamais vu le jour. Hormis l'aspect scientifique, elle m'a réservé une attention particulière se traduisant par des conseils et des gestes de la vie quotidienne. J'ai apprécié cette attention, du point de vue microscopique, à travers un sandwich au midi, ou une glace en été.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Michel VAUCLIN, mon co-directeur de thèse, pour ses précieux conseils, ses encouragements pertinents, ses propositions décisives et sa disponibilité. En travaillant avec lui, j'ai profité de ses qualités reconnues. Enfin, il a renforcé mon optimisme par la phrase « Tout est possible ! ».

Je tiens à remercier bien vivement Henri BERTIN pour m'avoir accueilli au sein de son équipe et m'avoir permis de réaliser des expériences dans les meilleures conditions. Qu'il trouve ici le témoignage de ma reconnaissance pour sa gentillesse, sa disponibilité et son intérêt scientifique.

Je remercie très chaleureusement Yves GAGNE, qui a bien voulu s'intéresser à ce travail et accepter de présider le jury.

Je suis très honoré que Azita AHMADI-SENICHAULT, Philippe ACKERER et Jean-Louis AURIAULT aient accepté d'être respectivement les rapporteurs et l'examinateur de mon travail de thèse. Je les remercie vivement pour le temps qu'ils ont consacré à évaluer avec attention mon manuscrit.

Je remercie également Jean-Dominique CREUTIN, ex-directeur du LTHE, pour m'avoir ac-

cueilli au sein de son laboratoire dans de très bonnes conditions de travail.

Je suis très reconnaissant envers les personnes qui m'ont permis de mettre au point les expériences. Merci donc à Jean-Marc et Jean-Marie pour la partie Sud-Est de la France (Grenoble) et Audrey, Paul et Alain pour la partie du Sud-Ouest (Bordeaux).

Un merci sincère s'adresse à Adam, avec qui j'ai beaucoup discuté pour clarifier les simulations numériques d'écoulement.

Je remercie évidemment l'équipe administrative du LTHE, Sylviane, Odette, Elif, Martine et Joseph pour l'aide amicale qu'ils m'ont apporté efficacement et toujours avec le sourire dans le dédale des démarches et tâches administratives.

Un amical remerciement à tous les membres du laboratoire (à Grenoble et à Bordeaux) pour leur aide et leur bonne humeur durant ces années de thèse. Notamment, merci à Céline et Guillaume qui ont toujours été à ma disposition pour répondre à mes questions diverses. Merci aussi à Wajdi pour les supports techniques informatiques. Merci à Aurélien et Sounmaila, collègues de bureau pendant la rédaction de thèse, et à Vladimir, collègue de la salle de manip « Gammamétrie », avec qui j'ai pu enrichir mon français et échangé des connaissances culturelles de quatre continents (Europe, Afrique, Amérique latine et Asie). Je leur souhaite bon courage et bonne chance pour leur thèse.

Merci à tous mes amis vietnamiens, français et étrangers qui m'ont apporté leur soutien moral. Merci à mes compatriotes qui ont été solidaires et ont partagé avec moi des expériences utiles de la vie quotidienne française. Je me souviendrai toujours des bons moments vécus pendant les repas préparés par Tuan (em), Huy (dn), Tieng (qn), Dung (can), Nhung (bio) et Truong (collègue de labo). Je les remercie.

Je remercie enfin ma famille pour son encouragement et sa confiance. Je voudrais dédier la réussite de ma thèse à mes parents, à qui je souhaite que leurs cœurs battent le plus longtemps possible.

Grenoble le 23 juillet 2008

TRAN NGOC Tien Dung

Résumé

Cette thèse présente le développement des modèles du transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé, en utilisant la méthode d'homogénéisation asymptotique. Les modèles macroscopiques concernent les phénomènes de diffusion, diffusion-convection et dispersion-convection, selon les nombres adimensionnels caractérisant le régime du transport. Les modèles consistent en deux équations couplées, traduisant le transport préférentiel et le non-équilibre local des concentrations. L'implémentation numérique des modèles à double-porosité est réalisée à l'aide du code COMSOL Multiphysics et confrontée avec la solution du même problème à l'échelle fine. Cette implémentation permet de résoudre de manière couplée l'équation de la concentration dans la macro-porosité et celle dans la micro-porosité (calculs à deux échelles). Les calculs du tenseur de dispersion ont été également réalisés. La dispersivité calculée à partir du coefficient de dispersion met en évidence l'influence du degré de saturation, des propriétés physiques du domaine de la macro-porosité et de la structure interne du milieu à double-porosité. Deux séries d'expériences ont été effectuées sur le modèle physique à double-porosité, constitué de billes d'argile solidifiée, distribuées périodiquement dans le sable d'Hostun HN38. La première série a concerné la validation du modèle de l'écoulement non saturé par des expériences du drainage. La deuxième série a été dédiée aux expériences de dispersion en régime permanent d'écoulement non saturé (teneur en eau mesurée par rayonnement gamma). La comparaison entre les simulations numériques et les observations montre un très bon accord. Ceci permet de valider les modèles développés.

Mots clés : milieu double-porosité ; homogénéisation ; dispersion ; non saturé ; transport préférentiel ; non-équilibre local ; expériences ; calculs à deux échelles.

Abstract

This Ph.D thesis presents the development of the solute transport models in unsaturated double-porosity medium, by using the asymptotic homogenization method. The obtained macroscopic models concern diffusion, diffusion-convection and dispersion-convection, according to the transport regime which is characterized by the non-dimensional numbers. The models consist of two coupled equations that show the preferential transport and local non-equilibrium of concentrations. The double-porosity transport models were numerically implemented using the code COMSOL Multiphysics (finite elements method), and compared with the solution of the same problem at the fine scale. The implementation allows solving the coupled equations in the macro- and micro-porosity domains (two-scale computations). The calculations of the dispersion tensor as a solution of the local boundary value problems, were also conducted. It was shown that the dispersivity depends on the saturation, the physical properties of the macro-porosity domain and the internal structure of the double-porosity medium. Finally, two series of experiments were performed on a physical model of double-porosity that is composed of a periodic assemblage of sintered clay spheres in Hostun sand HN38. The first experiment was a drainage experiment, which was conducted in order to validate the unsaturated flow model. The second series was a dispersion experiment in permanent unsaturated water flow condition (water content measured by gamma ray attenuation technique). A good agreement between the numerical simulations and the experimental observations allows the validation of the developed models.

Keywords : double-porosity medium ; homogenization ; dispersion ; unsaturated ; local non-equilibrium ; preferential transport ; experiments ; two-scale computations.

Table des matières

Remerciements i
Résumé iii
Abstract iv
Table des matières v
Liste des figures ix
Liste des tableaux xiv
Liste des symboles et abréviations xvii

1 Introduction **1**
1.1 Présentation de la problématique 1
1.2 Objectif et structure de la thèse 4
1.3 Revue bibliographique 7
1.3.1 Transport de soluté dans le milieu homogène non saturé 7
1.3.2 Modèles phénoménologiques du transport de solutés dans le milieu hétérogène non-saturé 11
1.3.3 Modèles du transport de soluté dans le milieu hétérogène saturé/non saturé obtenus par le changement d'échelles 14
1.3.4 Expériences du transport de solutés dans le milieu hétérogène non saturé 17
1.3.5 Conclusion 20

2 Modélisation par homogénéisation du transport de soluté dans un milieu à double-porosité **23**
2.1 Introduction 23
2.2 Méthode d'homogénéisation 24
2.3 Hypothèses 25
2.4 Formulation du problème 28
2.4.1 Description à l'échelle locale 28
2.4.1.1 Ecoulement d'eau 28
2.4.1.2 Transport de soluté 29

2.4.2 Normalisation des équations et nombres adimensionnels 30
2.4.2.1 Écoulement d'eau 30
2.4.2.2 Transport de soluté 31
2.5 Modèle macroscopique de l'écoulement d'eau 32
2.5.1 Variable macroscopique 32
2.5.2 Problème local aux limites 33
2.5.3 Modèle macroscopique de l'écoulement 34
2.6 Modèles macroscopiques du transport de soluté 35
2.6.1 Condition de l'écoulement et du transport de soluté 35
2.6.2 Modèle à double-porosité de diffusion (DP-Diffusion) 36
2.6.2.1 Formulation du problème 36
2.6.2.2 Homogénéisation 37
2.6.3 Modèle à double-porosité de diffusion-convection (DP-Diffusion-Convection) 40
2.6.3.1 Formulation du problème 40
2.6.3.2 Homogénéisation 41
2.6.4 Modèle à double-porosité de dispersion-convection (DP-Dispersion-Convection) . . 43
2.6.4.1 Formulation du problème 43
2.6.4.2 Homogénéisation 44
2.6.5 Modèle à simple-porosité de dispersion-convection (SP-Dispersion-Convection) . . 50
2.6.5.1 Formulation du problème 50
2.6.5.2 Modèle macroscopique 51
2.6.6 Catalogue des modèles macroscopiques pour le cas $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ 51
2.6.7 Modèle DP-Dispersion-Convection : extension au cas $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ 52
2.7 Discussion et conclusion 54

3 Implémentation numérique des modèles macroscopiques du transport 57
3.1 Introduction 57
3.2 Stratégie de l'implémentation numérique 58
3.3 Modèle DP-Diffusion 60
3.3.1 Géométries et propriétés physiques locales 60
3.3.2 Équations différentielles à résoudre 60
3.3.3 Conditions initiales et aux limites 61
3.3.4 Résultats pour le problème 2D 62
3.3.5 Résultats pour le problème 3D 62
3.4 Modèle DP-Diffusion-Convection 67
3.4.1 Géométries et propriétés physiques locales 67
3.4.2 Équations différentielles à résoudre 67

3.4.3 Conditions initiales et aux limites 67
3.4.4 Résultats 68
3.4.5 Paramètres numériques 68
3.5 Conclusion 71

4 Calculs du tenseur de diffusion/dispersion dans le milieu à double-porosité non saturé 73
4.1 Introduction 73
4.2 Microstructure à double-porosité et caractéristiques des matériaux 74
4.3 Formulation du problème 76
4.3.1 Écoulement d'eau 76
4.3.2 Transport de soluté 77
4.4 Tenseur de dispersion non saturé dans les conditions 2D 78
4.4.1 Solutions des problèmes locaux 78
4.4.2 Influence de la teneur en eau et de la vitesse de l'écoulement 78
4.4.3 Dispersivité dans le milieu à double-porosité non saturé 81
4.5 Tenseur de dispersion non saturé dans les conditions 3D 82
4.5.1 Solutions des problèmes locaux 82
4.5.2 Influence de la teneur en eau et de la vitesse de l'écoulement 83
4.5.3 Dispersivité dans le milieu à double-porosité non saturé 83
4.6 Tenseur de dispersion saturé dans les conditions 2D et 3D 84
4.6.1 Géométries 87
4.6.2 Formulation du problème 88
4.6.3 Résultats et discussions 91
4.7 Conclusion 96

5 Étude expérimentale et numérique de l'écoulement d'eau dans un milieu à double-porosité 97
5.1 Introduction 97
5.2 Expériences de drainage dans le milieu à simple-porosité et à double-porosité 98
5.3 Présentation succincte du code DPOR-1D 100
5.4 Modélisation numérique 103
5.5 Conclusion 105
5.6 Article « Water Drainage in Double-Porosity Soils... » 106

6 Étude expérimentale de la dispersion dans un milieu à double-porosité non saturé 121
6.1 Motivation 121
6.2 Matériels et méthodes 122
6.2.1 Matériaux 122

6.2.1.1 Sable d'Hostun HN38 . . . 122
6.2.1.2 Argile solidifiée . . . 123
6.2.1.3 Milieu à double-porosité . . . 124
6.2.1.4 Traceur et solution . . . 125
6.2.2 Dispositif et mesures expérimentales . . . 126
6.2.2.1 Gammamétrie . . . 126
6.2.2.2 Conductivité à saturation . . . 129
6.2.2.3 Injection des fluides . . . 131
6.2.2.4 Densimètre . . . 131
6.3 Procédure expérimentale . . . 133
6.3.1 Protocole . . . 133
6.3.2 Programme expérimental . . . 138
6.4 Résultats expérimentaux . . . 138
6.4.1 Traitement des données . . . 138
6.4.2 Résumé des courbes de percée . . . 140
6.4.3 Bilan de masse . . . 140
6.5 Analyse qualitative des expériences et discussion . . . 143
6.5.1 Comparaison des comportements des milieux homogène et hétérogène . . . 143
6.5.1.1 Cas du milieu saturé en eau . . . 143
6.5.1.2 Cas du milieu non saturé en eau . . . 145
6.5.2 Comparaison des comportements en fonction de la teneur en eau . . . 145
6.5.2.1 Milieu homogène : sable . . . 145
6.5.2.2 Milieu hétérogène à double-porosité . . . 147
6.6 Conclusion . . . 148

7 Validation expérimentale du modèle à double-porosité de dispersion-convection 151
7.1 Objectif et démarche . . . 151
7.2 Simulations des expériences dans le sable et dans l'argile . . . 152
7.2.1 Principe de l'analyse inverse . . . 152
7.2.2 Equations à résoudre, conditions initiales et aux limites . . . 153
7.2.3 Résultats et discussions . . . 154
7.2.4 Conclusion . . . 156
7.3 Simulations de l'expérience dans le milieu à DP saturé . . . 157
7.3.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites . . . 157
7.3.2 Paramètres de la solution numérique . . . 158
7.3.3 Calibration du modèle à double-porosité saturé . . . 159
7.4 Simulations de l'expérience dans le milieu à DP non saturé . . . 160

7.4.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites 161
7.4.2 Calibration du modèle à double-porosité non saturé 161
7.5 Validation expérimentale du modèle 163
7.5.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites 163
7.5.2 Comparaison entre la simulation numérique et l'expérience de type échelon 164
7.5.3 Comparaison entre la simulation numérique et l'expérience de type créneau 165
7.5.4 Conclusion 165
7.6 Effet de double-porosité 166
7.7 Domaine de validité 168
7.8 Conclusion 170

8 Conclusion et perspectives **173**
8.1 Conclusion 173
8.2 Perspectives 175

Références **176**

Liste des figures

1.1 Echelle d'observation. 2

1.2 Limon agrégé de Bioley à deux échelles : a) Macro-pores et agrégats et b) Micro-pores et grains 3

1.3 Coefficient de diffusion/dispersion en fonction de la vitesse de pores à deux teneurs en eau données (saturé et non-saturé) pour le milieu homogène. Les courbes sont tracées à partir de données expérimentales de Padilla et al. (1999). 11

2.1 Milieu poreux périodique à double-porosité. 26

2.2 Période à deux domaines (domaine Ω_1 plus conducteur et connexe, domaine Ω_2 moins conducteur et interface Γ). 27

2.3 Rapport D_{disp}/D_{diff} en fonction du nombre de Péclet $\mathcal{P}e_l$. 50

3.1 Géométrie périodique 2D et 3D. 58

3.2 Schéma de l'implémentation numérique. 59

3.3 Géométrie des problèmes 2D et 3D étudiés. 60

3.4 Profils de la concentration obtenus à différents temps par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 2D. 63

3.5 Flux diffusif à la sortie du domaine calculé par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 2D. 64

3.6 Terme source calculé dans tout le domaine par DP-Diffusion en fonction du temps dans le cas 2D. 64

3.7 Échange de soluté calculé par DP-Diffusion à l'interface entre les micro et macro-porosité dans le cas 2D... 64

3.8 Profils de la concentration au centre du domaine obtenus à différents temps par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 3D. 65

3.9 Flux diffusif à la sortie du domaine calculé par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 3D. 66

3.10 Terme source intégré sur tout le domaine par DP-Diffusion en fonction du temps dans le cas 3D. 66
3.11 Échange de soluté calculé par DP-Diffusion à l'interface entre les micro et macro-porosité dans le cas 3D... 66
3.12 Profils de la concentration obtenus par les modèles EF et DP-Diffusion-Convection dans le cas 3D 69
3.13 Courbes de percée obtenues par les modèles EF et DP-Diffusion-Convection. 70
3.14 Terme source calculé par le modèle DP-Diffusion-Convection. 70
3.15 Échange de soluté calculé par DP-Diffusion-Convection à l'interface entre les micro et macro-porosité dans le cas DP-Diffusion-Convection en 3D... 70

4.1 Période à double-porosité en 2D et 3D. 74
4.2 Courbe de rétention et courbe de conductivité du sable utilisé. 75
4.3 Coefficient de diffusion dans le sable en fonction de la teneur en eau. 75
4.4 a) Champs de vitesse $\boldsymbol{v}$ et b) Intensité de la composante verticale v_2 du vecteur vitesse $\boldsymbol{v}$. 79
4.5 Champs de χ_2 pour $\mathcal{P}e_1 = 0{,}08$ (a) ; 0,89 (b) ; 8,89 (c) et 88,9 (d). 80
4.6 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ en fonction de la vitesse imposée $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D). 81
4.7 $D_{//disp}(\theta)$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction de la vitesse pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D). 81
4.8 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction du nombre Peclet $\mathcal{P}e_1$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D). 82
4.9 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ en fonction de la teneur en eau θ pour différentes vitesses d'écoulement (exemple 2D). 83
4.10 Dispersivité λ versus la teneur en eau θ (exemple 2D) 84
4.11 a) Champ de ξ_3 et b) Intensité de la composante verticale v_3 du vecteur $\boldsymbol{v}$ pour la vitesse imposée $\langle v \rangle = 3{,}538 \times 10^{-5}$ m/s. 85
4.12 Champs de χ_3 pour $\mathcal{P}e_1 = 0{,}79$ (a) ; 7,9 (b) et 79 (c). 86
4.13 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ versus la vitesse $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 3D). 87
4.14 Coefficient de dispersion longitudinale normalisé $D_{//disp}(\theta)$ par $D_1(\theta)$ versus la vitesse $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 3D). 87
4.15 Coefficient de dispersion longitudinale normalisé $D_{//disp}(\theta)$ par $D_1(\theta)$ en fonction du nombre de Peclet $\mathcal{P}e_l$ pour différentes teneur en eau (exemple 3D). 88
4.16 Dispersivité λ en fonction de la teneur en eau θ : comparaison dans les deux cas 2D et 3D des calculs numériques pour le mileu à double-porosité et l'expérience pour le sable. . . . 88
4.17 Schéma du milieu à deux échelles : a) en 2D et b) en 3D. 89

4.18 a) l'échelle de pores μ : Champs du vecteur vitesse $\boldsymbol{v}$ et l'intensité de la composante verticale v_2 du vecteur $\boldsymbol{v}$; b) l'échelle de milieu poreux m : Champs du vecteur vitesse $\boldsymbol{V}$ et l'intensité de la composante verticale V_2 du vecteur $\boldsymbol{V}$. 92
4.19 Champs de κ_2 (exemple 2D) et κ_3 (exemple 3D) pour $\mathcal{P}e_\mu = 0{,}1$ et 100 à l'échelle μ. . . . 93
4.20 Champs de χ_2 (exemple 2D) et χ_3 (exemple 3D) pour $\mathcal{P}e_m = 1$ et 1000 à l'échelle m. . . 94
4.21 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ normalisée par D_0 versus nombre Peclet $\mathcal{P}e_{l\mu}$ dans le milieu à simple-porosité saturé. 94
4.22 Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ normalisée par D_1 versus nombre Peclet $\mathcal{P}e_{lm}$ dans le milieu à double-porosité saturé 95
4.23 Coeffcient de dispersion longitudinale dans le milieu à SP et DP saturé en fonction de la vitesse imposée. 95

5.1 Dispositif expérimental pour le test du drainage. 99
5.2 Stratégie de la solution globale du code DPOR-1D. 100
5.3 Structure de la solution de couplage entre l'équation macroscopique et l'équation locale. . 101
5.4 Types de géométries périodiques utilisés dans le code DPOR-1D. 102
5.5 Courbes des paramètres hydrodynamiques du sable et de l'argile cuite. 104
5.6 Fonction coût obtenue par analyse inverse. 105
5.7 Solution ξ_3 du problème local aux limites par Comsol Multiphysics 106
5.8 Pression en fonction du temps dans le drainage du milieu à DP. 106

6.1 Sable d'Hostun HN38 : vue macroscopique et microscopique avec zoom 50 et 300. 122
6.2 Spectre obtenu en micro-analyse des rayons X au MEB. 122
6.3 Courbe granulométrique analysée par laser. 123
6.4 Vue macroscopique de l'argile solidifiée : un échantillon et des billes. 123
6.5 Analyse minéralogique des billes d'argile solidifiée par rayons X au MEB. 124
6.6 MEB pour billes d'argile solidifiée : zoom 200 et 1000 fois. 124
6.7 Distribution de taille de pores de l'argile solidifié obtenue par porosimétrie au mercure. . . 125
6.8 Milieu à double-porosité périodique. 125
6.9 Pompe à vide et agitateur. 126
6.10 Trois phases dans le milieu poreux. 127
6.11 Cuve optique pour la mesure du coefficient d'atténuation de l'eau. 128
6.12 Exemple sur la précision de la mesure de porosité. 130
6.13 Dispositif de la mesure de la conductivité à saturation. 130
6.14 Valeur de la conductivité à saturation K_s mesuré du sable, du milieu à DP et d'argile cuite 131
6.15 Système d'établissement et d'injection du traceur. 132
6.16 Relation C(ρ) obtenue par mesure et relation à T = 20,7°C 132

6.17 Variation de la densité en fonction de la température (C = 5 g/l). 133
6.18 Bouchon rainuré pour homogénéiser d'écoulement. 134
6.19 Préparation de l'échantillon d'argile. 134
6.20 Test de dispersion. 136
6.21 Exemple une courbe expérimentale, filtrée (cas d'un échelon de concentration). 139
6.22 Exemple de courbe expérimentale, filtrée (cas d'un créneau de concentration). 139
6.23 Courbes de percée en milieu saturé pour une injection en échelon... 140
6.24 Courbes de percée en milieu insaturé pour une injection en échelon... 140
6.25 Courbes de percée en milieu insaturé pour une injection en créneau avec $v = 3{,}44 \times 10^{-4}$ cm/s... 141
6.26 Courbes de percée en milieu insaturé pour une injection en créneau avec $v = 0{,}49 \times 10^{-4}$ cm/s... 141
6.27 Mesure de la dissolution du sable d'Hostun dans l'eau pure. 142
6.28 Mesure de la dissolution du sable d'Hostun dans l'eau salée. 143
6.29 Profil de la teneur en eau à saturation... 144
6.30 Courbes de percée de trois types de milieux saturés... 144
6.31 Profil de teneur en eau après le test de dispersion... 145
6.32 Courbes de percée du sable (Tests 4 et 5) et du milieu à DP (tests 6 et 7). 146
6.33 Comportements de la dispersion dans les milieux sableux en condition saturée et insaturé... 146
6.34 Comportements de la dispersion dans les milieux à DP en condition saturée et insaturée... 147

7.1 Courbes de percée de l'ajustement et Test 1 (sable saturé). 155
7.2 Courbes de percée de l'ajustement et Test 3 (argile saturée). 155
7.3 Courbes de percée de l'ajustement et Test 4 et 5 (sable non saturé). 156
7.4 Schéma de la résolution numérique du problème (7.8) - (7.15). 158
7.5 Courbes de percée de l'expérience du milieu à DP saturé (Test 2) et de la simulation. . . . 160
7.6 Courbes de percée de la simulation et l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 6). 163
7.7 Courbes de percée de la simulation et l'observation dans le milieu à DP non saturé (Test 7). 165
7.8 Courbes de percée de la simulation et l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 13) 166
7.9 Courbes de percée de simulation dans les milieux insaturés : sable-Test 5 (SP), DP-Test 7 (DP) et DP avec inclusion imperméable. 167
7.10 Termes sources calculés sur tout le domaine pour le Test 7 et Test 13. 168
7.11 Géométrie de la période du milieu à double-porosité (unité en mm) 169

Liste des tableaux

2.1 Catalogue des modèles macroscopiques pour le cas $D_2/D_1 = \varepsilon^2$ 55

3.1 Données géométriques et physiques pour le modèle DP-Diffusion. 61

3.2 Données géométriques et physiques : Modèle DP-Diffusion-Convection. 67

4.1 Paramètres géométriques de la période. 74

4.2 Paramètres hydrodynamiques du domaine Ω_1. 75

4.3 Dispersivité dans le milieu à SP et DP saturé. 95

5.1 Paramètres du modèle de van Genuchten-Mualem pour les deux matériaux. 103

6.1 Caractéristiques des milieux poreux. 135

6.2 Conditions expérimentales de type « échelon » 137

6.3 Conditions expérimentales de type « créneau » 137

6.4 Critères statistiques pour le lissage des courbes à partir des données expérimentales. . . . 138

6.5 Bilan de masse pour une injection en échelon. 141

6.6 Bilan de masse pour une injection en créneau. 142

7.1 Conditions initiales et aux limites pour les Tests 1, 3, 4 et 5. 154

7.2 Résultats de l'ajustement du coefficient de dispersion dans le sable saturé, Tests 1 et 3 . . 154

7.3 Dispersivité à saturation de certains milieu homogène 155

7.4 Résultats de l'ajustement du coefficient de dispersion dans le sable non saturé, Test 4 et 5 156

7.5 Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP saturé (Test 2). 159

7.6 Paramètres calés du modèle à DP saturé (Test 2). 159

7.7 Indicateurs statistiques pour la simulation de l'expérience du milieu à DP saturé (Test 2). 160

7.8 Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 6). 162

7.9 Paramètres du modèle à DP non saturé (Test 6). 162

7.10 Indicateurs statistiques pour la simulation de l'expérience du milieu à DP non saturé (Test 6). 163
7.11 Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 7 et 13). 164
7.12 Indicateurs statistiques pour la simulation des expériences dans le milieu à DP non saturé (Test 7 et 13). 165

Liste des symboles et abréviations

Unité physique : [L] - longueur ; [M] - masse ; [T] - temps.

Lettres grecques

Symbole	Unité	Signification
α	[L^{-1}]	Paramètre du modèle de van Genuchten
α_s	[T^{-1}]	Coefficient de transfert de soluté (DPMM)
α_w	[T^{-1}]	Coefficient de transfert d'eau (DPMM)
β	[-]	Facteur géométrique (modèle MACRO)
γ	[-]	Rayonnement gamma
Γ	[-]	Interface entre Ω_1 et Ω_2
Γ_s	[$ML^{-3}T^{-1}$]	Terme d'échange du soluté (MIM, DPMIM)
Γ_w	[T^{-1}]	Terme d'échange de l'eau (MIM, DPMIM)
$\Delta\theta$	[-]	Incertitude de la teneur en eau
$\Delta\rho$	[-]	Incertitude relative de la densité
ΔM	[-]	Incertitude relative du bilan de masse
ΔP	[$ML^{-1}T^{-2}$]	Gradient de la pression
Δr	[L]	Intervalle spatiale dans la solution locale
Δx	[L]	Intervalle spatiale dans la solution macroscopique
ε	[-]	Paramètre de séparation d'échelle
ζ_S	[L^{-1}]	Coefficient d'atténuation de la phase solide
ζ_L	[L^{-1}]	Coefficient d'atténuation de la phase humide
ζ_L	[L^{-1}]	Coefficient d'atténuation de la phase gazeuse
η	[$ML^{-1}T$]	Viscosité dynamique de l'eau
θ	[L^3L^{-3}]	Teneur en eau
θ_1 et θ_2	[L^3L^{-3}]	Teneur en eau dans le domaine 1 et 2
θ_R	[L^3L^{-3}]	Teneur en eau résiduelle
θ_S	[L^3L^{-3}]	Teneur en eau à saturation
κ	[-]	Solution du problème local aux limites pour le transport (Échelle de pores)
λ	[L]	Dispersivité
λ^{sat}	[L]	Dispersivité du milieu saturé
λ^{nsat}	[L]	Dispersivité du milieu non saturé
μ	[-]	Appellation pour l'échelle des pores
ξ	[-]	Solution du problème local aux limites pour l'écoulement (Échelle de Darcy)
ρ	[ML^{-3}]	Masse volumique d'eau

ρ	[ML^{-3}]	Densité de la solution
σ	[-]	Écart-type
τ	[-]	Tortuosité du milieu
ϕ_1 et ϕ_2	[-]	Fraction volumique du domaine 1 et 2
χ	[-]	Solution du problème local aux limites pour le transport (Échelle de Darcy)
ω	[-]	Exposant de la loi entre le coefficient de dispersion et la vitesse
Ω	[-]	Période
Ω_1 et Ω_2	[-]	Domaine fortement conducteur (1) et faiblement conducteur (2) de la période

Lettres latines

Symbole	Unité	Signification
a	[-]	Coefficient de la relation entre la dispersivité et la teneur en eau
b	[-]	Exposant de la teneur en eau dans sa relation avec la dispersivité
C	[ML^{-3}]	Concentration
C_0	[ML^{-3}]	Concentration de référence
C_1 et C_2	[ML^{-3}]	Concentration du domaine 1 et 2
C_1^* et C_2^*	[-]	Concentration adimensionnelle du domaine 1 et 2
$\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$	[L^{-1}]	Capacité de rétention d'eau du domaine 1 et 2
$\mathcal{C}_1^*$ et $\mathcal{C}_2^*$	[-]	Capacité adimensionnelle de rétention d'eau du domaine 1 et 2
$\mathcal{C}^{eff}$	[L^{-1}]	Capacité effective de rétention d'eau
$\boldsymbol{D}_p$	[L^{2}T^{-1}]	Tenseur de dispersion dans la phase liquide
D_p	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de dispersion longitudinale dans la phase liquide
D_e	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de diffusion moléculaire dans le milieu poreux
D_0	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau pure
$\boldsymbol{D}_1$ et $\boldsymbol{D}_2$	[L^{2}T^{-1}]	Tenseur de diffusion/dispersion dans le domaine 1 et 2
D_1 et D_2	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de diffusion/dispersion dans le domaine 1 et 2
D_{1c} et D_{2c}	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de diffusion/dispersion caractéristique dans le domaine 1 et 2
$\boldsymbol{D}_1^*$ et $\boldsymbol{D}_2^*$	[-]	Tenseur de diffusion/dispersion adimensionnelle dans le domaine 1 et 2
$\boldsymbol{D}_{diff}^{eff}$	[L^{2}T^{-1}]	Tenseur de diffusion effective
$\boldsymbol{D}_{disp}$	[L^{2}T^{-1}]	Tenseur de dispersion dans le modèle macroscopique
$D_{//}$	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de dispersion longitudinale
$D_\perp$	[L^{2}T^{-1}]	Coefficient de dispersion transversale
d	[L]	Diamètre
d_{50}	[L]	Diamètre moyen des grains
$\vec{e}_3$	[-]	Vecteur unitaire
g	[LT^{-2}]	Accélération de la pesanteur

h	[L]	Hauteur de la pression capillaire
h_1 et h_2	[L]	Hauteur de la pression capillaire du domaine 1 et 2
h_1^* et h_2^*	[L]	Hauteur de la pression capillaire adimensionnelle du domaine 1 et 2
$\boldsymbol{I}$	[-]	Matrice unitaire
$\boldsymbol{K}$	[LT^{-1}]	Tenseur de conductivité hydraulique
K_1 et K_2	[LT^{-1}]	Conductivité hydraulique du domaine 1 et 2
K_{1c} et K_{2c}	[LT^{-1}]	Conductivité hydraulique caractéristique du domaine 1 et 2
K_1^* et K_2^*	[-]	Conductivité hydraulique adimensionnelle du domaine 1 et 2
$\boldsymbol{K}^{eff}$	[LT^{-1}]	Tenseur de conductivité hydraulique effective
K_S	[LT^{-1}]	Conductivité hydraulique à saturation
L	[L]	Longueur caractéristique macroscopique
l	[L]	Longueur caractéristique microscopique
M_1 et M_2	[M]	Masse entrante et sortante
MSE	[-]	Moyenne d'erreur de racine du carré
m	[-]	Appellation pour l'échelle de Darcy
$\boldsymbol{N}$	[-]	Vecteur unitaire normal, orienté à l'extérieur de Ω_1
n	[-]	Paramètre du modèle de van Genuchten
n	[-]	Porosité du milieu
p	[$\mathrm{ML}^{-1}\mathrm{T}^{-2}$]	Pression
p_c	[$\mathrm{ML}^{-1}\mathrm{T}^{-2}$]	Pression capillaire
$\mathcal{P}e$	[-]	Nombre de Péclet
$\mathcal{P}e_{1l}$	[-]	Nombre de Péclet local
Q	[$\mathrm{ML}^{-3}\mathrm{T}^{-1}$]	Terme d'échange du soluté
q	[LT^{-1}]	flux d'eau
R	[L]	Rayon
R^2	[-]	Coefficient de détermination
r	[L]	Coordonnée radical/sphérique
S_e	[-]	Degré de saturation en eau effective
S_w	[-]	Degré de saturation en eau
S_r	[-]	Degré de saturation en eau résiduelle
SSQ	[-]	Fonction coût
T	[C]	Température
t	[T]	Temps
t_c	[T]	Temps caractéristique
t^*	[T]	Temps adimensionnel
V	[L^3]	Volume injecté

V_p	[L^3]	Volume de pores
$\boldsymbol{v}_1$ et $\boldsymbol{v}_2$	[LT^{-1}]	Vecteur vitesse de Darcy locale dans le domaine 1 et 2
v_p	[LT^{-1}]	Vitesse moyenne de pores
$\langle v \rangle$	[LT^{-1}]	Vitesse de Darcy imposée
w_f	[-]	Proportion volumique des fissures (DPMM)
X	[L]	Variable spatiale
x	[L]	Variable spatiale macroscopique adimensionnelle
Y	[L]	Variable spatiale locale
y	[L]	Variable spatiale locale adimensionnelle
z	[L]	Variable spatiale

Abréviations

Symbole	Signification
3S-R	Laboratoire Sols, Solides, Structures-Risques
CDE	Equation de Dispersion-Convection
CNRS	Centre National de la Recherche Scientifique
CdP	Courbe de percée
DP	Double-porosité
DPMM	Dual-permeability/mobile-mobile
DPMIM	Dual-permeability/mobile-immobile
EF	Échelle fine
IMFS	Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg
LEGI	Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels
LTHE	Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement
MEB	Microscope Électronique à Balayage
MIM	Mobile-immobile
PNRH	Programme National de Recherche en Hydrologie
PM	Photomultiphicateur
SP	Simple-porosité
TREFLE	Laboratoire TRansferts Écoulements Fluides Énergétique
VER	Volume élémentaire représentatif

Chapitre 1

Introduction

1.1 Présentation de la problématique

Le transport des solutés dans les milieux poreux *insaturés* concerne de nombreuses applications environnementales et industrielles. Parmi celles-ci :

- La protection des aquifères contre les pollutions locales accidentelles ou diffuses (hydrocarbures, intrants agricoles, ...)
- La séquestration géologique du dioxyde de carbone.
- Les barrières de confinement des déchets (ménagers, industriels, nucléaires) pour éviter la contamination du milieu souterrain par les lixiviats (Fig. 1.1).
- Les procédés de traitement des eaux.
- La récupération assistée du pétrole.

De nos jours le concept de « *Développement Durable* » prend de plus en plus d'importance. Il vise à répondre aux besoins du présent, sans compromettre ceux des générations futures. Il nous oblige à nous intéresser non seulement aux questions technologiques et environnementales à court terme, mais aussi à celles à long terme. La problématique environnementale du transport de solutés en milieux poreux doit être placée dans le cadre de ce concept.

La modélisation du transport de solutés dans le *sol non saturé* (« vadose zone ») a fait l'objet de nombreuses recherches dans les dernières décennies, dans la mesure où cette zone joue un rôle clé dans la liaison entre la surface et le sol et la nappe et les couplages des cycles hydrologiques, énergétiques, écologiques. Cette zone présente deux phases de fluides au moins (eau et air) et la phase solide. Ceci rend la modélisation si difficile par rapport à la zone saturée que son

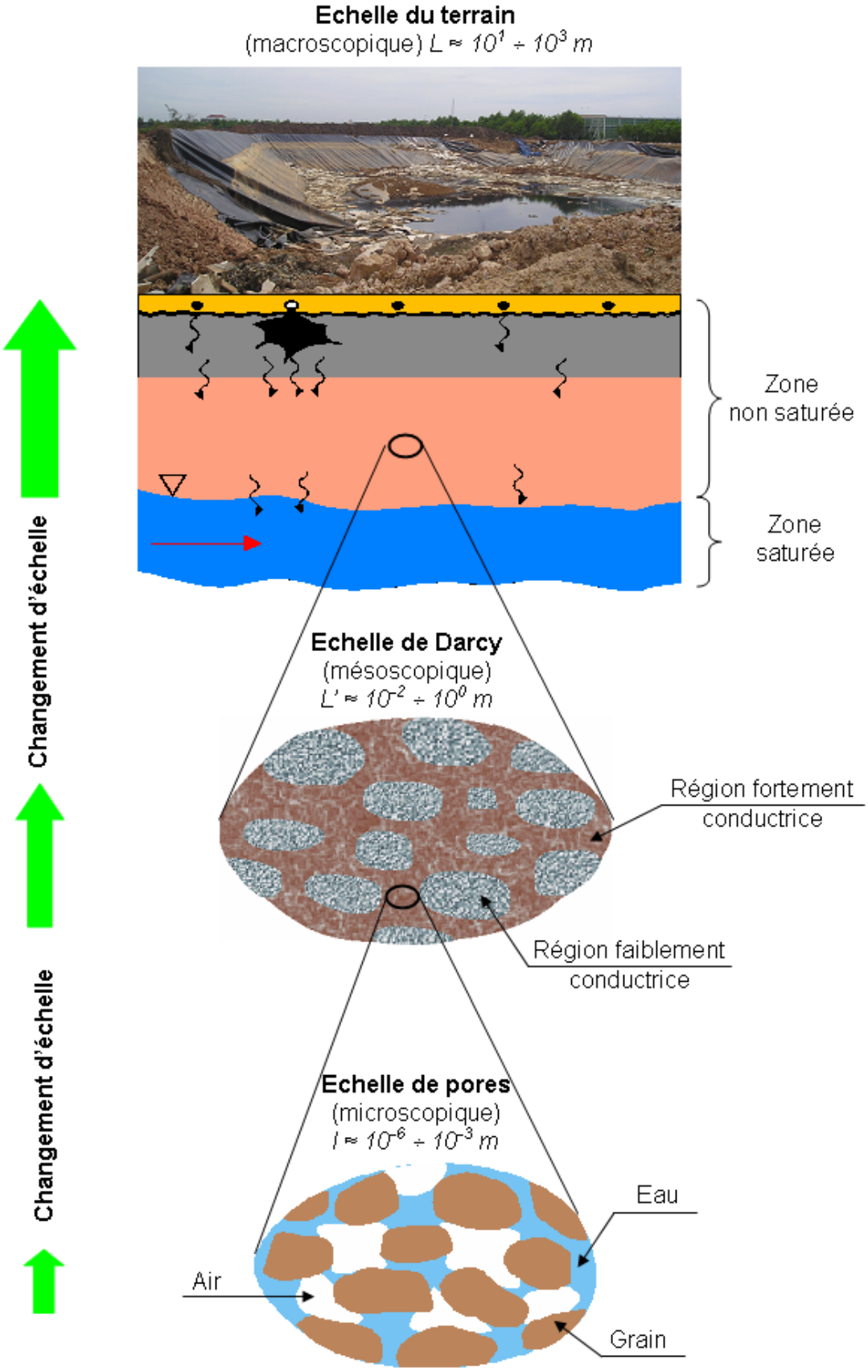


FIG. 1.1: Echelle d'observation.

étude demeure toujours un sujet d'actualité. Un autre problème important est *l'hétérogénéité* des systèmes à modéliser. Elle est présente à différentes échelles (FIG. 1.1) : *l'échelle microscopique* (échelle du pore), *l'échelle mésoscopique* (échelle de Darcy) et *l'échelle macroscopique* (échelle du terrain ou de l'ouvrage). Le passage de l'échelle plus petite à l'échelle la plus grande exige l'existence d'un *volume élémentaire représentatif* (VER). C'est la condition de la séparation d'échelles. Du point de vue pratique, la description du transport de solutés à l'échelle locale ne peut pas s'appliquer directement à la modélisation à l'échelle du terrain. Il est donc nécessaire de développer des approches qui soient capables de traiter des processus du transport dans le milieu hétérogène vu comme dans le milieu homogène équivalent en prenant en compte l'influence des hétérogénéités à différentes échelles à l'aide de propriétés effectives.

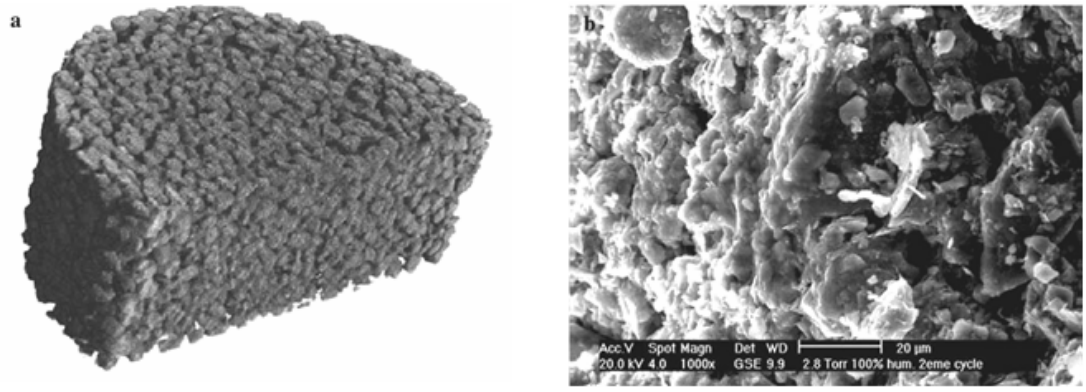


FIG. 1.2: Limon agrégé de Bioley à deux échelles : a) Macro-pores et agrégats et b) Micro-pores et grains (extraire de Koliji et *al* 2008).

Les sols naturels présentent souvent des hétérogénéités structurales (micro-pores et macro-pores) d'origine mécanique, thermique ou biologique. L'existence du contraste entre les tailles caractéristiques des pores permet de définir un milieu appelé *« milieu à double-porosité »*, tels que les sols agrégés (FIG. 1.2 Koliji *et al.* 2008), les roches fissurées, fracturées,... A cause de ces structures particulières, le milieu à double-porosité (DP) manifeste souvent des comportements atypiques. Le temps caractéristique du transport de solutés est très différent dans chaque région. Le temps exigé pour atteindre l'équilibre de pression et de concentration est beaucoup plus long dans le domaine faiblement conducteur par rapport à celui à conductivité hydraulique plus élevée. Cela implique que la condition de non-équilibre peut apparaître pendant les processus du transfert de masse. Le contraste des propriétés hydrauliques se traduit par des écoulements/transports préférentiels dans les macro-pores avec des interactions ou des échanges avec les micro-pores. Ceux-ci contribuent à la propagation des solutés dans des conditions de non équilibre local.

L'accélération de l'écoulement dans les macro-pores vis-à-vis du retard dans la matrice constitue le phénomène appelé l'effet de traînée (Coats et Smith 1964). Il joue un rôle important dans le diagnostic des sols pollués ou pour la prédiction de la migration de polluants dans des ouvrages en génie de l'environnement/génie civil. Tous ces phénomènes considérés comme « anormaux » ne peuvent être décrits par l'équation classique de convection et dispersion (CDE) (van Genuchten et Wierenga 1976).

Depuis les années 1980 de nombreuses études sur l'impact de la structure complexe du sol sur la propagation de l'eau et du soluté ont été réalisées (van Genuchten et Wierenga 1977 ; Rao *et al.* 1980 ; Bibby 1981 ; Gerke et van Genuchten 1993 ; Villholth et Jensen 1998 ; Larsson et Jarvis 1999 ; Katterer *et al.* 2001). Plusieurs modèles théoriques pour le transport de solutés dans le milieu hétérogène ont été proposés (Simůnek *et al.* (2003) ; Gerke (2006)). Deux types d'approche continue peuvent être distingués. Les modèles phénoménologiques à deux régions qui ont été développés sur des considérations physiques et des résultats expérimentaux (Simůnek *et al.* 2003). Chaque région représente un système poral du milieu. D'autre part, les modèles macroscopiques peuvent être obtenus en utilisant le changement d'échelles (« upscaling ») avec différentes méthodes mathématiques : la méthode de la prise de moyenne volumique (Quintard et Whitaker 1987), la méthode d'homogénéisation asymptotique (Bensoussan *et al.* 1978 ; Sanchez-Palencia 1980 ; Auriault 1991). Cependant relativement peu d'études s'adressent spécifiquement au problème du transport dans le sol à double-porosité non saturé, notamment en ce qui concerne la modélisation de la dispersion. Il est également difficile de trouver des données obtenues à partir des expériences réalisées dans les conditions contrôlées, qui permettent de vérifier la validité des modèles proposés.

1.2 Objectif et structure de la thèse

La thèse a pour objectif principal de développer des modèles de l'écoulement et du transport miscible de soluté dans un milieu fortement hétérogène à l'échelle macroscopique, à partir de la description à l'échelle locale. Nous supposons qu'à cette échelle le milieu est constitué de deux régions dont les propriétés sont très contrastées. Ce travail met l'accent sur les synergies : écoulement - transport ; théorie - numérique - expérience pour une meilleure compréhension des mécanismes de diffusion/dispersion en milieu hétérogène non saturé. Il comprend :

- Le développement des modèles théoriques du transport de soluté dans le milieu à double-porosité non saturé par homogénéisation asymptotique ;
- L'implémentation numérique des modèles de transport obtenus et la résolution des problèmes locaux pour déterminer des tenseurs de diffusion effective/dispersion (code commercial COMSOL Multiphisics) ;
- Une campagne d'expériences de drainage sur un modèle physique à double-porosité et la comparaison avec les simulations numérques en utilisant le modèle de l'écoulement d'eau à double-porosité non saturé (code de recherche DPOR-1D).
- Une campagne d'expériences de dispersion d'un traceur (NaCl) dans un modèle physique à double-porosité non saturé.
- Calibration et validation du modèle à double-porosité de dispersion-convection par comparaison entre les simulations numériques et les observations expérimentales.

La thèse est structurée en 8 chapitres. Le chapitre 1.3 présente une étude bibliographique. De variétés de modèles phénoménologiques concernant le transport dans le milieu dit à double-porosité seront reportés. Les méthodes de changement d'échelle pour l'obtention des modèles macroscopiques, la forme et les paramètres obtenus par deux approches sont discutés. Enfin, on présente une revue d'expériences sur le transport réalisées dans le milieu hétérogène non saturé.

Le chapitre 2 aborde le développement des modèles macroscopiques de transport d'un soluté inerte bio-chimiquement dans un milieu à double-porosité non saturé, en utilisant la technique d'homogénéisation asymptotique. Les différents modèles obtenus correspondent aux différentes situations en fonctions des nombres adimensionnels définissant le régime du transport.

Le chapitre 3 présente l'implémentation numérique des modèles obtenus dans le chapitre précédent, à l'aide du logiciel commercial COMSOL Multiphysics. La procédure se compose de deux étapes principales : calcul du tenseur de diffusion effective/dispersion et résolution du problème macroscopique aux limites. Dans le but de vérifier l'implémentation numérique, une étude comparative est réalisée entre la solution homogénéisée et celle de l'échelle fine (EF) qui représente explicitement la structure hétérogène du milieu (solution de référence), sur des exemples numériques 2D et 3D.

Les calculs du tenseur de diffusion effective/dispersion dans le milieu à double-porosité non saturé sont présentés dans le chapitre 4, à travers des exemples numériques avec la géométrie en 2D et 3D. Pour ces calculs, nous résolvons les problèmes locaux en utilisant le code COMSOL

Multiphysics. Les coefficients de diffusion effective/dispersion sont tracés en fonction de la vitesse, de la teneur en eau et du nombre de Péclet. La relation entre la dispersivité et la teneur en eau est développée.

Le chapitre 5 porte sur la modélisation numérique et expérimentale d'un écoulement transitoire dans un milieu non saturé à double-porosité. Les expériences de drainage sont réalisées dans un milieu à double-porosité. Ce dernier milieu se compose de billes d'argile solidifiées arrangées périodiquement dans la matrice sableuse d'Hostun, le rapport des pores caractéristiques de deux matériaux diffère de deux ordres de grandeur. Les champs de saturation en eau sont mesurés à l'intérieur de la colonne par la technique d'atténuation gammamétrique, ainsi que des mesures du flux à la sortie de colonne et de la pression capillaire. Les résultats expérimentaux sont comparés avec des simulations numériques pour valider le modèle théorique de l'écoulement à double-porosité non saturé, obtenu précédemment.

Le chapitre 6 présente des expériences de transport d'un traceur passif (NaCl) dans le milieu à double-porosité. Ces expériences ont été réalisées dans différentes conditions : écoulement permanent saturé et non saturé ; sollicitaion de concentration « échelon » et « créneau » ; condition initiale $C_0 = 0$ ou et $C_0 \neq 0$ et plusieurs types de longueur du milieu. Les courbes d'élution de la concentration en fonction du temps sont déduites par mesures de la densité à la sortie du milieu dont le profil de la saturation est contrôlé par gammamétrie. Une analyse qualitative de ces expériences est effectuée pour mettre en évidence le caractère non Fickien du transport dans un milieu à DP et identifier la différence entre les comportements dispersifs dans les milieux homogènes et hétérogènes en fonction de la teneur en eau et de sa distribution.

Le chapitre 7 présente la validation expérimentale du modèle à double-porosité de Dispersion-Convection macroscopique obtenu par homogénéisation. Les résultats expérimentaux présentés dans le chapitre 6 sont confrontés aux simulations numériques du modèle théorique à l'aide du logiciel COMSOL Multiphysics. Les paramètres du modèle, i. e. le coefficient de dispersion du milieu à double-porosité non saturé et le coefficient de diffusion dans les inclusions argileuses sont estimés à partir d'expériences indépendantes par analyse inverse. Un excellent accord entre les résultats numériques et expérimentaux dans les différentes conditions étudiées permet de valider le modèle théorique proposé.

Le chapitre 8 présente les principales conclusions de ce travail de recherche et expose les perspectives envisagées pour le futur.

1.3 Revue bibliographique

On présente ici une revue bibliographique sur les études du transport de solutés en milieu homogène/hétérogène saturé/non saturé. D'abord, un rappel succinct décrit le mécanisme du transport d'une substance chimique dans le milieu homogène non saturé. Ensuite, des modèles à double-porosité obtenus par l'approche phénoménologique ainsi que des modèles macroscopiques issus des méthodes du changement d'échelle (prise de moyenne volumique, homogénéisation asymptotique) sont exposés afin de mettre en évidence les différences entre les différentes approches. Finalement, une synthèse est consacrée aux études expérimentales réalisées dans le but d'expliciter le comportement non Fickien d'une part, de vérifier les modèles théoriques d'autre part, et de souligner les difficultés à expérimenter le transport en milieu hétérogène non saturé.

1.3.1 Transport de soluté dans le milieu homogène non saturé

Dans un sol non saturé considéré comme homogène, le transport de soluté est décrit par une l'équation classique appelée l'équation de dispersion-convection (CDE) :

$$\frac{\partial(\theta\, C)}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\theta\, \boldsymbol{D}_p \cdot \nabla C - \boldsymbol{q}\, C\right) = 0, \tag{1.1}$$

où C [$\mathrm{ML^{-3}}$] : concentration du soluté dans la phase liquide ; $\boldsymbol{D}_p$ [$\mathrm{L^2T^{-1}}$] : tenseur de dispersion hydrodynamique dans la phase liquide ; $\boldsymbol{q}$ [$\mathrm{LT^{-1}}$] : flux d'eau ; θ [$\mathrm{L^3/L^3}$] : teneur volumique en eau ; t [T] : temps.

L'équation (1.1) est obtenue par l'introduction de la loi de Fick dans l'équation de conservation de masse. Elle est valable en l'absence d'interactions entre le soluté et la phase solide et de transformations biochimiques, en négligeant les termes source/puits et en considérant que l'écoulement d'eau est incompressible et isotherme. Le deuxième terme de l'Eq. (1.1) décrit le transfert dispersif qui associe la diffusion moléculaire à la dispersion mécanique provoquée par les variations de vitesse de l'eau à l'échelle microscopique (Bear 1972).

$\boldsymbol{D}_p$ observé à l'échelle macroscopique est donc censé intégrer et moyenner des fluctuations microscopiques. Il est fonction de la vitesse moyenne de l'écoulement, de la diffusion moléculaire et de la taille moyenne des grains du milieu (Pfannkuch 1962). Le coefficient de dispersion

longitudinale peut être présenté sous la forme

$$D_p = D_e + \lambda \, |v_p|^{\omega} \,, \tag{1.2}$$

où D_e [$\mathrm{L^2T^{-1}}$] est le coefficient de diffusion moléculaire dans un milieu poreux, fonction de la tortuosité τ et de la teneur en eau. D_e [$\mathrm{L^2T^{-1}}$] est inférieur au coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau pure D_0

$$D_e = \tau \, D_0, \tag{1.3}$$

$$\text{avec} \quad \tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_S^2} \text{ (Millington et Quirk 1961)}, \tag{1.4}$$

où θ_S est la teneur volumique en eau à saturation.

λ [L] est la dispersivité, due au mélange mécanique microscopique et v_p [$\mathrm{LT^{-1}}$] est la vitesse moyenne de pores,

$$v_p = \frac{q}{\theta}. \tag{1.5}$$

L'exposant ω [-] est souvent considéré égal à 1 pour le domaine des vitesses usuelles qui donne la valeur du nombre de Péclet variant dans la zone III et IV selon la définition du régime diffusif/dispersif par Pfannkuch (1962) (de Marsily 1981)

$$\mathcal{P}e = \frac{v_p \, d_{50}}{D_0}, \tag{1.6}$$

où d [L] est le diamètre moyen des grains.

Dans l'équation (1.1) le flux $\boldsymbol{q}$ est donné par la loi de Darcy (1856)

$$\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{K} \cdot \nabla(h + z), \tag{1.7}$$

qui, combinée à l'équation de conservation de la masse d'eau, conduite à l'équation de Richards (1931)

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot (\boldsymbol{K} \cdot \nabla(h + z)) = 0, \tag{1.8}$$

où $h = p_c/\rho g < 0$ [L] est la hauteur de la pression capillaire $p_c = p_a - p_w$ [$\mathrm{ML^{-1}T^{-2}}$] (p_a : pression de l'air, supposée égale à la pression de l'atmosphère ici ; p_w : pression de l'eau ; ρ [$\mathrm{ML^{-3}}$] : la masse volumique d'eau, g [$\mathrm{LT^{-2}}$] : l'accélération de la pesanteur). $\boldsymbol{K}(h)$ [$\mathrm{LT^{-1}}$] est le tenseur

de conductivité hydraulique ; z [L] est la profondeur orientée positivement vers le haut. Dans la suite nous allons appeler h « pression capillaire ».

L'équation (1.1) est aussi considérée comme la description macroscopique pour le sol homogène (autrement dit sol à simple-porosité (SP)). Elle est aussi utilisée pour décrire le cas général du transport de plusieurs espèces chimiques en prenant en compte d'autres phénomènes comme adsorption/absorption/désorption (Vauclin 1994).

- **Coefficient de diffusion**

Dans le cas où le nombre de Péclet est inférieur à 1, la diffusion devient prédominante. L'équation (1.2) se re-écrit en utilisant (1.3)

$$D_p = D_e = D_{p/dif} = \tau\, D_0. \tag{1.9}$$

D'après (1.4), nous obtenons la relation de la diffusion locale dans le milieu saturé $D^{sat}_{p/dif}$ et non saturé $D^{nsat}_{p/dif}$

$$D^{nsat}_{p/dif} = \left(\frac{\theta}{\theta_S}\right)^{7/3} D^{sat}_{p/dif}. \tag{1.10}$$

Rowe et Badv (1996a) et (1996b) ont étudié la diffusion dans la phase dissoute pour les milieux non saturés (limon, sable et gravier fin) et ont trouvé

$$D^{nsat}_{p/dif} = \left(\frac{\theta - \theta_{min}}{n - \theta_{min}}\right) D^{sat}_{p/dif}, \tag{1.11}$$

où θ_{min} [-] est la teneur en eau non connectée et n [-] est la porosité. Pour θ_{min}=0 (Rowe 2001), (1.11) se réduit à

$$D^{nsat}_{p/dif} = S_w\, D^{sat}_{p/dif}, \text{ avec } S_w = \frac{\theta}{n}. \tag{1.12}$$

En bref, le coefficient de diffusion dans la phase liquide en milieu non saturé est inférieur à celui en milieu saturé. La longueur du cheminement augmente avec la diminution de θ (Musy et Soutter 1991).

- **Coefficient de dispersion**

La diffusion est négligeable lorsque la vitesse d'écoulement est importante. L'équation (1.2) devient

$$D_p = D^{sat}_{p/disp} = \lambda^{sat}\ |v_p| \text{ pour le milieu saturé et} \tag{1.13}$$

$$D_p = D^{nsat}_{p/disp} = \lambda^{nsat}\,|v_p| \text{ pour le milieu non saturé,} \tag{1.14}$$

où λ^{sat} et λ^{nsat} sont les dispersivités du milieu saturé et non saturé, respectivement.

Pour une même vitesse de pores, la relation entre $D^{sat}_{p/disp}$ et $D^{nsat}_{p/disp}$ peut s'écrire

$$D^{nsat}_{p/disp} = \frac{\lambda^{nsat}}{\lambda^{sat}}\ D^{sat}_{p/disp}. \tag{1.15}$$

La dispersivité est une fonction de la teneur en eau ou du degré de saturation :

– pour Nutzmann *et al.* (2002)

$$\lambda = a\,\theta^b, \text{ donc } \lambda^{sat} = a\,\theta^b_S \text{ et } \lambda^{nsat} = a\,\theta^b, \tag{1.16}$$

– pour Sato *et al.* (2003)

$$\lambda = \frac{d_{50}}{a\,S^b_r} \text{ donc } \lambda^{sat} = \frac{d_{50}}{a} \text{ et } \lambda^{nsat} = \frac{d_{50}}{a\,S^b_r}, \tag{1.17}$$

où a et b sont des paramètres empiriques dépendant de la texture du milieu poreux. L'équation (1.15) devient avec Eq. (1.16)

$$D^{nsat}_{p/disp} = \left(\frac{\theta}{\theta_S}\right)^b\ D^{sat}_{p/disp}, \tag{1.18}$$

et avec Eq. (1.17)

$$D^{nsat}_{p/disp} = S^b_r\ D^{sat}_{p/disp}. \tag{1.19}$$

où $S_r = \frac{\theta-\theta_R}{\theta_S-\theta_R}$ est le degré de saturation effective.

L'équation (1.19) devient (1.18) si $\theta_R = 0$.

De nombreuses études ont constaté que le coefficient de dispersion dans le milieu homogène non saturé est supérieur à celui dans le milieu homogène saturé (Padilla *et al.* 1999 ; Nutzmann *et al.* 2002 ; Toride *et al.* 2003 ; Sato *et al.* 2003).

La Figure 1.3 montre que le coefficient de diffusion est supérieur dans le milieu saturé à celui du milieu non-saturé lorsque la vitesse d'écoulement de pores est faible. La tendance est inverse pour une vitesse de pores élevée.

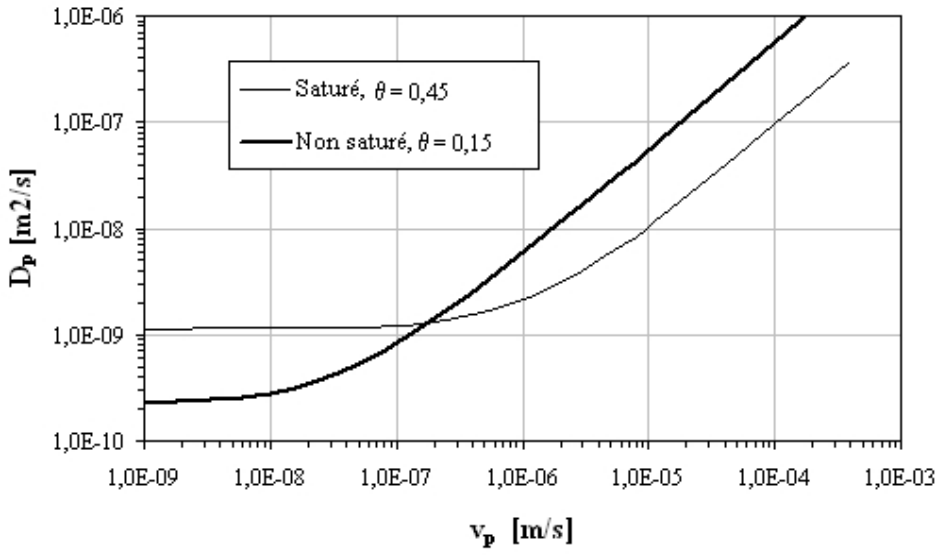


FIG. 1.3: Coefficient de diffusion/dispersion en fonction de la vitesse de pores à deux teneurs en eau données (saturé et non-saturé) pour le milieu homogène. Les courbes sont tracées à partir de données expérimentales de Padilla et al. (1999).

1.3.2 Modèles phénoménologiques du transport de solutés dans le milieu hétérogène non-saturé

De nombreuses études ont montré que l'équation (1.1) ne s'appliquait pas dans les milieux présentant de fortes hétérogénéités. Cela a conduit à introduire le concept de « double-porosité ».

Les modèles du transport dans un milieu à double-porosité (DP) en conditions non saturées disponibles dans la littérature sont essentiellement de type phénoménologique. Ils sont classés dans le groupe des modèles « *à deux régions* », concept initialement introduit par Barenblatt *et al.* (1960). Le milieu à double-porosité est conceptualisé comme deux domaines continus superposés. L'écoulement et le transport dans chaque région sont décrits par des équations couplées par un terme source/puits qui représente le taux de transfert de masse entre les deux régions.

- **Modèle « dual-porosity »**

Le transport de soluté insaturé est intuitivement considéré dans les deux régions : l'une « mobile » où la convection et la dispersion sont dominantes, l'autre « immobile » où le transport est essentiellement diffusif et l'existence d'une différence de la concentration de solutés entre ces régions induit des échanges. Le modèle « dual-porosity/ mobile-immobile » (MIM) (van Genuchten

et Wierenga 1976) correspondant s'écrit

$$\frac{\partial\left(\theta_m\, C_m\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta_m\, D_{pm}\, \frac{\partial C_m}{\partial z} - C_m\, q\right) - \Gamma_s, \tag{1.20}$$

$$\frac{\partial\left(\theta_{im}\, C_{im}\right)}{\partial t} = \Gamma_s, \tag{1.21}$$

$$\Gamma_s = \alpha_s\, \left(C_m - C_{im}\right) + \begin{cases} \Gamma_w\, C_m & \Gamma_w > 0 \\ \Gamma_w\, C_{im} & \Gamma_w < 0 \end{cases}, \tag{1.22}$$

$$\Gamma_w = \alpha_w\, \left(S_{em} - S_{eim}\right), \tag{1.23}$$

où les indices « m » et « im » désignent les régions d'eau mobile et immobile, respectivement. Γ_s [$\mathrm{ML^{-3}T^{-1}}$] et Γ_w [$\mathrm{T^{-1}}$] représentent les termes d'échange du soluté et de l'eau, respectivement. α_s et α_w [$\mathrm{T^{-1}}$] sont les coefficients de transfert de soluté et d'eau au premier ordre, respectivement. S_{em} et S_{eim} [-] sont les degrés de la saturation effective des régions mobile et immobile, respectivement.

- **Modèle « dual-permeability »**

Les modèles fondés sur le concept de phase « mobile-immobile » impliquent que les propriétés hydrodynamiques de deux régions soient suffisamment contrastées (i.e. la vitesse d'écoulement dans la région moins imperméable est négligeable devant celle de la diffusion du soluté). Dans le cas où ce contraste est fable, le transport convectif et dispersif est pris en compte dans les deux régions. Le modèle résultant « dual-permeability/mobile-mobile » (DPMM) (Gerke et van Genuchten 1993) s'écrit

$$\frac{\partial\left(\theta_f\, C_f\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta_f\, D_{pf}\, \frac{\partial C_f}{\partial z} - C_f\, q_f\right) - \frac{\Gamma_s}{w_f}, \tag{1.24}$$

$$\frac{\partial\left(\theta_m\, C_m\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta_m\, D_{pm}\, \frac{\partial C_{im}}{\partial z} - C_m\, q_m\right) + \frac{\Gamma_s}{1 - w_f}, \tag{1.25}$$

$$\Gamma_s = \alpha_s\, \left(1 - w_f\right)\, \left(C_f - C_m\right) + \begin{cases} \Gamma_w\, C_f & \Gamma_w > 0 \\ \Gamma_w\, C_m & \Gamma_w < 0 \end{cases}, \tag{1.26}$$

$$\Gamma_w = \alpha_w\, \left(h_f - h_m\right), \tag{1.27}$$

où les indices « f » et « m » sont relatifs aux fissures et à la matrice poreuse respectivement, w_f étant la proportion volumique de fissures.

On remarquera que le modèle « dual-permeability/mobile-mobile » exige plus de paramètres que le modèle « dual-porosity/mobile-immobile ».

Le modèle DPMM a été étendu au cas d'une « triple porosité » par Pôt *et al.* (2005). Le modèle résultant « Dual-permeability mobile-immobile » (DPMIM) suppose que la teneur en eau dans la matrice θ_m soit repartie en fractions mobile $\theta_{m,mo}$ et immobile $\theta_{m,im}$. Ainsi, le transport de solutés dans les fractures est décrit en utilisant (1.24), tandis que le transport dans la matrice est modélisé par (1.20 et 1.21). Le modèle DPMIM qui est une combinaison de deux modèles MIM et DPMM nécessite un plus de grand nombre de paramètres.

- **Modèle MACRO**

La détermination des paramètres des modèles ci-dessus est difficile voire impossible à partir de mesures directes (Larsbo et Jarvis 2006). La technique inverse n'est pas toujours à même de donner la bonne solution par défaut de données. La réduction du nombre de paramètres apparaît donc bien souvent nécessaire. Ainsi, le modèle « MACRO » (Jarvis 1994) suppose que le transport de solutés soit décrit par une CDE dans la micro-porosité (mi) avec un terme source/puits représentant le transfert de masse entre les deux sous-domaines, l'écoulement étant dominé par la convection dans la macro-porosité (ma). Il s'exprime par les équations suivantes :

$$\frac{\partial\left(\theta_{mi}\, C_{mi}\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\theta_{mi}\, D_{pmi}\, \frac{\partial C_{mi}}{\partial z} - C_{mi}\, q\right) \pm \Gamma_s, \tag{1.28}$$

$$\Gamma_s = \frac{\beta\, D_e\, \theta_{mi}}{d^2}\, \left(C_{ma} - C_{mi}\right) + S_w\, c', \tag{1.29}$$

$$S_w = \frac{\beta\, D_0\, \theta_{mi}\, \gamma_m}{d^2}\, \left(\theta_b - \theta_{mi}\right), \tag{1.30}$$

où « mi » et « ma » désignent la micro-porosité et macro-porosité, respectivement ; β [-] est un facteur géométrique ; d [L] est la distance caractéristique de diffusion ; c' [ML$^-$3] indique si la concentration de soluté est dans la macro-porosité ou dans l'« eau accessible » des micro-porosités ; S_w [-] est l'écoulement d'eau latéral de la macro-porosité vers la micro-porosité ; γ_m [-] est un facteur d'échelle introduit pour harmoniser les solutions approximative et exacte pour le problème de diffusion et θ_b [-] est la teneur volumique en eau saturée dans la micro-porosité.

En décrivant le transport de solutés dans une région, le modèle « MACRO » contient moins de paramètres que les modèles « dual-porosity/permeability ».

- **Autres modèles**

Les modèles « multiple-porosity/permeability » sont conceptuellement similaires aux modèles « dual-porosity/permeability », sauf qu'ils sont décrits dans les régions multimodales de pores superposées. Ceci permet une plus grande versatilité puisqu'ils font appel à plus de paramètres (Simunek et al., 2003). Par exemple, le modèle « MURT » (Gwo *et al.* 1995) a été développé en supposant le transport de solutés dans trois régions de pores superposées : macropores, mesopores et micropores. Le modèle « TRANSMIT » (Hutson et Wagenet 1995) considère n_i régions. Tous ces modèles utilisent néanmoins la CDE pour décrire le transport de solutés dans chaque région et considèrent l'échange de masse entre les régions.

1.3.3 Modèles du transport de soluté dans le milieu hétérogène saturé/non saturé obtenus par le changement d'échelles

L'approche du changement d'échelles permet d'obtenir de façon rigoureuse la macroscopisation des transferts en milieu poreux. En fait, le transport de soluté à l'échelle microscopique est décrit par des modèles mathématiques pour tous les points dans un milieu poreux. La description du transport dans le milieu hétérogène devient compliquée, voire impossible, si toutes les hétérogénéités sont prises en compte, malgré les moyens de calcul de plus en plus performants. Cette difficulté peut être surmontée en appliquant une approche « continue » qui permet de transformer le problème de l'échelle microscopique en celui de l'échelle macroscopique. Il s'agit de remplacer un milieu réel hétérogène par un milieu homogénéisé, macroscopiquement équivalent.

La condition nécessaire pour appliquer cette méthode est la séparation d'échelle. Lorsque le volume élémentaire représentatif (VER) peut être déterminé, il est possible de définir sa taille caractéristique microscopique l, qui doit être beaucoup plus petite que la taille caractéristique macroscopique L. La séparation d'échelle est donc caractérisée par le petit paramètre $\varepsilon = l/L$. Cependant, tout dépend du but ciblé. Le choix de l'échelle de départ à adopter dépend de deux préoccupations : ne pas descendre inutilement à un niveau plus fin qu'il n'est nécessaire pour rendre compte des propriétés que l'on veut analyser ; s'assurer que l'échelle est encore pertinente au regard des lois de la mécanique des milieux continus (Zaoui 2001). D'une façon générale, plus la séparation des échelles est « propre », meilleurs sont les résultats (Auriault 2002).

- **Modèles obtenus par prise de moyenne volumique**

La méthode de prise de moyenne volumique a été développée par Whitaker (1986), Quintard et Whitaker (1988), Whitaker (1999). Ahmadi *et al.* (1998) ont développé un *modèle à deux équations* pour le transport de soluté (dispersion-convection-adsorption) dans le milieu hétérogène saturé constitué de deux régions différentes continues, en utilisant la méthode de prise de moyenne volumique. Le modèle macroscopique est obtenu, en partant de l'échelle de Darcy (l'échelle du milieu poreux) et en considérant le champ de vitesse connu et déterminé indépendamment du problème de transport (écoulement permanent - vitesse de Darcy). Il se compose de deux équations séparatives de même forme qui décrivent le transport macroscopique dans chaque région. On peut voir les rôles équivalents de ces deux équations du fait qu'il n'y a pas de définition du contraste des caractéristiques hydrauliques de deux régions. Si on compare avec le modèle « dual-permeability » (1.24) - (1.27), ce modèle contient plus de termes convectifs non-traditionnels et de terme dispersif croisé (résultant de l'influence de la vitesse d'une région sur l'autre région) (Cherblanc *et al.* 2003). Plusieurs propriétés effectives sont donc à déterminer.

Le modèle à deux équations se classe dans la famille des modèles qui décrivent le problème de transport dans les conditions de non-équilibre local. En considérant la périodicité du milieu, il a été vérifié par les expériences numériques pour des milieux stratifiés (Ahmadi *et al.* 1998) et nodulaires trempés dans la matrice (Cherblanc *et al.* 2007). La comparaison du terme d'échange avec le modèle « mobile-immobile/ mobile-mobile » a été réalisée par Cherblanc *et al.* (2003).

Dans le but de chercher des simplifications du modèle à deux équations qui fait intervenir de nombreux paramètres. La condition de l'équilibre macroscopique de masse a été imposée, (i.e. les concentrations moyennes sont égales dans les deux régions), Quintard *et al.* (2001) ont déduit un *modèle macroscopique à une équation d'équilibre de masse*, avec le tenseur de dispersion déterminé par somme de quatre tenseurs de dispersion présent dans le modèle à deux équations. Le modèle est obtenu en faisant l'appel à une hypothèse très forte : celle de l'équilibre local. Cette situation particulière est rarement vérifiée dans le milieu hétérogène comme dans le sol naturel.

Un modèle *macroscopique à une équation de non-équilibre* proposé par Quintard *et al.* (2001) peut remplacer le modèle à deux équations dans le cas de non équilibre local des concentrations.

- **Modèles obtenus par homogénéisation**

Une autre méthode du changement d'échelle largement utilisée est la méthode d'homogénéisation. Elle possède plusieurs aspects similaires à la méthode de prise de moyenne volumique

avec cependant des formulations mathématiques différentes. Le principe de cette méthode peut être trouvé dans les ouvrages de Bensoussan *et al.* (1978) et Sanchez-Palencia (1980).

Hornung (1991) a développé un modèle de transport de diffusion-convection couplé avec l'écoulement non saturé dans le milieu à double-porosité dont la microstructure est connue, par application de la méthode d'homogénéisation. La formulation a été réalisée à partir de l'échelle de Darcy (échelle locale). L'équation de Richards a été utilisée pour la description d'écoulement dans chaque domaine, tandis que l'équation CDE décrit le transport. Le milieu est sollicité par une vitesse d'écoulement assez faible pour ignorer la dispersion hydrodynamique. Le modèle obtenu consiste en équation qui contient un terme d'échange. Ce terme est calculé par la résolution de l'équation d'échelle local. Le tenseur de diffusion effective ne dépend que de la diffusivité du domaine fortement conducteur et de la géométrie de la microstructure.

Auriault et Lewandowska (1995) ont proposé un modèle de diffusion dans le milieu à double-porosité saturé, en utilisant l'homogénéisation asymptotique. Ce milieu est formé de deux matériaux dont le rapport des diffusivités du domaine fortement conducteur D_1 et du domaine faiblement conducteur D_2 est de $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ ou $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$. L'équation macroscopique présente une forme intégro-différentielle avec le tenseur de diffusion effective qui dépend de D_1, de la tortuosité de la microstructure, l'effet de traînée venant de l'influence de la concentration du domaine le moins conducteur. Le modèle obtenu permet de capturer le phénomène non-équilibre local/non-Fickien, (i.e. la courbe de percée a une forme non Gaussienne marquée par l'effet de traînée).

Baltean *et al.* (2003) ont développé un modèle de diffusion-convection pour le milieu appelé multiporeux. Le modèle macroscopique obtenu par Baltean *et al.* (2003) peut être considéré comme l'extension d'un des cas qui ont été étudiés par Auriault et Adler (1995) et Auriault et Lewandowska (1996). En effet, ils ont ajouté dans le milieu saturé des petits solides par rapport aux solides existants. Ce milieu présente donc deux types d'obstacles imperméables : petits, arrangés d'une façon périodique à une distance d'ordre de grandeur $\alpha\, L$ et grands, distribués périodiquement à une distance d'ordre de grandeur $\varepsilon\, L$, $\alpha << \varepsilon << L$ (milieu doublement périodique).

Mikelic et Rosier (2004) ont développé par homogénéisation un modèle macroscopique de diffusion-convection d'une substance chimique avec l'adsorption sur la surface des agrégats. Le

modèle est associé à l'écoulement de Richards homogénéisé. Le rapport des conductivités entre l'inter-agrégat et intra-agrégat est de l'ordre de ε^2.

Récemment, la revue des modèles macroscopiques du couplage entre l'écoulement et le transport dans les conditions saturées, obtenus par des méthodes d'homogénéisation a été faite par Peszynska et Showalter (2007).

1.3.4 Expériences du transport de solutés dans le milieu hétérogène non saturé

Dans le cadre de l'explication des phénomènes « anormaux » du transport de solutés surtout en zone non saturée, beaucoup d'études expérimentales ont été publiées. Chaque étude a son objectif propre, mais généralement toutes visent à comparer le modèle classique avec ceux de leurs auteurs, pour évaluer l'importance des paramètres, ainsi que les façons de les déterminer.

Le comportement non Fickien du transport de solutés est observé par deux aspects du milieu : son hétérogénéité et/ou son degré de saturation. En effet, même si le milieu est homogène mais non saturé, la forme non standard de la courbe de percée est alors mise en évidence. Ce comportement est très souvent observé lorsqu'un soluté est transporté dans un milieu poreux. On peut considérer la dispersion Fickienne comme un cas particulier de la dispersion non Fickienne. Elle est mise en évidence par de nombreuses études expérimentales en laboratoire. La dispersion non Fickienne se manifeste dans des milieux hétérogènes saturés constitués de deux matériaux dont le rapport de conductivités est de 1/20 (Silliman et Simpson 1987, Berkowitz *et al.* 2000), ou de 1/1800 (Zinn *et al.* 2004, Golfier *et al.* 2007) ; dans des colonnes de sol hétérogènes non perturbées insaturées (Comegna *et al.* 2001) ; ou bien dans des milieux homogènes non-saturés (Padilla *et al.* 1999).

Comegna *et al.* (2001) ont effectué la comparaison des approches équilibre (CDE) et non-équilibre physique (MIM), en interprétant le résultat d'expériences relatives au transport d'un traceur dans une colonne de sol non perturbé qui était composée de sable et argile. Les expériences ont été réalisées en régime d'écoulement permanent non saturé avec injection d'un échelon de traceur KCl à différents débits. Les résultats ont montré que les approches CDE et MIM avaient la capacité à reproduire l'effet de traînée observé. Les auteurs supposent que l'asymétrie et l'effet de mémoire observés sont attribués non seulement au non-équilibre physique (zone d'eau stagnante),

mais encore au non-équilibre chimique (interaction chimique entre traceur et milieu), avec un facteur retard R (R_{max} = 1,698). Ils montrent que l'hétérogénéité du milieu est responsable du comportement non Fickien du transport : plus le milieu est hétérogène plus le transport est non Fickien. En fait, les deux modèles CDE et MIM ont des interprétations équivalentes et non discernables, lorsqu'ils sont calibrés à partir des données à une seule profondeur. Enfin ils montrent que plus le flux est élevé plus le non-équilibre du transport est important.

Cote *et al.* (1999) ont étudié l'influence du gradient de concentration dans des agrégats sphériques sous la condition d'écoulements préférentiels induits par des macropores. En vue de simuler les conditions alternatives aux limites du modèle (période humide et période sèche), la technique d'écoulement intermittent a été utilisée et testée lors d'une première série d'expériences réalisées dans un milieu comprenant des sphères d'argile cuites. Une deuxième série d'expériences a été réalisé sur des colonnes de sol non perturbé, en répétant plusieurs fois l'imbibition et le déplacement du traceur Br^- pour que la distribution de la concentration des agrégats se produit. Cote *et al.* (1999) donnent une estimation du rayon diffusif équivalent des sols agrégés sphériques et montrent que le soluté se déplace plus vite dans le régime d'écoulement alternatif que dans celui en continu.

Outre l'expérience en batch (sans écoulement) réalisée sur un ensemble de 10 agrégats de sol pour évaluer le rôle des macropores dans le transfert diffusif de masse, Haws *et al.* (2004) ont réalisé une série de tests à l'échelle de la colonne (sols intacts) soumis des écoulements permanents et des saturations variables. Ces expériences ont été simulées en utilisant le modèle « dual-porosity » (Eqs. 1.20 - 1.23). L'écoulement a été interrompu deux fois pendant la manipulation pour évaluer la dynamique du transfert de masse de la diffusion. Les résultats montrent que la présence du système « micro-macropores » influence significativement la diffusion qui est plus de deux fois supérieure dans les expériences de la colonne que dans les essais en batch.

Schwartz *et al.* (2000) ont essayé d'estimer les paramètres du modèle « dual-permeability » (Eqs. 1.24 - 1.27) à partir des données expérimentales. Les conditions expérimentales sont similaires à celles de Haws *et al.* (2004) : écoulement permanent insaturé et colonne de sols tropicaux intacts. L'estimation des paramètres par analyse inverse s'est avéré très difficile : coefficient de dispersion dans les micro-porosités trop grand, fraction de sorption proche de l'unité à cause du comportement non linéaire du terme d'échange de masse. Les auteurs ont conclu que la pro-

cédure inverse pose problème pour le modèle « dual-permeability », même pour le cas simple d'écoulement permanent avec seulement quatre paramètres inconnus.

Le modèle MACRO est souvent appliqué dans les études d'écoulement et de transport de solutés sur le terrain (i. e. Saxena *et al.* 1994, Villholth *et al.* 1998, Larsson et Jarvis 1999). A l'échelle du laboratoire Katterer *et al.* (2001) ont réalisé des expériences pour répondre à des objectifs variés : évaluation de la capacité des modèles à simple et double-porosité, influence de l'humidité initiale du milieu, concurrence entre traceurs transportés, ainsi que mode d'application. Le transport de traceurs multiples non-réactifs (deuterium, bromure et chlorure) a été réalisé dans deux types de colonnes de sols intacts (humides et sèches) présentant des sulfates et de nitrates, en écoulement non-stationnaire. Par rapport à l'expérience de Schwartz *et al.* (2000), les concentrations ne sont pas mesurées qu'en sortie de la colonne, mais aussi à certaines profondeurs à l'intérieur. Grâce à cela, Katterer *et al.* (2001) ont pu estimer les paramètres du modèle par analyse inverse. Les résultats de la comparaison avec les mesures montrent que le modèle à SP ne s'adapte pas à la complexité du milieu. Le modèle à DP semble avoir donné de bon résultats.

La comparaison entre les modèles CDE, MIM, DPMM et DPMIM a été réalisée par Pôt *et al.* (2005) et Kohne *et al.* (2006) en simulant l'expérience du transport du traceur de l'eau Br^- et des herbicides dans les colonnes de sols intacts. Les teneurs en eau ont été mesurées à deux profondeurs à l'aide de sondes TDR d'eau (Pôt *et al.* 2005), de deux tensiomètres (Kohne *et al.* 2006). Les modèles ont été calés à partir des données expérimentales. Les résultats montrent que le modèle classique CDE n'est pas capable de reproduire correctement les courbes de percée et que le modèle DPMIM a donné les meilleurs résultats du transport non équilibre physique. Les auteurs soulignent que les limites des approches résident toujours dans l'analyse inverse (corrélation non négligeable entre le grand nombre de paramètres et la solution non unique), dans l'incertitude des paramètres ajustés qui dépendent de l'échelle du temps et de l'espace, dans l'inadéquation des coefficients de transfert de masse supposés du premier ordre. Ces difficultés pourront être surmontées si les processus locaux d'expériences sont connus et les paramètres des modèles sont mesurés expérimentalement.

Les paramètres seront d'autant plus fiables qu' ils seront estimés simultanément à partir des informations sur l'écoulement et le transport, car la concentration est une fonction de l'écoulement d'eau. Inspiré par cela, Inoue *et al.* (2000) ont proposé une expérimentation qui est capable de mesurer à la fois les propriétés hydrauliques d'écoulement et les données dispersives de trans-

port en condition permanente/transitoire sur une même colonne, à l'aide de la mesure de la conductivité électrique du sol . Maineult *et al.* (2004) et Mortensen *et al.* (2006) ont développé des instruments qui permettent de mesurer simultanément les paramètres (propriétés thermiques et hydrauliques, teneur en eau, flux et concentration) présents dans le processus couplé d'écoulement et de transport des solutés dans la zone insaturée.

1.3.5 Conclusion

Dans les modèles à deux régions phénoménologiques, le milieu à double-porosité est assimilé à deux sous-domaines continus superposés. La comparaison de leur intérêt a été rapportée dans la littérature (Simůnek *et al.* 2003, Kohne *et al.* 2006). En général, il est difficile d'utiliser le modèle « dual-permeability » à cause du nombre important de paramètres impliqués, tandis que le modèle « MACRO » est fréquemment appliqué aux expériences *in situ*. L'écoulement et le transport dans chaque région est décrit par une équation spécifique couplée par un terme source/puits qui représente le taux de transfert de masse entre les deux régions. Ce taux dépend du degré de saturation en eau (modèle « dual-porosity »), de la pression (modèle « dual-permeability ») et de la concentration dans les deux régions. La description du modèle « dual-permeability » est donc plus réaliste que le modèle « dual-porosity » par leur terme d'échange. Cependant, celui-ci se ramène au modèle « dual-porosity » sous la condition d'écoulement permanent, parce qu'il existe un équilibre de pression entre les deux domaines (Cherblanc *et al.* 2003). La distinction entre les modèles « dual-porosity » et « dual-permeabilitty » reste difficile (Simůnek *et al.* 2003) du point de vue d'applications pratiques. Ces modèles sont largement utilisés dans la modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée en conditions d'écoulement préférentiel/non-équilibre aussi bien pour des expériences en laboratoire qu'*in situ*. L'inconvénient de ces modèles phénoménologiques est qu'ils ne sont pas obtenus par un passage d'échelle micro-macro rigoureux. La forme est imposée *a priori* et le domaine de leur validité n'est pas connu. De plus ils ne proposent pas de méthodes de calcul des paramètres effectifs. Ces inconvénients sont surmontés par les modèles déterministes obtenus par la méthode du changement d'échelle.

L'utilisation de la méthode du changement d'échelles permet de dériver les modèles macroscopiques dans le milieu à double-porosité. On remarque que dans la littérature les modèles obtenus par homogénéisation pour le milieu à double-porosité sont essentiellement dédiés au transport

de diffusion-convection à l'échelle macroscopique. Les modèles macroscopiques de dispersion-convection dans le milieu à double-porosité non saturé sont donc à développer.

Les milieux poreux naturels forment souvent des structures hétérogènes. Néanmoins, de nombreuses études abordées ci-dessus ont étudié les milieux présentant des structures simples et ordonnées pour le remplissage des colonnes. Les caractéristiques géométriques et la superposition des phénomènes bio-physicochimiques pendant l'expérimentation ne permettent pas toujours de comprendre et décrire de manière satisfaisante les phénomènes de transport dans ces milieux complexes. La condition expérimentale non saturée est souvent difficile à établir de manière contrôlée le flux d'écoulement et la teneur en eau. On manque toujours de données expérimentales (le profil de pression, la distribution de la teneur en eau, par exemple) qui sont nécessaires à la détermination des paramètres du modèle, et puis à sa validation d'un modèle. Dans les milieux hétérogènes non saturé, les difficultés sont asservies par le fait que l'état d'équilibre est très long à s'établir. La question de l'identification paramétrique est donc posée (Vauclin 1994, Schwartz *et al.* 2000). La technique inverse est souvent utilisée lorsqu'il n'est pas possible d'estimer directement les paramètres. Dans ce cas, comment distinguer les erreurs du modèle ou du paramètre (Larsson et Jarvis 1999) ? Comment s'assumer de l'unicité de la solution (Cote *et al.* 1999) ? Les modèles phénoménologiques contiennent souvent de nombreux paramètres à déterminer. Il reste beaucoup de questions ouvertes.

Finalement, la relation expérimentale de la dispersivité entre le milieu homogène saturé et non-saturé issue de données de la littérature donne la base pour étudier celle entre le milieu hétérogène saturé et/ou non.

Chapitre 2

Modélisation par homogénéisation du transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé

2.1 Introduction

Le but du chapitre présent est de développer des modèles macroscopiques de l'écoulement et du transport de soluté dans un milieu à double-porosité non saturé, en utilisant la technique d'homogénéisation asymptotique (Bensoussan *et al.* 1978 et Sanchez-Palencia 1980). Nous suivons la méthodologie proposée dans Auriault (1991). Ce travail présente l'extension de l'analyse présentée dans Auriault et Lewandowska (1993) (1996) et Auriault et Adler (1995) au cas d'un milieu à double-porosité non saturé.

Les modèles macroscopiques du transport sont développés dans les quatre cas suivants : modèle à double-porosité de diffusion (DP-Diffusion), modèle à double-porosité de diffusion-convection (DP-Diffusion-Convection), modèle à double-porosité de dispersion-convection (DP-Dispersion-Convection) et modèle à simple-porosité de dispersion-convection (SP-Dispersion-Convection).

Les différents modèles correspondent aux différents régimes de transport à l'échelle microscopique (locale), définis à l'aide de nombres adimensionels. Nous commençons par une présentation de la méthode d'homogénéisation. Ensuite, nous formulons le problème à l'échelle microscopique. Dans le paragraphe 2.5 nous rappelons les principaux résultats de l'homogénéisation du pro-

blème de l'écoulement dans un milieu à double-porosité non saturé (Thèse Szymkiewicz 2004, Lewandowska *et al.* 2004). Le développement des modèles de transport associés aux modèles de l'écoulement, est présenté dans 2.6. Nous terminons par une présentation synthétique des modèles (équations différentielles de bilan de masse, définition des paramètres, domaine de validité) et par une brève analyse des différents comportements.

2.2 Méthode d'homogénéisation

La méthode d'homogénéisation permet de décrire le comportement d'un milieu hétérogène, en le remplaçant par un milieu homogène équivalent. Ce processus est appelé changement d'échelles. L'étude commence par la description des phénomènes physiques à l'échelle des hétérogénéités. Cette échelle doit être beaucoup plus fine que celle où se place l'ingénieur pour les applications pratiques, qui est contrôlée par la taille des ouvrages (échelle macroscopique). Le principe de la méthode, qui est fondé sur les développements asymptotiques, est présenté dans les ouvrages de Bensoussan *et al.* (1978) et Sanchez-Palencia (1980). Auriault (1991) a proposé une approche appelée l'homogénéisation physique qui est effectuée sur les nombres adimensionnels gouvernant les processus impliqués. Elle est bien adapté à la résolution de problèmes d'ingénierie.

L'hypothèse fondamentale de l'homogénéisation est la séparation d'échelles concernant des quantités géométriques et physiques, qui s'écrit

$$\varepsilon = \frac{l}{L} << 1, \tag{2.1}$$

où l [L] est la longueur caractéristique microscopique et L [L] est la longueur caractéristique macroscopique. La condition 2.1 est équivalente à l'existence d'un VER. La présence des deux échelles se traduit par l'introduction de deux variables d'espace : les variables microscopiques ($y = X/l$) et macroscopique ($x = X/L$). L'opérateur de la dérivée spatiale est donc remplacé par son équivalent à deux échelles

$$\nabla_y \longrightarrow \nabla_y + \varepsilon\, \nabla_x. \tag{2.2}$$

On suppose que la physique à une échelle donnée est connue. La microstructure du milieu doit être connue, soit périodique, soit aléatoire (Auriault 1991). La méthode consiste à rechercher la description à l'échelle supérieure (macroscopique) pour un milieu équivalent continu.

Les grandeurs physiques inconnues du problème sont exprimées sous forme de développements asymptotiques :

$$\psi^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*) = \psi^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*) + \varepsilon\, \psi^{(1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*) + \varepsilon^2\, \psi^{(2)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*) + ... \tag{2.3}$$

où $\psi^{(i)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*)$ sont y-périodiques.

Les différentes étapes de la procédure d'homogénéisation sont (Auriault 1991) :

- Etape 1 : Description physique à l'échelle microscopique,
- Etape 2 : Normalisation des équations,
- Etape 3 : Evaluation des nombres adimensionnels R en fonction des puissances de ε :

$$R = \mathcal{O}(\varepsilon^p) \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon^{p+1} << R << \varepsilon^{p-1}, \tag{2.4}$$

- Etape 4 : Introduction des développements asymptotiques de toutes grandeurs physiques adimensionnelles,
- Etape 5 : Solution des problèmes aux limites aux différentes puissances de ε,
- Etape 6 : Retour à une description macroscopique dimensionnelle.

Ce processus conduit alors à un modèle macroscopique dont les propriétés homogénéisées viennent de la solution du problème local aux limites.

2.3 Hypothèses

Les hypothèses concernant les milieux poreux et la physique à l'échelle locale sont les suivantes :

- Milieu à double-porosité

Nous considérons un milieu poreux rigide dont la structure à double-porosité est périodique (FIG. 2.1). La périodicité signifie que nous pouvons définir une période, dont la dimension l est très inférieure à la dimension macroscopique L. Le milieu est alors reproductible par translation de la période. La double-porosité signifie qu'à l'intérieur de la période nous pouvons distinguer deux domaines poreux, dont les tailles caractéristiques des pores sont très contrastées et très inférieures à l. Le contraste des tailles des pores entraîne celui des propriétés physiques des deux domaines poreux, traités comme homogènes (= homogénéisés).

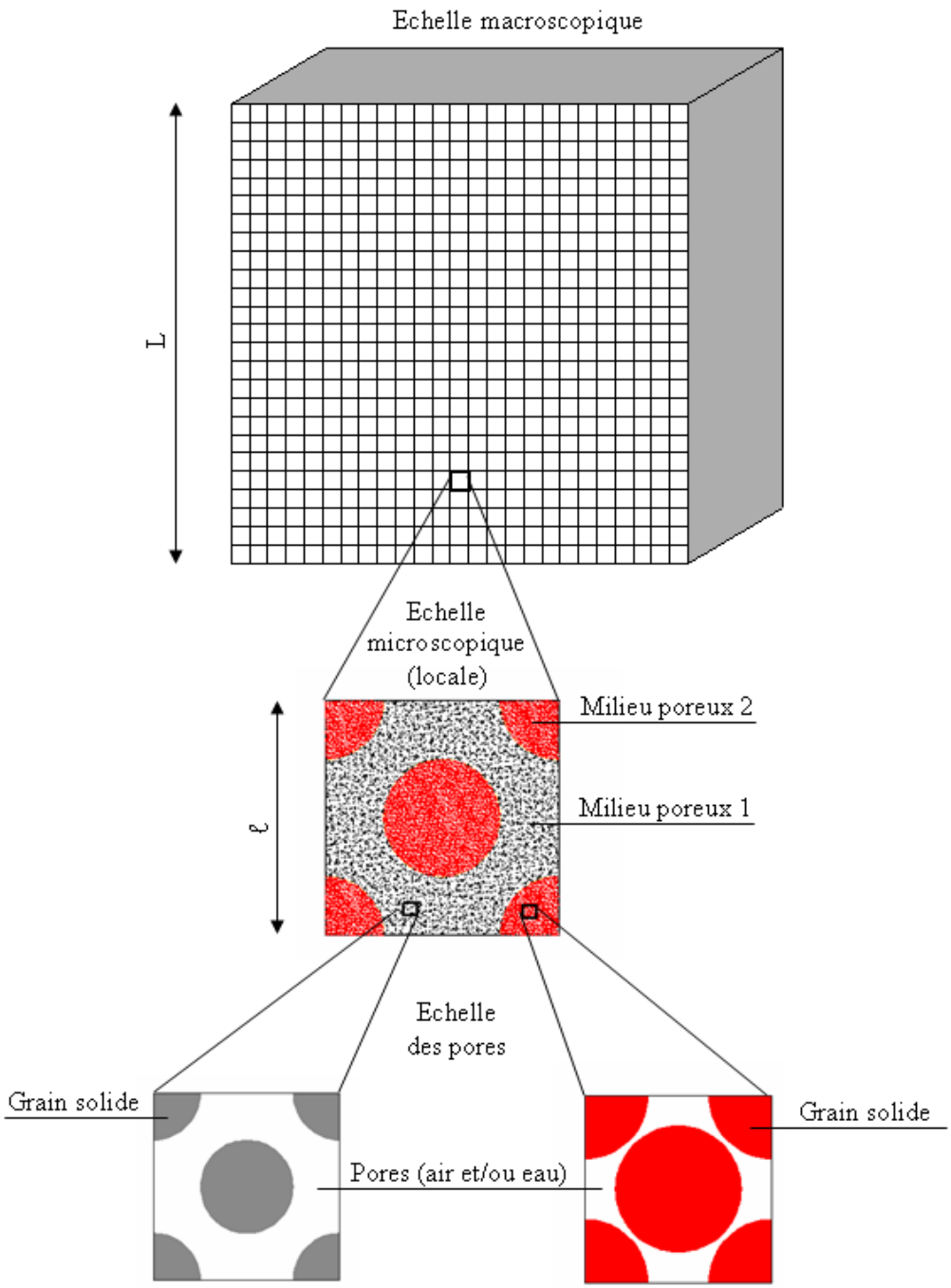


FIG. 2.1: Milieu poreux périodique à double-porosité.

- Propriétés physiques locales

A l'échelle de la période on suppose :

$$\frac{K_2}{K_1} = \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad \text{et} \quad \frac{D_2}{D_1} = \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{2.5}$$

où K [LT^{-1}] est la conductivité hydraulique ; D [$\mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-1}$] est le coefficient de diffusion de soluté ; ε est le paramètre de séparation d'échelle ($\varepsilon << 1$) et « 1, 2 » sont les indices de deux domaines.

Un paramètre clé de l'analyse est la connectivité des domaines, qui influence de façon significative le comportement macroscopique. On suppose que le domaine le plus conducteur noté 1 constitue un domaine connexe (FIG. 2.2). Cette hypothèse correspond à la réalité physique de l'écoulement préférentiel, observé expérimentalement et que nous souhaitons décrire. De plus, les fractions volumiques du domaine 1 (ϕ_1) et 2 (ϕ_2) sont supposées du même ordre de grandeur

$$\mathcal{O}(\phi_1) = \mathcal{O}(\phi_2). \tag{2.6}$$

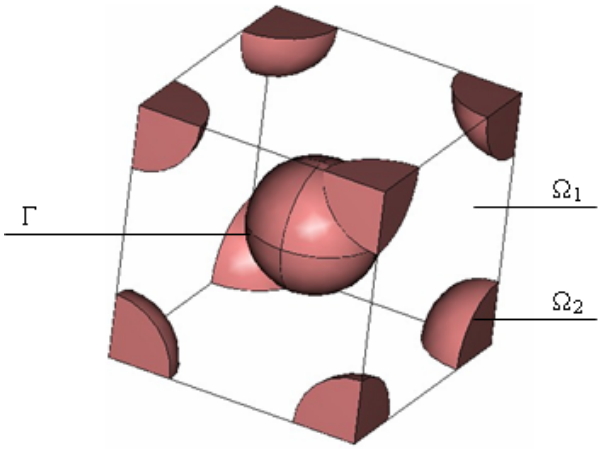


FIG. 2.2: Période à deux domaines (domaine Ω_1 plus conducteur et connexe, domaine Ω_2 moins conducteur et interface Γ).

- Ecoulement d'eau

L'écoulement de l'eau dans les conditions non saturées est décrit par l'équation de Richards (1931). On suppose donc que l'eau est un fluide Newtonien et incompressible et que la pression d'air est constante et égale à la pression atmosphère pendant tout le processus d'écoulement.

- Transport de soluté

Le transport d'un soluté est supposé inerte chimiquement et décrit par l'équation de diffusion/dispersion-convection. De plus on suppose que l'écoulement d'eau est permanent et non saturé.

2.4 Formulation du problème

Le problème est formulé à l'échelle à la période l (FIG. 2.1) en supposant que chaque milieu poreux constituant la période est homogène (a été homogénéisé auparavant). Nous ne montrons pas ici le passage de l'échelle des pores à celle du milieu poreux. On trouvera les détails de cette analyse dans Auriault (1987) pour l'écoulement non saturé et dans Auriault et Lewandowska (1993), (1996) et Auriault et Adler (1995) pour le transport de soluté.

2.4.1 Description à l'échelle locale

2.4.1.1 Ecoulement d'eau

L'écoulement d'eau en milieu non saturé est localement décrit dans chaque domaine poreux (FIG. 2.2) par l'équation de conservation de la masse qui est écrite sous la forme proposée par Richards (1931)

$$\mathcal{C}_1(h_1)\,\frac{\partial h_1}{\partial t} = \nabla_X \cdot [\boldsymbol{K}_1(h_1) \cdot \nabla_X(h_1 + X_3)] \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.7}$$

$$\mathcal{C}_2(h_2)\,\frac{\partial h_2}{\partial t} = \nabla_X \cdot [\boldsymbol{K}_2(h_2) \cdot \nabla_X(h_2 + X_3)] \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.8}$$

où h [L] est la hauteur de la pression capillaire ; $\boldsymbol{K}$ [LT^{-1}] est le tenseur de conductivité ; $\mathcal{C}(h)$ [L^{-1}] est la capacité de rétention ; t [T] est le temps ; $\boldsymbol{X}(X_1, X_2, X_3)$ est la variable spatiale avec X_3 [L] l'axe vertical orienté positivement vers le haut. ∇_X est l'opérateur différentiel par rapport à la variable $\boldsymbol{X}$. A l'interface, la continuité des pressions capillaires et des flux de masse d'eau conduit à

$$[\boldsymbol{K}_1(h_1) \cdot \nabla_X(h_1 + X_3)] \cdot \boldsymbol{N} = [\boldsymbol{K}_2(h_2) \cdot \nabla_X(h_2 + X_3)] \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.9}$$

$$h_1 = h_2 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.10}$$

où $\boldsymbol{N}$ [-] est le vecteur unitaire normal et orienté à l'extérieur de Ω_1.

Supposons que les caractéristiques hydrauliques des deux domaines sont connues, soit :

$$h_1 = h_1(\theta_1) \quad \text{et} \quad \boldsymbol{K}_1 = \boldsymbol{K}_1(\theta_1), \tag{2.11}$$

$$h_2 = h_2(\theta_2) \quad \text{et} \quad \boldsymbol{K}_2 = \boldsymbol{K}_2(\theta_2), \tag{2.12}$$

où $h(\theta)$ est la courbe de rétention en eau et $K(\theta)$ la courbe de conductivité ; θ [$\mathrm{L}^3\mathrm{L}^{-3}$] étant la teneur volumique en eau. Elles correspondent aux lois constitutives de chaque domaine à déterminer expérimentalement.

Les capacités de rétention d'eau $\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$ sont définies comme inverse des pentes des courbes de rétention $h(\theta)$

$$\mathcal{C}_1 = \frac{d\theta_1}{dh_1} \quad \text{et} \quad \mathcal{C}_2 = \frac{d\theta_2}{dh_2}. \tag{2.13}$$

Remarquons que les fonctions $K(h)$ et $\mathcal{C}(h)$ sont fortement non linéaires. Dans la suite, nous supposons que le milieu est localement isotrope et les tenseurs $\boldsymbol{K}_1$ et $\boldsymbol{K}_2$ sont remplacés par des scalaires.

2.4.1.2 Transport de soluté

On suppose que le transport dans un milieu poreux non saturé à l'échelle de la période est décrit par l'équation de conservation de la masse, valable dans chaque domaine (Bear 1961) :

$$\frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_1(\theta_1) \cdot \nabla_X\, C_1 - \boldsymbol{v}_1(\theta_1)\, C_1\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial(\theta_2\, C_2)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_2(\theta_2) \cdot \nabla_X\, C_2 - \boldsymbol{v}_2(\theta_2)\, C_2\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_2. \tag{2.15}$$

Les conditions de continuité à l'interface Γ (FIG. 2.2) s'écrivent

$$\left(\boldsymbol{D}_1(\theta_1) \cdot \nabla_X\, C_1 - \boldsymbol{v}_1(\theta_1)\, C_1\right) \cdot \boldsymbol{N} = \left(\boldsymbol{D}_2(\theta_2) \cdot \nabla_X\, C_2 - \boldsymbol{v}_2(\theta_2)\, C_2\right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.16}$$

$$C_1 = C_2 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.17}$$

où C_1 et C_2 [ML^{-3}] sont les concentrations de soluté dans la phase liquide des domaines 1 et 2 respectivement ; $\boldsymbol{D}_1$ et $\boldsymbol{D}_2$ [$\mathrm{L}^2\mathrm{T}^{-1}$] sont les tenseurs de diffusion/dispersion dans les mêmes domaines. Ils sont fonction de θ_1 et θ_2 ; $\boldsymbol{v}_1$ et $\boldsymbol{v}_2$ [LT^{-1}] sont les vitesses de Darcy locales dont on suppose qu'elles sont connues et déterminées indépendamment du problème de transport.

2.4.2 Normalisation des équations et nombres adimensionnels

Le problème physique considéré à l'échelle locale est écrit en termes de variables adimensionnelles ψ^* définies par

$$\psi^* = \frac{\psi}{\psi_c}, \tag{2.18}$$

où ψ est une variable physique dimensionnelle et ψ_c est une valeur caractéristique de ψ.

2.4.2.1 Écoulement d'eau

L'introduction des variables adimensionnelles suivantes :

$$h_1 = h_1^*\, h_c \qquad K_1 = K_1^*\, K_{1c} \qquad \mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_1^*\, \mathcal{C}_{1c}, \tag{2.19}$$

$$h_2 = h_2^*\, h_c \qquad K_2 = K_2^*\, K_{2c} \qquad \mathcal{C}_2 = \mathcal{C}_2^*\, \mathcal{C}_{2c}, \tag{2.20}$$

$$t = t^*\, t_c, \tag{2.21}$$

$$X = y\, l, \tag{2.22}$$

dans (2.7 - 2.10) conduit aux équations sans dimensions suivantes :

$$\frac{l^2\, \mathcal{C}_{1c}}{t_c\, K_{1c}}\, \mathcal{C}_1^*\, \frac{\partial h_1^*}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left[K_1^*\, \nabla_y \left(h_1^* + \frac{l}{h_c} y_3 \right) \right] \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.23}$$

$$\frac{l^2\, \mathcal{C}_{2c}}{t_c\, K_{2c}}\, \mathcal{C}_2^* \frac{\partial h_2^*}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left[K_2^*\, \nabla_y \left(h_2^* + \frac{l}{h_c} y_3 \right) \right] \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.24}$$

$$\left[K_1^*\, \nabla_y \left(h_1^* + \frac{l}{h_c} y_3 \right) \right] \cdot \boldsymbol{N} = \frac{K_{2c}}{K_{1c}} \left[K_2^*\, \nabla_y \left(h_2^* + \frac{l}{h_c} y_3 \right) \right] \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.25}$$

$$h_c\, h_1^* = h_c\, h_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.26}$$

Le temps caractéristique choisi correspond à celui de l'écoulement dans le domaine le plus conducteur à l'échelle L, soit

$$t_c = \frac{\mathcal{C}_{1c}\, L^2}{K_{1c}}. \tag{2.27}$$

Nous regardons le cas du contraste de conductivités hydrauliques suivant :

$$\frac{K_{2c}}{K_{1c}} = \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad \text{avec} \quad \frac{\mathcal{C}_{1c}}{\mathcal{C}_{2c}} = \mathcal{O}(1). \tag{2.28}$$

D'autres cas peuvent être envisagés comme ceux présentés dans la thèse de Szymkiewicz (2004) et ou dans Lewandowska *et al.* (2004).

On suppose qu'à l'échelle l, le terme de la capillarité est beaucoup plus important que celui de la gravité

$$\frac{l}{h_c} = \mathcal{O}(\varepsilon). \tag{2.29}$$

Le problème de l'écoulement non saturé devient donc :

$$\varepsilon^2\, \mathcal{C}_1^* \, \frac{\partial h_1^*}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, [K_1^* \, \nabla_y \, (h_1^* + \varepsilon \, y_3)] \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.30}$$

$$\mathcal{C}_2^* \, \frac{\partial h_2^*}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, [K_2^* \, \nabla_y \, (h_2^* + \varepsilon \, y_3)] \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.31}$$

$$[K_1^* \, \nabla_y \, (h_1^* + \varepsilon \, y_3)] \cdot \boldsymbol{N} = \varepsilon^2 \, [K_2^* \, \nabla_y (h_2^* + \varepsilon \, y_3)] \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.32}$$

$$h_1^* = h_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.33}$$

2.4.2.2 Transport de soluté

L'introduction des variables adimensionnelles suivantes :

$$C_1 = C_1^* \, C_c; \quad \boldsymbol{D}_1 = \boldsymbol{D}_1^* \, D_{1c}; \quad \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}_1^* \, v_{1c}, \tag{2.34}$$

$$C_2 = C_2^* \, C_c; \quad \boldsymbol{D}_2 = \boldsymbol{D}_2^* \, D_{2c}; \quad \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{v}_2^* \, v_{2c} \quad \text{et} \quad t = t^* \, t_c. \tag{2.35}$$

(2.34) - (2.35) dans (2.14) - (2.17) donne

$$\frac{l^2}{D_{1c} \, t_c} \, \frac{\partial(\theta_1^* \, C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \frac{l \, v_{1c}}{D_{1c}} \, \boldsymbol{v}_1 \, C_1^* \right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.36}$$

$$\frac{l^2}{D_{2c} \, t_c} \, \frac{\partial(\theta_2^* \, C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^* - \frac{l \, v_{2c}}{D_{2c}} \, \boldsymbol{v}_2 \, C_2^* \right) \quad \text{dans} \quad \Omega_2 \tag{2.37}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \frac{l \, v_{1c}}{D_{1c}} \, \boldsymbol{v}_1^* \, C_1^* \right) \cdot \boldsymbol{N} = \frac{D_{2c}}{D_{1c}} \, \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, {C_2}^* - \frac{l \, v_{2c}}{D_{2c}} \, \boldsymbol{v}_2^* \, C_2^* \right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.38}$$

$$C_c \, {C_1}^* = C_c \, {C_2}^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.39}$$

En définissant les nombres adimensionnels :

$$\mathcal{P}_{1l} = \frac{l^2}{D_{1c}\, t_c} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{2l} = \frac{l^2}{D_{2c}\, t_c} \tag{2.40}$$

et les nombres de Péclet dans chaque domaine

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_{1c}} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}e_{2l} = \frac{v_{2c}\, l}{D_{2c}}, \tag{2.41}$$

les équations adimensionnelles (2.36-2.39) deviennent donc

$$\mathcal{P}_{1l}\, \frac{\partial(\theta_1^*\, C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot\, (\boldsymbol{D}_1^* \cdot\, \nabla_y\, C_1^* - \mathcal{P}e_{1l}\, \boldsymbol{v}_1\, C_1^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.42}$$

$$\mathcal{P}_{2l}\, \frac{\partial(\theta_2^*\, C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot\, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot\, \nabla_y\, C_2^* - \mathcal{P}e_{2l}\, \boldsymbol{v}_2\, C_2^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.43}$$

$$(\boldsymbol{D}_1^* \cdot\, \nabla_y\, C_1^* - \mathcal{P}e_{1l}\, \boldsymbol{v}_1^*\, C_1^*) \cdot \boldsymbol{N} = \frac{D_{2c}}{D_{1c}}\, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot\, \nabla_y\, {C_2}^* - \mathcal{P}e_{2l}\, \boldsymbol{v}_2^*\, C_2^*) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.44}$$

$$C_c\, {C_1}^* = C_c\, {C_2}^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.45}$$

2.5 Modèle macroscopique de l'écoulement d'eau

Nous rappelons ici les résultats obtenus dans le cadre de la thèse de Szymkiewicz (2004) et présentés dans Lewandowska *et al.* (2004) en appliquant la procédure d'homogénéisation décrite dans le paragraphe 2.2.

2.5.1 Variable macroscopique

A partir du problème (2.30) et (2.32), à l'ordre ε^0, nous obtenons la variable macroscopique $h_1^{(0)}$

$$\nabla_y \cdot \left(K_1^*\, \nabla_y\, h_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1 \tag{2.46}$$

$$\left(K_1^*\, \nabla_y\, h_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.47}$$

où $h_1^{(0)}$ est $\boldsymbol{y}$-périodique. La solution de (2.46) et (2.47) est une fonction qui ne dépend pas de $\boldsymbol{y}$

$$h_1^{(0)} = h_1^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*) = h^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*). \tag{2.48}$$

La solution au premier ordre permet d'obtenir la variable macroscopique $h^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*)$ qui est constante sur Ω . La courbe de rétention permet également d'obtenir la teneur volumique en eau correspondante :

$$\theta_1^{(0)} = h_1^{-1}(h_1^{(0)}) \quad \text{ou} \quad h_1^{(0)} = h_1(\theta_1^{(0)}). \tag{2.49}$$

2.5.2 Problème local aux limites

A l'ordre ε^1, (2.30) et (2.32) donnent :

$$\nabla_y \cdot \left[K_1^{(0)} \left(\nabla_x h^{(0)} + \vec{e}_3\right) + K_1^{(0)} \nabla_y h_1^{(1)}\right] = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.50}$$

$$\left[K^{(0)} \left(\nabla_x h^{(0)} + \vec{e}_3\right) + K_1^{(0)} \nabla_y h_1^{(1)}\right] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.51}$$

La solution de (2.50) - (2.51) est une fonction linéaire du gradient macroscopique

$$h_1^{(1)} = \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{y}) \left(\nabla_x h_1^{(0)} + \vec{e}_3\right) + \overline{h}_1^{(1)}(x, t^*) \tag{2.52}$$

où $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{y})$ est une fonction vectorielle périodique.

Le vecteur $\boldsymbol{\xi}$ est donné par le problème aux limites suivant :

$$\nabla_y \cdot \left[K_1^{(0)} \left(\nabla_y \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I}\right)\right] = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.53}$$

$$\left[K_1^{(0)} \left(\nabla_y \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I}\right)\right] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.54}$$

et une condition de moyenne volumique nulle de la fonction vectorielle $\boldsymbol{\xi}$

$$\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\xi} \, d\Omega = 0 \tag{2.55}$$

où $\boldsymbol{I}$ est la matrice unitaire. La symbole « $\langle\,\rangle$ » signifie la moyenne sur le volume total de la période Ω.

2.5.3 Modèle macroscopique de l'écoulement

Le modèle macroscopique est obtenu en analysant les équations (2.30) et (2.32) à l'ordre ε^2 :

$$\mathcal{C}_1^{(0)}\,\frac{\partial h_1^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left[K_1^{(0)}\left(\nabla_y\, h_1^{(2)} + \nabla_x\, h_1^{(1)}\right) + K_1^{(1)}\left(\nabla_y\, h_1^{(1)} + \nabla_x\, h_1^{(0)}\right) + K_1^{(1)}\vec{e}_3\right] + \\ + \nabla_x \cdot \left[K_1^{(0)}\,\left(\nabla_y\, h_1^{(1)} + \nabla_x\, h_1^{(0)}\right) + K_1^{(0)}\vec{e}_3\right] \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.56}$$

$$\left[K_1^{(0)}\,(\nabla_y\, h_1^{(2)} + \nabla_x\, h_1^{(1)}) + K_1^{(1)}(\nabla_y\, h_1^{(1)} + \nabla_x\, h_1^{(0)}) + K_1^{(1)}\vec{e}_3\right]\cdot\boldsymbol{N} = \left[K_2^{(0)}\,\nabla_y\, h_2^{(0)}\right]\cdot\boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.57}$$

L'intégration de l'équation (2.56) avec la prise en compte de (2.57) et de la périodicité, donne l'équation qui gouverne la variable macroscopique sous la forme suivante :

$$\mathcal{C}^{eff}\,\frac{\partial h^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left[\boldsymbol{K}^{eff}\cdot\nabla_x\,\left(h^{(0)} + x_3\right)\right] - \left\langle \mathcal{C}_2^{(0)}\,\frac{\partial h_2^{(0)}}{\partial t^*}\right\rangle. \tag{2.58}$$

Les paramètres effectifs sont définis par :

$$\mathcal{C}^{eff}(h^{(0)}) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_1} \mathcal{C}_1^{(0)} d\Omega = \phi_1 \mathcal{C}_1^{(0)}, \tag{2.59}$$

$$\boldsymbol{K}^{eff}(h^{(0)}) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_1} K_1^{(0)}\,\left(\nabla_y \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I}\right) d\Omega. \tag{2.60}$$

L'équation (2.58) contient un terme source qui correspond à l'échange de masse d'eau entre les domaines Ω_1 et Ω_2

$$\left\langle \mathcal{C}_2^{(0)}\,\frac{\partial h_2^{(0)}}{\partial t^*}\right\rangle = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_2} \mathcal{C}_2^{(0)}\,\frac{\partial h_2^{(0)}}{\partial t^*} d\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_2} \frac{\partial \theta_2^{(0)}}{\partial t^*}\, d\Omega \tag{2.61}$$

Pour obtenir le problème gouvernant (2.61) les équations (2.31) - (2.33) à l'ordre ε^0 donnent :

$$\mathcal{C}_2^{(0)}\,\frac{\partial h_2^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot\,(K_2^{(0)}\nabla_y\, h_2^{(0)}) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.62}$$

$$h_2^{(0)} = h^{(0)} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.63}$$

La solution du problème (2.62) et (2.63) est une fonction $h_2^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t^*)$ qui n'est pas constante dans Ω_2. Nous obtenons donc deux champs de pression $h_1^{(0)}$ et $h_2^{(0)}$ dans la période qui correspondent

à un modèle à deux équations couplées qui peut être présenté sous la forme mixte (h, θ)

$$\phi_1 \frac{\partial \theta^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left[\boldsymbol{K}^{eff}(h^{(0)}) \cdot \nabla_x \left(h^{(0)} + x_3 \right) \right] - \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*}, \tag{2.64}$$

$$\frac{\partial \theta_2^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(K_2^{(0)} \nabla_y h_2^{(0)} \right) \quad \text{avec} \quad h_2^{(0)} = h^{(0)} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.65}$$

ou sous forme dimensionnelle

$$\phi_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left[\boldsymbol{K}^{eff}(h) \cdot \nabla_X \ (h + X_3) \right] - \frac{\partial \langle \theta_2 \rangle}{\partial t}, \tag{2.66}$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial t} = \nabla_X \cdot \ (K_2 \nabla_X \ h_2) \quad \text{avec} \quad h_2 = h \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.67}$$

et qui présente le couplage entre les échelles macroscopique et microscopique.

2.6 Modèles macroscopiques du transport de soluté

On présente le développement de quatre modèles correspondant aux différents régimes de transport à l'échelle locale. Les modèles sont regroupés dans la section 2.6.6.

2.6.1 Condition de l'écoulement et du transport de soluté

Nous considérons que l'écoulement d'eau est permanent. L'équation (2.64) devient donc

$$\nabla_x \cdot \left[\boldsymbol{K}^{eff}(\theta) \cdot \nabla_x \left(h^{(0)} + x_3 \right) \right] = 0, \tag{2.68}$$

avec

$$\left\langle \boldsymbol{v}^{(0)} \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle = \left[\boldsymbol{K}^{eff}(\theta) \cdot \nabla_x \left(h^{(0)} + x_3 \right) \right], \tag{2.69}$$

qui définit la vitesse macroscopique.

Les équations (2.50) et (2.51) deviennent

$$\nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.70}$$

$$\boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.71}$$

$$\boldsymbol{v}_1^{(0)} = \left[K_1^{(0)} \left(\nabla_x h^{(0)} + \vec{e}_3\right) + K_1^{(0)} \nabla_y h_1^{(1)}\right], \tag{2.72}$$

où $\boldsymbol{v}_1^{(0)}$ est la vitesse locale dans le domaine 1.

Du fait de l'écoulement permanent, on considère que l'eau est stagnante dans le domaine 2 (micro-porosité) et que l'écoulement se produit dans le domaine 1 (macro-porosité). C'est un résultat de l'homogénéisation du problème de l'écoulement. A cause de l'écoulement permanent d'eau, nous avons θ_1=constante, θ_2=constante, $\boldsymbol{D}_1(\theta)$=constante et $\boldsymbol{D}_2(\theta)$=constante.

Donc, le problème (2.42) - (2.45) s'écrit :

$$\mathcal{P}_{1l} \frac{\partial(\theta_1^* C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^* - \mathcal{P}e_{1l}\, \boldsymbol{v}_1\, C_1^*\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.73}$$

$$\mathcal{P}_{2l} \frac{\partial(\theta_2^* C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.74}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^* - \mathcal{P}e_{1l}\, \boldsymbol{v}_1^*\, C_1^*\right) \cdot \boldsymbol{N} = \frac{D_{2c}}{D_{1c}} \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y {C_2}^*\right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.75}$$

$$C_c\, {C_1}^* = C_c\, {C_2}^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.76}$$

Les différents cas considérés dans la suite correspondent à différents régimes de transport dans le domaine 1, avec le transport par diffusion dans le domaine 2.

2.6.2 Modèle à double-porosité de diffusion (DP-Diffusion)

2.6.2.1 Formulation du problème

Le temps caractéristique

$$t_c = \frac{L^2}{D_{1c}} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{1l} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.77}$$

où D_{1c} est le coefficient de diffusion dans le domaine 1.

Nous considérons le cas suivant :

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_{1c}} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.78}$$

Le problème s'écrit

$$\varepsilon^2 \frac{\partial(\theta_1^* C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(D_1^* \nabla_y C_1^* - \varepsilon^2\, \boldsymbol{v}_1^*\, C_1^*\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.79}$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* \, C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (D_2^* \, \nabla_y \, C_2^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.80}$$

$$\left(D_1^* \, \nabla_y \, C_1^* - \varepsilon^2 \, \boldsymbol{v}_1^* \, C_1^*\right) \cdot \boldsymbol{N} = \varepsilon^2 \, (D_2^* \, \nabla_y \, C_2^*) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.81}$$

$$C_1^* = C_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.82}$$

2.6.2.2 Homogénéisation

- A l'ordre ε^0

Nous analysons le comportement de la concentration à l'ordre ε^0 :

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.83}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.84}$$

où $C_1^{(0)}$ est $\boldsymbol{y}$-périodique.

La solution du problème (2.83) - (2.84) est classique

$$C_1^{(0)} = C_1^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*). \tag{2.85}$$

Ainsi, la solution au premier ordre $C_1^{(0)}$ est une fonction qui dépend de la variable macroscopique $\boldsymbol{x}$ (ne dépend pas de la variable locale $\boldsymbol{y}$) et est constante sur la période. $C_1^{(0)}$ est donc considéré comme la variable macroscopique $C^{(0)}$.

Pour $C_2^{(0)}$, les équations (2.80) et (2.82) à l'ordre ε^0 donne le problème suivant

$$\frac{\partial(\theta_2^{(0)} \, C_2^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^{(0)}) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.86}$$

$$C_1^{(0)} = C_2^{(0)} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.87}$$

La concentration $C_2^{(0)}$ n'est pas une variable macroscopique, puisqu'elle n'est pas constante dans le domaine Ω_2. Nous avons deux concentrations : macroscopique $C_1^{(0)}$ et locale $C_2^{(0)}$ qui sont couplées par la condition (2.87) sur Γ.

- A l'ordre ε^1

Les équations (2.79) et (2.81) à l'ordre ε^1 et la prise en compte de la solution (2.85), nous donnent

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.88}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.89}$$

Le système (2.88) et (2.89) admet la solution de la forme

$$C_1^{(1)} = \boldsymbol{\chi}\,(\boldsymbol{y})\, \nabla_x C_1^{(0)} + \overline{C}_1^{(1)}(\boldsymbol{x}, t^*) \tag{2.90}$$

où $\boldsymbol{\chi}\,(\boldsymbol{y})$ est une fonction vectorielle périodique et $\overline{C}_1^{(1)}\ (\boldsymbol{x}, t^*)$ est une fonction arbitraire. Le vecteur $\boldsymbol{\chi}\,(\boldsymbol{y})$ est donné par le problème aux limites suivant :

$$\nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})\right] = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.91}$$

$$\left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})\right] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.92}$$

$$\langle \boldsymbol{\chi} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \boldsymbol{\chi}\, d\Omega = 0 \tag{2.93}$$

- A l'ordre ε^2

En vue de déterminer le modèle macroscopique, nous écrivons les équations (2.79) - (2.81) à l'ordre ε^2

$$\frac{\partial(\theta_1^{(0)}\, C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) + \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.94}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.95}$$

L'intégration de l'équation (2.94) sur Ω_1 et la division par $|\Omega|$ donne

$$\frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) d\Omega + \\ + \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) d\Omega. \tag{2.96}$$

Le deuxième terme à droite de (2.96) est traité par des transformations suivantes. D'abord, nous appliquons le théorème de Gauss - Ostrogradski

$$\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_1} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) d\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\partial\Omega_1} \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) \cdot \boldsymbol{N}\, dS \tag{2.97}$$

où $\partial\Omega_1$ est la frontière de Ω_1. Elle est la somme du bord extérieur de la période $\partial\Omega$ et de l'interface Γ. L'intégration sur $\partial\Omega$ étant nulle pour cause de périodicité, l'expression (2.97) devient alors

$$\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_1} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) d\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Gamma} \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) \cdot \boldsymbol{N}\, d\Gamma. \tag{2.98}$$

Ensuite, l'utilisation de la condition (2.95) donne

$$\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Gamma} \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) \cdot \boldsymbol{N}\, d\Gamma = \frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Gamma} \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N}\, d\Gamma. \tag{2.99}$$

L'application du théorème de Gauss - Ostrogradski permettant de passer de l'intégrale surfacique à l'intégrale volumique conduit à l'équation

$$\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Gamma} \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N}\, d\Gamma = -\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_2} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) d\Omega. \tag{2.100}$$

Notons que le vecteur normal $\boldsymbol{N}$ est par convention, extérieur au domaine Ω_1. Finalement nous utilisons l'équation (2.86) pour écrire

$$-\frac{1}{\Omega}\int\limits_{\Omega_2} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) d\Omega = -\frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_2} \frac{\partial(\theta_2^{(0)} C_2^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega \tag{2.101}$$

L'équation (2.96) devient

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega = \frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) d\Omega - \\ - \frac{1}{|\Omega|}\int\limits_{\Omega_2} \frac{\partial(\theta_2^{(0)} C_2^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega. \tag{2.102}$$

où $\phi_1 = \frac{|\Omega_1|}{|\Omega|}$ est la fraction volumique du milieu 1.

En remplaçant $C_1^{(1)}$ par sa solution (2.90), nous obtenons l'équation macroscopique sous la forme adimensionnelle

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1^{(0)}\, C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_{dif}^{*eff} \cdot \nabla_x\, C_1^{(0)} \right) - \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_2} \frac{\partial(\theta_2^{(0)}\, C_2^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega, \tag{2.103}$$

avec le tenseur de diffusion effective du milieu à double-porosité défini comme la moyenne de volume

$$\boldsymbol{D}_{dif}^{*eff} = \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y\, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I} \right)\, d\Omega. \tag{2.104}$$

Nous obtenons un modèle macroscopique qui consiste en deux équations couplées par un terme source représentant l'échange de masse de soluté à l'échelle locale

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_{dif}^{eff} \cdot \nabla_X\, C_1 \right) - \frac{\partial \left\langle \theta_2\, C_2 \right\rangle}{\partial t}, \tag{2.105}$$

$$\frac{\partial(\theta_2\, C_2)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_2 \cdot \nabla_X\, C_2 \right), \tag{2.106}$$

avec

$$C_2 = C_1 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.107}$$

où

$$\boldsymbol{D}_{dif}^{eff}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int\limits_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1(\theta) \cdot \left(\nabla\, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I} \right) d\Omega. \tag{2.108}$$

Ce modèle est un modèle de non-équilibre local des concentrations C_1 et C_2 avec un paramètre effectif qui est le tenseur de diffusion effective.

2.6.3 Modèle à double-porosité de diffusion-convection (DP-Diffusion-Convection)

2.6.3.1 Formulation du problème

Le temps caractéristique

$$t_c = \frac{L^2}{D_{1c}} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{1l} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.109}$$

où D_{1c} est le coefficient de diffusion dans le domaine 1.

Dans ce cas, le nombre de Péclet est :

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_{1c}} = \mathcal{O}(\varepsilon). \tag{2.110}$$

Compte tenu de ce choix, les équations adimensionnelles sont

$$\varepsilon^2 \, \frac{\partial(\theta_1^* \, C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \varepsilon \, \boldsymbol{v}_1^* \, C_1^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.111}$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* \, C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.112}$$

$$(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \varepsilon \, \boldsymbol{v}_1^* \, C_1^*) \cdot \boldsymbol{N} = \varepsilon^2 \, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^*) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.113}$$

$$C_1^* = C_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.114}$$

2.6.3.2 Homogénéisation

- A l'ordre ε^0

A l'ordre ε^0, il s'agit du même problème que le cas précédent

$$\nabla_y \, \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.115}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.116}$$

$$\frac{\partial(\theta_2^{(0)} \, C_2^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^{(0)}\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.117}$$

$$C_1^{(0)} = C_2^{(0)} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.118}$$

La solution du problème (2.115) et (2.116) est

$$C_1^{(0)} = C_1^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*) = C^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*). \tag{2.119}$$

- A l'ordre ε^1

Les équations (2.111) et (2.113) sont analysées à l'ordre ε^1 en prenant en compte la solution (2.119) :

$$\nabla_y \cdot \, \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_x \, C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \, C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.120}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.121}$$

Remarquons que nous avons

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{et} \quad (\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}) \cdot \boldsymbol{N} = 0. \tag{2.122}$$

comme conséquence des Eqs (2.50) et (2.51), ainsi que de (2.119).

En tenant en compte de (2.122) le système (2.120) et (2.121) devient le même que les équations (2.88) et (2.89) du cas précédent. C'est pourquoi la solution pour $C_1^{(1)}$ est

$$C_1^{(1)} = \boldsymbol{\chi}\,(\boldsymbol{y}) \nabla_x C_1^{(0)} + \overline{C}_1^{(1)}(\boldsymbol{x}, t^*), \tag{2.123}$$

soit de la même forme que celle donnée par l'équation (2.90).

- A l'ordre ε^2

L'écriture des équations adimensionnelles (2.111) et (2.113) à l'ordre ε^2 conduit à

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)} - \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right) + \\ + \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) \quad \text{dans} \quad \Omega_1,\end{aligned} \tag{2.124}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)} - \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.125}$$

L'intégration (2.124) sur Ω_1 et la division par $|\Omega|$ donne

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*}\, d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(2)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(1)}\right) d\Omega + \\ + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(1)} + \boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) d\Omega.\end{aligned} \tag{2.126}$$

Nous effectuons les transformations en utilisant le théorème de Gauss - Ostrogradski, la périodicité, la condition sur l'interface Γ, Eq. (2.125), la définition de $C_1^{(1)}$, Eq. (2.123) pour obtenir l'équation macroscopique sous la forme adimensionnelle

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_{dif}^{*eff} \cdot \nabla_x C_1^{(0)} - \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)}\right) - \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} C_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*}, \tag{2.127}$$

avec le tenseur de diffusion effective

$$\boldsymbol{D}_{dif}^{*eff} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) \; d\Omega. \tag{2.128}$$

L'équation macroscopique dimensionnelle s'écrit

$$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1 \, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_{dif}^{eff} \cdot \nabla_X C_1 - \langle \boldsymbol{v}_1 \rangle \; C_1 \right) - \frac{\partial \langle \theta_2 \, C_2 \rangle}{\partial t}, \tag{2.129}$$

$$\frac{\partial(\theta_2 \, C_2)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \left(\boldsymbol{D}_2 \cdot \nabla_X C_2 \right), \tag{2.130}$$

où le tenseur de diffusion effective est le même que dans le cas de DP-Diffusion. Il n'est pas modifié par la convection

$$\boldsymbol{D}_{dif}^{eff}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1(\theta_1) \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) \; d\Omega. \tag{2.131}$$

Le modèle macroscopique obtenu est un modèle de non équilibre local des concentrations. Il est composé de deux équations couplées micro-macro (2.129) - (2.130) avec un terme d'échange. Le terme convectif apparaît dans l'équation macroscopique (2.129), ce qui présente une différence par rapport au modèle DP-Diffusion. Par contre, le problème local est le même que dans le cas du modèle DP-Diffusion.

Ce modèle a été obtenu par homogénéisation périodique par Hornung (1991).

2.6.4 Modèle à double-porosité de dispersion-convection (DP-Dispersion-Convection)

2.6.4.1 Formulation du problème

Le temps caractéristique

$$t_c = \frac{L^2}{D_{1c}} \quad \text{et} \quad \mathcal{P}_{1l} = \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.132}$$

où D_{1c} est le coefficient de diffusion dans le domaine 1.

La vitesse d'écoulement d'eau est augmentée d'un ordre de grandeur par rapport au cas précédent

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c} \, l}{D_{1c}} = \mathcal{O}(1). \tag{2.133}$$

Ainsi, le système des équations adimensionnelles (2.42) - (2.45) devient dans ce cas

$$\varepsilon^2 \frac{\partial(\theta_1^* C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^* - \boldsymbol{v}_1^* C_1^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.134}$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.135}$$

et la condition de continuité à l'interface

$$(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^* - \boldsymbol{v}_1^* C_1^*) \cdot \boldsymbol{N} = \varepsilon^2 \ (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^*) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.136}$$

$$C_1^* = C_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.137}$$

2.6.4.2 Homogénéisation

- A l'ordre ε^0

A l'ordre ε^0 nous avons

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.138}$$

$$\left(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \nabla_y C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.139}$$

On peut démontrer que la solution du problème (2.138) - (2.139) est

$$C_1^{(0)} = C_1^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*) = C^{(0)}(\boldsymbol{x}, t^*). \tag{2.140}$$

- A l'ordre ε^1

L'analyse du problème à l'ordre ε^1 conduit à :

$$\nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}\right)\right] - \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right) - \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)}\right) - \\ - \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(0)}\right) = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.141}$$

$$\left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}\right) - \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.142}$$

L'intégration de (2.141) sur Ω_1, la division par Ω, l'utilisation du théorème de Gauss - Ostrograski et de la condition sur l'interface et de la périodicité donnent

$$\nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)} \right) = 0. \tag{2.143}$$

Le problème (2.141) - (2.142) définit $C_1^{(1)}$ et on peut démontrer que la solution s'écrit (Auriault et Lewandowska 1996)

$$C_1^{(1)} = \boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{y}) \, \nabla_x \, C_1^{(0)} + \overline{C}_1^{(1)}(\boldsymbol{x}, t^*). \tag{2.144}$$

Pour trouver le problème local permettant de calculer le vecteur $\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{y})$, nous introduisons (2.144) dans (2.141) et (2.142) et nous l'analysons terme par terme. Pour le premier terme, nous obtenons

$$\nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y \, C_1^{(1)} + \nabla_x \, C_1^{(0)} \right) \right] = \nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y \, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I} \right) \right] \, \nabla_x \, C_1^{(0)}. \tag{2.145}$$

Le deuxième terme peut être transformé comme suit :

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} \, C_1^{(1)} \right) = C_1^{(1)} \, \nabla_y \cdot \, \boldsymbol{v}_1^{(0)} + \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(1)}. \tag{2.146}$$

Avec Eq. (2.88) (problème de l'écoulement), nous avons

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} \, C_1^{(1)} \right) = \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \, \nabla_y \, C_1^{(1)}. \tag{2.147}$$

Du fait que $C_1^{(0)}$ ne dépend pas de $\boldsymbol{y}$, le troisième terme devient .

$$\nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(1)} \, C_1^{(0)} \right) = C_1^{(0)} \, \nabla_y \cdot \, \boldsymbol{v}_1^{(1)}. \tag{2.148}$$

Nous développons le quatrième terme

$$\nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} \, C_1^{(0)} \right) = C_1^{(0)} \, \nabla_x \cdot \, \boldsymbol{v}_1^{(0)} + \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \, \nabla_x \, C_1^{(0)}. \tag{2.149}$$

Nous utilisons les résultats obtenus pour les quatre termes pour écrire l'équation (2.141) sous la forme suivante :

$$\nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) \nabla_x C_1^{(0)}\right] - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \nabla_y \left(\boldsymbol{\chi} \nabla_x C_1^{(0)}\right) - C_1^{(0)} \nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} - \\ - C_1^{(0)} \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \nabla_x C_1^{(0)} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega_1. \quad (2.150)$$

Analysons maintenant la somme des troisième et quatrième termes de (2.150)

$$C_1^{(0)} \nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + C_1^{(0)} \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)} = C_1^{(0)} \left(\nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)}\right). \quad (2.151)$$

Rappelons que le problème d'écoulement donne à l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ (voir Eq. 2.56)

$$\frac{\partial \theta_1^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)}. \quad (2.152)$$

On peut donc écrire

$$C_1^{(0)} \left(\nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)}\right) = C_1^{(0)} \frac{\partial \theta_1^{(0)}}{\partial t^*}. \quad (2.153)$$

D'autre part, le problème de l'écoulement donne (voir Eq. 2.64)

$$\phi_1 \frac{\partial \theta_1^{(0)}}{\partial t^*} = \nabla_x \cdot \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle - Q(h^{(0)}, t^*), \quad (2.154)$$

avec $Q(h^{(0)}, t^*) = \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*}$ qui est le terme d'échange de masse d'eau. Nous obtenons alors pour (2.153)

$$C_1^{(0)} \left(\nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)}\right) = C_1^{(0)} \left[\frac{1}{\phi_1} \nabla_x \cdot \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle - \frac{1}{\phi_1} Q(h^{(0)}, t^*)\right]. \quad (2.155)$$

On revient maintenant au développement à l'équation (2.143) comme suit :

$$\nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)}\right) = C_1^{(0)} \cdot \nabla_x \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle \cdot \nabla_x C_1^{(0)} = 0 \quad (2.156)$$

ou

$$C_1^{(0)} \nabla_x \cdot \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle = - \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle \cdot \nabla_x C_1^{(0)}. \quad (2.157)$$

Ensuite, on introduit (2.157) dans (2.155) pour obtenir

$$C_1^{(0)} \left(\nabla_y \cdot \boldsymbol{v}_1^{(1)} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{v}_1^{(0)}\right) = -\frac{1}{\phi_1} \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle \cdot \nabla_x C_1^{(0)} - \frac{1}{\phi_1} C_1^{(0)} Q(h^{(0)}, t^*). \tag{2.158}$$

Finalement, l'équation (2.150) devient

$$\nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) \nabla_x C_1^{(0)}\right] - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \nabla_y \left(\boldsymbol{\chi} \nabla_x C_1^{(0)}\right) + \\ + \frac{1}{\phi_1} \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle \cdot \nabla_x C_1^{(0)} + C_1^{(0)} \frac{1}{\phi_1} Q(h^{(0)}, t^*) - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \nabla_x C_1^{(0)} = 0. \tag{2.159}$$

Ici, nous rappelons que terme d'échange de masse d'eau $Q(h^{(0)}, t^*)$ est nul puisque nous avons supposé l'écoulement permanent de l'eau.

En posant le gradient macroscopique unitaire $\nabla_x C_1^{(0)} = 1$ dans les directions 1, 2 et 3 successivement, nous obtenons le problème local pour $\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{y})$

$$\nabla_y \cdot [\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \cdot \nabla_y \boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{v}_1^{(0)} - \frac{\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle}{\phi_1} \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.160}$$

$$[\boldsymbol{D}_1^* \cdot (\nabla_y \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.161}$$

$$\langle \boldsymbol{\chi} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\chi} \, d\Omega = 0 \tag{2.162}$$

où $\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{y})$ - périodique.

Ce problème possède la même forme que le problème (31) - (32) obtenu par Auriault et Lewandowska (1996) pour le transport par dispersion dans les conditions saturées.

- A l'ordre ε^2

Nous passons au développement de l'équation macroscopique par analyse du problème d'homogénéisation à l'ordre ε^2

$$\frac{\partial(\theta_1^{(0)} C_1^{(0)})}{\partial t^*} - \nabla_y \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(2)} + \nabla_x C_1^{(1)}\right)\right] - \nabla_x \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}\right)\right] + \\ + \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(2)}\right) + \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right) + \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)}\right) + \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(1)}\right) + \nabla_y \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(2)} C_1^{(0)}\right) = 0 \\ \text{dans} \quad \Omega_1. \tag{2.163}$$

avec la condition

$$\left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(2)} + \nabla_x C_1^{(1)}\right) - \boldsymbol{v}_1^{(2)} C_1^{(0)} - \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(1)} - \boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(2)}\right] \cdot \boldsymbol{N} = \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \nabla_y C_2^{(0)}\right) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.164}$$

L'intégration de (2.163) sur Ω_1, la division par Ω, l'utilisation de l'équation sur l'interface Γ (2.164), ainsi que la périodicité conduisent à l'équation suivante :

$$\frac{\partial \left\langle \theta_1^{(0)} C_1^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left[\boldsymbol{D}_1^* \cdot \left(\nabla_y C_1^{(1)} + \nabla_x C_1^{(0)}\right)\right] d\Omega + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(0)} C_1^{(1)}\right) d\Omega + \\ + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)}\right) + \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} C_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} = 0. \tag{2.165}$$

Notons que le dernier terme de (2.165) vient de l'échange de masse du soluté entre les domaines 1 et 2. Le remplacement de (2.144) dans (2.165) donne

$$\frac{\partial \left\langle \theta_1^{(0)} C_1^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} - \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_{disp}^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) + \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \overline{C}_1^{(1)} \right\rangle\right) + \\ + \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} \right\rangle\right) + \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} C_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} = 0. \tag{2.166}$$

où $\boldsymbol{D}_{disp}^*(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \left[\boldsymbol{D}_1^*(\theta) \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}_1^{(0)} \boldsymbol{\chi}\right] d\Omega.$

Pour obtenir l'équation macroscopique nous procédons comme dans Auriault et Lewandowska (1996). L'équation (2.166) multipliée par ε sera additionnée à (2.143).

$$\varepsilon \frac{\partial \left\langle \theta_1^{(0)} C_1^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} - \varepsilon \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_{disp}^* \cdot \nabla_x C_1^{(0)}\right) + \varepsilon \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \overline{C}_1^{(1)} \right\rangle\right) + \\ + \varepsilon \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} \right\rangle\right) + \varepsilon \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} C_2^{(0)} \right\rangle}{\partial t^*} + \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)}\right) = 0. \tag{2.167}$$

En regroupant tous les termes convectifs dans l'équation macroscopique (2.167), on obtient

$$\nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)}\right) + \varepsilon \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(1)} C_1^{(0)} \right\rangle\right) + \varepsilon \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \overline{C}_1^{(1)} \right\rangle\right). \tag{2.168}$$

avec les relations suivantes

$$\langle \boldsymbol{v}_1^* \rangle = \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle + \varepsilon \left\langle \boldsymbol{v}_1^{(1)} \right\rangle + ... \tag{2.169}$$

$$\langle C_1^* \rangle = \left\langle C_1^{(0)} \right\rangle + \varepsilon \left\langle C_1^{(1)} \right\rangle + ... = \phi_1 \, C_1^{(0)} + \phi_1 \, \varepsilon \, \overline{C}_1^{(1)} + ... \tag{2.170}$$

Nous obtenons

$$\nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle C_1^{(0)} \right) + \varepsilon \, \nabla_x \cdot \left(\left\langle \boldsymbol{v}_1^{(1)} \, C_1^{(0)} \right\rangle \right) + \varepsilon \, \nabla_x \cdot \left(\left\langle \overline{C}_1^{(1)} \boldsymbol{v}_1^{(0)} \right\rangle \right) = \frac{1}{\phi_1} \, \nabla_x \cdot \left(\langle \boldsymbol{v}_1^* \rangle \, \langle C_1^* \rangle \right). \tag{2.171}$$

Finalement, nous écrivons l'équation macroscopique sous forme de

$$\varepsilon \, \frac{\partial \left(\theta_1^{(0)} \, \langle C_1^* \rangle \right)}{\partial t^*} = \varepsilon \, \nabla_x \cdot \left(\boldsymbol{D}_{disp}^* \cdot \, \nabla_x \, C_1^* \right) - \frac{1}{\phi_1} \, \nabla_x \cdot \left(\langle \boldsymbol{v}_1^* \rangle \, \langle C_1^* \rangle \right) - \varepsilon \, \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} \, C_2^* \right\rangle}{\partial t^*} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.172}$$

Avec $\langle C_1^* \rangle \approx \phi_1 \, C_1^*$, (2.172) devient

$$\varepsilon \, \phi_1 \, \frac{\partial \left(\theta_1^{(0)} \, C_1^* \right)}{\partial t^*} = \varepsilon \, \nabla_x \cdot \, \left(\boldsymbol{D}_{disp}^* \cdot \, \nabla_x \, C_1^* \right) - \nabla_x \cdot \, \left(\langle \boldsymbol{v}_1^* \rangle \, C_1^* \right) - \varepsilon \, \frac{\partial \left\langle \theta_2^{(0)} \, C_2^* \right\rangle}{\partial t^*} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{2.173}$$

L'équation (2.173) est couplée avec l'équation microscopique de diffusion dans Ω_2

$$\frac{\partial (\theta_2^{(0)} \, C_2^{(0)})}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, \left(\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^{(0)} \right), \tag{2.174}$$

au travers la condition d'interface

$$C_1^{(0)} = C_2^{(0)} \tag{2.175}$$

Nous remarquons la présence de ε dans le terme transitoire à gauche de (2.173).

Finalement, le modèle macroscopique dimensionnel s'écrit

$$\phi_1 \, \frac{\partial \, (\theta_1 \, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \, (\boldsymbol{D}_{disp} \cdot \, \nabla_X \, C_1) - \nabla_X \cdot \, (\langle \boldsymbol{v}_1 \rangle \, C_1) - \, \frac{\partial \, \langle \theta_2 \, C_2 \rangle}{\partial t}, \tag{2.176}$$

$$\frac{\partial (\theta_2 C_2)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \, (\boldsymbol{D}_2 \cdot \, \nabla_X \, C_2) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.177}$$

avec

$$C_1 = C_2. \tag{2.178}$$

où le tenseur de dispersion est défini comme :

$$\boldsymbol{D}_{disp}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \left[\boldsymbol{D}_1(\theta) \cdot \, (\nabla \, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}_1 \, \boldsymbol{\chi} \right] \, d\Omega. \tag{2.179}$$

Le modèle (2.176) - (2.177) est un modèle à deux équations couplées. Il décrit le transport par dispersion-convection dans la macro-porosité, couplé avec le transport par diffusion dans la micro-porosité. Cette situation induit un non équilibre local des concentrations. Le paramètre effectif est un tenseur anisotrope de dispersion $\boldsymbol{D}_{disp}$.

2.6.5 Modèle à simple-porosité de dispersion-convection (SP-Dispersion-Convection)

2.6.5.1 Formulation du problème

Dans ce cas, on augmente la vitesse d'écoulement d'un ordre de grandeur par rapport au cas précédent. Cela veut dire qu'à l'échelle locale, nous passons du régime diffusion-convection au régime de dispersion-convection, selon la courbe de Pfannkuch (1962). Nous avons donc le phénomène de dispersion locale (Cherblanc *et al.* 2003). Nous allons supposer que le rapport $\frac{v_{1c}\,l}{D_{1c}}$ reste constant, i. e. le coefficient D_{1c} devient le coefficient de dispersion et augmente également d'un ordre de grandeur par rapport au coefficient de diffusion (FIG. 2.3). Cette hypothèse est justifiée par le fait que D_{1c} peut être présenté comme le produit de la dispersivité du milieu par la vitesse (Bear 1972). Le nombre de Péclet local est donc

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\,l}{D_{1c}} = \mathcal{O}(1). \tag{2.180}$$

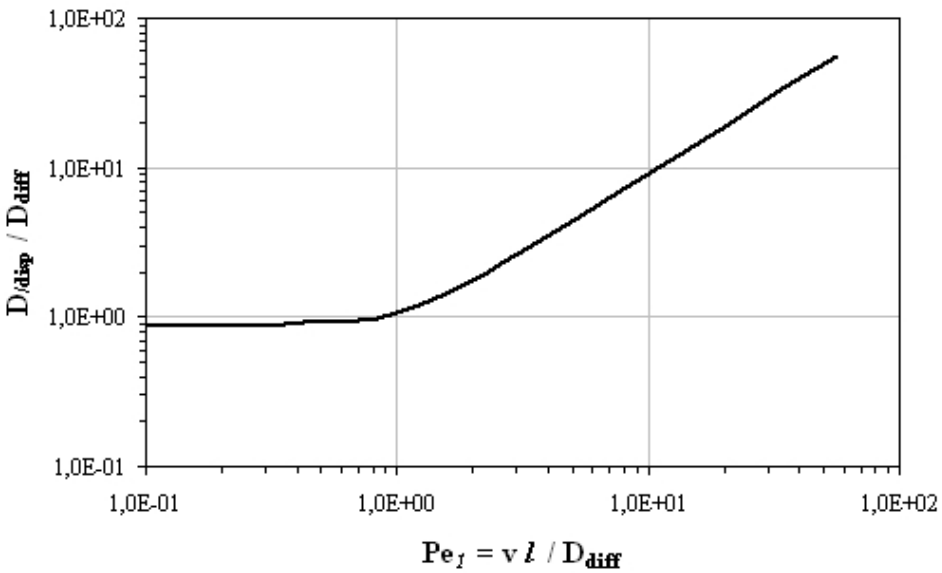


FIG. 2.3: Rapport D_{disp}/D_{diff} en fonction du nombre de Péclet $\mathcal{P}e_l$.

Le temps d'observation du phénomène (temps caractéristique) est plus court par rapport au cas précédent et est estimé par le temps de convection. Nous pouvons donc écrire

$$\mathcal{P}_{1l} = \frac{l^2}{D_{1c}\, t_c} \quad \text{avec} \quad t_c = \frac{L}{v_{1c}}, \tag{2.181}$$

Ce qui conduit à l'estimation suivante :

$$\mathcal{P}_{1l} = \mathcal{O}(\varepsilon). \tag{2.182}$$

Ce temps est beaucoup trop court pour observer le phénomène de diffusion dans le milieu 2. Il sera donc considéré comme inactif pour le transport. Le problème est formulé comme suit :

$$\varepsilon\, \frac{\partial(\theta_1\, C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot\, (\boldsymbol{D}_1^* \cdot\, \nabla_y\, C_1^* - \boldsymbol{v}_1^*\, C_1^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.183}$$

$$(\boldsymbol{D}_1^* \cdot\, \nabla_y\, C_1^* - \boldsymbol{v}_1^*\, C_1^*) \cdot \boldsymbol{N} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.184}$$

2.6.5.2 Modèle macroscopique

La situation exprimée par les équations (2.183) - (2.184) correspond au problème du milieu à simple-porosité et saturé, analysé par Auriault et Adler (1995) et Auriault et Lewandowska (1996). Le résultat de l'homogénéisation obtenu dans ces référence peut être étendu au cas non saturé pour obtenir l'équation macroscopique suivant :

$$\phi_1\, \frac{\partial\, (\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot\, (\boldsymbol{D}_{disp} \cdot\, \nabla_X\, C_1 - \langle \boldsymbol{v}_1 \rangle\, C_1)\,. \tag{2.185}$$

Dans ce cas, le transport de soluté dans le milieu à double-porosité est traité comme celui à simple-porosité par une seule équation macroscopique. Le tenseur de dispersion $\boldsymbol{D}_{disp}$ est calculé comme dans le cas précédent à partir de l'Eq. (2.179). $\boldsymbol{\chi}$ est défini par (2.160 - 2.162). Remarquons que $\boldsymbol{D}_1$ dans (2.160 - 2.161) et (2.178) est le tenseur de dispersion locale, $\boldsymbol{D}_1(\boldsymbol{v}_1, \theta)$

2.6.6 Catalogue des modèles macroscopiques pour le cas $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$

Les quatre différents modèles macroscopiques considérés sont résumés dans le tableau (6.1). Ils concernent l'écoulement permanent non saturé qui n'a lieu que dans la macro-porosité en

raison du contraste des caractéristiques physiques. Le premier modèle macroscopique concernant la diffusion est adopté dans le cas où $\mathcal{P}e$ local est de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Si la vitesse d'écoulement augmente de manière à ce que $\mathcal{P}e$ devienne de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon)$, le modèle macroscopique sera un modèle de diffusion-convection. Le paramètre effectif est le même pour ces deux modèles : le tenseur de diffusion effective. Si la vitesse d'écoulement continue à croître d'un ordre de grandeur, i. e. $\mathcal{P}e_l = \mathcal{O}(1)$, le modèle macroscopique de dispersion-convection sera obtenu. Le paramètre effectif distinct celui de deux cas précédents est le tenseur de dispersion dans lequel apparaît le terme convectif. Ces trois modèles présentent un non équilibre local entre la concentration dans la micro- et macro-porosité.

Tandis que le seul temps caractéristique de diffusion est considéré dans les trois cas ci-dessus, le temps caractéristique de convection est pris en compte pour le dernier modèle macroscopique, du fait du passage au régime dispersif à l'échelle locale. Dans ce cas là, on obtient un modèle macroscopique qui consiste en une seule équation de Dispersion-Convection avec le même paramètre effectif que dans le modèle DP-Dispersion-Convection. Ce modèle traite des inclusions comme des obstacles inertes.

Ainsi, il existe un passage à la limite entre le modèle le plus « riche » (DP-Dispersion-Convection) et les autres modèles.

2.6.7 Modèle DP-Dispersion-Convection : extension au cas $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$

Nous présentons ici une extension du modèle à simple-porosité de dispersion-convection traité dans le chapitre 2.6.5 au cas du contraste des coefficients de diffusion de l'ordre de ε : $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Cette situation conduit à l'interaction entre la macro- et micro-porosité et l'échange de masse (effet de double-porosité).

Comme dans le cas du modèle SP-Dispersion-Convection, le nombre de Péclet local est

$$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_{1c}} = \mathcal{O}(1) \quad \text{ou} \quad \mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_1} = \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}). \tag{2.186}$$

où D_{1c} est le coefficient de dispersion locale ; D_1 est le coefficient de diffusion du domaine 1.

Avec le temps caractéristique de la convection (2.181 et donc 2.182), les équations adimensionnelles (2.42) - (2.45) deviennent

$$\varepsilon \, \frac{\partial(\theta_1^* \, C_1^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \boldsymbol{v}_1^* \, C_1^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_1, \tag{2.187}$$

$$\frac{\partial(\theta_2^* \, C_2^*)}{\partial t^*} = \nabla_y \cdot \, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^*) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.188}$$

et la condition de continuité à l'interface

$$(\boldsymbol{D}_1^* \cdot \, \nabla_y \, C_1^* - \boldsymbol{v}_1^* C_1^*) \cdot \boldsymbol{N} = \varepsilon \, (\boldsymbol{D}_2^* \cdot \, \nabla_y \, C_2^*) \cdot \boldsymbol{N} \quad \text{sur} \quad \Gamma, \tag{2.189}$$

$$C_1^* = C_2^* \quad \text{sur} \quad \Gamma. \tag{2.190}$$

Le résultat d'homogénéisation nous donne un modèle macroscopique qui possède la même structure formelle que le modèle DP-Dispersion-Convection (2.176) - (2.179)

$$\phi_1 \, \frac{\partial \, (\theta_1 \, C_1)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \, (\boldsymbol{D}_{disp} \cdot \, \nabla_X \, C_1) - \nabla_X \cdot \, (\langle \boldsymbol{v}_1 \rangle \, C_1) - \, \frac{\partial \, \langle \theta_2 \, C_2 \rangle}{\partial t}, \tag{2.191}$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = \nabla_X \cdot \, (\boldsymbol{D}_2 \cdot \, \nabla_X \, C_2) \quad \text{dans} \quad \Omega_2, \tag{2.192}$$

avec

$$C_1 = C_2. \tag{2.193}$$

où le tenseur de dispersion est défini comme :

$$\boldsymbol{D}_{disp}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} [\boldsymbol{D}_1(\boldsymbol{v}, \, \theta) \cdot \, (\nabla \, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}_1 \, \boldsymbol{\chi}] \; d\Omega. \tag{2.194}$$

Ainsi, on obtient le modèle à double-porosité de dispersion-convection avec le couplage de la concentration dans la macro- et micro-porosité. La différence de ce modèle par rapport au modèle DP-Dispersion-Convection (2.176) - (2.179) réside dans le tenseur de dispersion locale, qu'il faut prendre en compte dans le calcul du tenseur de dispersion à l'échelle macroscopique (2.194). Ce fait présente une difficulté numérique à cause de l'anisotropie induite par le champs de vitesses locales.

2.7 Discussion et conclusion

Les modèles macroscopiques de l'écoulement et du transport de soluté dans le milieu à double-porosité non saturé ont été développés en appliquant la méthode d'homogénéisation asymptotique. Les quatre modèles macroscopiques ont été obtenus avec le contraste de diffusion de deux domaines de l'ordre ε^2, selon l'estimation des nombres adimensionnels qui reflètent le régime du processus de transport à l'échelle locale. Les trois premiers modèles macroscopiques (DP-Diffusion, DP-Dispersion-Convection et DP-Dispersion-Convection) sont constitués de deux équations couplées qui décrivent le processus de transport dans les micro et macro-porosité. L'influence du domaine faiblement conducteur (domaine 2) est prise en compte par le terme source dans l'équation macroscopique. Dans le cas où la vitesse devient localement importante (dispersion locale), le transport de soluté dans le milieu à double-porosité peut être modélisé par une seule équation (modèle SP-Dispersion-Convection). Ce modèle devient un modèle DP-Dispersion-Convection avec la dispersion locale si le contraste de coefficients de diffusion diminue $D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$. Il existe les cas non-homogénéisable dans lesquels nous ne pouvons pas définir un modèle macroscopique équivalent (Auriault et Adler 1995 et Auriault et Lewandowska 1996)

La présence du non équilibre local dans les trois modèles à double-porosité provoquera l'effet de traînée dans la courbe de percée. Ce qui veut dire que l'on observe deux processus de l'évolution de la concentration correspondant aux temps court et long : le soluté traverse rapidement la macro-porosité, mais il est retardé dans la micro-porosité. Ce phénomène est appelé dans la littérature transport préférentiel.

La méthode d'homogénéisation nous a permis de comprendre les mécanismes locaux conduisant aux phénomènes couplés observés macroscopiquement, comme la dispersion.

Cas	$\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_{1c}\, l}{D_{1c}}$	$\mathcal{P}_{1l} = \frac{l^2}{D_{1c}\, t_c}$	**Modèle macroscopique**	**Tenseur de diffusion/dispersion et problème local**
DP-Diffusion	$\mathcal{O}(\varepsilon^2)$	$\mathcal{O}(\varepsilon^2)$	$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla \cdot \boldsymbol{D}_{dif}^{eff} \cdot \nabla C_1 - \frac{\partial \langle \theta_2\, C_2 \rangle}{\partial t}$ $\frac{\partial(\theta_2 \cdot C_2)}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_2 \cdot \nabla C_2)$	$\boldsymbol{D}_{dif}^{eff} = \frac{1}{\lvert\Omega\rvert} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})\ d\Omega$ $\nabla \cdot [\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] = 0$ $[\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0$
DP-Diffusion-Convection	$\mathcal{O}(\varepsilon)$	$\mathcal{O}(\varepsilon^2)$	$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\boldsymbol{D}_{dif}^{eff} \cdot \nabla C_1 - \langle \boldsymbol{v_1} \rangle\, C_1 \right) - \frac{\partial \langle \theta_2\, C_2 \rangle}{\partial t}$ $\frac{\partial(\theta_2\, C_2)}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_2 \cdot \nabla C_2)$	$\boldsymbol{D}_{dif}^{eff} = \frac{1}{\lvert\Omega\rvert} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla\, \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})\ d\Omega$ $\nabla \cdot [\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] = 0$ $[\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0$
DP-Dispersion-Convection	$\mathcal{O}(1)$	$\mathcal{O}(\varepsilon^2)$	$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_{disp} \cdot \nabla C_1 - \langle \boldsymbol{v_1} \rangle\, C_1) - \frac{\partial \langle \theta_2\, C_2 \rangle}{\partial t}$ $\frac{\partial(\theta_2\, C_2)}{\partial t} = \nabla\, (\boldsymbol{D}_2 \cdot \nabla C_2)$	$\boldsymbol{D}_{disp} = \frac{1}{\lvert\Omega\rvert} \int_{\Omega_1} [\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{\chi}]\ d\Omega$ $\nabla \cdot [D_1\, (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] - \boldsymbol{v}_1 \cdot \nabla \boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{v}_1 - \frac{\langle \boldsymbol{v}_1 \rangle}{\phi_1}$ $[\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0$
SP Dispersion-Convection	$\mathcal{O}(1)$	$\mathcal{O}(\varepsilon)$	$\phi_1 \frac{\partial(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_{disp} \cdot \nabla C_1 - \langle \boldsymbol{v_1} \rangle\, C_1)$	$\boldsymbol{D}_{disp} = \frac{1}{\lvert\Omega\rvert} \int_{\Omega_1} [\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{\chi}]\ d\Omega$ $\nabla \cdot [\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] - \boldsymbol{v}_1 \cdot \nabla \boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{v}_1 - \frac{\langle \boldsymbol{v}_1 \rangle}{\phi_1}$ $[\boldsymbol{D}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0$

TAB. 2.1: Catalogue des modèles macroscopiques pour le cas $D_2/D_1 = \varepsilon^2$

Chapitre 3

Implémentation numérique des modèles macroscopiques du transport dans un milieu à double-porosité non saturé

3.1 Introduction

Les modèles macroscopiques à double-porosité du transport de soluté obtenus par la méthode d'homogénéisation sont numériquement implémentés dans ce chapitre. La difficulté de l'implémentation réside dans le couplage des concentrations dans la micro et la macro-porosité. Une stratégie particulière qui permet de résoudre ce couplage est proposée, en utilisant le code commercial COMSOL Multiphysics (ComsolGroup 2006). Ce code utilise la méthode des éléments finis. La démarche numérique est présentée dans la section 3.2.

Dans les sections 3.3 et 3.4 nous présentons la vérification numérique de l'implémentation proposée pour le modèle DP-Diffusion et DP-Diffusion-Convection. La vérification consiste en la solution d'un problème particulier, en utilisant le modèle macroscopique et en comparant avec la solution à l'échelle fine (EF) du même problème. Cette dernière solution est considérée comme une solution de référence.

3.2 Stratégie de l'implémentation numérique

L'implémentation numérique est composée de deux étapes : *i)* calcul des paramètres effectifs à partir des problèmes locaux aux limites ; *ii)* résolution du problème macroscopique aux limites.

Le calcul du tenseur effectif de diffusion/dispersion concerne la solution d'un problème local correspondant au modèle choisi et en appliquant la définition de ce tenseur selon le modèle. Ce calcul est présenté en détail dans le chapitre 4. Dans le chapitre 3, nous nous focalisons sur la résolution du problème macroscopique.

L'implémentation des modèles macroscopiques concerne le cas du transport macroscopique 1D, couplé avec le transport local dans les conditions 2D ou 3D (voir TAB. 2.1 du chapitre 2). La géométrie de la période est simple : cercle ou sphère noyée dans une matrice carrée ou cubique (FIG. 3.1).

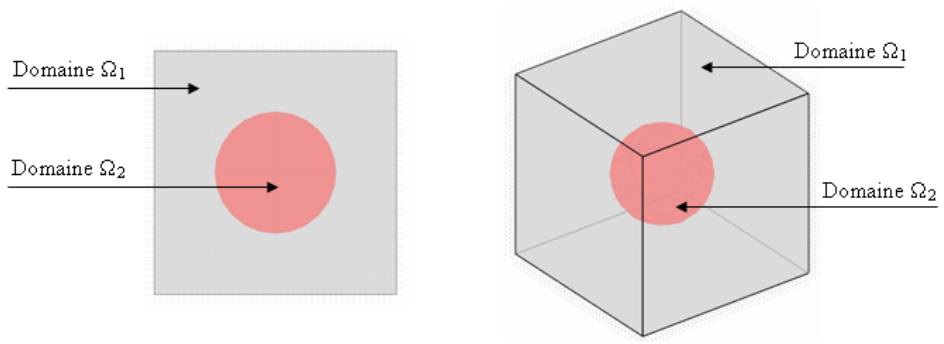


FIG. 3.1: Géométrie périodique 2D et 3D.

Du fait de la géométrie choisie, nous transformons le problème local 2D ou 3D (transport dans la micro-porosité) en un problème 1D en coordonnées cylindriques ou sphériques. Nous allons donc résoudre une équation macroscopique 1D couplée avec une série des problèmes 1D locaux. Le schéma général de l'implémentation numérique sous COMSOL Multiphysics est présenté FIG. 3.2.

Nous effectuons donc les calculs à deux échelles couplées. Les variables du couplage sont :

- La concentration $C(x)$ dans le domaine 1 est égale à la concentration $C(r = 0)$ dans le domaine 2 ($0 \leq r \leq R$) (R est le rayon du cercle ou de la sphère).
- Le flux diffusif $f(r = 0)$ calculé sur l'interface Γ dans le domaine 2 est inséré comme terme source dans l'équation du transport du domaine 1.

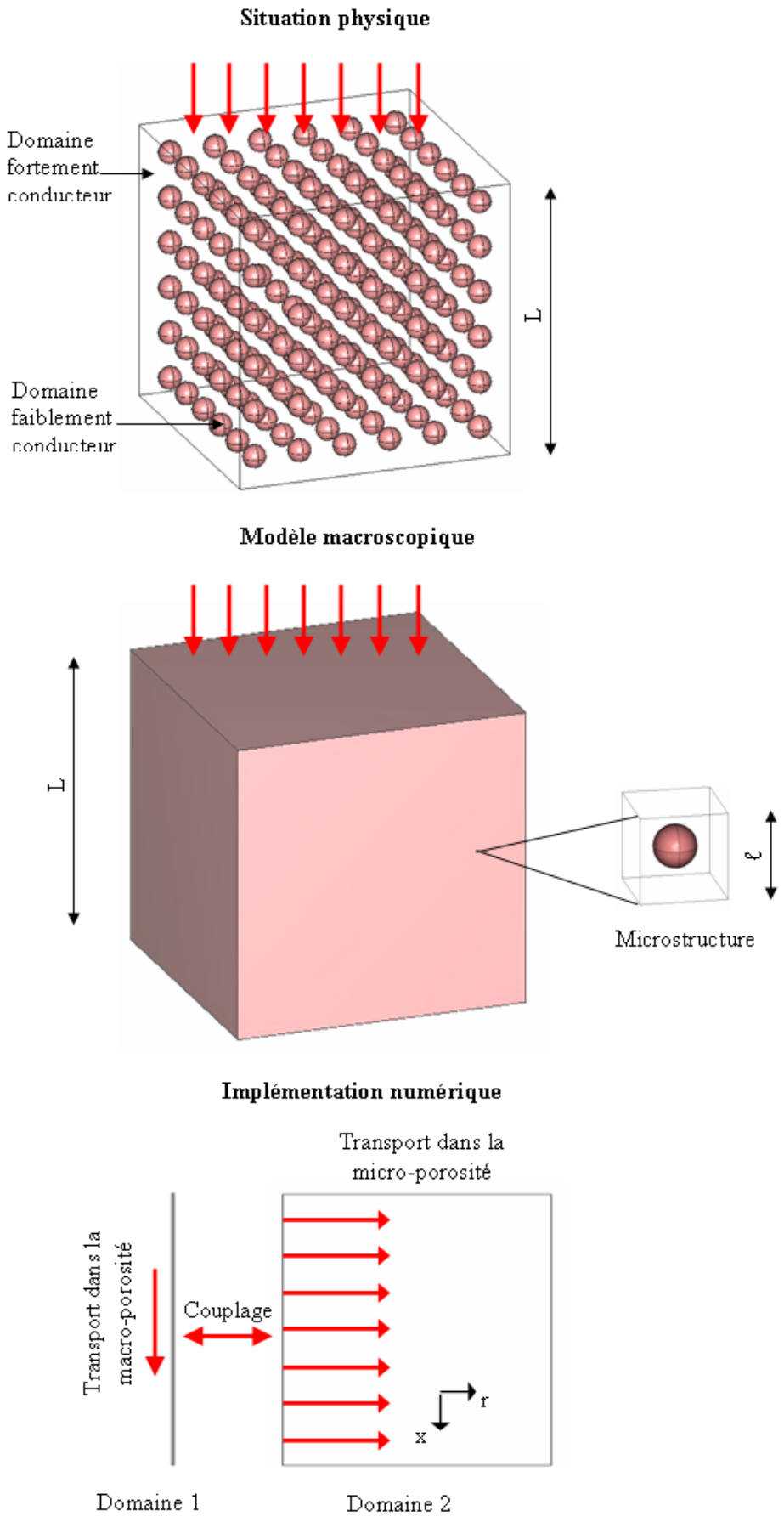


FIG. 3.2: Schéma de l'implémentation numérique.

Afin d'effectuer la vérification numérique des modèles macroscopiques, nous allons comparer les résultats obtenus avec la solution numérique à l'échelle fine du problème donné, celle-ci étant considérée comme une référence. Cette dernière est obtenue en traitant explicitement la structure hétérogène du milieu à DP et en résolvant les équations locales dans tout le domaine. Les deux exemples numériques présentés correspondent aux modèles : DP-Diffusion et DP-Diffusion-Convection (chaptre 2, paragraphe 2.6.2 et 2.6.3).

3.3 Modèle DP-Diffusion

3.3.1 Géométries et propriétés physiques locales

Le milieu à double-porosité est formé de cercles (2D) ou des sphères (3D) de rayon R, arrangées périodiquement dans la matrice de forte conductivité hydraulique. La longueur macroscopique est $L = 0,02$ m. Le milieu contient 10 périodes avec $l = 0,002$ m (FIG. 3.3). Les propriétés physiques dans les deux domaines sont résumées dans le tableau 3.1.

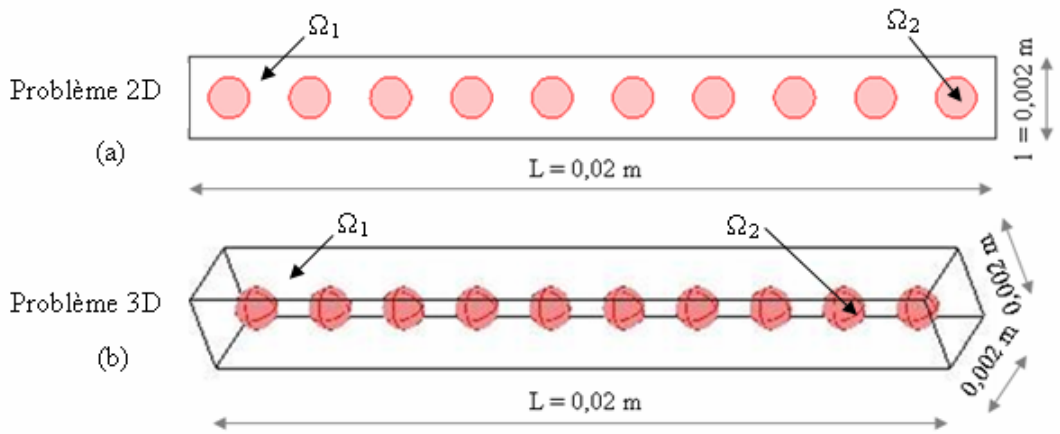


FIG. 3.3: Géométrie des problèmes 2D et 3D étudiés.

3.3.2 Équations différentielles à résoudre

Nous présentons ici le modèle à double-porosité décrivant la diffusion dans les deux cas présentés dans la figure 3.3. Le problème est décrit comme suit :

– Problème 2D :

$$\phi_1 \frac{\partial (\theta_1 C_1)}{\partial t} = D_{dif}^{eff}(\theta_1) \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - \frac{1}{|\Omega|} \int_\Gamma D_2(\theta_2) \frac{\partial C_2}{\partial r} \, d\Gamma, \tag{3.1}$$

Paramètre	**L [m]**	**l [m]**	R [m]	ϕ_1 **[-]**	ϕ_2 **[-]**	θ_1 **[-]**	θ_2 **[-]**
Problème 2D	0,02	0,002	0,5e-3	0,804	0,196	0,5	0,3
Problème 3D	0,02	0,002	0,5e-3	0,935	0,065	0,5	0,3

Paramètre	$\mathbf{D}_1(\theta_1)$ **[m²/s]**	$\mathbf{D}_2(\theta_2)$ **[m²/s]**	$\mathbf{D}_{dif}^{eff}$ **[m²/s]**
Problème 2D	1e-9	1e-13	0,637e-9
Problème 3D	1e-9	1e-13	0,905e-9

TAB. 3.1: Données géométriques et physiques pour le modèle DP-Diffusion.

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = D_2(\theta_2)\left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C_2}{\partial r}\right), \tag{3.2}$$

– Problème 3D :

$$\phi_1 \frac{\partial\left(\theta_1 C_1\right)}{\partial t} = D_{dif}^{eff}\left(\theta_1\right)\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Gamma} D_2(\theta_2)\,\frac{\partial C_2}{\partial r}\,d\Gamma, \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = D_2(\theta_2)\left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_2}{\partial r}\right), \tag{3.4}$$

avec la condition à l'interface

$$C_1 = C_2. \tag{3.5}$$

3.3.3 Conditions initiales et aux limites

Dans cet exemple, les conditions initiales et aux limites représentent la diffusion d'un soluté avec les conditions suivantes :

– Condition initiale :

$$t \leq 0,\ C_1 = C_2 = 0. \tag{3.6}$$

– Condition aux limites pour Eq. (3.1) :

$$t > 0,\ x = 0,\ C_1 = 1, \tag{3.7}$$

$$t > 0,\ x = L,\ C_1 = 0. \tag{3.8}$$

– Condition aux limites pour Eqs. (3.2 et 3.4) :

$$C_1(x) = C_2(r = 0). \tag{3.9}$$

$$D_2\,\frac{\partial C_2}{\partial r} = 0 \quad \text{pour r=R.} \tag{3.10}$$

3.3.4 Résultats pour le problème 2D

Les profils de la concentration obtenus par la résolution numérique de l'équation de diffusion à l'échelle fine (EF) (coupe au centre du milieu) et par le modèle DP-Diffusion sont présentés dans la figure 3.4. Les courbes des profils du modèle DP-Diffusion montrent la concentration macroscopique, tandis que celles obtenues par le modèle à l'échelle fine représentent les fluctuations de la concentration entre les domaines 1 et 2. Ces courbes sont en très bon accord entre elles, aux temps courts jusqu'à l'équilibre. La figure 3.5 présente les flux calculés à la sortie du domaine macroscopique. Un très bon accord est observé.

Le modèle DP-Diffusion permet d'accéder au terme source. La figure 3.6 présente le terme source S intégré sur le domaine 1 en fonction du temps. Sa valeur maximale est atteinte au temps de l'ordre de 1e4 s. L'échange de concentration en fonction de x est présenté pour quatre temps intermédiaires (FIG. 3.7).

3.3.5 Résultats pour le problème 3D

Afin de comparer les profils de la concentration obtenus par le modèle à l'échelle fine et par le modèle DP-Diffusion, nous produisons les profils de la concentration au centre du domaine pour le modèle à l'échelle fine et nous les comparons avec la concentration macroscopique (FIG. 3.8). Le comportement est similaire à celui du cas 2D. Néanmoins l'état d'équilibre est atteint plus vite du fait que la fraction volumique de la matrice est plus élevée par rapport au cas 2D. Les figures 3.8 et 3.9 montrent un excellent accord des comportements entre les deux modèles.

Le terme source S intégré sur le domaine 1 en fonction du temps est présenté dans la figure 3.10. On observe que sa valeur maximale est aussi marquée pour un temps de l'ordre de 1e4 s. Cependant, elle est légèrement plus faible par rapport au cas 2D du fait de la fraction volumique du domaine 1 plus grande.

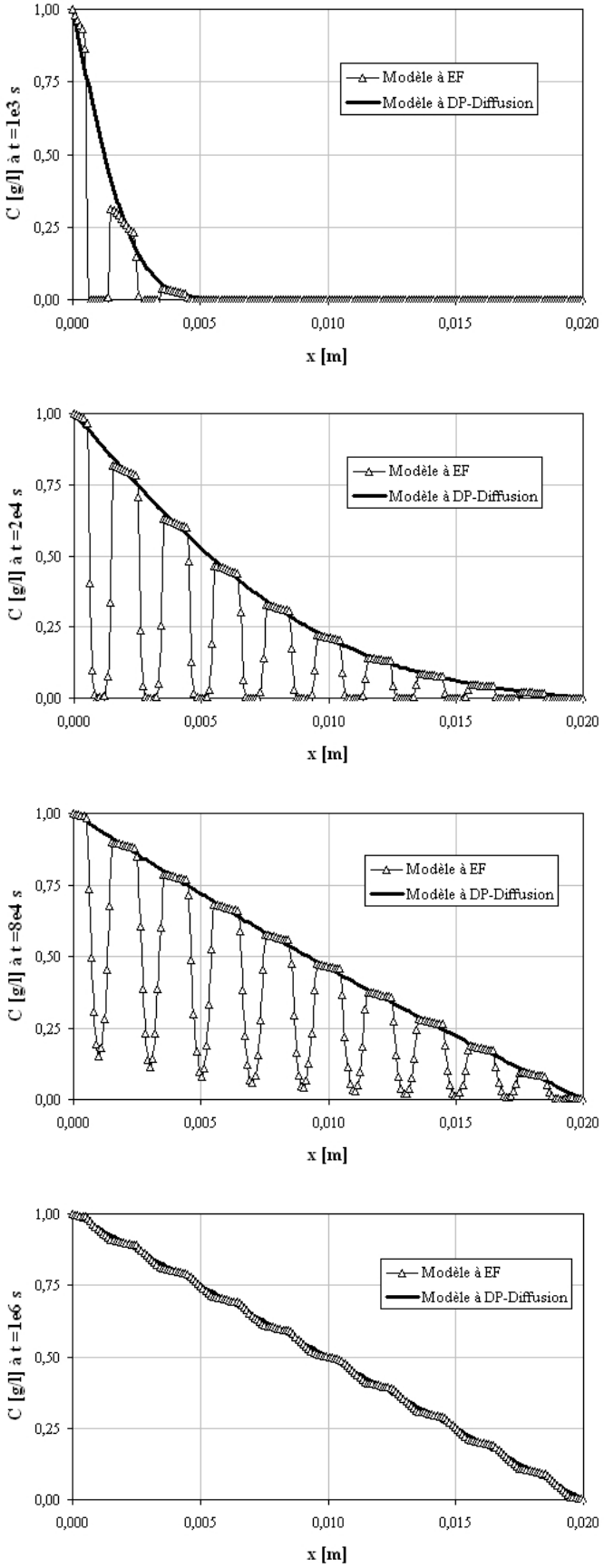


FIG. 3.4: Profils de la concentration obtenus à différents temps par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 2D.

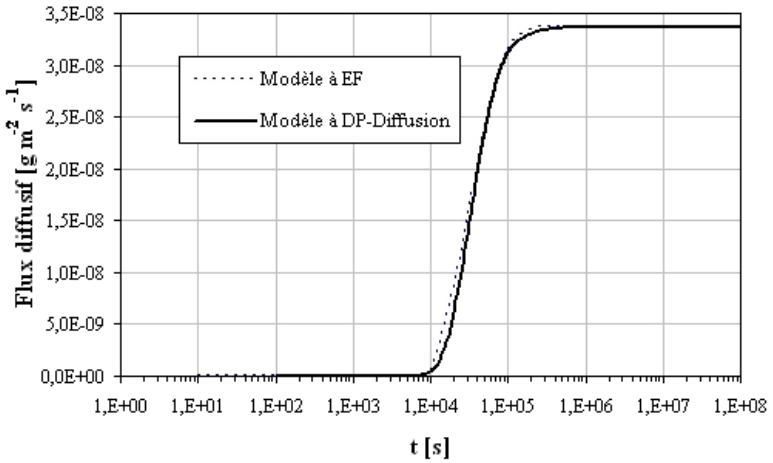


FIG. 3.5: Flux diffusif à la sortie du domaine calculé par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 2D.

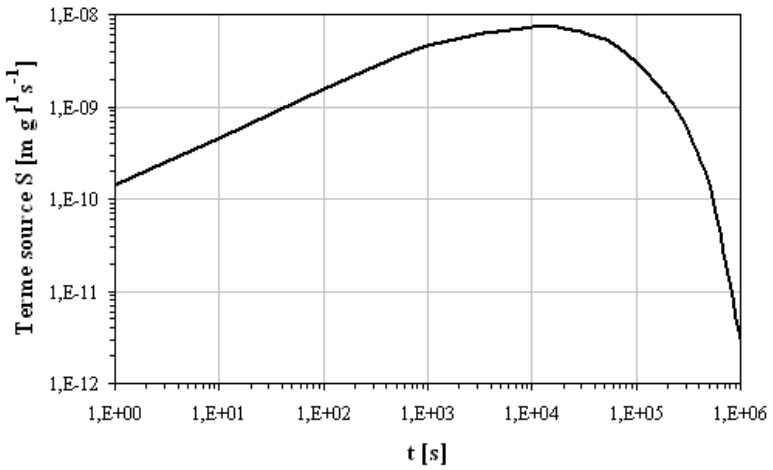


FIG. 3.6: Terme source calculé dans tout le domaine par DP-Diffusion en fonction du temps dans le cas 2D.

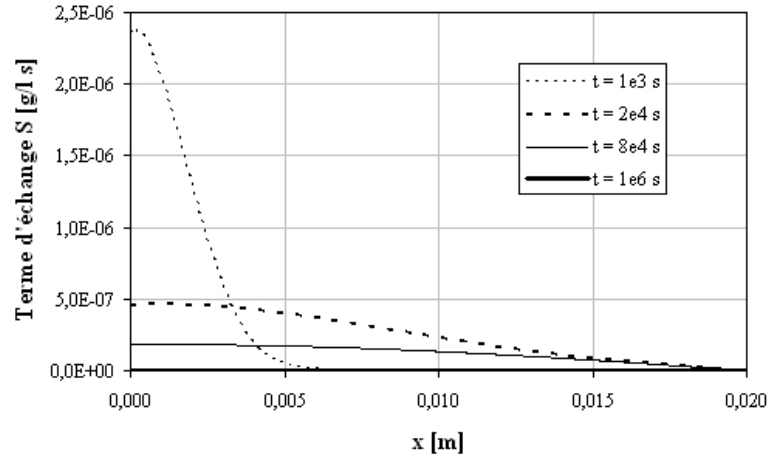


FIG. 3.7: Échange de soluté calculé par DP-Diffusion à l'interface entre les micro et macro-porosité à t = 1e3, 2e4, 8e4 et 1e6 s dans le cas 2D.

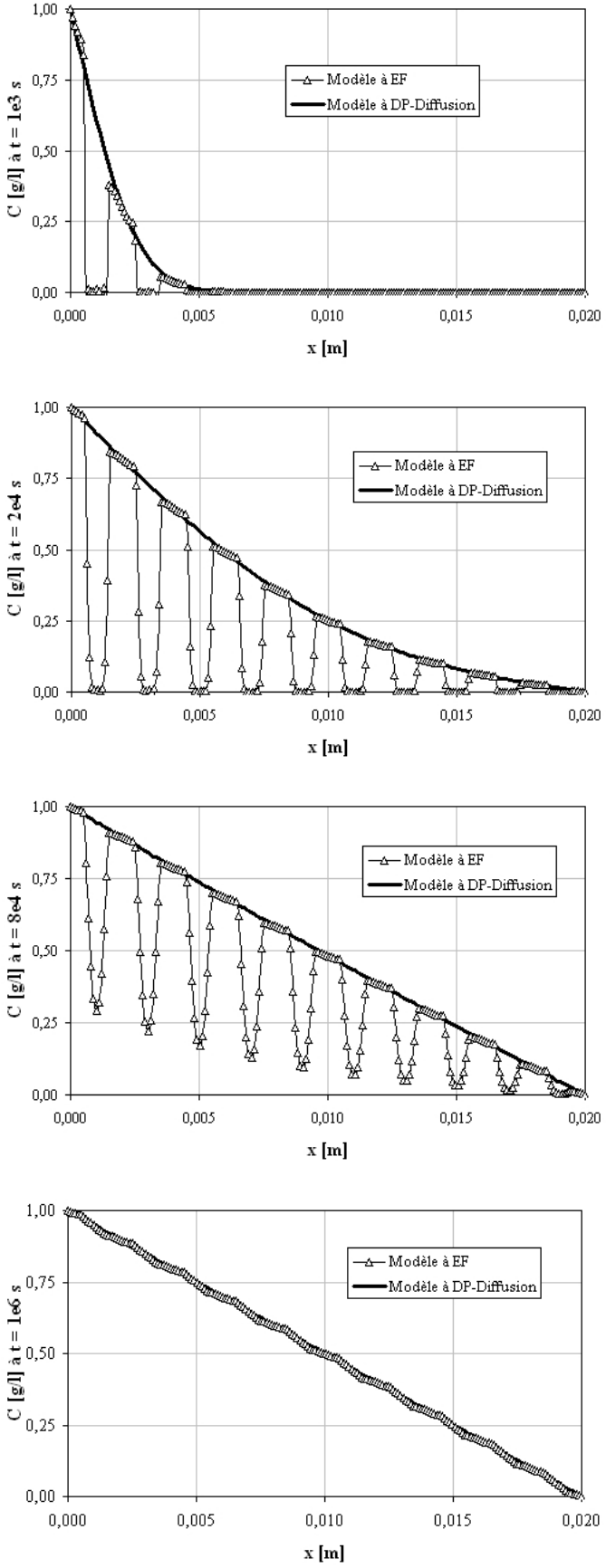


FIG. 3.8: Profils de la concentration au centre du domaine obtenus à différents temps par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 3D.

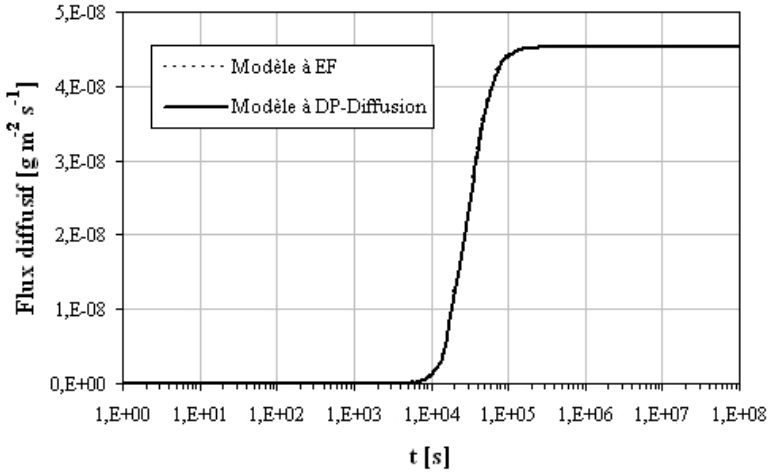


FIG. 3.9: Flux diffusif à la sortie du domaine calculé par les modèles EF et DP-Diffusion dans le cas 3D.

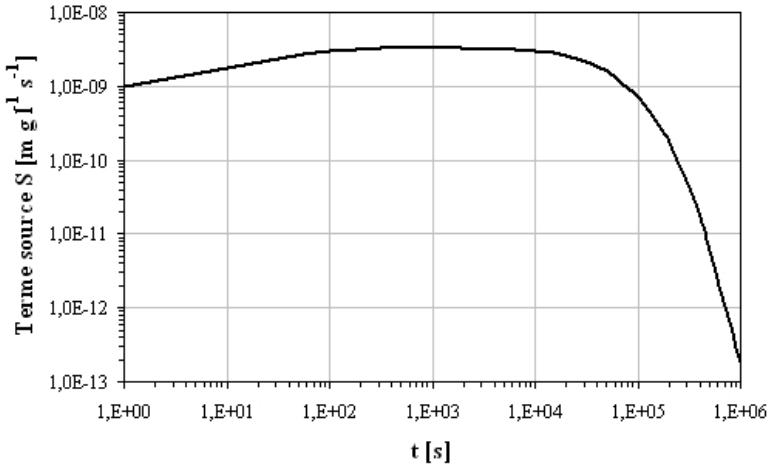


FIG. 3.10: Terme source intégré sur tout le domaine par DP-Diffusion en fonction du temps dans le cas 3D.

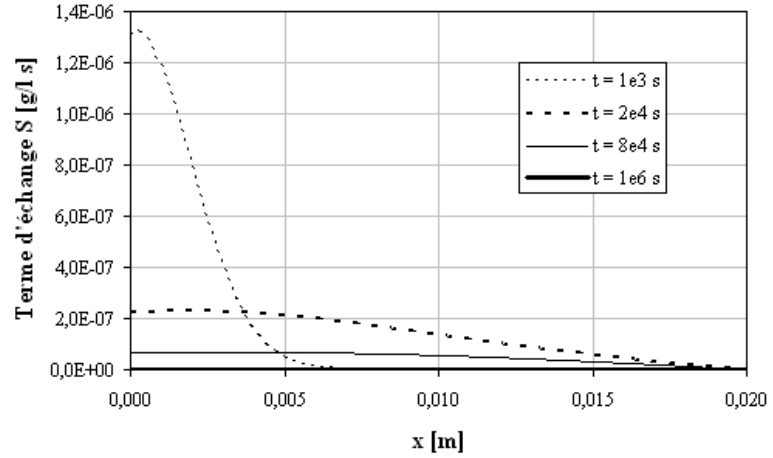


FIG. 3.11: Échange de soluté calculé par DP-Diffusion à l'interface entre les micro et macro-porosité à t = 1e3, 2e4, 8e4 et 1e6 s dans le cas 3D.

3.4 Modèle DP-Diffusion-Convection

3.4.1 Géométries et propriétés physiques locales

Nous considérons le problème 3D dont la géométrie est donnée FIG. 3.3b. On impose une vitesse d'écoulement $\langle v \rangle$ =0,796e-7 m/s (donc $\mathcal{P}e_{1l} = \frac{v_1\, l}{D_1} = 0,76$ avec $v_1 = \frac{\langle v \rangle}{\phi_1}$). Les propriétés physiques locales sont reportées dans le tableau 3.2.

Paramètre	**L [m]**	**l [m]**	R [m]	ϕ_1 **[-]**	ϕ_2 **[-]**	θ_1 **[-]**	θ_2 **[-]**
Problème 3D	0,02	0,002	0,5e-3	0,935	0,065	0,33	0,30

Paramètre	$\mathbf{D}_1(\theta_1)$ **[m²/s]**	$\mathbf{D}_2(\theta_2)$ **[m²/s]**	$\mathbf{D}_{dif}^{eff}$ **[m²/s]**
Problème 3D	2,228e-10	1e-13	2,122e-10

TAB. 3.2: Données géométriques et physiques : Modèle DP-Diffusion-Convection.

3.4.2 Équations différentielles à résoudre

Nous présentons ici le modèle à double-porosité décrivant la diffusion-convection dans le cas 3D présenté dans la figure 3.3b. Nous considérons les équations

$$\phi_1 \frac{\partial\,(\theta_1\, C_1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{dif}^{eff}(\theta_1)\,\frac{\partial C_1}{\partial x} - \langle \boldsymbol{v} \rangle\; C_1\right) - \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Gamma} D_2(\theta_2)\,\frac{\partial C_2}{\partial r}\,d\Gamma, \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = D_2(\theta)\left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_2}{\partial r}\right), \tag{3.12}$$

avec la condition à l'interface Γ

$$C_1 = C_2. \tag{3.13}$$

3.4.3 Conditions initiales et aux limites

Dans ce cas, les conditions initiales et aux limites sont les suivantes :

– Condition initiale :

$$t \leq 0,\; C_1 = C_2 = 0. \tag{3.14}$$

– Condition aux limites pour Eq. (3.11) :

$$t > 0,\ x = 0,\ C_1 = 1, \tag{3.15}$$

$$t > 0,\ x = L, D_{diff}^{eff}\ \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0. \tag{3.16}$$

– Condition aux limites pour Eq. (3.12) :

$$C_1(x) = C_2(r = 0), \tag{3.17}$$

$$D_2\ \frac{\partial C_2}{\partial r} = 0 \quad \text{pour r=R.} \tag{3.18}$$

3.4.4 Résultats

La figure 3.12 présente les profils de la concentration (au centre de l'inclusion) obtenus par le modèle à l'échelle fine EF et par le modèle DP-Diffusion-Convection. On peut remarquer un excellent accord entre les deux solutions. Cet accord est confirmé en comparant les courbes de percée obtenues par le modèle à l'échelle fine et par le modèle DP-Diffusion-Convection (FIG. 3.13).

Le terme source S (FIG. 3.14) intégré sur tout le domaine 1 atteint un maximum à t=1e5 s. Notons que la courbe du terme source présente une forme similaire au cas diffusif. La figure 3.15 montre l'échange de concentration en fonction de x pour quatre temps : t = 1e3, 2e4, 8e4 et 1e6 s.

3.4.5 Paramètres numériques

La même discrétisation a été effectuée dans les cas 2D et 3D. Le domaine 1 a été segmenté en 50 éléments dans la direction x avec un pas $\Delta x = 4 \times 10^{-4}$ m. Le domaine 2 a été discrétisé en 1199 éléments triangulaires dont la taille maximale d'un élément est de 1/15 de celle du domaine. Un côté du domaine 2 qui est interface avec le domaine 1D possède le maillage plus resserré avec $\Delta r = 2 \times 10^{-4}$ m. Du fait que le rayon des sphères est très petit devant la longueur macroscopique, on doit recaler le maillage selon la direction r avec un facteur 10 pour obtenir une solution plus précise.

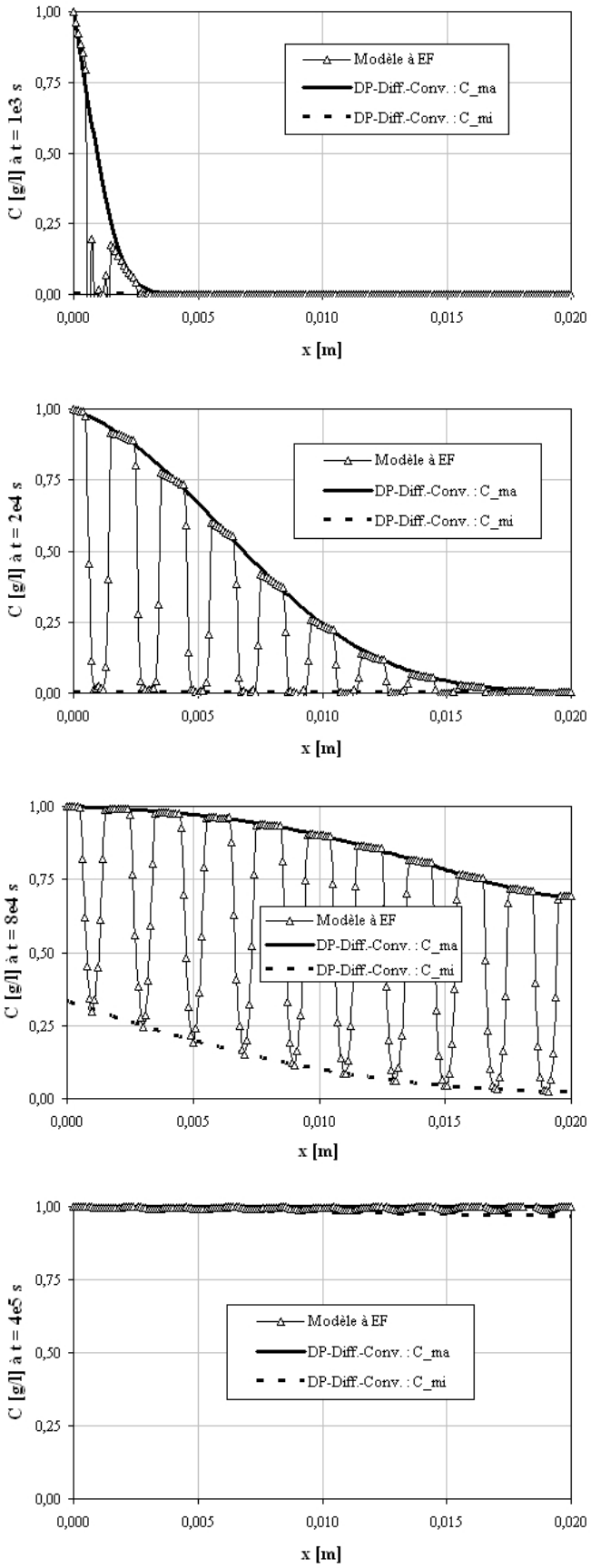


FIG. 3.12: Profils de la concentration obtenus par les modèles EF et DP-Diffusion-Convection dans le cas 3D (en gras : concentration dans la macro-porosité (ma) et en pointillés : concentration dans la micro-porosité (mi)).

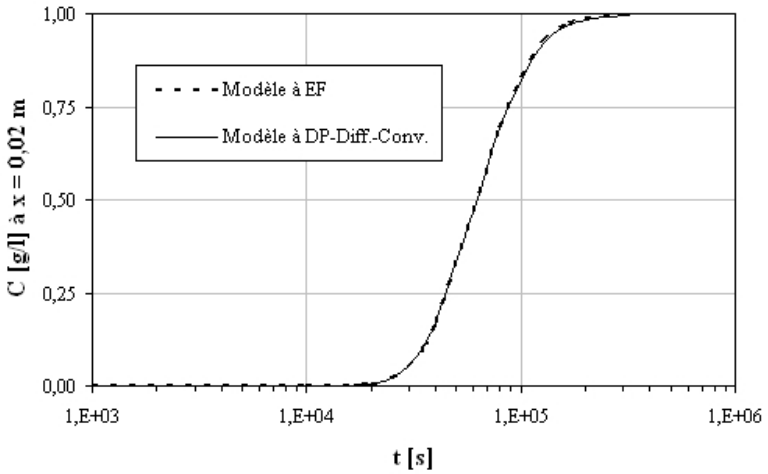


FIG. 3.13: Courbes de percée obtenues par les modèles EF et DP-Diffusion-Convection.

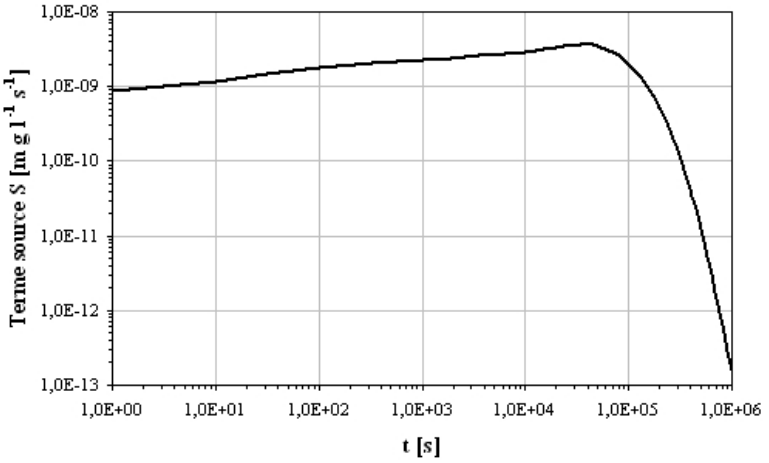


FIG. 3.14: Terme source calculé par le modèle DP-Diffusion-Convection.

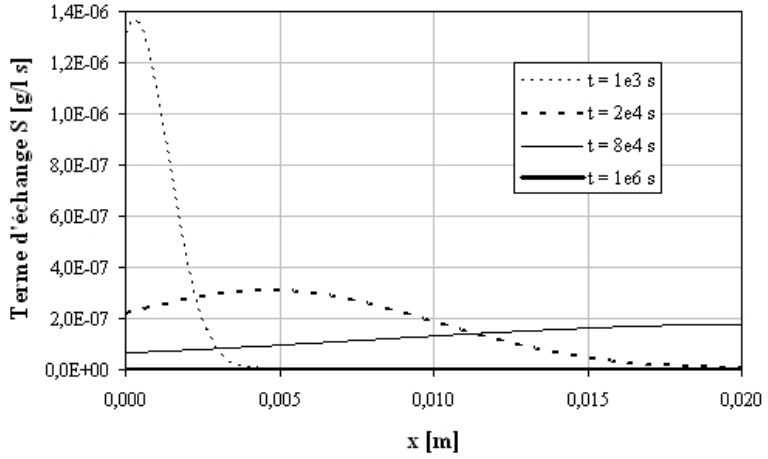


FIG. 3.15: Échange de soluté calculé par DP-Diffusion-Convection à l'interface entre les micro et macro-porosité à t = 1e3, 2e4, 8e4 et 1e6 s dans le cas DP-Diffusion-Convection en 3D.

Le solveur temporel effectue des itérations pour la convergence sur chaque pas de temps. Le critère de convergence est donné par la tolérance absolue (abs_tol) et la tolérance relative (rel_tol), selon le règle : critère de convergence $<$ rel_tol $\times\, u +$ abs_tol (u correpond à l'inconnue). Le logiciel COMSOL Multiphysics propose d'ajuster la tolérance relative et absolue qui contrôlent des erreurs dans chaque pas d'intégration du temps. Par défaut, les tolérances relative et absolue sont de 0,01 et 0,001 respectivement.

On doit résoudre un calcul stationnaire à chaque étape de la résolution temporelle. Nous avons donc choisi le solveur du système linéaire « direct UMFPACK » pour résoudre notre problème.

Le temps réel de la solution est de l'ordre de 1 s avec un ordinateur de 1,99 GHz/1,99 Go de RAM.

3.5 Conclusion

Nous avons réalisé la vérification des modèles à double-porosité obtenus par la méthode d'homogénéisation asymptotique à travers deux exemples : diffusion et diffusion-convection. En comparant avec les solutions numériques à l'échelle fine, les modèles donnent de très bons résultats qui nous ont permis de valider l'implémentation numérique de ces deux modèles macroscopiques. Nous n'avons pas pu réaliser la vérification numérique pour le modèle DP-Dispersion-Convection à cause des difficultés numériques rencontrées dans la solution à l'échelle fine (Ackerer et Mose 2000, Ackerer et Younes 2008). Ce modèle sera donc validé par la comparaison avec les résultats expérimentaux (chapitre 7).

Le logiciel COMSOL Multiphysics présente un avantage de permettre son utilisation d'autres problèmes physiques et d'autres couplages.

Chapitre 4

Calculs du tenseur de diffusion effective/dispersion dans le milieu à double-porosité non saturé

4.1 Introduction

Le tenseur de diffusion effective/dispersion dans le milieu à double-porosité non-saturé peut être calculé à partir de la définition obtenue par l'homogénéisation qui est basée sur la solution du problème local aux limites (voir le chapitre 2). Il est déterminé en résolvant de manière couplée les problèmes locaux d'écoulement et de transport.

Une série de calculs numériques bi et tridimensionnels a été réalisée dans le but de déterminer le tenseur de diffusion effective/dispersion sous différentes conditions d'écoulement non saturé (vitesse de Darcy et teneur en eau), en utilisant le logiciel COMSOL Multiphysics. L'avantage d'utiliser ce logiciel est que la condition de périodicité est intégrée dans la structure du logiciel. Nous avons également calculé la dispersivité en fonction de la teneur en eau. Cette relation a été comparée avec celle trouvée dans la littérature pour le milieu à simple-porosité. Notons qu'il est difficile de trouver des données tant numériques qu'expérimentales pour les coefficients de dispersion et la dispersivité dépendant de la teneur en eau dans le milieu à double-porosité.

Nous avons aussi effectué une série de calculs du tenseur de diffusion effective/dispersion dans un milieu à double-porosité saturé vu comme un cas particulier de milieu insaturé. Dans ce cas, les calculs sont effectués deux fois, à l'échelle des pores et à l'échelle de Darcy.

A titre d'exemple, nous allons présenter les calculs numériques dans le cas de géométries simples. Néanmoins la démarche proposée reste valable pour le cas général. Elle peut être utilisée pour une étude systématique de l'influence de la microstructure sur le tenseur de dispersion et la dispersivité.

4.2 Microstructure à double-porosité et caractéristiques des matériaux

Nous considérons deux géométries de la période en 2D et 3D qui sont présentées sur la figure 4.1. Le matériau à double-porosité est composé d'une inclusion poreuse (Ω_2) circulaire (problème 2D) ou sphérique (problème 3D) arrangée dans la matrice poreuse (Ω_1).

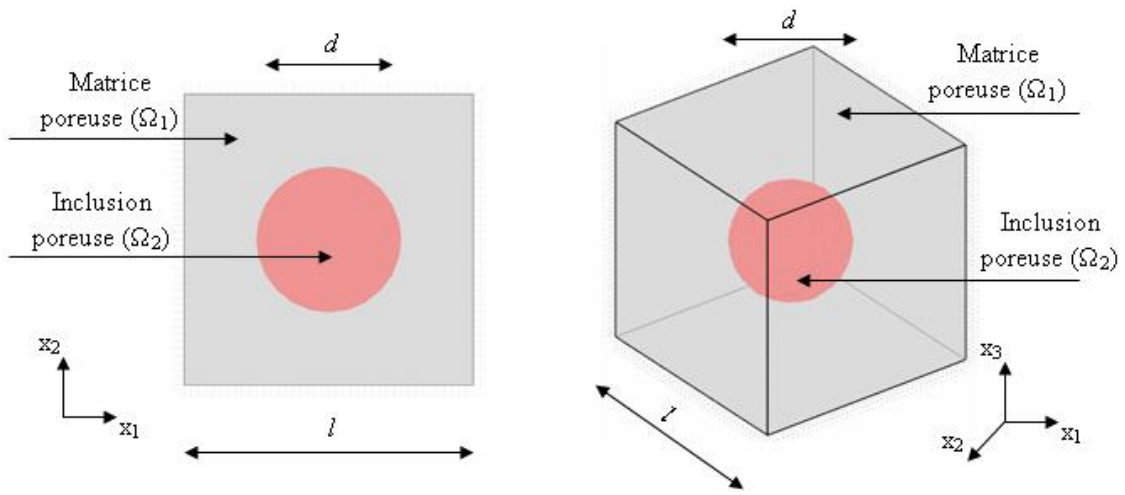


FIG. 4.1: Période à double-porosité en 2D et 3D.

Les paramètres géométriques sont reportés dans le tableau 4.1.

Géométrie	**l [m]**	**d [m]**	ϕ_1 **[-]**	ϕ_2 **[-]**
2D	0,02	0,01	0,804	0,196
3D	0,02	0,01	0,935	0,065

TAB. 4.1: Paramètres géométriques de la période.

Pour l'écoulement, les paramètres du modèle de van Genuchten (van Genuchten 1980) pour le domaine Ω_1 (sable Toyoura (Sato *et al.* 2003)) sont présentés dans le tableau 4.2. La figure 4.2 présente les courbes de rétention $h(\theta)$ et de conductivité hydrauliques $K(\theta)$.

θ_R **[-]**	θ_S **[-]**	α **[1/m]**	n **[-]**	K_s **[m/s]**
0,011	0,415	3,6	4,2	$1{,}25\times10^{-5}$

TAB. 4.2: Paramètres hydrodynamiques du domaine Ω_1.

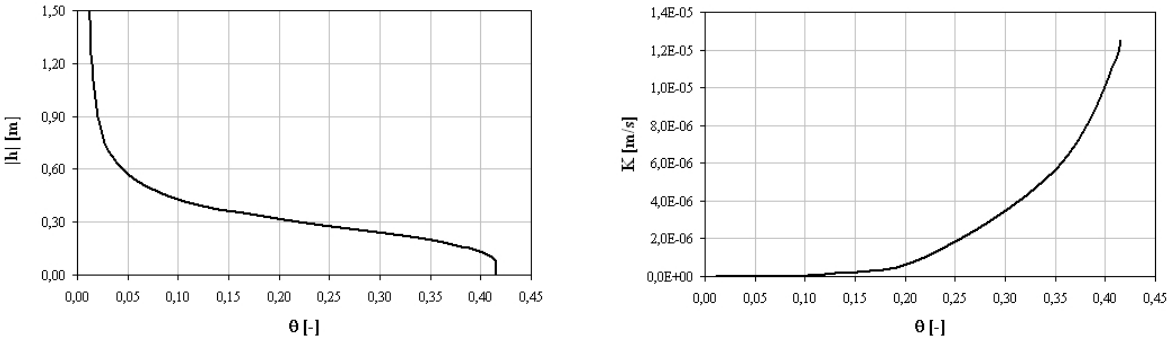


FIG. 4.2: Courbe de rétention et courbe de conductivité du sable utilisé.

Pour le transport, nous utilisons un traceur dont le coefficient de diffusion dans le domaine Ω_1 est connu et calculé par

$$D_1(\theta) = \theta\,\tau(\theta)\;D_0, \tag{4.1}$$

où $\tau(\theta) = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_S^2}$ (Millington et Quirk 1961) et $D_0 = 1,545 \times 10^{-9}$ (m^2/s) est le coefficient de diffusion dans l'eau pure. La relation entre D_1 et θ est présentée dans la figure 4.3.

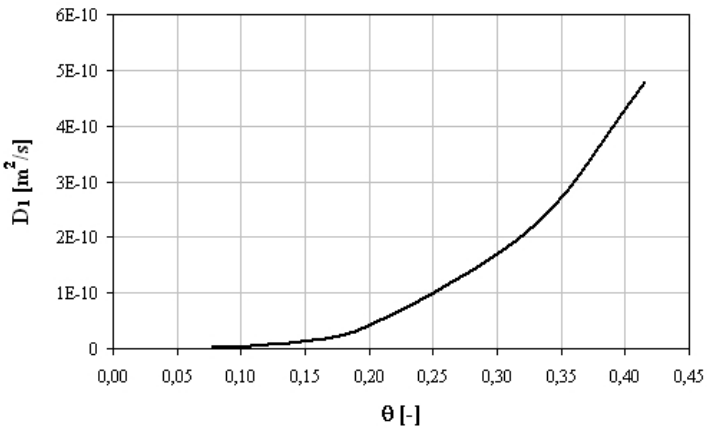


FIG. 4.3: Coefficient de diffusion dans le sable en fonction de la teneur en eau.

4.3 Formulation du problème

Nous considérons le transport de soluté en condition d'écoulement d'eau permanent dans la direction verticale x_3.

Pour calculer $\boldsymbol{D}_{disp}(\theta)$, nous allons considérer comme connues :

- la microstructure du milieu, représentée par la période Ω ;
- les propriétés locales du milieu, $K_1(\theta)$, $K_2(\theta)$, $D_1(\theta)$ et $D_2(\theta)$.

Les problèmes locaux aux limites concernant l'écoulement de l'eau et le transport à résoudre dans le domaine de la période ont été obtenus dans le chapitre 2 (Eqs. (2.50-2.51) et (2.160-2.161)).

4.3.1 Écoulement d'eau

Nous imposons une vitesse verticale due au gradient macroscopique de pression noté g_3 :

$$\nabla_{x_1} h = \nabla_{x_2} h = 0 \ \text{ et } \ \nabla_{x_3} h = g_3. \tag{4.2}$$

Le vecteur vitesse $\boldsymbol{v}(\theta)$ s'écrit dans le repère local (y_1, y_2, y_3)

$$\boldsymbol{v}(\theta) = -K_1(\theta) \begin{bmatrix} \nabla_{y_1}\xi_3 (g_3+1) \\ \nabla_{y_2}\xi_3 (g_3+1) \\ (\nabla_{y_3}\xi_3 + 1)(g_3+1) \end{bmatrix}. \tag{4.3}$$

La vitesse de Darcy s'écrit

$$\langle \boldsymbol{v}(\theta) \rangle = - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ K_{33}^{eff}(\theta)(g_3+1) \end{bmatrix}, \tag{4.4}$$

avec la composante du tenseur de conductivité effective dans la direction 3

$$K_{33}^{eff}(\theta) = K^e \, K_1^{eff}(\theta), \ \text{ où } \ K^e = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} (\nabla_{y_3}\xi_3 + 1) \, d\Omega. \tag{4.5}$$

La formulation pour le cas 2D est déduite à partir du cas 3D.

Rappelons le problème local pour le vecteur $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3)$ ($\boldsymbol{\xi}_1(y_1, y_2, y_3)$, $\boldsymbol{\xi}_2(y_1, y_2, y_3)$ et $\boldsymbol{\xi}_3(y_1, y_2, y_3)$) :

$$\nabla \cdot [K_1(\theta)(\nabla \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I})] = 0 \text{ dans } \Omega_1, \tag{4.6}$$

$$[K_1(\theta)(\nabla \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \text{ sur } \Gamma. \tag{4.7}$$

$$\langle \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\xi} \, d\Omega, \quad \boldsymbol{\xi} - \text{périodique}. \tag{4.8}$$

Le tenseur de conductivité effective est défini

$$\boldsymbol{K}^{eff}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} K_1(\theta)(\nabla \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{I}) \, d\Omega. \tag{4.9}$$

Dans le cas considéré nous obtenons

$$\boldsymbol{K}^{eff}(\theta) = \begin{bmatrix} K_{11}^{eff}(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & K_{22}^{eff}(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & K_{33}^{eff}(\theta) \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad K_{11}^{eff} = K_{22}^{eff} = K_{33}^{eff} \tag{4.10}$$

4.3.2 Transport de soluté

Rappelons le problème local aux limites pour le transport de soluté :

$$\nabla \cdot [\boldsymbol{D}_1(\theta) \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] - \boldsymbol{v}(\theta) \cdot \nabla \boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{v}(\theta) - \frac{\langle \boldsymbol{v}(\theta) \rangle}{\phi_1} \text{ dans } \Omega_1, \tag{4.11}$$

$$[\boldsymbol{D}_1(\theta) \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I})] \cdot \boldsymbol{N} = 0 \text{ sur } \Gamma, \tag{4.12}$$

$$\langle \boldsymbol{\chi} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\chi} \, d\Omega, \quad \boldsymbol{\chi} - \text{périodique}. \tag{4.13}$$

Le vecteur vitesse est donné par (4.3) et (4.4). Le tenseur de dispersion est défini comme :

$$\boldsymbol{D}_{disp}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} [\boldsymbol{D}_1(\theta) \cdot (\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I}) - \boldsymbol{v}\boldsymbol{\chi}] \, d\Omega, \tag{4.14}$$

Dans le cas considéré, nous avons

$$\boldsymbol{D}_{disp}(\theta) = \begin{bmatrix} D_{\perp}(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & D_{\perp}(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & D_{//}(\theta) \end{bmatrix} \tag{4.15}$$

où $D_{\perp}$ est le coefficient de dispersion horizontale dans la direction x_1 et x_2. $D_{//}$ est le coefficient de dispersion longitudinale dans la direction x_3

$$D_{//}(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \left[D_1(\theta) \left(\frac{\partial \chi_3}{\partial x_3} + 1 \right) - v_3 \chi_3 \right] d\Omega. \tag{4.16}$$

Dans les chapitres 4.4, 4.5 et 4.6, nous effectuons une étude paramétrique du tenseur de dispersion en fonction du nombre de Péclet. Ce tenseur est associé au modèle DP-Dispersion-Convection (voir le chapitre 2). Son utilisation nécessite la vérification du domaine de validité, défini en fonction de ε.

4.4 Tenseur de dispersion non saturé dans les conditions 2D

4.4.1 Solutions des problèmes locaux

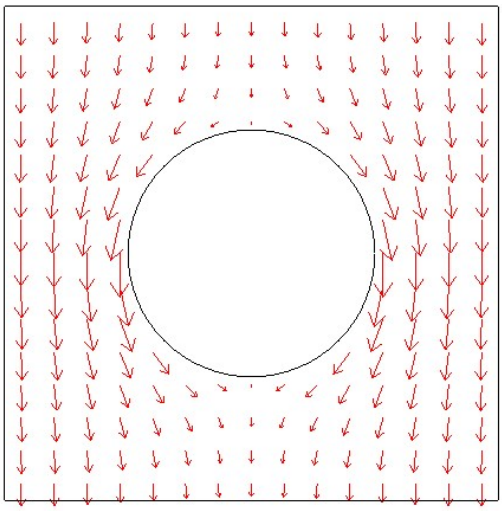
La figure 4.4 présente le champs de vitesse locale $\boldsymbol{v}$, ainsi que l'intensité de la composante verticale v_3 du vecteur $\boldsymbol{v}$. Les champs de χ_2 pour $\theta = 0,330$ sont présentés sur la figure 4.5. Les figures a, b, c et d qui correspondent à quatre nombres Péclet 0,09 ; 0,89 ; 8,89 et 88,9 respectivement, montrent graphiquement le passage entre les régimes du transport diffusif et dispersif selon le nombre de Péclet défini comme :

$$\mathcal{P}e_1 = \frac{v_1\, l}{D_1} \quad \text{avec} \quad v_1 = \frac{\langle v \rangle}{\phi_1}, \tag{4.17}$$

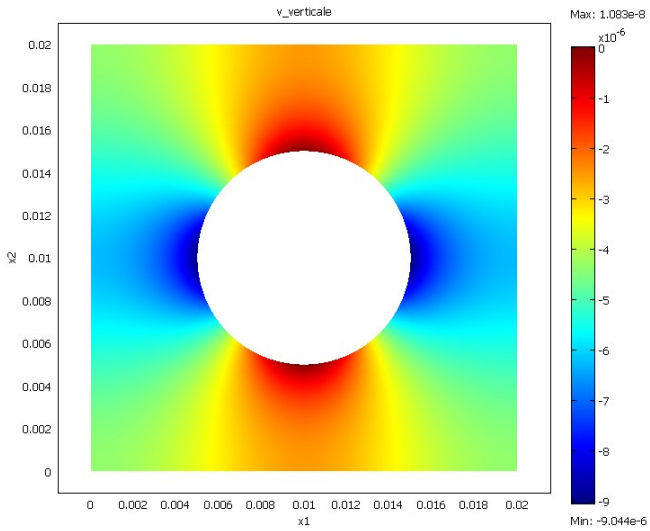
où $\langle v \rangle$ = 7,96e-10 ; 7,96e-9 ; 7,96e-8 et 7,96e-7 m/s sont les vitesses de Darcy imposées.

4.4.2 Influence de la teneur en eau et de la vitesse de l'écoulement

Dans le but d'étudier l'influence de la teneur en eau et de la vitesse d'écoulement sur le coefficient de dispersion longitudinale, nous avons effectué des calculs pour différentes vitesses



(a)



(b)

FIG. 4.4: a) Champs de vitesse $\boldsymbol{v}$ et b) Intensité de la composante verticale v_2 du vecteur vitesse $\boldsymbol{v}$.

imposées en fixant la teneur en eau. Les résultats obtenus (coefficient de dispersion longitudinale) pour quatre valeurs de teneur en eau ($\theta = 0,121;\ 0,202;\ 0,330$ et $0,415$) sont présentés dans la figure 4.6. On peut voir que les positions des courbes entre elles dépendent de la vitesse $\langle v \rangle$. Pour les vitesses faibles, $D_{//disp}$ augmente avec la croissance de la teneur en eau, tandis que pour les vitesses fortes cette tendance s'inverse. Ces résultats ont été expérimentalement trouvés pour le

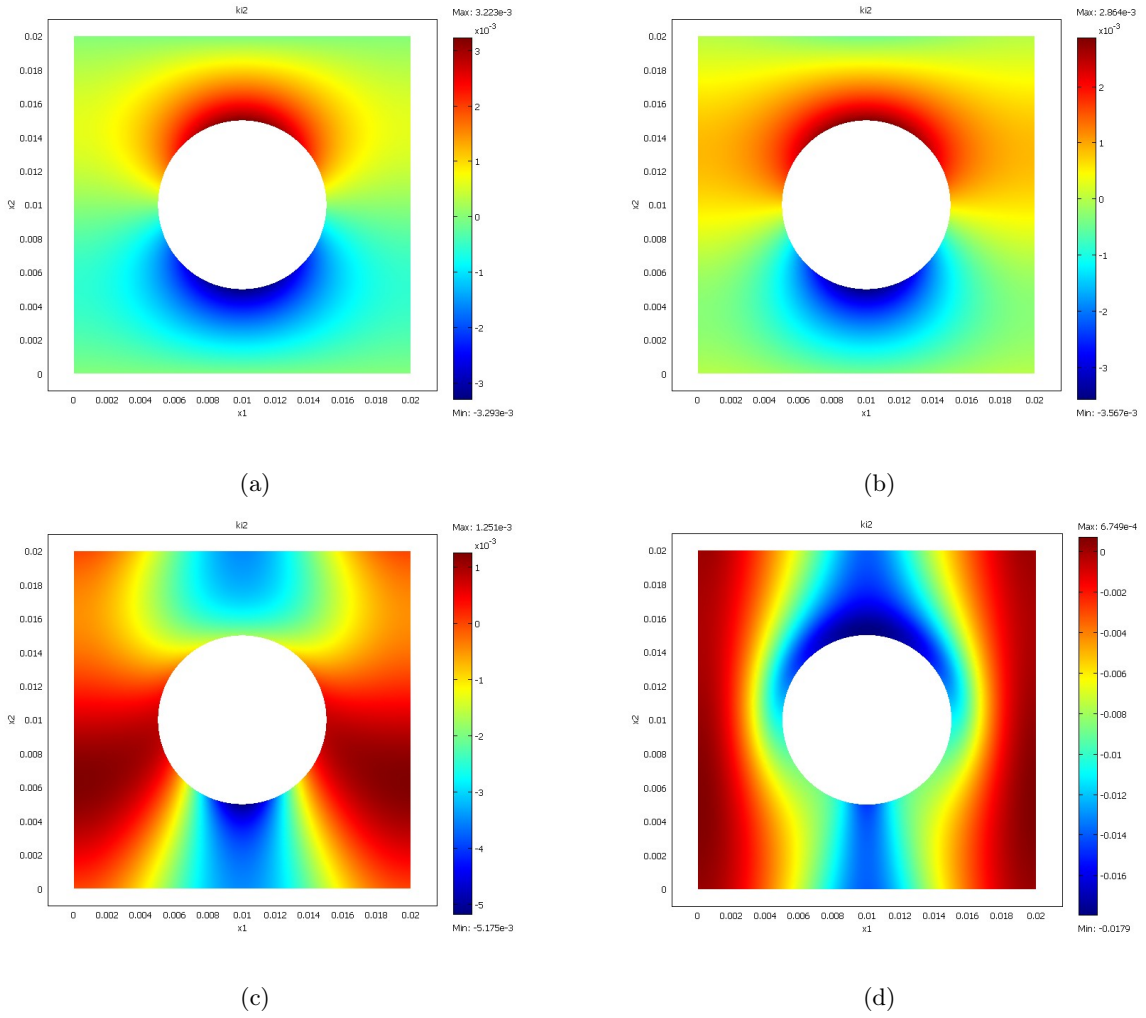


FIG. 4.5: Champs de χ_2 pour $\mathcal{P}e_1 = 0{,}08$ (a) ; 0,89 (b) ; 8,89 (c) et 88,9 (d).

milieu à simple-porosité par Rowe et Badv (1996a), Buchwald et Kaps (2000) et Rowe (2001) pour le régime diffusif et par Padilla *et al.* 1999, Nutzmann *et al.* 2002, Toride *et al.* 2003 et Sato *et al.* 2003 pour le régime dispersif.

La figure 4.7 montre l'évolution de $D_{//disp}$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction de la vitesse. La disposition des différentes courbes est régulière. C'est-à-dire que $D_{//disp}/D_1$ augmente avec la croissance de la vitesse $\langle v \rangle$ pour une teneur en eau θ donnée et que $D_{//disp}/D_1$ augmente lorsque la teneur en eau diminue pour la même vitesse.

Finalement, tous les résultats se ramènent sur une courbe unique, si on présente $D_{//disp}(\theta)/D_1(\theta)$ en fonction du nombre de Péclet (FIG. 4.8). Elle montre l'augmentation linéaire (log - log) du $D_{//disp}(\theta)/D_1(\theta)$ par rapport à $\mathcal{P}e_1(D_1(\theta))$, en fonction de la teneur en eau. Ceci peut être comparé avec les résultats de Pfannkuch (1962), obtenu en conditions saturées.

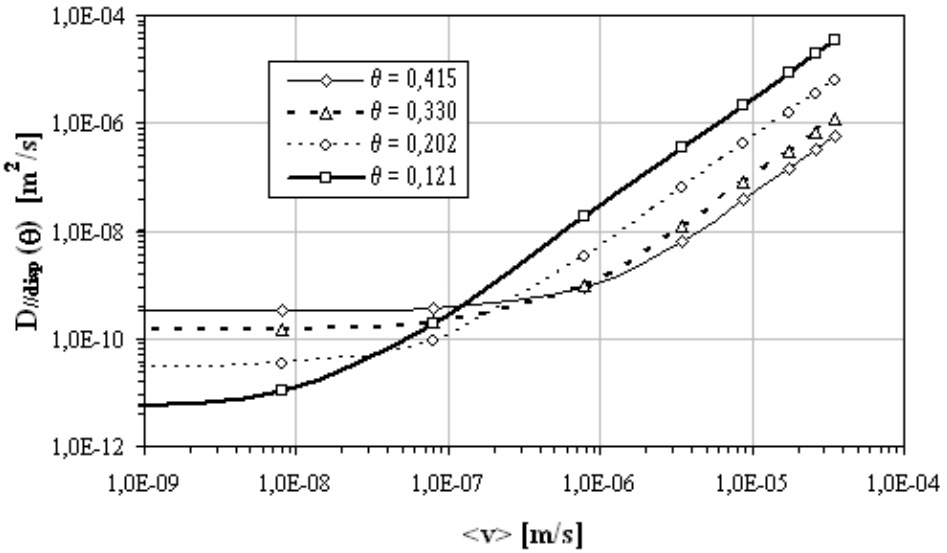


FIG. 4.6: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ en fonction de la vitesse imposée $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D).

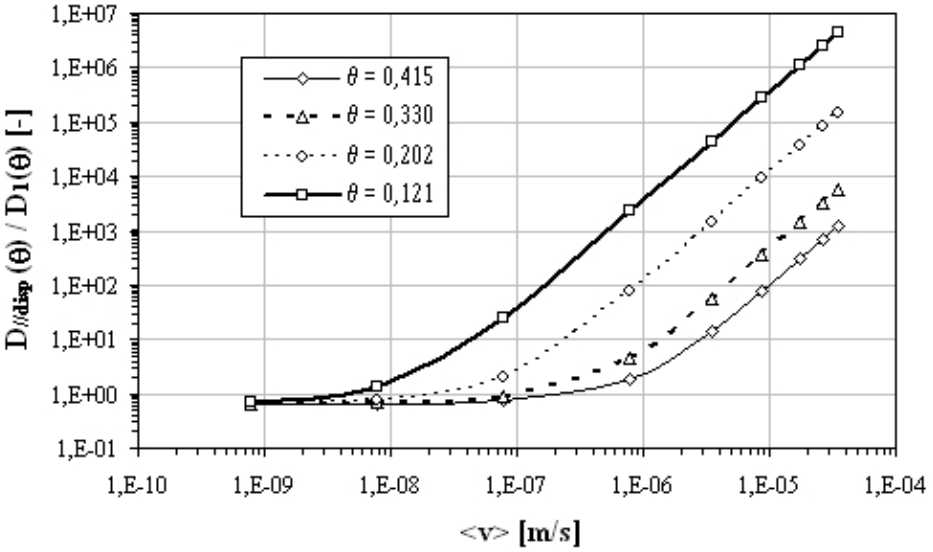


FIG. 4.7: $D_{//disp}(\theta)$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction de la vitesse pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D).

4.4.3 Dispersivité dans le milieu à double-porosité non saturé

Pour un milieu homogène (à simple-porosité) et non saturé, le tenseur de dispersion dépend à la fois de la vitesse d'écoulement et de la teneur en eau (Nutzmann *et al.* 2002, Toride *et al.* 2003 et Sato *et al.* 2003). Nous trouvons cette dépendance dans le milieu hétérogène et non saturé (FIG. 4.9). D'autre part, il a été montré expérimentalement que la dispersivité λ [L] (Bear 1972) est un paramètre du milieu qui ne dépend que de la teneur en eau et des propriétés du milieu

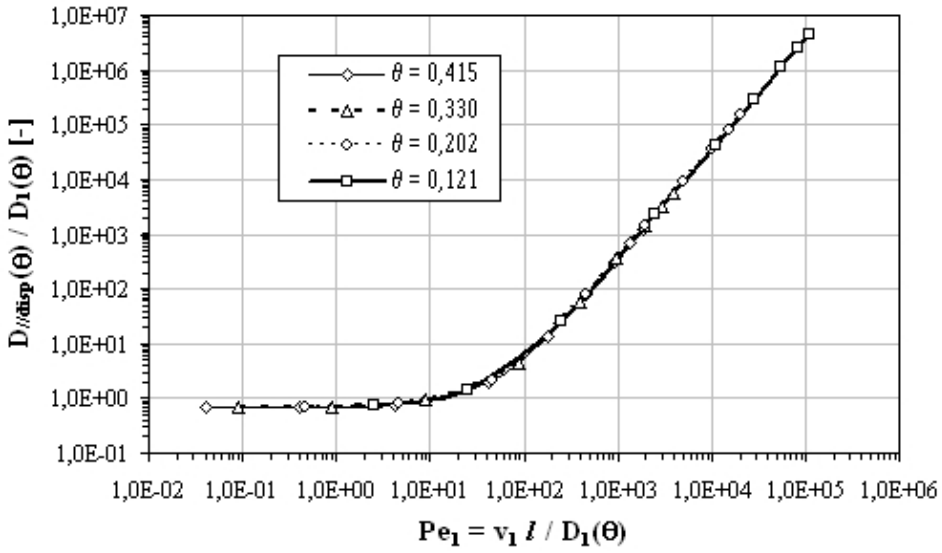


FIG. 4.8: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction du nombre Peclet $\mathcal{P}e_1$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 2D).

(Padilla *et al.* 1999, Sato *et al.* 2003)

$$\lambda(\theta) = D_{//disp}(\theta)/\langle v\rangle^{\omega}\,. \tag{4.18}$$

L'exposant ω varie entre 1 et 2 (Bear 1972). Nous avons donc calculé les valeurs de $\lambda(\theta)$ en utilisant la définition (4.18) avec ω=1, FIG. 4.10. Comme annoncé pour le milieu à simple-porosité (Padilla *et al.* 1999, Bejat *et al.* 2000, Nutzmann *et al.* 2002, Toride *et al.* 2003 et Sato *et al.* 2003), la dispersivité augmente fortement lorsque la teneur en eau diminue. On retrouve cette tendance dans le milieu à double-porosité. L'augmentation est de deux ordres de grandeur, c-à-d plus importante que dans le cas du milieu à simple-porosité.

4.5 Tenseur de dispersion non saturé dans les conditions 3D

4.5.1 Solutions des problèmes locaux

La figure 4.11 présente dans le cas 3D le champ de ξ_3 du vecteur $\boldsymbol{\xi}$ d'écoulement et l'intensité de la composante verticale v_3 du vecteur vitesse locale $\boldsymbol{v}$ pour $\langle v\rangle = 3{,}538\times10^{-5}$ m/s. Les figures 4.12 a, b et c montrent les champs de χ_3 en fonction du nombre de Péclet. On peut ainsi observer le passage du régime diffusif vers le régime dispersif.

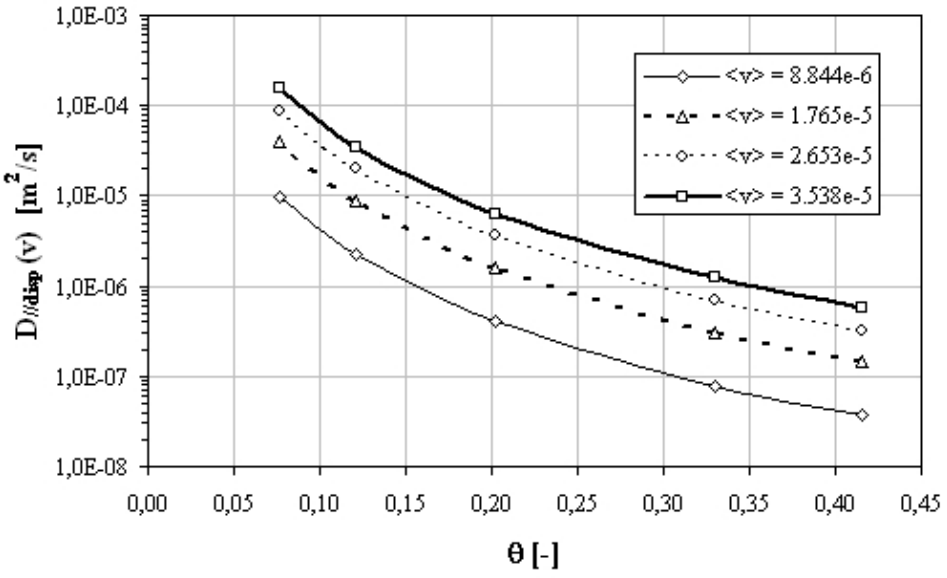


FIG. 4.9: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ en fonction de la teneur en eau θ pour différentes vitesses d'écoulement (exemple 2D).

4.5.2 Influence de la teneur en eau et de la vitesse de l'écoulement

Dans le cas 3D, les calculs avec $\theta = 0,202$ et 0,121 ont été réalisés jusqu'une vitesse de l'ordre de 1e-5 m/s. Pour une vitesse plus importante, nous avons rencontré des problèmes de convergence (Ackerer *et al.* 1999, Younes *et al.* 1999). Le coefficient de dispersion longitudinale en fonction de la vitesse d'écoulement est présenté Figure 4.13. Nous retrouvons ici les mêmes tendances que dans le cas 2D. Pour mieux comprendre le comportement dans le milieu à double-porosité non-saturé, nous reportons le coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ normalisé par $D_1(\theta)$ en fonction de la vitesse (FIG. 4.14) et du nombre de Péclet (FIG. 4.15). Le comportement est similaire au cas 2D.

4.5.3 Dispersivité dans le milieu à double-porosité non saturé

A partir de la relation $D_{//disp}(\theta) = \lambda(\theta)\ \langle v \rangle$, nous déduisons la dispersivité $\lambda(\theta)$ en fonction de la saturation du milieu, FIG. 4.16. Nous pouvons constater que la dispersivité dans le cas 2D est d'un ordre de grandeur plus importante que celle obtenue avec le cas 3D. Ceci peut venir de la différence entre les fractions volumiques $\phi_1 = 0{,}804$ pour 2D et 0,935 pour 3D.

Les résultats concernant la dispersivité obtenus à partir des calculs numériques en 2D et 3D peuvent être comparés avec les résultats expérimentaux de Sato *et al.* (2003) pour un sable

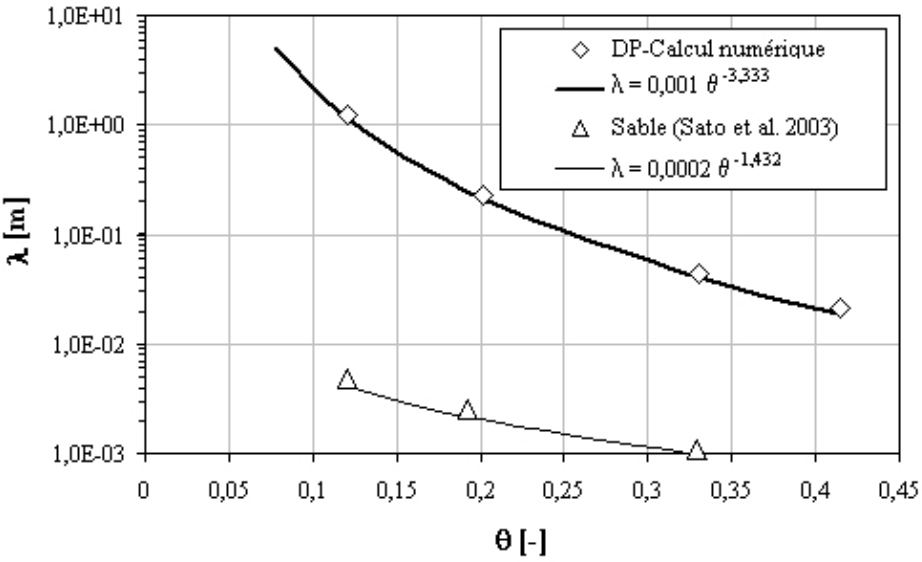


FIG. 4.10: Dispersivité λ versus la teneur en eau θ : calcul numérique (exemple 2D) et expérience dans un sable (symbole triangulaire).

dont les propriétés physiques et hydrauliques sont les mêmes que celles du matériau du domaine 1 utilisées dans les calculs. Par exemple à $\theta = 0,415$, la dispersivité mesurée dans le sable est de 0,06 cm, contre 0,2 cm (exemple 2D) et 0,16 cm (exemple 3D), obtenues à partir des calculs numériques pour le milieu à double-porosité. Ainsi, il est possible de conclure que l'augmentation de la dispersivité ne vient pas que de la décroissance de la teneur en eau, mais aussi de l'hétérogénéité du milieu.

4.6 Tenseur de dispersion saturé dans les conditions 2D et 3D

Dans le cas du milieu à double-porosité saturé, nous disposons d'un outil mathématique qui permet de procéder par double homogénéisation à partir de l'échelle des pores (appelée μ).

Le tenseur de dispersion est d'abord calculé pour le matériau de la matrice du milieu à double-porosité. Ce matériau est composé des grains solides et des pores complètement saturés par l'eau. Après une première homogénéisation il est considéré comme homogène (milieu à simple-porosité), selon Auriault et Adler (1995), Auriault et Lewandowska (1996). Ensuite, à partir de ce matériau nous construisons un milieu à double-porosité dans lequel le tenseur de dispersion est déterminé par l'homogénéisation depuis l'échelle du matériau poreux, c-à-d l'échelle de Darcy (appelée m).

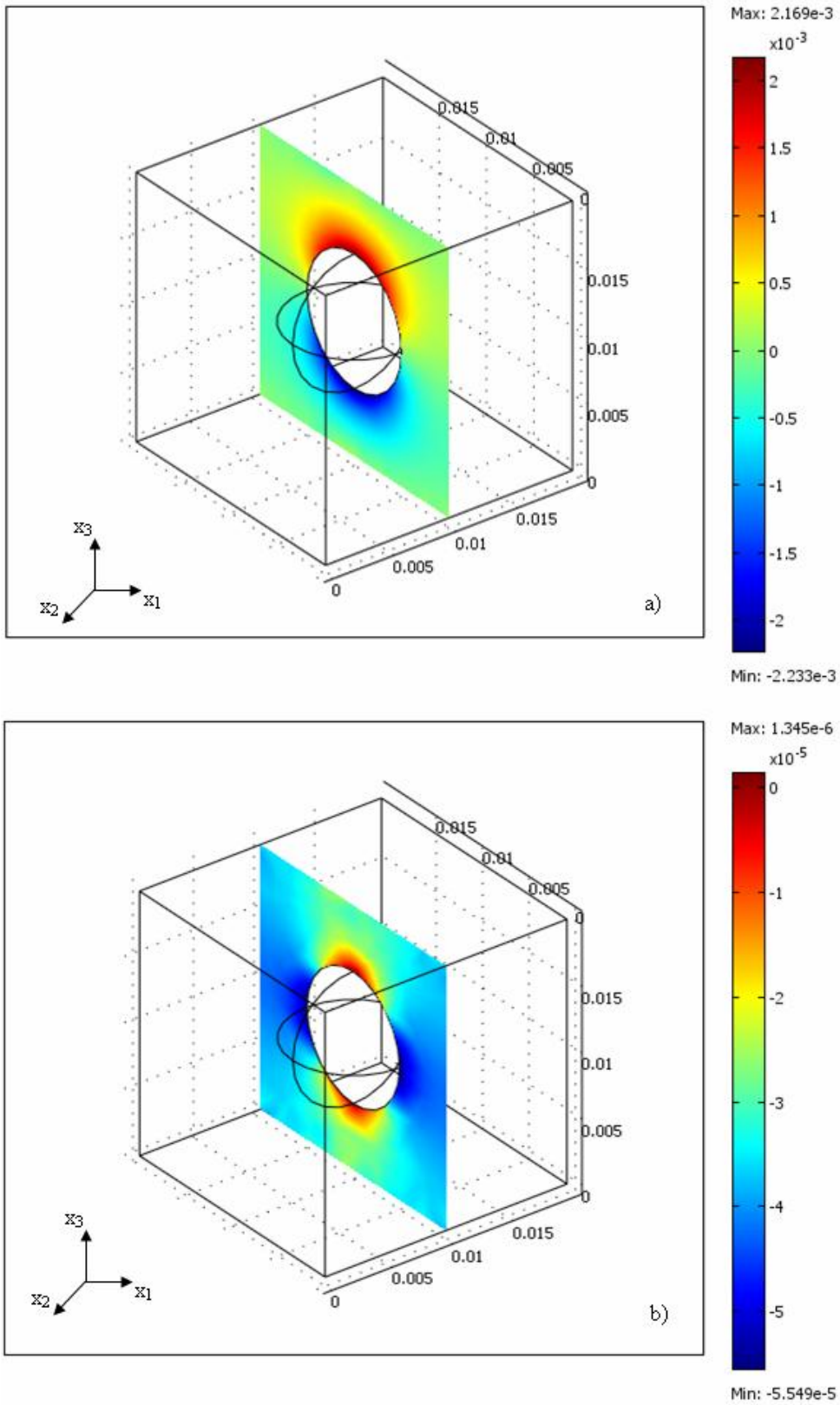


FIG. 4.11: a) Champ de ξ_3 et b) Intensité de la composante verticale v_3 du vecteur $\boldsymbol{v}$ pour la vitesse imposée $\langle v \rangle = 3{,}538 \times 10^{-5}$ m/s.

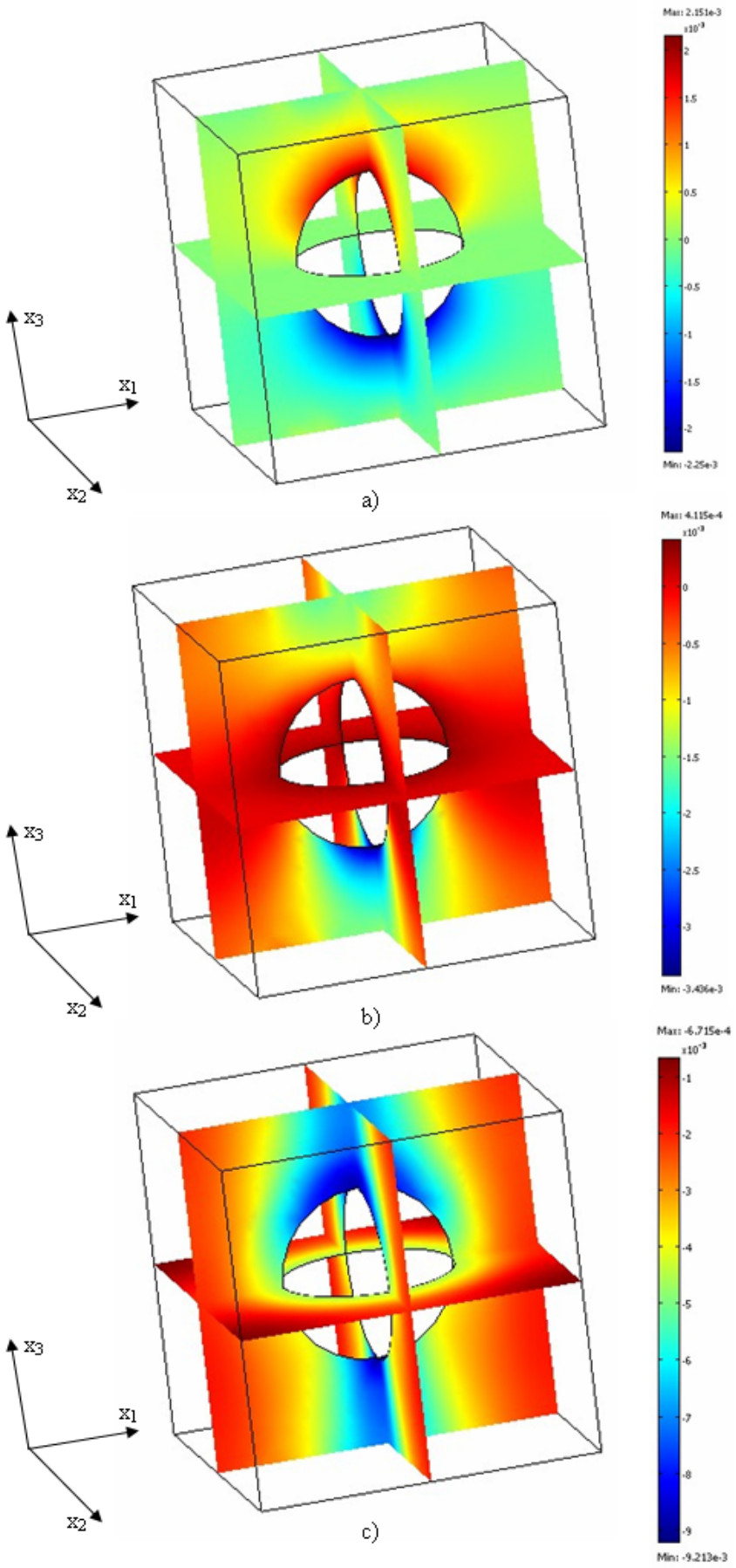


FIG. 4.12: Champs de χ_3 pour $\mathcal{P}e_1 = 0{,}79$ (a) ; 7,9 (b) et 79 (c).

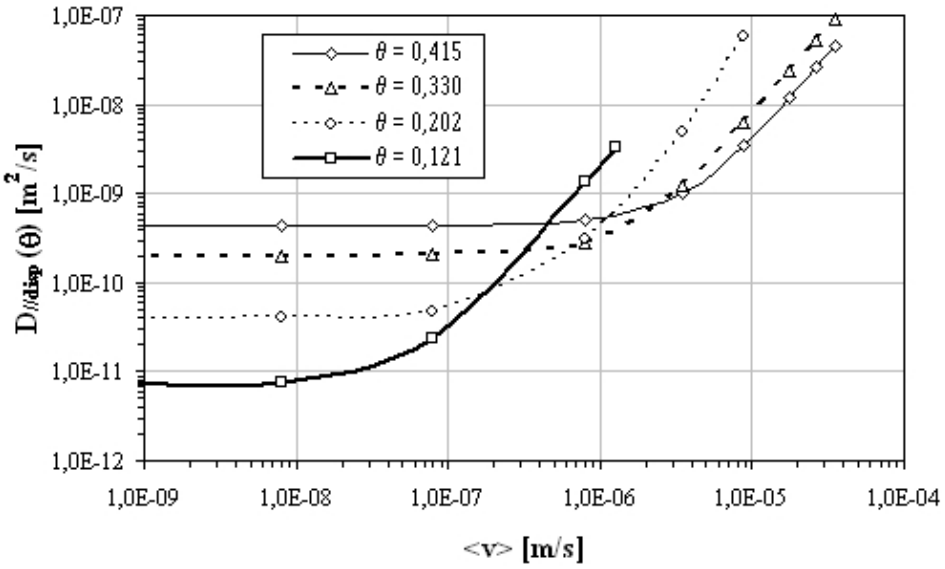


FIG. 4.13: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}(\theta)$ versus la vitesse $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 3D).

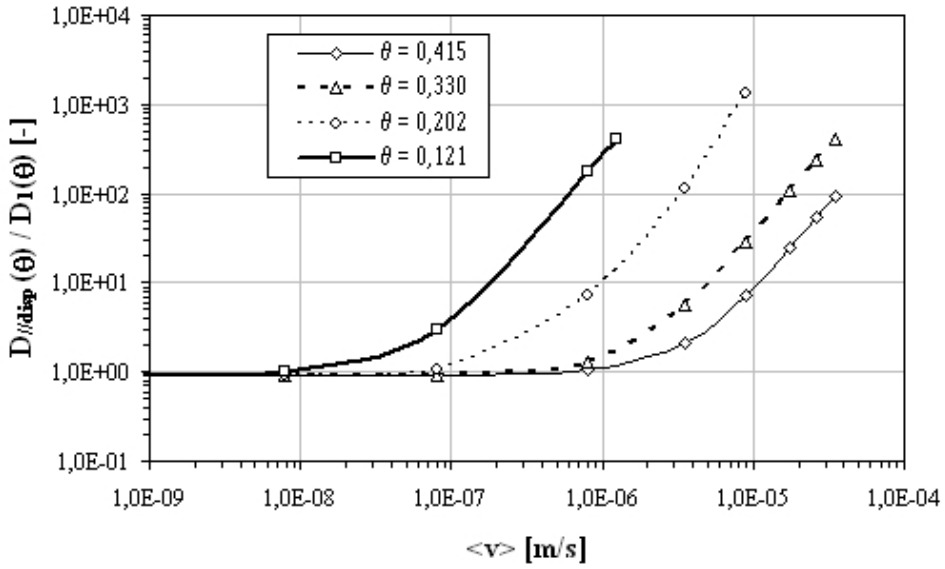


FIG. 4.14: Coefficient de dispersion longitudinale normalisé $D_{//disp}(\theta)$ par $D_1(\theta)$ versus la vitesse $\langle v \rangle$ pour différentes teneurs en eau θ (exemple 3D).

4.6.1 Géométries

Les géométries de la microstructure sont présentées sur la figure 4.17. Les dimensions de la période des échelles μ et m des exemples numériques en 2D et 3D sont de 0,002 m et 0,02 m respectivement. Les diamètres du cercle (exemple 2D) et de la sphère (exemple 3D) sont égaux à la moitié du côté de carré.

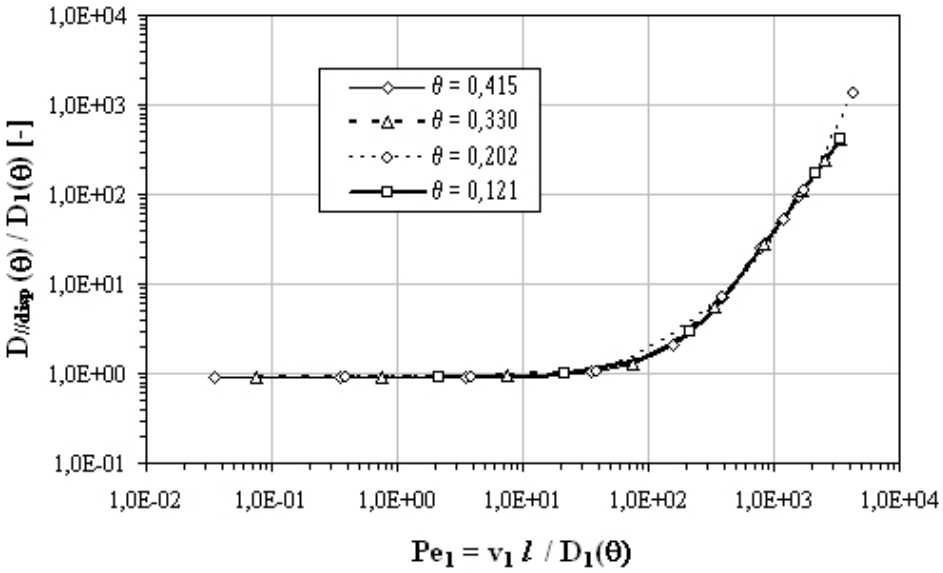


FIG. 4.15: Coefficient de dispersion longitudinale normalisé $D_{//disp}(\theta)$ par $D_1(\theta)$ en fonction du nombre de Peclet $\mathcal{P}e_l$ pour différentes teneur en eau (exemple 3D).

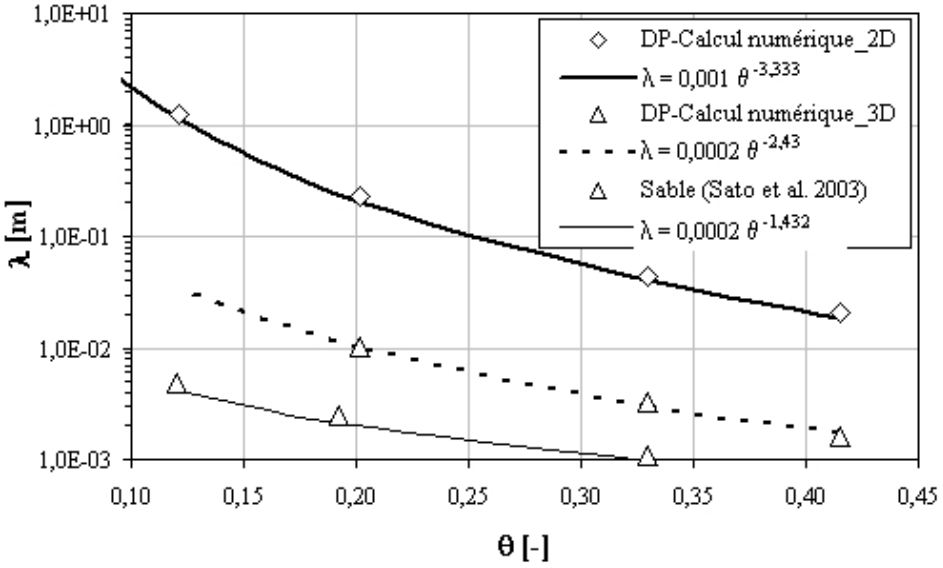


FIG. 4.16: Dispersivité λ en fonction de la teneur en eau θ : comparaison dans les deux cas 2D et 3D des calculs numériques pour le mileu à double-porosité et l'expérience pour le sable.

4.6.2 Formulation du problème

L'homogénéisation conduit à deux problèmes locaux aux limites à résoudre dans deux périodes, représentant la microstructure du matériau, et définies successivement à l'échelle μ et m (FIG. 4.17). Les mécanismes pris en compte sont :

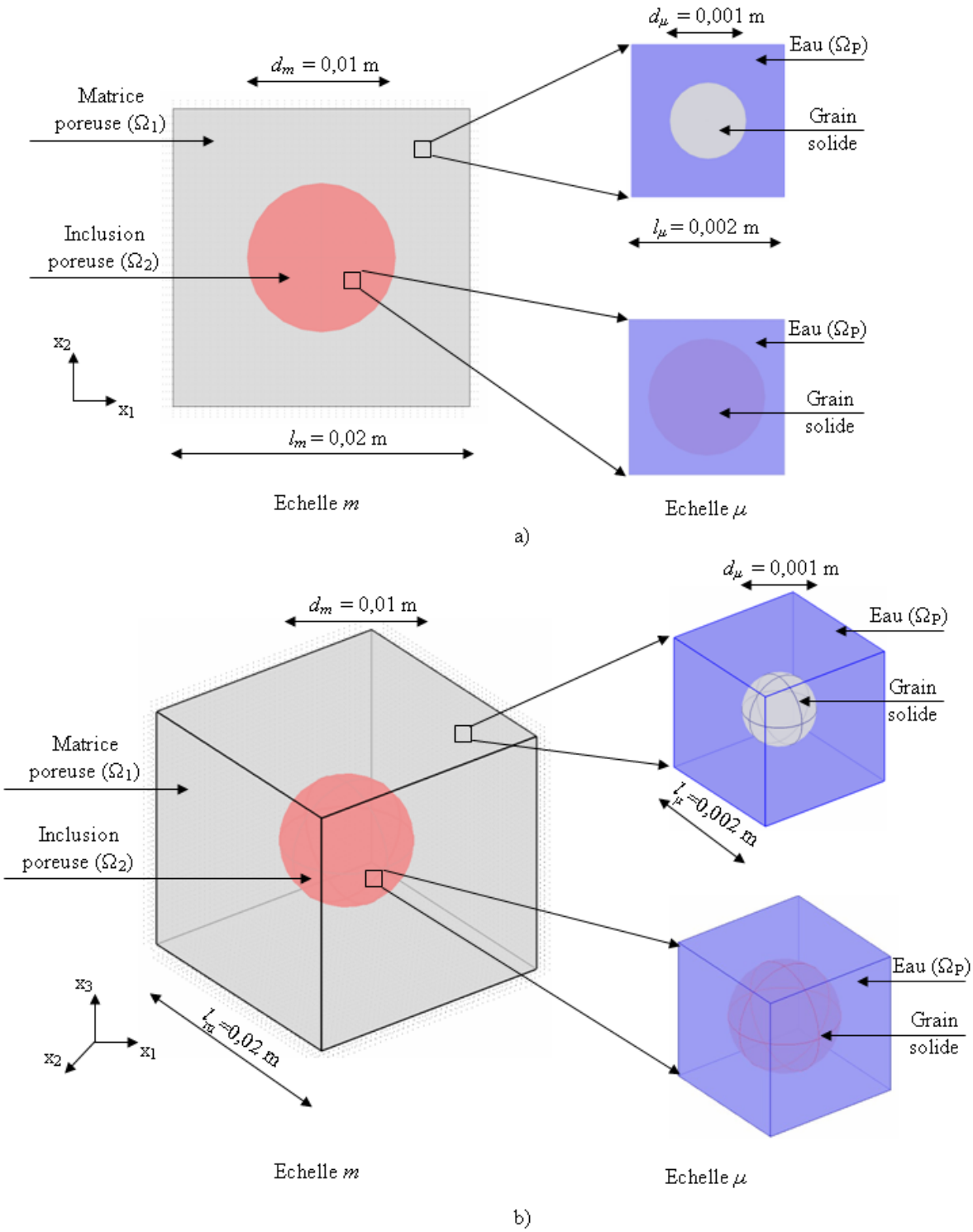


FIG. 4.17: Schéma du milieu à deux échelles : a) en 2D et b) en 3D.

– L'échelle μ : l'écoulement de Stokes couplé avec le transport par diffusion dans les pores (Auriault et Adler 1995, Auriault et Lewandowska 1996).

– L'échelle m : l'écoulement de Darcy, couplé avec le transport par dispersion/diffusion dans le milieu poreux (Lewandowska *et al.* 2004, Tran Ngoc et Lewandowska 2007).

La vitesse d'écoulement est imposée dans le sens vertical suivant l'axe x_2 (problème 2D) et x_3 (problème 3D) et les propriétés de soluté et du milieu sont les mêmes que ceux dans le cas non saturé.

Nous présentons les deux problèmes locaux aux limites à résoudre à l'échelle μ et m.

- **Echelle μ**

– Ecoulement d'eau

$$-\eta\Delta\boldsymbol{v}^{(0)} + \nabla p^{(1)} = -\nabla p^{(0)} \text{ dans } \Omega_p, \tag{4.19}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v}^{(0)} = 0 \text{ dans } \Omega_p, \tag{4.20}$$

$$\boldsymbol{v}^{(0)} = 0 \text{ sur } \Gamma_p, \tag{4.21}$$

où η [ML^{-1}T] est la viscosité dynamique de l'eau, $\boldsymbol{v}^{(0)}$ [L/T] est la vitesse à l'ordre $\mathcal{O}(0)$, $p^{(0)}$ et $p^{(1)}$ sont les pressions à l'ordre $\mathcal{O}(0)$ et $\mathcal{O}(1)$. Les indices « 0 » et « 1 » signifient les ordres de grandeur au sens des développements asymptotiques.

– Transport de soluté

$$\nabla\cdot\left[D_0\left(\nabla\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{I}\right)\right] - \boldsymbol{v}^{(0)}\cdot\nabla\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{v}^{(0)} - \frac{\left\langle\boldsymbol{v}^{(0)}\right\rangle}{n} \text{ dans } \Omega_p, \quad (n \text{ est la porosité}) \tag{4.22}$$

$$\left[D_0\left(\nabla\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{I}\right)\right]\cdot\boldsymbol{N} = 0 \text{ sur } \Gamma_p, \tag{4.23}$$

$$\langle\boldsymbol{\kappa}\rangle = \frac{1}{|\Omega_\mu|}\int_{\Omega_p}\boldsymbol{\kappa}\,d\Omega. \tag{4.24}$$

Les équations (4.19-4.21) et (4.22-4.24) sont résolues en tenant en compte de la condition de périodicité. Le tenseur de dispersion du milieu poreux est défini par

$$\boldsymbol{D}^{SP}_{disp} = \frac{1}{|\Omega_\mu|}\int_{\Omega_p}\left[D_0\left(\nabla\,\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{I}\right) - \boldsymbol{v}^{(0)}\boldsymbol{\kappa}\right]d\Omega, \tag{4.25}$$

avec

$$\boldsymbol{D}^{SP}_{disp} = \begin{bmatrix} D^{SP}_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & D^{SP}_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & D^{SP}_{//} \end{bmatrix} \tag{4.26}$$

où $D_{\perp}^{SP}$ est le coefficient de dispersion horizontale du milieu à simple-porosité dans la direction x_1 et x_2. $D_{//}^{SP}$ est le coefficient de dispersion longitudinale du milieu à simple-porosité dans la direction x_3.

- **Echelle** m

Le tenseur de dispersion dans le milieu à double-porosité est défini à partir de deux problèmes locaux aux limites (Eqs. 4.11 - 4.13).

$$\boldsymbol{D}_{disp}^{DP} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_1} \left[D_1 \left(\nabla \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{I} \right) - \mathbf{V}^{(0)} \boldsymbol{\chi} \right] \, d\Omega, \tag{4.27}$$

ou sous forme matricielle

$$\boldsymbol{D}_{disp}^{DP} = \begin{bmatrix} D_{\perp}^{DP} & 0 & 0 \\ 0 & D_{\perp}^{DP} & 0 \\ 0 & 0 & D_{//}^{DP} \end{bmatrix} \tag{4.28}$$

où $D_{\perp}^{DP}$ est le coefficient de dispersion horizontale du milieu à double-porosité dans la direction x_1 et x_2. $D_{//}^{DP}$ est le coefficient de dispersion longitudinale du milieu à double-porosité dans la direction x_3.

4.6.3 Résultats et discussions

Les calculs numériques ont été réalisés sous COMSOL Multiphysics. Nous présentons d'abord, Figure 4.18 l'allure du champs de la vitesse $\boldsymbol{v}$ et $\boldsymbol{V}$ et l'intensité de la composante verticale v_2 et V_3 à l'échelle μ et m de l'exemple 2D. On observe les comportements différents de la vitesse locale à deux échelles. La figure 4.19 présente les champs de κ_2 (exemple 2D) et κ_3 (exemple 3D) à l'échelle μ, pour des nombres de Péclet $\mathcal{P}e_{\mu}$=0,1 et 100. La figure 4.20 présente les champs de χ_2 (exemple 2D) et χ_3 (exemple 3D) à l'échelle m, pour $\mathcal{P}e_m$=1 et 1000. Ces nombres sont définis pour chaque échelle :

– Pour l'échelle μ :

$$\mathcal{P}e_{\mu} = \frac{\langle v_{pore} \rangle \; l_{\mu}}{D_0}, \quad \text{avec} \quad \langle v_{pore} \rangle = \frac{\langle v \rangle}{n}. \tag{4.29}$$

– Pour l'échelle m :

$$\mathcal{P}e_m = \frac{\langle v_{sab} \rangle \; l_m}{D_1}, \quad \text{avec} \quad \langle v_{sab} \rangle = \frac{\langle v \rangle}{\phi_1}. \tag{4.30}$$

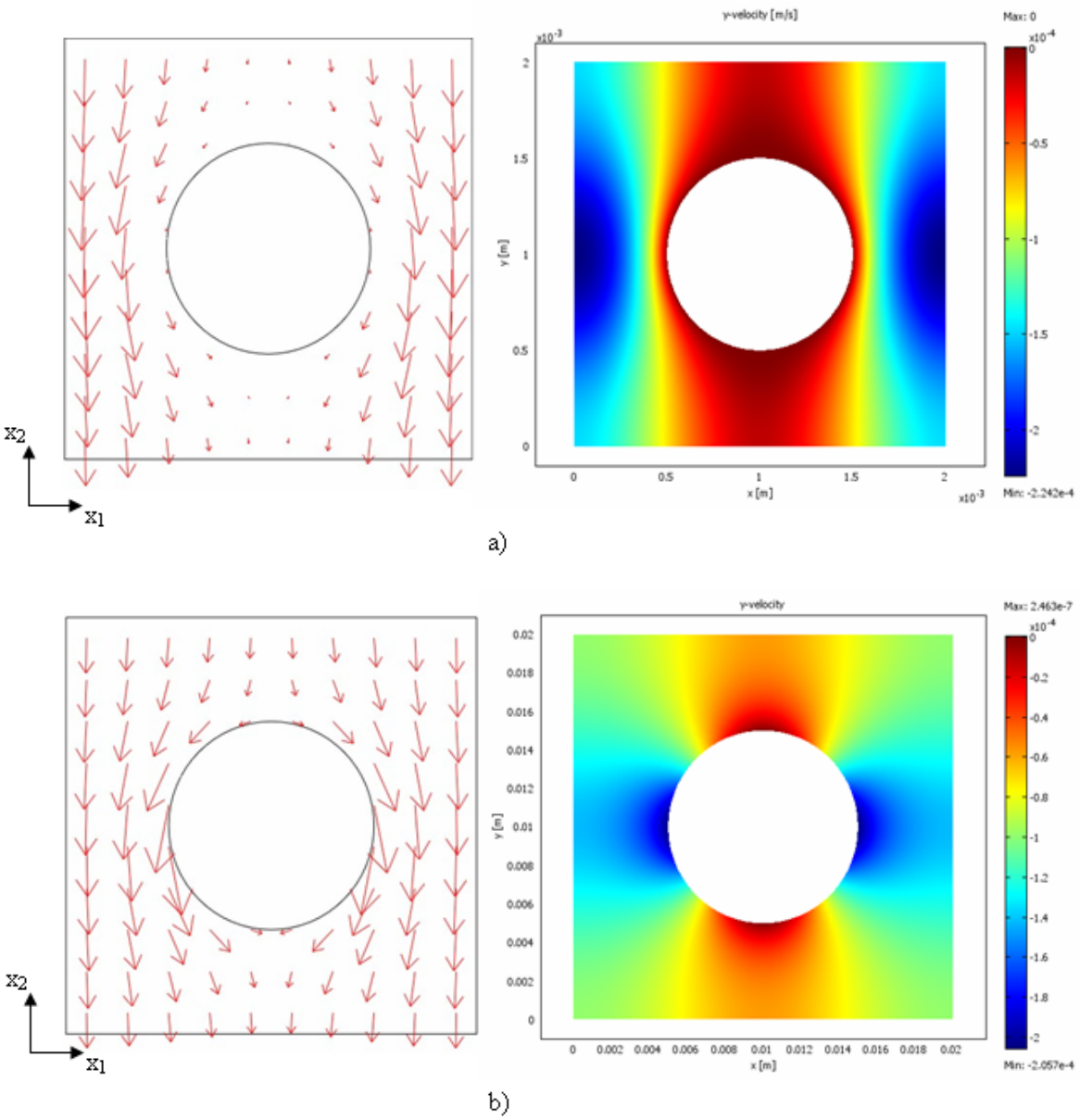


FIG. 4.18: a) l'échelle de pores μ : Champs du vecteur vitesse $\boldsymbol{v}$ et l'intensité de la composante verticale v_2 du vecteur $\boldsymbol{v}$; b) l'échelle de milieu poreux m : Champs du vecteur vitesse $\boldsymbol{V}$ et l'intensité de la composante verticale V_2 du vecteur $\boldsymbol{V}$.

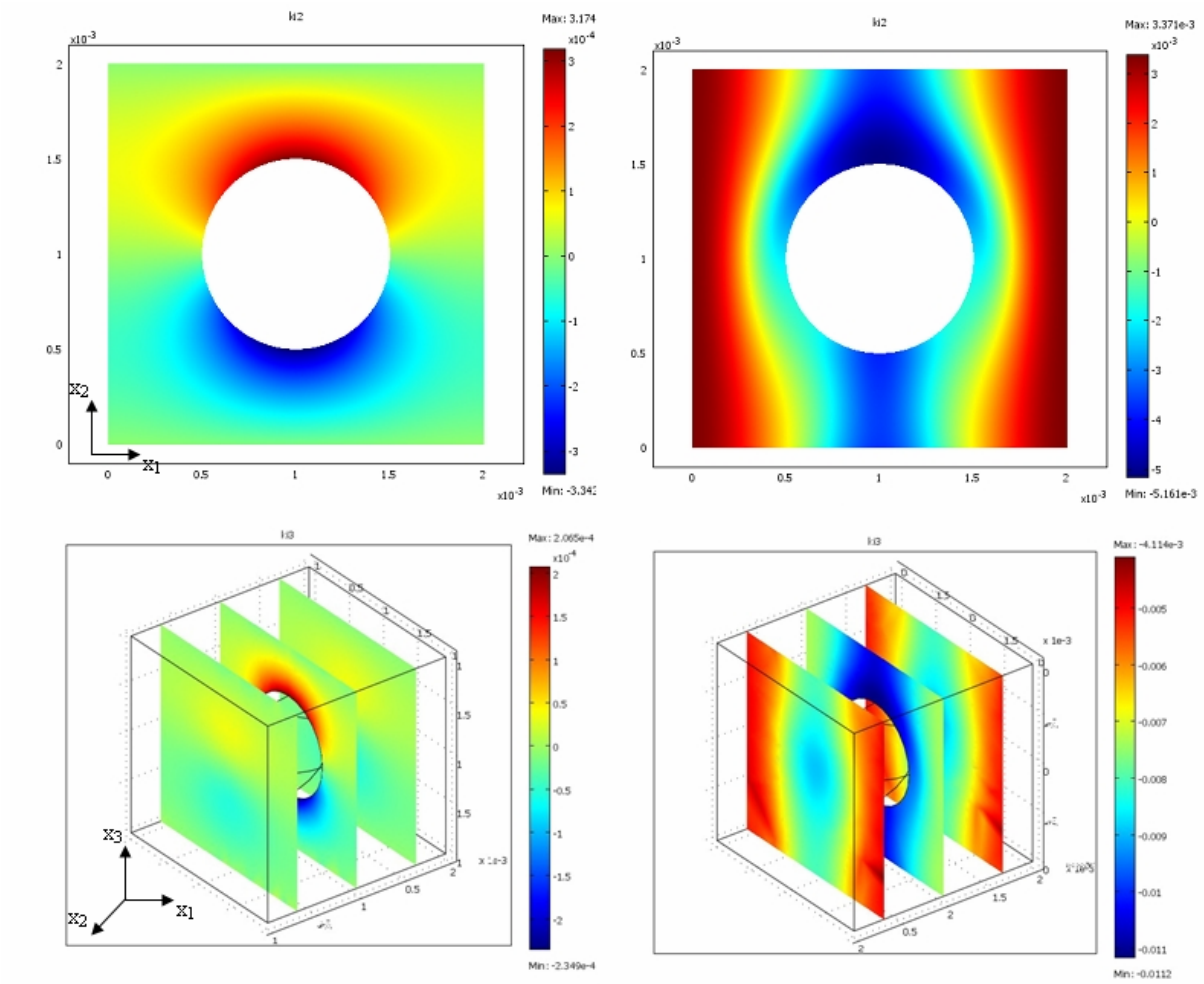


FIG. 4.19: Champs de κ_2 (exemple 2D) et κ_3 (exemple 3D) pour $\mathcal{P}e_\mu = 0{,}1$ et 100 à l'échelle μ.

Les résultats des calculs du tenseur de dispersion dans les milieux à simple-porosité et double-porosité saturés sont reportés respectivement sur les figures 4.21 et 4.22, en fonction des nombres de Péclet. Pour le même diamètre de l'hétérogénéité, $D_{//disp}$ est plus grand dans le cas 2D que dans le cas 3D. Ceci est valable pour le milieu à simple et à double-porosité. Le coefficient de dispersion longitudinale dans le milieu à double-porosité est supérieur à celui dans le milieu à simple-porosité (FIG. 4.23). La présence des hétérogénéités à l'échelle de Darcy (double-porosité) augmente $D_{//disp}$ par rapport au milieu poreux homogène (simple-porosité) pour la même vitesse imposée. Ce résultats est cohérent avec les résultats trouvés dans la littérature (Matheron et de Marsily 1980, Gelhar *et al.* 1992, Cherblanc *et al.* 2003).

Les dispersivités obtenues dans ces milieux sont résumées dans le tableau 4.3. L'homogénéisation par double changement d'échelles permet de confirmer l'augmentation de la dispersivité en milieu hétérogène par rapport à celle en milieu homogène (Cherblanc *et al.* 2003).

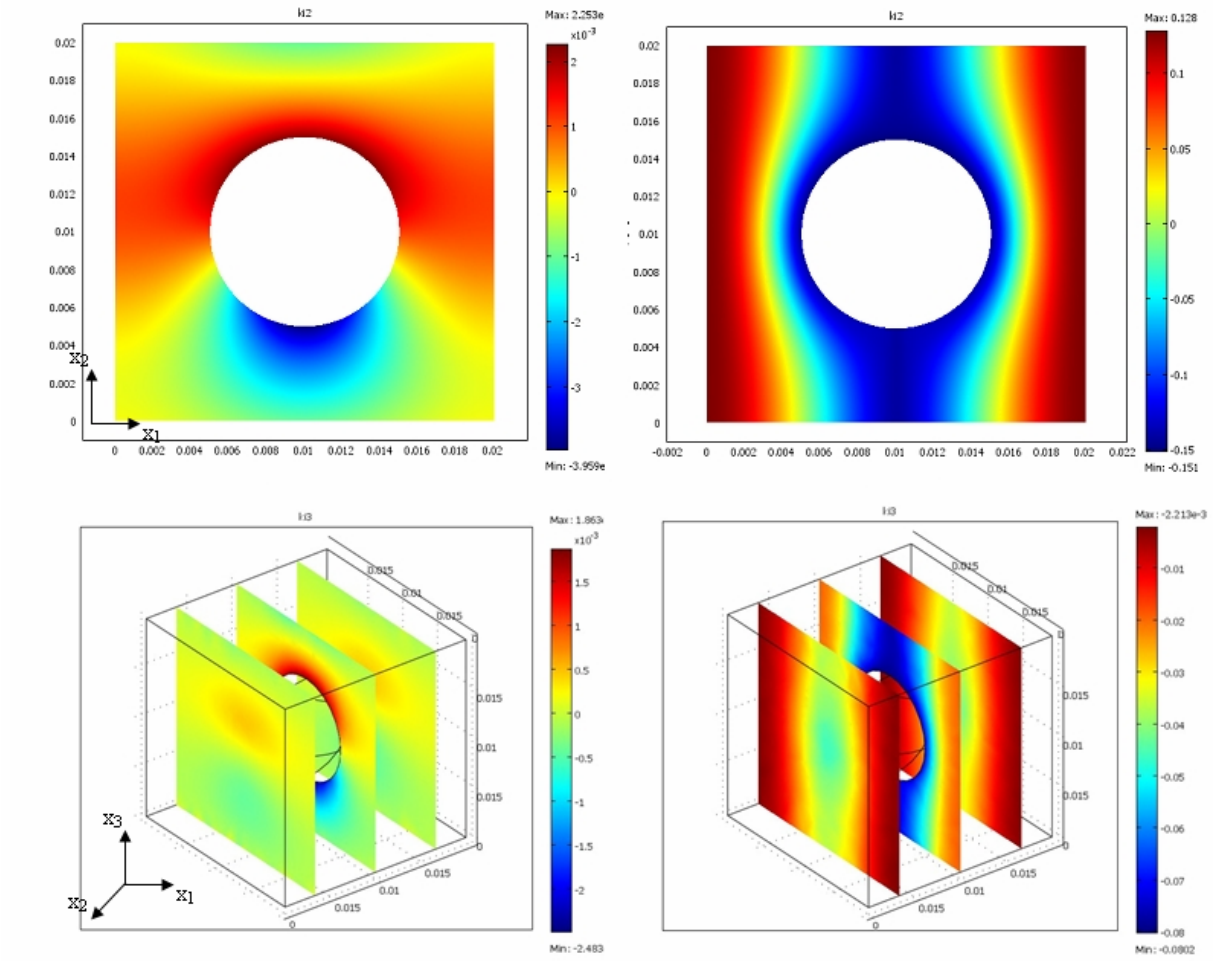


FIG. 4.20: Champs de χ_2 (exemple 2D) et χ_3 (exemple 3D) pour $\mathcal{P}e_m = 1$ et 1000 à l'échelle m.

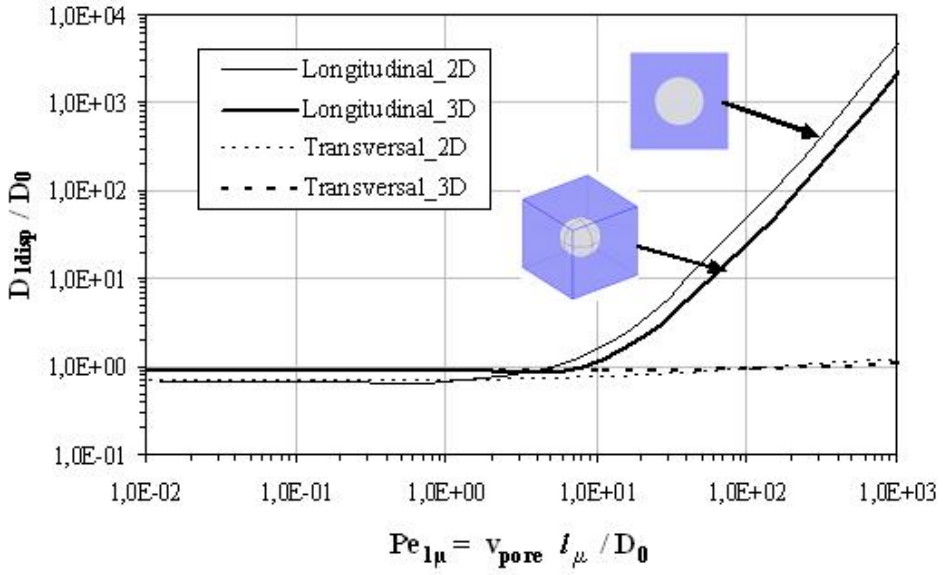


FIG. 4.21: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ normalisée par D_0 versus nombre Peclet $\mathcal{P}e_{l\mu}$ dans le milieu à simple-porosité saturé.

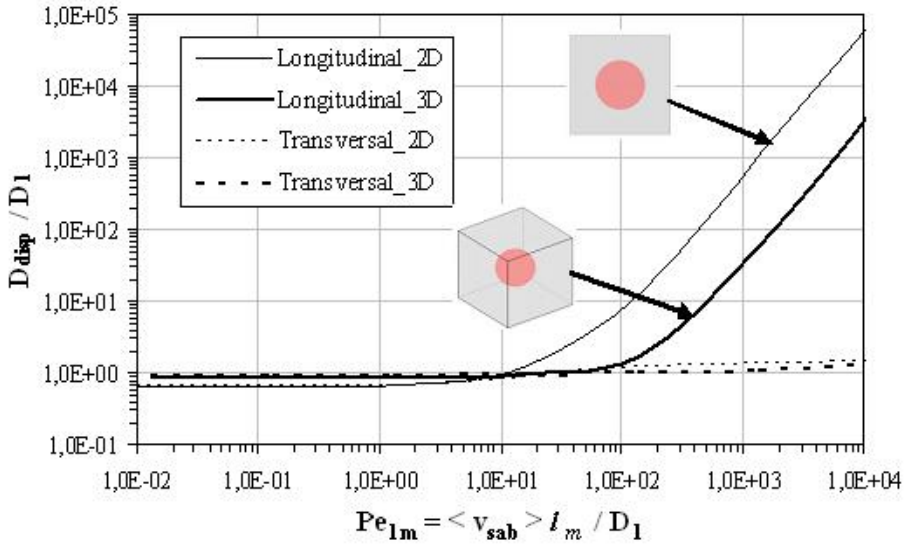


FIG. 4.22: Coefficient de dispersion longitudinale $D_{//disp}$ normalisée par D_1 versus nombre Peclet $\mathcal{P}e_{lm}$ dans le milieu à double-porosité saturé

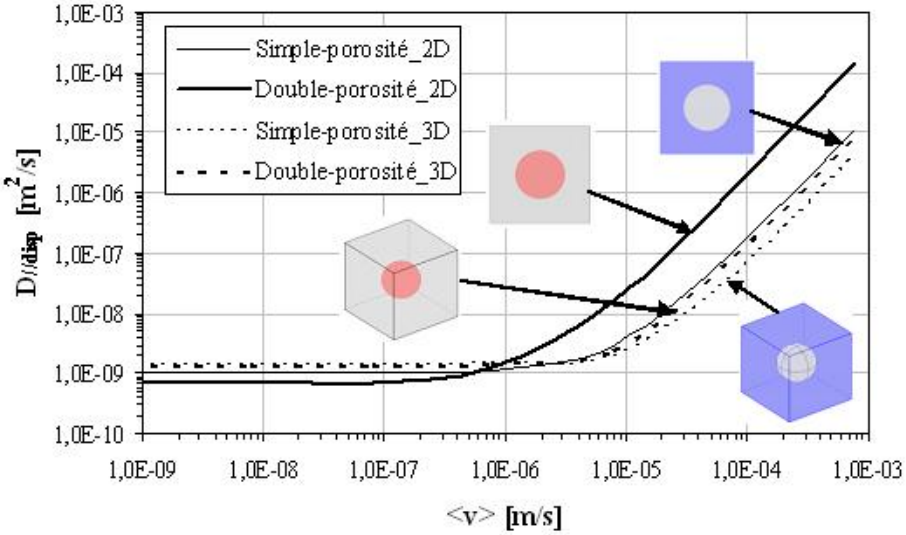


FIG. 4.23: Coeffcient de dispersion longitudinale dans le milieu à SP et DP saturé en fonction de la vitesse imposée.

Milieu	**Cas**	λ **[cm]**	d **de l'hétérogénéité [cm]**
Simple-porosité	2D	0,030	0,1
Double-porosité	2D	0,200	1
Simple-porosité	3D	0,006	0,1
Double-porosité	3D	0,010	1

TAB. 4.3: Dispersivité dans le milieu à SP et DP saturé.

4.7 Conclusion

Nous avons réalisé des calculs numériques du tenseur de diffusion effective/dispersion dans des milieux à double-porosité non saturé et saturé, en résolvant deux problèmes locaux aux limites couplés en conditions 2D et 3D. Les deux problèmes locaux sont obtenus en utilisant la technique d'homogénéisation. Dans le cas où le milieu à double-porosité est saturé, deux changements d'échelles successifs ont été effectués.

Cette étude a mis en évidence l'influence du degré de saturation et de la présence des hétérogénéités sur le tenseur de dispersion. Les conclusions suivantes peuvent être mise en exergue :

- Le tenseur de dispersion dépend de la vitesse d'écoulement, du coefficient de diffusion, du degré de saturation et de la microstructure du milieu ;
- Le coefficient de dispersion longitudinale augmente à mesure que la teneur en eau diminue pour la même vitesse ;
- La dispersivité dans le milieu non-saturé est plus grande que celle dans le milieu saturé, pour les mêmes vitesses de Darcy et de teneurs en eau.

Les dispersivités calculées sont inférieures aux tailles de l'hétérogénéité d'un ordre de grandeur avec sa fraction volumique faible. Elles pourront être comparées avec celles déterminées à partir des expériences présentées dans les chapitres 6 et 7.

Chapitre 5

Étude expérimentale et numérique de l'écoulement d'eau dans un milieu à double-porosité non saturé

5.1 Introduction

Ce chapitre présente l'étude expérimentale et numérique du drainage dans les milieux à simple-porosité (SP) et à double-porosité (DP). L'objectif du travail était double : *i)* comparer le comportement du drainage dans les deux types de milieux homogène et hétérogène ; *ii)* comparer les résultats expérimentaux obtenus pour le milieu à double-porosité avec la simulation numérique (code DPOR-1D, Thèse de Szymkiewicz 2004) dans le but de vérifier la validité du modèle de l'écoulement d'eau dans le milieu non-saturé à DP obtenu par l'homogénéisation. Une série d'expériences de drainage a été réalisée dans les colonnes du sable Hostun 38 et du milieu à DP (billes d'argile solidifiée - domaine de faible conductivité - arrangées périodiquement dans la matrice sableuse d'Hostun - domaine de forte conductivité). Au cours du drainage, la teneur en eau, la pression capillaire et le flux à la sortie de la colonne sont mesurés. Particulièrement, la teneur en eau est mesurée à l'intérieur de la colonne par la technique d'atténuation gammamétrique, grâce à l'équipement disponible au laboratoire TREFLE-Bordeaux.

Le modèle de l'écoulement d'eau développé dans le milieu à DP non saturé est vérifié numériquement (Lewandowska *et al.* 2004) et expérimentalement (Lewandowska *et al.* 2005). Toutefois

les données expérimentales des flux cumulés ne sont pas des critères suffisants pour permettre la validation du modèle, parce qu'ils résultent de conditions variant à l'intérieur du domaine considéré. De plus, du fait que l'effet d'hystérésis soit négligé dans le modèle, il est nécessaire de le valider dans d'autres conditions d'écoulement. La comparaison des résultats expérimentaux montre un bon accord avec des simulations numériques qui confirme la capacité de prédiction du modèle.

L'ensemble des résultats de cette étude a fait l'objet de l'article, intitulé « Water Drainage in Double-Porosity Soils : Experiments and Micro-Macro Modeling », publié dans ASCE, Journal Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2008, 134 (2), 231-243 (Lewandowska, Tran Ngoc, Vauclin et Bertin 2008), qui est présenté dans la dernière section de ce chapitre. Nous résumons brièvement ci-dessous les expériences, les principes du code DPOR-1D, ainsi que la modélisation numérique avec des éléments d'analyse complémentaire non publiés dans l'article.

5.2 Expériences de drainage dans le milieu à simple-porosité et à double-porosité

Nous avons utilisé lors de nos expériences trois types de milieux : *i)* sable d'Hostun, *ii)* milieu à DP formé du sable d'Hostun et de billes d'argile solidifié, *iii)* argile cuite. Ces matériaux décrits dans Lewandowska *et al.* (2005) et Lewandowska *et al.* (2008), sont détaillés dans le chapitre suivant.

Les tests de drainage ont été effectués dans une colonne de 60 cm de hauteur et de 6 cm de diamètre intérieur (50 cm utile). Les tensiomètres sont installés sur la paroi de la colonne. La porosité et la saturation du milieu sont mesurées par un dispositif mobile de gammamétrie. L'infiltration du milieu est effectuée à l'aide d'une pompe volumétrique à débit constant. La masse d'eau sortant de la colonne est mesurée en continu lors du drainage à l'aide d'une balance connectée à une centrale d'acquisition (Campbell Scientific) et à un ordinateur. L'ensemble du dispositif expérimental pour le test du drainage est présenté FIG. 5.1.

Il y a trois étapes principales dans la procédure expérimentale. La mise en place des milieux poreux (sable, argile cuite) et périodiques (DP) est présentée dans le chapitre 6. Après l'injection de CO_2, on pompe de l'eau dégazée depuis le bas de la colonne avec un débit constant pour saturer le milieu. Le drainage gravitaire débute par l'ouverture de deux valves d'entrée et de

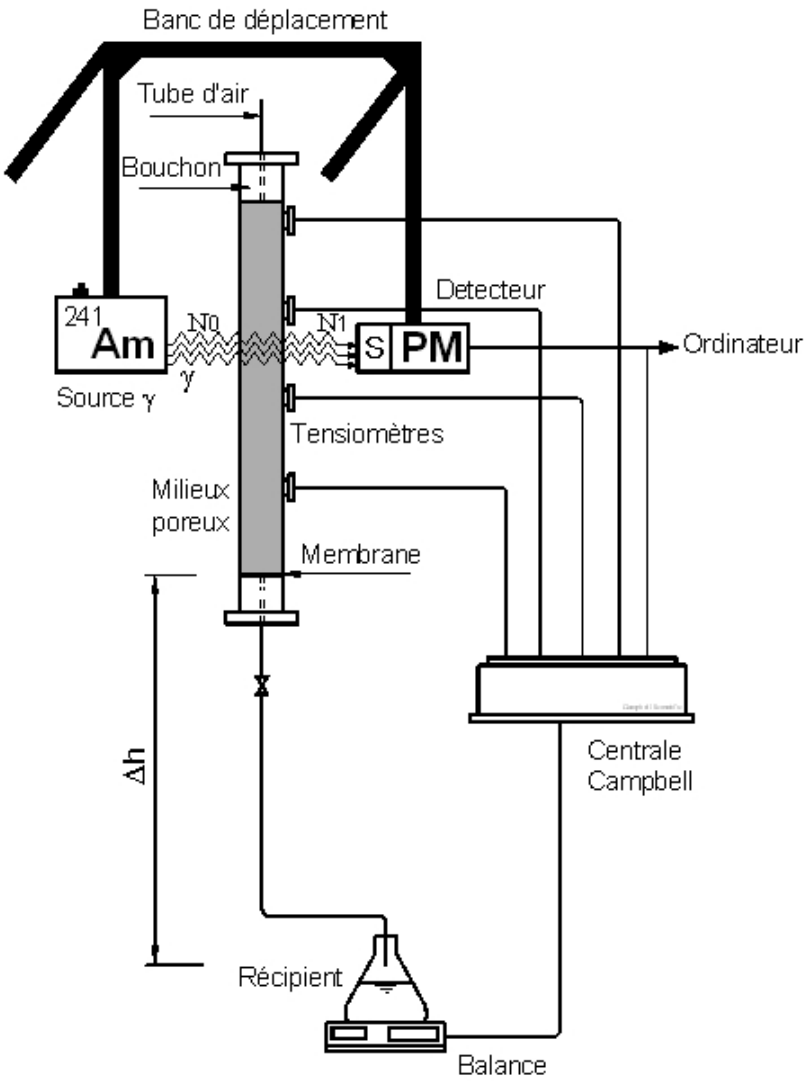


FIG. 5.1: Dispositif expérimental pour le test du drainage.

sortie en imposant des succions de -50 cm ou -85 cm d'eau. Pendant l'expérience, les paramètres physiques suivants sont mesurés :

- les teneurs en eau eau au cours de l'infiltration et du drainage ;
- la conductivité hydraulique à saturation du milieu poreux ;
- la saturation en eau au cours du drainage ;
- la masse d'eau à la sortie de la colonne durant le drainage ;
- la pression capillaire au niveau des tensiomètres en fonction du temps.

Les problèmes techniques étant survenus durant les expériences, seules les données avec une succion imposée -85 cm d'eau ont été utilisées pour la simulation numérique et la comparaison avec le modèle théorique. La stratégie expérimentale étant de réaliser les mêmes essais de drainage

pour les deux milieux poreux, (i. e. sable et double-porosité) afin de comparer le comportement de ces deux milieux et étudier l'influence de la double-structure. Les paramètres hydrodynamiques de deux matériaux (sable et argile) obtenus par des essais indépendants dans le sable et l'argile ont été utilisés dans le milieu à DP pour la comparaison entre les résultats numériques avec les observations. Notons que pour l'argile, la très forte pression d'entrée d'air n'a pas permis le drainage de la colonne.

Les résultats expérimentaux sont présentés dans l'article ci-joint.

5.3 Présentation succincte du code DPOR-1D

Dans le cadre de la thèse de Szymkiewicz 2004, le modèle macroscopique de l'écoulement à double-porosité non saturé a été implémenté dans un code appelé DPOR-1D (Fortran 90 sous Windows 2000/XP ou Unix système). La solution du modèle se compose de deux étapes principales, illustrées dans la figure 5.2.

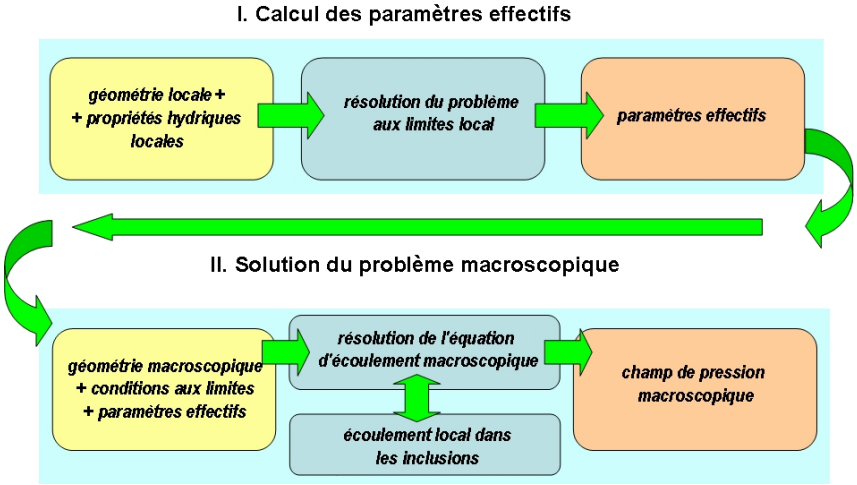


Fig. 5.2: Stratégie de la solution globale du code DPOR-1D.

La structure du code DPOR-1D permet de résoudre l'équation macroscopique 1D, couplée avec la solution du problème local 2D ou 3D (FIG. 5.3). A chaque noeud du maillage macroscopique est associé à une période représentative de la géométrie spécifique (FIG. 5.4).

La démarche mise en oeuvre pour résoudre l'équation macroscopique comprend plusieurs étapes :

– la discrétisation spatiale de l'équation macroscopique (Eq. 2. 59) ;

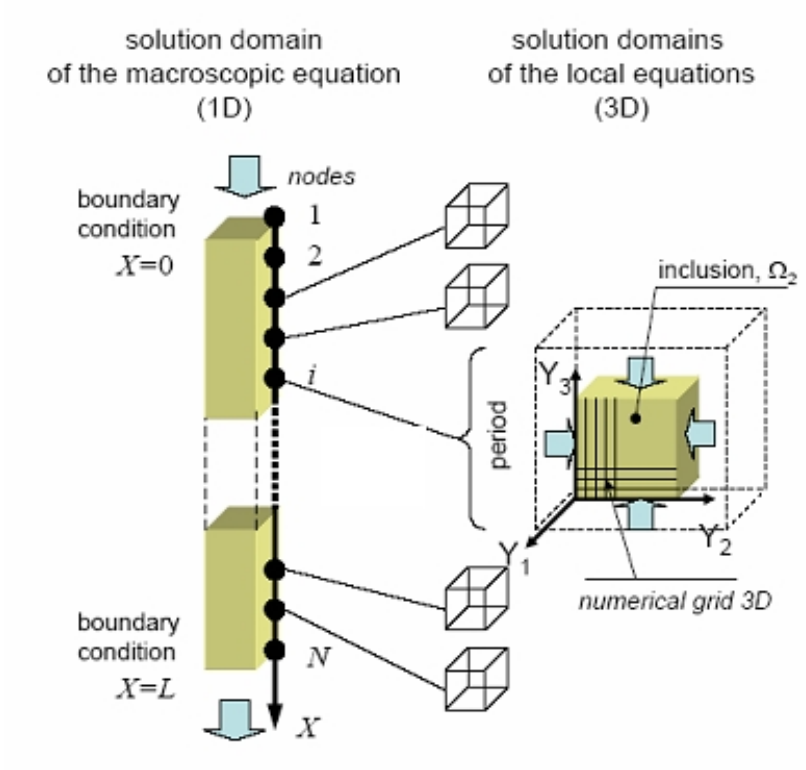


FIG. 5.3: Structure de la solution de couplage entre l'équation macroscopique et l'équation locale. (Szymkiewicz 2004)

- la transformation de l'équation aux dérivées partielles en une équation différentielle ordinaire par rapport au temps ;
- la discrétisation temporelle à chaque pas de temps, permettant d'obtenir un système d'équations algébriques qui sont fortement non linéaires par rapport à la pression capillaire.
- la résolution du système non linéaire par une méthode itérative qui permet de résoudre l'écoulement local dans les inclusions et déterminer le terme source Q.
- la solution du système algébrique résultant donne les valeurs des inconnues.

Le code DPOR-1D offre les choix des conditions initiales et aux limites. Les conditions initiales et aux limites utilisées dans les Eqs. (2. 66) - (2. 67) (chapitre 2) dans le domaine $0 \leq X \leq L$, sont les suivantes :

- Conditions initiales :

La condition initiale définit la distribution de la pression ou de la teneur en eau au début du processus ($t = 0$)

$$h(X, t = 0) = h_{init}(X) \quad \text{et} \quad h_2(X, Y, t = 0) = h_{init}(X) \quad \text{(pression locale)}, \tag{5.1}$$

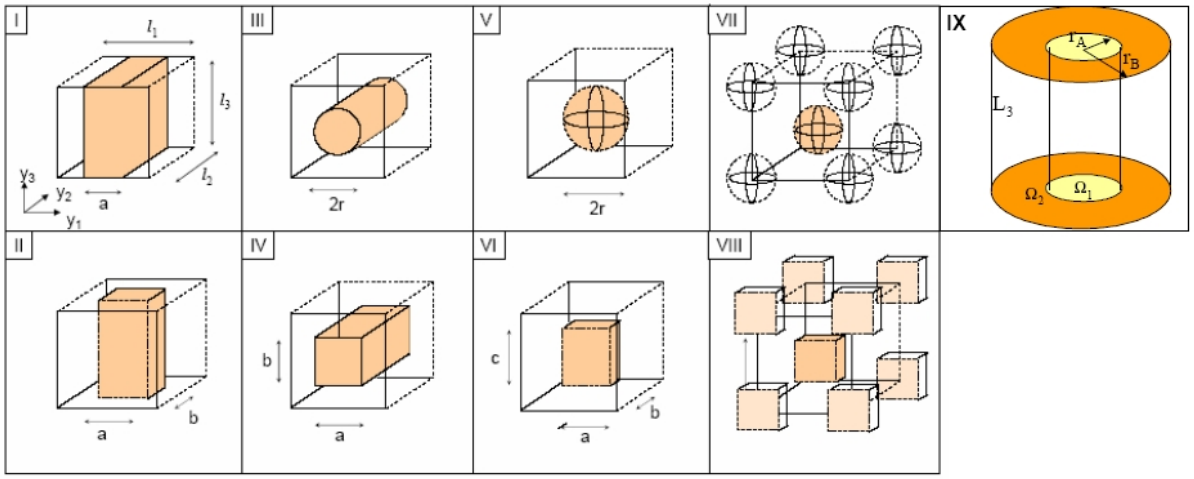


FIG. 5.4: Types de géométries périodiques utilisés dans le code DPOR-1D.

ou

$$\theta(X, t = 0) = \theta_{init}(X) \quad \text{et} \quad \theta_2(X, Y, t = 0) = \theta_{init}(X) \quad \text{(teneur en eau locale).} \tag{5.2}$$

- Conditions aux limites :

– A l'entrée du milieu :

$$h(X = 0, t) = h_{haut}(t), \tag{5.3}$$

ou

$$\left[-K\frac{\partial h}{\partial X} + K\right]_{X=0} = q_{haut}(t). \tag{5.4}$$

– A la sortie du milieu :

$$h(X = L, t) = h_{bas}, \tag{5.5}$$

ou

$$\left[-K\frac{\partial h}{\partial X} + K\right]_{X=L} = q_{bas}(t), \tag{5.6}$$

ou

$$h\left[\frac{\partial h}{\partial X}\right]_{X=L} = 0 \text{ (« free drainage ») et donc } q_{bas} = K. \tag{5.7}$$

où $q_{haut/bas}$ [L/T] sont le flux imposé en haut ou en bas du domaine.

Le code DPOR-1D a été étendu au cas DPOR-2D par Szymkiewicz *et al.* (2008).

5.4 Modélisation numérique

Les calculs numériques ont été effectués en utilisant le code HYDRUS-1D (Simůnek *et al.* 1998) pour le milieu à simple-porosité et le code DPOR-1D pour le milieu à double-porosité, respectivement. Les conditions aux limites et les conditions initiales correspondantes aux essais de drainage sont les suivantes :

- à $z = 0$ et $t > 0$: $K\left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1\right) = 0$ (K est remplacé par K^{eff} dans le milieu à DP) ;
- à $z = -L$ et $t > 0$: $h = -85$ cm d'eau ;
- pour $t \leq 0$, $h = 0$ dans tout le domaine (saturation).

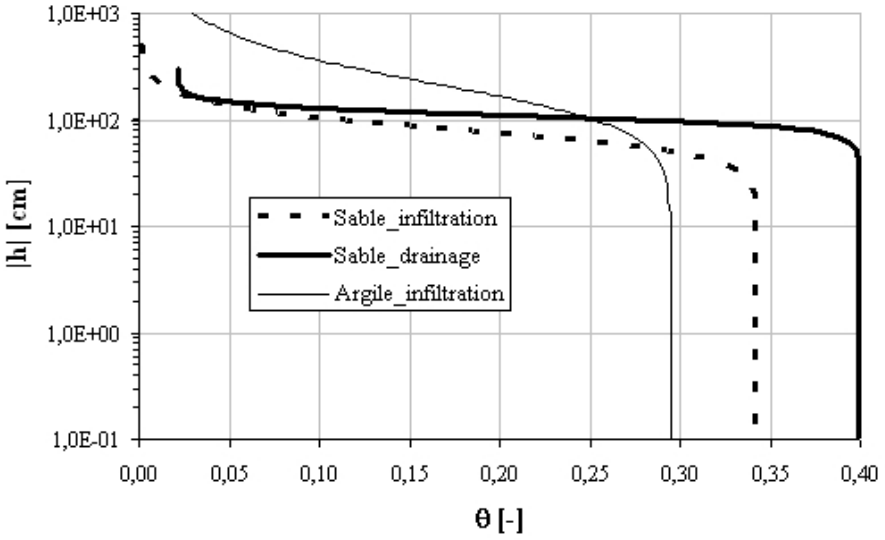
Dans le cas du drainage, les deux paramètres α et n de van Genuchten-Mualem (van Genuchten 1980) sont obtenus par une approche inverse basée sur l'ensemble des résultats d'un des tests sur le sable : 33 données pour $h(\theta)$; 15 données pour $\theta(t)$ et 81 données pour $q_{bas}(t)$. Les trois autres paramètres θ_S, θ_R et K_S ont été déterminés expérimentalement de façons indépendantes. L'ensemble des paramètres de van Genuchten-Mualem (van Genuchten 1980) est reporté dans le tableau 5.1. Les courbes de rétention et de conductivité hydraulique du sable en infiltration et en drainage, ainsi que pour l'argile en infiltration sont présentées FIG. 5.5.

Paramètres	**Sable** infiltration	**Sable** drainage	**Argile** infiltration
θ_R [-]	0	0,022	0
θ_S [-]	0,342	0,399	0,295
α [cm^{-1}]	1,380 $\times 10^{-2}$	0,931 $\times 10^{-2}$	6,050 $\times 10^{-3}$
n [-]	4,060	8,567	2,270
K_S [cm/s]	2,86 $\times 10^{-3}$	2,86 $\times 10^{-3}$	1,15 $\times 10^{-5}$

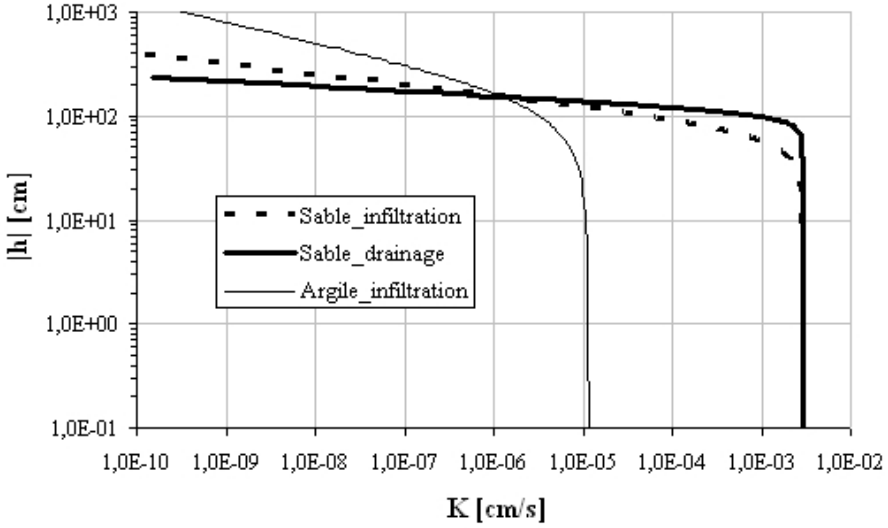
TAB. 5.1: Paramètres du modèle de van Genuchten-Mualem pour les deux matériaux.

Dans la procédure inverse, nous avons cherché le minimum de la fonction coût en changeant les différentes valeurs initiales pour une large gamme de n et α. On observe un minimum marqué par une croix pour $n = 8,567$ et $\alpha = 0,00931$ cm^{-1} (FIG. 5.6). Les paramètres hydrauliques du drainage du sable sont similaires à ceux de Beydoun et Lehmann (2006) qui les ont estimé également par méthode inverse à partir d'expériences de drainage.

La conductivité effective est calculée à partir de la solution du problème local aux limites, en utilisant, soit le code DPOR-1D, soit le code commercial Comsol Multiphysics (ComsolGroup 2006). La solution du problème local aux limites est présentée FIG. 5.7.



(a) Courbes de rétention.



(b) Courbe de conductivité hydraulique.

FIG. 5.5: Courbes des paramètres hydrodynamiques du sable et de l'argile cuite.

Il faut souligner que les paramètres hydrauliques des deux matériaux, déterminés à partir d'expériences réalisées séparément, ont été directement utilisés pour la simulation numérique du drainage dans le milieu à double-porosité. A l'aide du code DPOR-1D, l'équation macroscopique (2. 66, chapitre 2) est résolue dans les conditions de l'expérience de drainage, en couplage avec l'équation de l'écoulement local dans les sphères argileuses (2. 67, chapitre 2) avec la condition de continuité de la pression sur l'interface. Les comparaisons des teneurs en eau et des flux entre la simulation numérique et les mesures sont reportés dans Lewandowska *et al.* (2008) (voir FIGs.

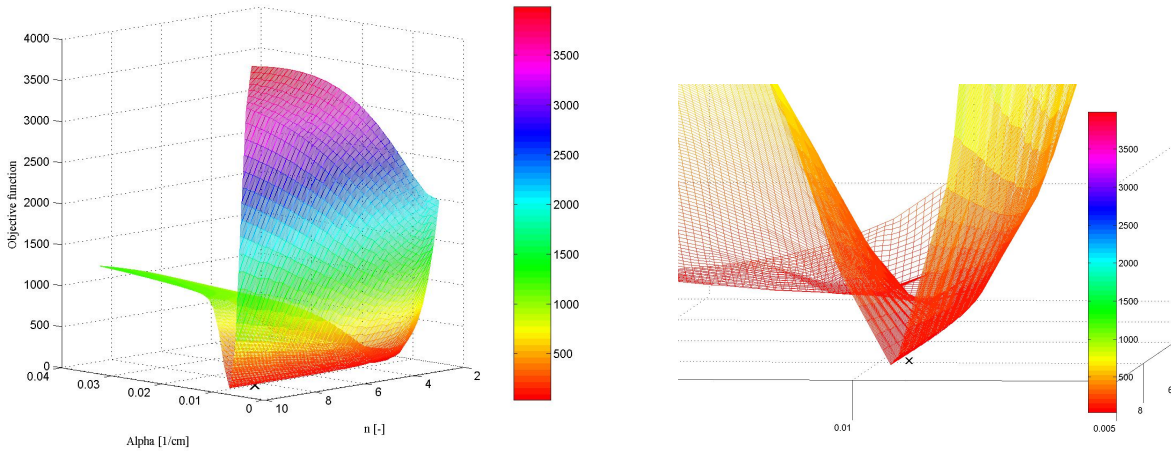


FIG. 5.6: Fonction coût obtenue par analyse inverse.

10 - 13 de l'article). La comparaison entre les pressions capillaires mesurées à deux profondeurs de la colonne et calculées numériquement est présenté Figure 5.8. Le bon accord constaté permet de valider le modèle d'écoulement à double-porosité développé.

5.5 Conclusion

Le modèle macroscopique de l'écoulement transitoire d'eau dans le milieu à double-porosité obtenu par la méthode d'homogénéisation apparaît pertinent d'après son bon accord avec une série d'expériences de drainage dans la colonne du sol à double-porosité. Pendant le drainage, les mesures de la teneur en eau et de la pression capillaire ont permis d'évaluer complètement le modèle théorique développé, car elles constituent des variables internes inconnues du problème aux limites déterminées, contrairement aux flux cumulés.

Cette étude a également mis en évidence expérimentalement et numériquement le rôle important des inclusions micro-poreuses dans la dynamique de l'écoulement, i. e. le retard du flux et la rétention d'eau dans la micro-porosité.

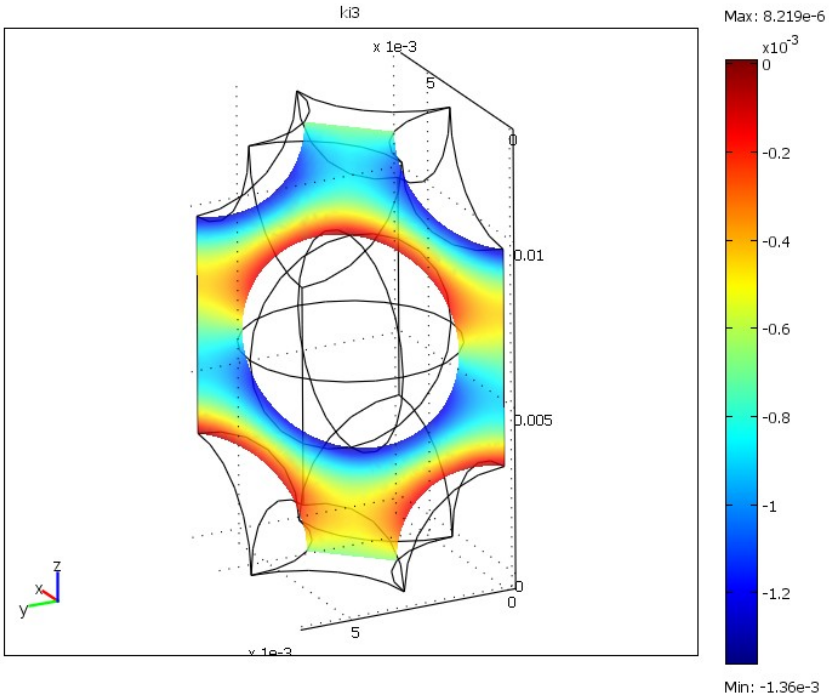


FIG. 5.7: Solution ξ_3 du problème local aux limites par Comsol Multiphysics (section orthogonale $y_1 = (0\,;\,0\,;\,0)\,;\,y_2 = (0\,;\,0\,;\,12,96)$ et $y_3 = (6{,}4\,;\,6{,}4\,;\,12{,}96)$). (unité en mm)

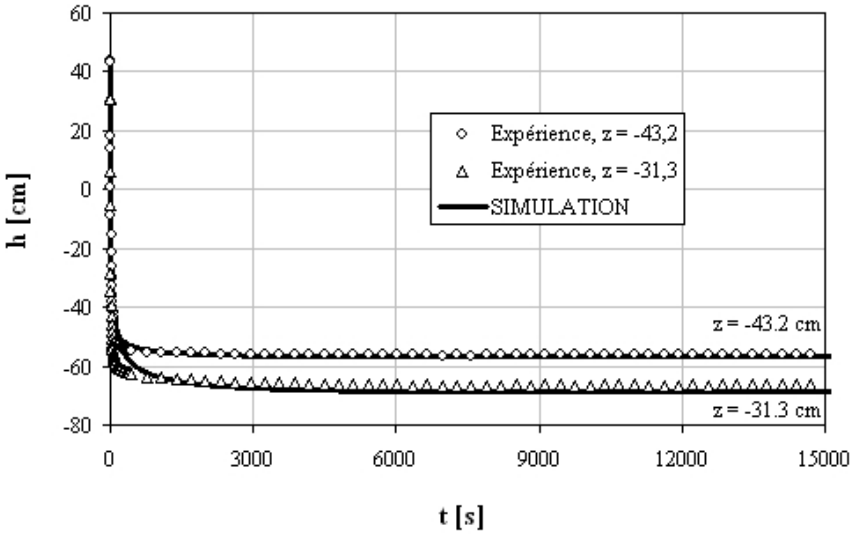


FIG. 5.8: Pression en fonction du temps dans le drainage du milieu à DP.

5.6 Article « Water Drainage in Double-Porosity Soils : Experiments and Micro-Macro Modeling »

Lewandowska, Tran Ngoc, Vauclin et Bertin 2008, ASCE, J. Geotech. and Geoenvir. Eng. (with permission from ASCE)

Water Drainage in Double-Porosity Soils: Experiments and Micro–Macro Modeling

Jolanta Lewandowska[1]; Tien Dung Tran Ngoc[2]; Michel Vauclin[3]; and Henri Bertin[4]

Abstract: This paper presents the experimental validation of a macroscopic model of unsaturated flow in double-porosity soils, which was developed using the asymptotic homogenization method. The model was implemented into a code which enables micro–macro coupled calculations of macroscopically one-dimensional and microscopically three-dimensional problems. A series of drainage experiments were carried out in a column filled with a double porosity medium. The porous medium is composed of Hostun sand and porous spheres made of sintered clay, periodically distributed in the sand. The characteristic pores sizes of the two media differ by two orders of magnitude. During the experiments the water content evolution inside the column, the capillary pressure, and the flux at the bottom of the column were measured. The numerical simulations results showed a good agreement with the experimental data, confirming the predictive ability of the model. The experimental and numerical evidence of the influence of the microporous inclusions on the flow dynamics (flux retardation, water retention in the microporosity), is clearly shown.

DOI: 10.1061/(ASCE)1090-0241(2008)134:2(231)

CE Database subject headings: Unsaturated soils; Nonuniform flow; Drainage; Microstructure; Heterogeneity; Scale effect; Gamma rays; Model verification; Porous media.

Introduction

Modeling of unsaturated water flow in soils is still a problem of great interest because of geotechnical and geoenvironmental applications, such as construction of earth dams and dikes, protection of groundwater resources from chemical pollution, or securing waste landfill. The recent advances concern two main difficulties related to this topic: The heterogeneity of the soils and the nonlinearity of the involved processes. Both features are at the origin of the development of macroscopic models which are able, on one hand, to take into account the microstructure of soils and their influence on the water flow dynamics, and on the other hand, to simplify the mathematical description in order to make it tractable from a numerical point of view.

Natural soils are complex heterogeneous structures. A particular class of heterogeneous soils, which are characterized by the existence of two distinct subregions with highly contrasted hydraulic properties, can be named double-porosity media. In this case, one of the subdomains is associated with high hydraulic conductivity (interaggregates, fractures or fissures) and another one with low conductivity (aggregates, porous matrix). In practice it is difficult (even impossible) to represent the heterogeneous microstructure of such soils, therefore macroscopic models which replace these porous media by equivalent homogeneous continuum have to be considered.

Modeling water flow in unsaturated double-porosity soils was the subject of much research in the scientific literature. Different approaches were adopted in order to address the question of nonstandard behaviors of this soil type, which cannot be described by the classic single-porosity model (Richards 1931). The phenomenological models were recently reviewed by Šimůnek et al. (2003). These models are based on the concept of two overlapping subregions, initially proposed by Barenblatt et al. (1960). Generally, models of this type are called two-regions/two-equations models, because every region is represented by an equation according to the different conceptualizations and an exchange term links the two equations. When water flow is assumed to occur only in the macroregion (interaggregates, fractures or fissures) and is stagnant in the microregion (intraaggregates, porous matrix), we have the dual-porosity model or mobile-immobile model (van Genuchten and Wierenga 1976). In this model the immobile region is responsible for the water exchange, which is defined by the difference of the effective water saturations and a first-order rate coefficient. The dual-porosity model is considered as the "classic dual-porosity model" by Brouyère (2006). As the assumption of uniform water content in the microporosity is questionable from the physical point of view (Zurmuhl and Durner 1996), an adjustment of the dual-porosity model called "dynamic dual-porosity model" was recently proposed by Brouyère (2006). Gerke and van Genuchten (1993a,b)

[1]Assistant Professor, Laboratoire Sols, Solides, Structures-Risques (3S-R), UMR 5521, CNRS, UJF, INPG, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (corresponding author). E-mail: jolanta.lewandowska@hmg.inpg.fr

[2]Ph.D. Student, Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement (LTHE), UMR 5564, CNRS, UJF, INPG, IRD, BP 53, Grenoble Cedex 09, France.

[3]Directeur de Recherche, Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement (LTHE), UMR 5564, CNRS, UJF, INPG, IRD, BP 53, Grenoble Cedex 09, France.

[4]Directeur de Recherche, Laboratoire Transferts, Ecoulements, Fluides, Energétiques (TREFLE), UMR CNRS 8508, Univ. de Bordeaux, 33405 Talence Cedex, France.

Note. Discussion open until July 1, 2008. Separate discussions must be submitted for individual papers. To extend the closing date by one month, a written request must be filed with the ASCE Managing Editor. The manuscript for this paper was submitted for review and possible publication on November 14, 2006; approved on June 21, 2007. This paper is part of the ***Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering***, Vol. 134, No. 2, February 1, 2008. ©ASCE, ISSN 1090-0241/2008/2-231–243/$25.00.

developed the dual-permeability model, in which the Richards equation is written for each subdomain and the mass transfer term is assumed to be proportional to the pressure head difference between the two subdomains. This means that water flow occurs not only in the macropores, but also in the micropores. This approach requires knowledge of water retention and hydraulic conductivity functions for both porous regions, as well as the hydraulic conductivity function of the fracture-matrix interface (Šimůnek et al. 2003). The expressions of the exchange term for the two-region models were also proposed by Barker (1985), Dykhuizen (1990), and Zimmerman et al. (1993). The verification of the dual-porosity/permeability model was carried out, for example, by performing a series of upward infiltration experiments on undisturbed soil column (Šimůnek et al. 2001). Although these models were able to reproduce the nonequilibrium behavior in a particular case, the general definition of the range of their validity was not given. Therefore, they cannot directly be applied to other situations (other materials, other flow conditions). The dual-permeability models were also developed for fractured rock and their complete overview can be found in Doughty (1999) and Doughty and Karasaki (2004). Another type of description is proposed in the MACRO model of Jarvis (1994). The water flow is described by the kinematic wave equation (German and Beven 1985) in the more conductive subregion, whereas the Richards equation is applied in the soil matrix. The water exchange between micro- and macropores is assumed to be proportional to the saturations difference.

An alternative approach with respect to the above-cited phenomenological models is the upscaling by applying the homogenization methods. Quintard and Whitaker (1988, 1990) used the volume average method to derive a macroscopic model for two-phase flow in heterogeneous media. This model was validated by experiments performed on two different types of nodular media (continuous sand matrix with sandstone inclusions and sandstone matrix with sand inclusions) (Bertin et al. 1993). Another type of upscaling is the asymptotic homogenization method. By applying this method, Arbogast et al. (1990) and Douglas et al. (1997) proposed models of single-phase flow in double-porosity media. Showalter and Su (2002) developed a model of partially saturated flow in a composite poroelastic medium. Lewandowska et al. (2004) presented a model of transient flow in unsaturated double-porosity soil. The resulting model was successfully verified by performing a series of numerical tests of water infiltration, the results of which were close to the fine-scale reference solutions. The formal mathematical proof of existence and uniqueness of the solution of this double-porosity model was presented by Mikelic and Rosier (2004). A good agreement between the model and experimental data of infiltration tests performed in a double-porosity soil was reported by Lewandowska et al. (2005). However, these data were limited to the cumulative fluxes at the inlet and the outlet to the column. As they can result from various conditions inside the column, they are not sufficient for definitive validation of the model. What is needed is the information on the water content and capillary pressure (the unknowns of the problem) inside the column. Also, the fact that hysteresis is neglected in the model makes it necessary to validate the model in other flow conditions like drainage, in which the response of the double-porosity medium can be different.

The aim of the present paper is the experimental validation of the double-porosity model (Lewandowska et al. 2004) in the case of water drainage, including the measurements of water content and capillary pressure inside the column during the flow. A series of one-dimensional experiments were carried out in a column filled with a porous medium composed of sand and sintered clayey spheres embedded in a periodic manner. The experimental results are compared with the double-porosity model, which was implemented into a code (Szymkiewicz and Lewandowska 2006), enabling the micro–macro coupled calculations of unsaturated water flow.

Experiments

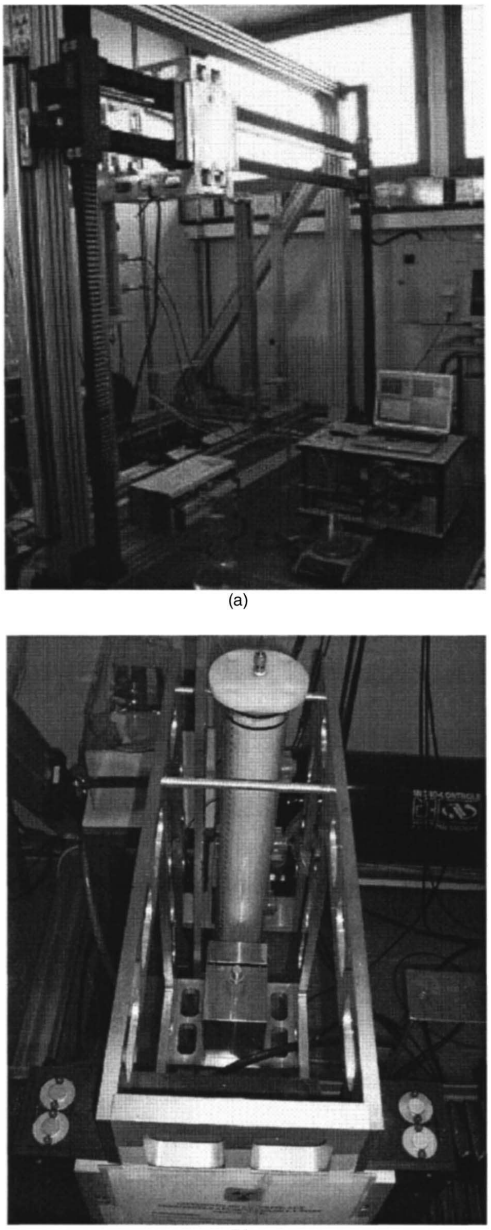
Experimental Strategy

The experimental strategy consisted of performing the same type of drainage tests in two materials, namely, homogeneous sand and double-porosity medium (sand with porous inclusions of spheres made of sintered clay). The aim of this strategy was twofold. First, compare the behavior of these two porous media, in order to investigate the influence of the double structure. Second, once the individual hydraulic parameters of the two components (sand and sintered clay), were known, apply the homogenization technique developed in Lewandowska et al. (2004) in order to predict the behavior of the double-porosity medium and compare it with experimental observations. Each test was repeated twice. The hydraulic parameters of sand were determined by an inverse analysis based on the results of one of the drainage tests (Test 1). The other drainage test (Test 2) was used as a validation of these parameters by performing direct calculations. Concerning the sintered clay material, previous results obtained in the case of infiltration (Lewandowska et al. 2005) were used, as we were not able to perform drainage experiments in this material. The clay being of low permeability (high air-entry pressure), a gravity drainage on a short core (available) was not possible. Finally, the two experiments performed in the double-porosity medium were interpreted individually and experimental data compared with the double-porosity model simulation.

Experimental Setup

The experimental setup consisted of a column, equipped with a tube at its bottom, allowing the application of a negative pressure. The inner diameter of the column was 6 cm and its total height was 60 cm. The column was installed in a rig (Fig. 1) moving the gamma ray attenuation device (Lewandowska et al. 2006). The following quantities were measured during the experiments: The volumetric water content (θ), the capillary pressure (h), and the cumulative mass of water drained out of the column (F). The water content was measured by the gamma ray attenuation technique (Corey et al. 1970; Gharbi et al. 2004) that is based on the selective attenuation of the solid and fluid phases. The mass of water drained from the column was measured by a balance. The data were registered every 5 s and transferred to a computer via a datalogger (Campbell Scientific Ltd CR 10 X).

The experimental protocol consisted of four principal stages. First, the porous medium was packed in the column. Each layer of the medium was mechanically compacted and its porosity was controlled. Then, the column was filled up with several pore volumes of CO_2 in order to drive out the air and attain full initial water saturation. After that, water was allowed to infiltrate into the column from the bottom and to push out CO_2. The principal step of the experiment started after the water saturation was reached. It consisted of the drainage of water at a constant capillary pressure (Δh) imposed at the bottom of the column.



(a)

(b)

Fig. 1. The experimental setup: (a) complete equipment; (b) gamma ray mobile platform with the column

Drainage Experiments in Sand

In the experiments we used the Hostun sand HN38 that is a fine calibrated quartz sand (Flavigny et al. 1990). The grain distribution of the sand was relatively uniform with the mean grain diameter of 162 μm (Lewandowska et al. 2005). The sand was compacted. Two drainage experiments (Tests 1 and 2) were performed. In each case the capillary pressure applied at the bottom was the same and equal to −0.85 m, Table 2.

Table 1. Hydraulic Parameters of the Van Genuchten–Mualem Model for the Two Materials

Material	θ_S (—)	θ_R (—)	α (m^{-1})	n (—)	K_S ($m\,s^{-1}$)
Hostun sand	0.399	0.022	9.31×10^{-1}	8.567	2.86×10^{-5}
Sintered clay	0.295	0	6.05×10^{-1}	2.27	1.15×10^{-7}

It was assumed that the sand hydraulic properties were adequately described by the van Genuchten–Mualem (Mualem 1976; van Genuchten 1980) equations

$$\theta(h) = \theta_R + (\theta_S - \theta_R)[1 + (\alpha|h|)^n]^{-m} \quad (1)$$

for the water retention curve, and

$$K(h) = K_S[1 - (\alpha|h|)^{n-1}\{1 + (\alpha|h|)^n\}^{-m}]^2[1 + (\alpha|h|)^n]^{-m/2} \quad (2)$$

for the unsaturated hydraulic conductivity. θ_R and θ_S [—] =residual and saturated volumetric water content, respectively; K_S=hydraulic conductivity at saturation [$L\,T^{-1}$]; α[L^{-1}]; n [—]; and m [—], (with $m=1-1/n$) are empirical constants.

The retention curve $h(\theta)$ was measured directly at the end of the drainage experiments, once the hydrostatic equilibrium was reached. Then, an inverse procedure using the HYDRUS-1D code (Šimůnek et al. 1998) was used to determine the parameters of Eqs. (1) and (2). To overcome the nonuniqueness problem, the number of fitting parameters was reduced to two (α and n), as the three others (θ_S, θ_R, and K_S) were determined from other experiments (Lewandowska et al. 2006). In the inverse analysis the $h(\theta)$ data, as well as the water content versus time $\theta(t)$ at fixed depths z and the cumulative water flux at the bottom of the column $F(t)$ from Test 1, were used. The total number of input data (of equal weight) was equal to 129: 33 data points for $h(\theta)$, 15 data points for $\theta(t)$ and 81 data points for $F(t)$. The resulting adjusted parameters are: $\alpha=9.31\times10^{-1}$ m^{-1} and $n=8.567$, whereas the values of the remaining (fixed) parameters are: $\theta_S=0.399$ m^3/m^3, $\theta_R=0.022$ m^3/m^3, and $K_S=2.86\times10^{-5}$ m/s, Table 1. In Fig. 2 the isolines of the objective function as a function of the parameters α and n are plotted. The objective function is of valley type. The bottom of the valley is slightly tilted. This behavior is often reported in the literature, and is associated with the correlation of the parameters. The minimum point is marked by a cross. As can be seen, it is not well defined. However, as we investigated a large spectrum of parameters and we repeated the search for various initial values it can be assumed that this fitting is the best that can be obtained using the van Genuchten—Mualem model. The water retention $\theta(h)$ and the hydraulic conductivity $K(h)$ curves of the Hostun sand are presented in Fig. 3.

The obtained hydrodynamic functions were used to perform the direct calculations of drainage in the Hostun sand for Test 2. The comparison between the calculated and measured cumulative and instantaneous water fluxes at the bottom of the column is presented in Fig. 4 (the experimental results for Test 1 are also shown). A good agreement can be observed at the beginning of the drainage process whereas after about 5000 s the calculated cumulative flux diverges slightly from the experimental values [Fig. 4(a)]. Moreover, the characteristic time of the phenomenon is not precisely reproduced, as we observed an abrupt interruption of flow, whereas the model predicts a continuous but very slow increase of the cumulative water flux. The experimental behavior suggests that the threshold-type hydraulic functions should be

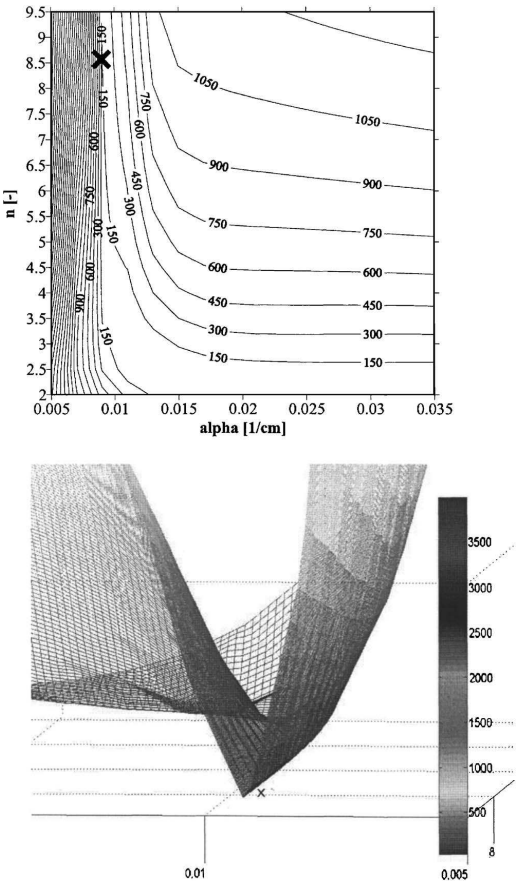


Fig. 2. Inverse analysis for sand: contour lines and surface of the objective function (the minimum is indicated by a cross mark)

used. However, we were limited by the inverse analysis proposed by commercial codes and the implemented van Genuchten—Mualem model, as the inverse analysis is a problem itself, beyond the scope of the paper.

The calculated and measured water content are compared in Figs. 5–7. The comparison requires a comment. Measurement of the water content using the gamma ray attenuation technique is not instantaneous. It takes about 5,000 s to perform 33 measurements along the column. Each value of the calculated water content profile corresponds to a position in the column and a time of measurement at that point. It means that the whole profile cannot be treated as an instantaneous picture of the distribution of the water content in the column at time t. In Fig. 5 a good agreement between the calculated and measured initial and final water content profiles can be seen. In Fig. 6 the profiles of the water content variations between the initial saturated value and the transient value $\Delta\theta=\theta_S-\theta(t)$ are plotted. The observed scatterings can be explained by the difficulties of measuring a transient process. Another kind of interpretation of the same data is shown in Fig. 7, where the measured evolution of the water content at three positions in the column is compared with the calculated values. A

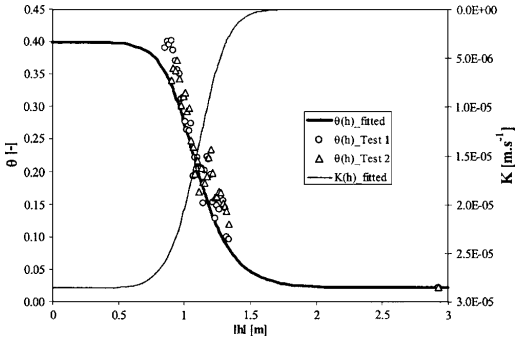


Fig. 3. Hydrodynamic properties of the Hostun sand. The curves $\theta(h)$ (bold line) and $K(h)$ (fine line) were fitted by the van Genuchten–Mualem model using the inverse analysis.

good agreement is observed for the first and the second points of measurement, and worse for the third. This trend is seen in both tests. These tests differ in the direction of measurement (Test 1: From the top to the bottom; Test 2: From the bottom to the top). This fact indicates the accumulation of errors due to the noninstantaneous measurement.

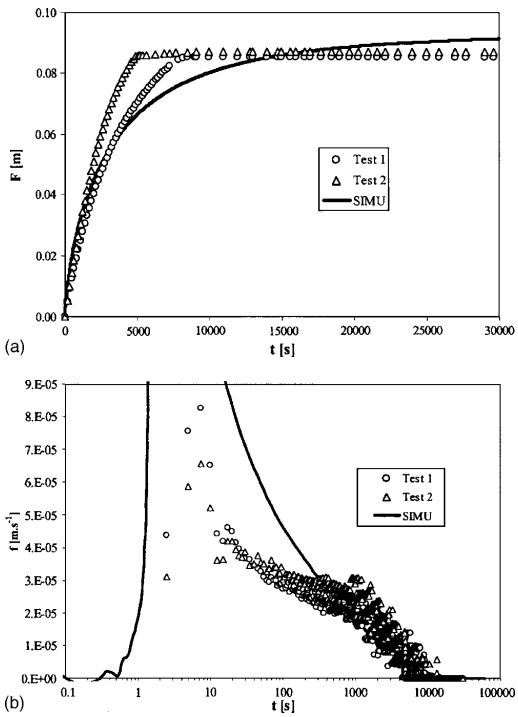


Fig. 4. Time evolution of calculated (lines) and measured (symbols) values of cumulative (a) and instantaneous (b) water fluxes at the bottom of the sand column

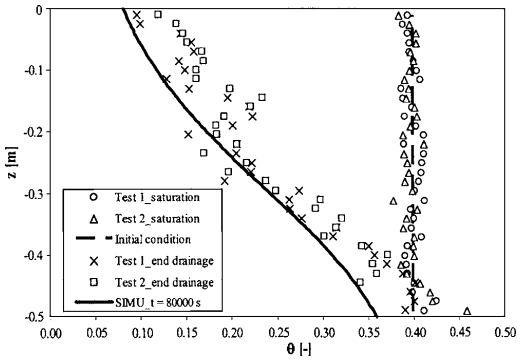


Fig. 5. Calculated (lines) and measured (symbols) water content profiles at the initial condition (saturation) and the end of the experiment in the sand column

Drainage Experiments in the Double-Porosity Medium

The double-porosity medium used in the experiments was a periodic arrangement of spheres (mean diameter of 6.4 mm) made of sintered clayey material, embedded in the Hostun sand HN38. The clayey spheres were homogeneous without a skin effect due to reduced porosity (Fig. 8). The pore size distribution was very narrow, with a mean pore of 0.7 μm (Lewandowska et al. 2005). The total porosity of the sintered clay material obtained from the mercury porosimetry was $\phi_m=0.376$. The skeleton specific density was $\rho_s=3{,}001\ \mathrm{kg/m^3}$ and its dry bulk density $\rho_d=1{,}880\ \mathrm{kg/m^3}$. The column was gradually and carefully filled with sand and spheres layer after layer. The mass of each layer and the energy of compaction were controlled. The obtained periodic microstructure of the double-porosity medium is presented in Fig. 9. For the spheres the parameters previously obtained from infiltration tests (Lewandowska et al. 2005) were used. It was assumed that the possible error is negligible, as it was shown that the unsaturated water flow in double-porosity medium is primarily governed by the macroporosity (Lewandowska et al. 2004). The hydraulic parameters of the van Genuchten–Mualem model for the sintered clay are reported in Table 1.

Two experiments of drainage of the double-porosity medium (Test 3 and Test 4) at constant capillary pressure head (−0.85 m) imposed at the base of the column were performed. Their main characteristics are given in Table 2. The same experimental protocol as for the sand column was followed. The experiments took longer time than in sand, because of the presence of microporosity. Thanks to the gamma ray attenuation technique, the saturation of the double porosity medium was well controlled. It was achieved after about 32 h, against 14 h in sand for the same pumped water rate.

Note that for the reason of comparison the porosity of sand in the double-porosity medium was kept the same as in the case of the experiments carried out in the homogeneous sand. We measured the water content inside the column and the cumulative flux at the bottom of the column during the whole experiment.

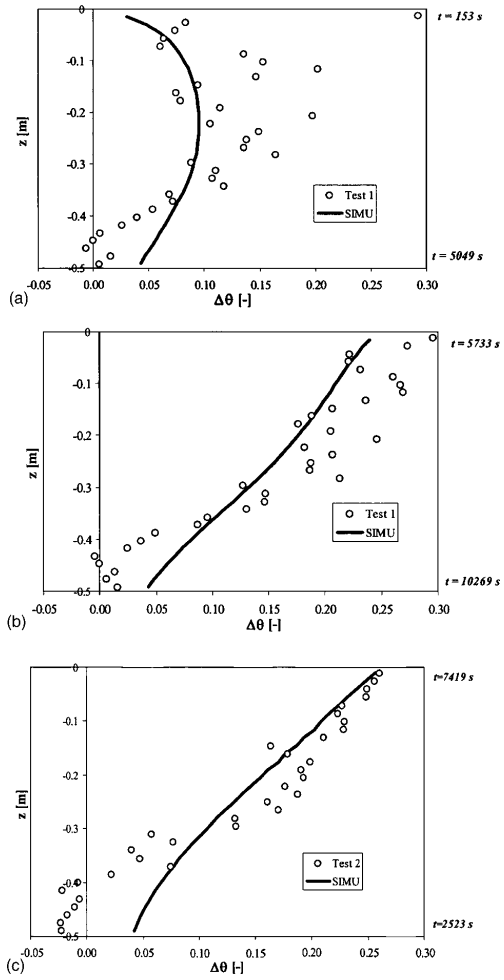


Fig. 6. Calculated (lines) and measured (symbols) profiles of the water content variations between saturation and transient profiles: $\Delta\theta=\theta_S-\theta(t)$ in the sand column: (a) Test 1: $t=153-5{,}049$ s; (b) Test 1: $t=5{,}733-10{,}269$ s; and (c) Test 2: $t=2{,}523-7{,}419$ s

Micro–Macro Modeling of Unsaturated Water Flow in the Double-Porosity Medium

Macroscopic Model

Modeling unsaturated water flow in the double-porosity medium should take into account the contrast between the hydrodynamic parameters, which comes from the double structure at the microscopic level. Such a model can be obtained by applying the asymptotic homogenization method (Bensoussan et al. 1978; Sanchez-Palencia 1980; Auriault 1991). It consists of two coupled equations: One equation describing the water flow in the macroporosity (Ω_M), and one equation concerning the local flow

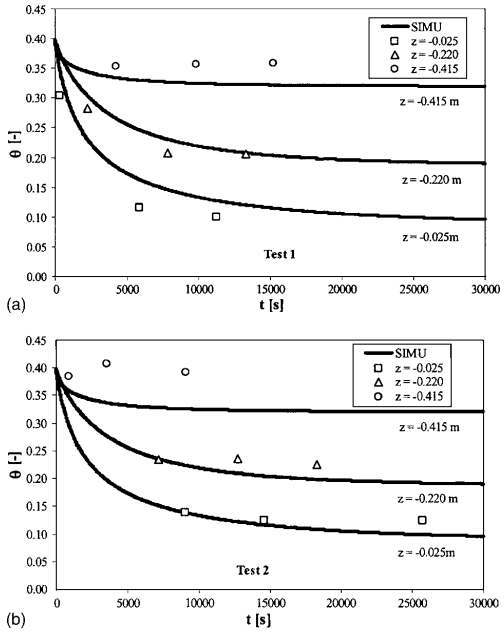


Fig. 7. Calculated (lines) and measured (symbols) water content versus time at different depths in the sand column: (a) Test 1; (b) Test 2

in the microporosity domain (Ω_m). They are written as follows (Lewandowska et al. 2004):

$$C^{\text{eff}}(h_M)\frac{\partial h_M}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}^{\text{eff}}(h_M)(\nabla h_M + \vec{e}_3)) + Q(h_M, t) = 0 \quad (3)$$

$$C_m(h_m)\frac{\partial h_m}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}_m(h_m)\,\nabla\, h_m) = 0 \text{ in } \Omega_m \quad (4)$$

where h_M and h_m [L]=capillary pressure heads in the macro- and the microporosity, respectively; C^{eff}=effective retention capacity

Table 2. Main Characteristics of the Experiments Carried out in Sand and Double-Porosity Media

	Sand		Double-porosity medium	
Characteristics	Test 1	Test 2	Test 3	Test 4
Effective length of the column, L (m)	0.502	0.501	0.503	0.504
Porosity of sand, ϕ_M	0.396	0.399	0.386	0.389
Mean porosity of the double-porosity medium, ϕ				
• By weighting			0.339	0.340
• By gamma attenuation technique			0.359	0.353
Volumetric fraction of sand, w_1			0.483	0.484
Volumetric fraction of sintered clay spheres, w_2			0.517	0.516
Capillary pressure imposed at the bottom of the column, Δh (m)	−0.85	−0.85	−0.85	−0.85

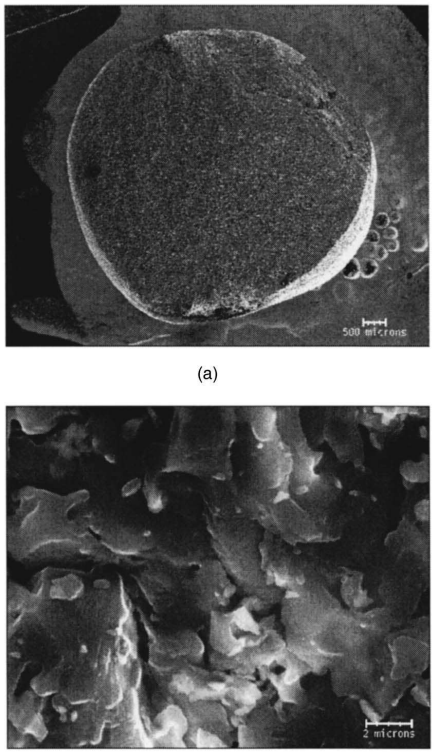


Fig. 8. Scanning electron microscopy image of the sintered clay material: (a) ×10; (b) ×5,000

of the double-porosity medium; C_m [L^{-1}]=retention capacity in the microporosity domain; $\mathbf{K}^{\text{eff}}$ [$L\,T^{-1}$]=effective hydraulic conductivity of the double-porosity medium; $\mathbf{K}_m$ [$L\,T^{-1}$]=hydraulic conductivity in the microporosity domain; and $\vec{e}_3$ [L]=unit vector oriented positively upwards. Eq. (3) is written in global coordinates, whereas Eq. (4) is in local coordinates. The coupling term $Q\ (h_M, t)$ in Eq. (3) corresponds to the rate of variations of the average water content in the microporosity domain. It is expressed as

$$Q(h_M, t) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_m} C_m \frac{\partial h_m}{\partial t} d\Omega_m = \frac{\partial \langle \theta_m \rangle}{\partial t} \quad (5)$$

The boundary conditions for Eq. (3) are the conditions imposed at the macroscopic boundaries, whereas the boundary condition for Eq. (4) is the continuity of the capillary pressure at the macro and microporosity interface Γ

$$h_M = h_m \quad \text{on } \Gamma \quad (6)$$

The model includes two effective parameters $\mathbf{K}^{\text{eff}}$ and C^{eff}, which are defined as follows:

$$\mathbf{K}^{\text{eff}}(h_M) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega_M} \mathbf{K}_M(h_M)(\nabla\vec{\chi} + \mathbf{I})d\Omega \quad (7)$$

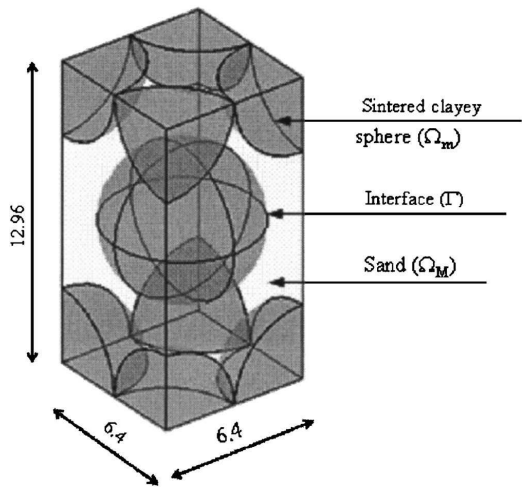


Fig. 9. Period geometry of the double-porosity medium (units in mm)

$$C^{\text{eff}}(h_M) = w_1 C_M(h_M) \tag{8}$$

where $\mathbf{K}_M$ [L T^{-1}] and C_M [L^{-1}]=unsaturated hydraulic conductivity and retention capacity of the macroporous domain (Ω_M), respectively; w_1=volumetric fraction of Ω_M in the period Ω; and $\mathbf{I}$=identity matrix. The vector function $\vec{\chi}$ is a solution of the local boundary value problem (or closure problem), resulting from the homogenization process. This problem is defined as follows:

$$\nabla \cdot (\mathbf{K}_M(h_M)\ (\nabla\vec{\chi} + \mathbf{I}) = 0 \quad \text{in } \Omega_M \tag{9}$$

with the zero-flux boundary condition on the interface Γ

$$\mathbf{K}_M(h_M)(\nabla\vec{\chi} + \mathbf{I}) \cdot \vec{N} = 0 \tag{10}$$

where $\vec{N}$=unit vector normal to Γ, and the periodicity on the external boundaries of the period and the zero-volume average condition. For more details the reader can refer to Lewandowska et al. (2004).

Numerical Solution

The double-porosity model described by Eqs. (3)–(5) requires a particular strategy of numerical solution as both equations are highly nonlinear and coupled. The simultaneous solution in the macro- and microdomains was previously proposed in the literature for other problems [see, for example, Pruess and Narasihman (1982), Huyakorn et al. (1983)]. In the case of experiments reported in the paper, both problems (macroscopic and microscopic) are one dimensional. The problem was solved using the two scale finite difference method (Lewandowska et al. 2004; Szymkiewicz and Lewandowska 2006). First, the macroscopic domain was discretized. Then, each macroscopic node was associated with a local-scale numerical grid, representing the inclusion. The calculations were performed simultaneously at these two scale levels, with the transfer of information at each time step. The main characteristics of the numerical solution are the following: The mixed (θ-h) formulation of the flow equations, the implicit scheme of time integration, the Newton method for solving the nonlinear equations, and time step adjusted automatically to meet the accuracy and stability requirements. The initial and boundary conditions were:

- For $t \leq 0$: $h=0$ within the whole domain (saturation).
- At $z=0$ and for $t>0$: $K^{\text{eff}}\ (\partial h/\partial z+1)=0$ (zero flux at the top of the column).
- At $z=-L$ and for $t>0$, $h=-0.85$ m of water.

Effective Hydraulic Parameters of the Double-Porosity Medium

In order to calculate the effective conductivity tensor, the local boundary value problem [Eqs. (9) and (10)] in the period domain (Fig. 9) was solved, using the commercial code COMSOL Multiphysics. In our particular case, only the χ_3 component was needed, as we were interested in the vertical component K_{33} of the conductivity tensor. According to expressions (7) and (8), the effective conductivity and effective capillary retention capacity of the double-porosity medium are, respectively

$$K^{\text{eff}}(h) = 0.330 K_M(h) \tag{11}$$

and

$$C^{\text{eff}}(h) = 0.483 C_M(h) \tag{12}$$

where $K_M(h)$ and $C_M(h)$=corresponding hydraulic properties of sand.

Comparison between Numerical Results and Measurements for the Double-Porosity Medium

The experimental data of Test 3 and Test 4 are compared with the numerical solution of the unsaturated water flow equation in the double-porosity medium.

The cumulative flux is one of the criteria of comparison of the results presented in our paper. The other ones are the distribution of the water content and the evolution of the capillary pressure in the column during the process. We believe that the data concerning the water content and the capillary pressure distribution (and their time evolution), are more pertinent for comparisons than the cumulative flux. The reason is twofold: (1) the water content and the capillary pressure are unknowns, and are direct solutions of the boundary value problem, whereas the cumulative flux at the boundary follows from the posttreatment; (2) as a measured quantity the cumulative flux integrates all the errors in the domain and in time, therefore it appears less reliable than data inside of the domain.

Cumulative and Instantaneous Water Fluxes

The time evolutions of the cumulative and instantaneous water fluxes at the bottom of the column are presented in Fig. 10. It can be seen that the total amount of drained water measured at the end of the experiments (4.95×10^{-2} m) differs from the calculated one (5.52×10^{-2} m) by about 10%, which is considered to be acceptable. Another element of comparison is the characteristic time of the process. The model does not fit it correctly, as in the case of sand. Whereas the measured values indicate that the water apparently ceased to flow out of the column at $t \approx 10{,}000$ s, the calculated cumulative flux continues to increase slightly with time. This can be explained by means of the same arguments as were discussed in case of the sand. On the other hand, the transient simulated and observed cumulative fluxes are in good agree-

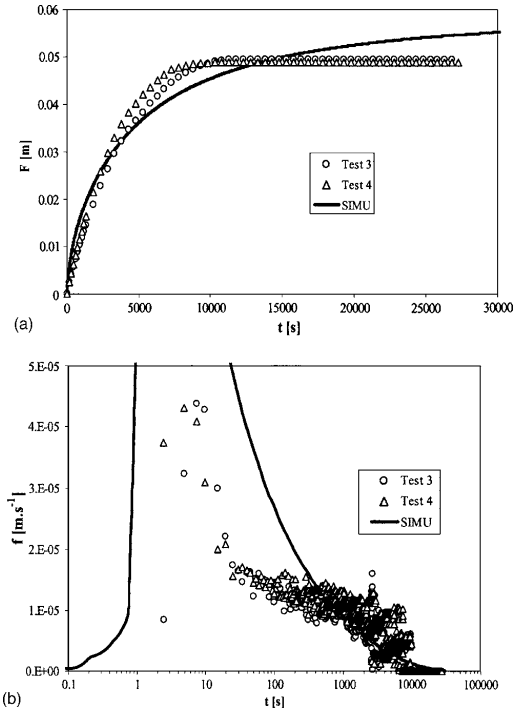


Fig. 10. Double-porosity medium: Time evolution of calculated (line) and measured (symbols) cumulative values of cumulative (a) and instantaneous (b) water fluxes at the bottom of the column. [Lewandowska et al. (2006), with permission.]

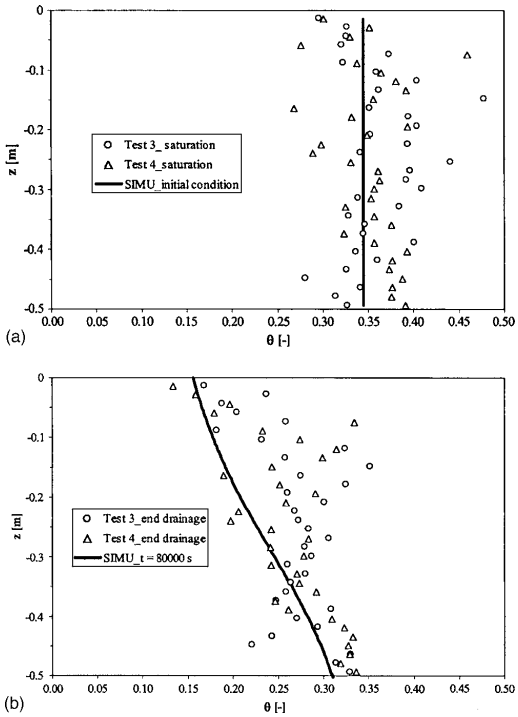


Fig. 11. Double-porosity medium: calculated (line) and measured (symbols) volumetric water content profiles. (a) Initial and (b) final. [Lewandowska et al. (2006), with permission].

ment. Also, the instantaneous water flux is fairly well described; the scatterings could be related to the precision of measurement (0.7×10^{-5} m/s).

Water Content Distribution

The calculated initial and final water content profiles are compared with the experimental observations in Fig. 11. The calculated water content is an average value of the water content in the micro- and macroporosity domains, taking into account the volumetric fraction of each domain. It clearly appears that the measurements are much more scattered than in the case of sand (Fig. 5). This is due to two main reasons: (1) The presence of heterogeneities of periodic structure and characteristic size of 12.96 mm (Fig. 9), and (2) the size of the gamma ray collimated beam (5 mm) that provides an "average" measured value. It can be noticed that the measuring technique is not well adapted to the experience. Nevertheless, relatively good agreement in terms of average values can be observed.

Fig. 12 shows the water content profile variations, i.e., the difference between the initial and current state of water content during the transient phase of flow. It can be seen that the observations are scattered around the simulation line. The negative values observed at the bottom of the column in the first profiles give us information about the order of magnitude of the total measurement precision, which is about 3% (in water content). We can also argue about the capacity of the outlet of the column to evacuate water instantaneously. In Fig. 13 the measured time evolution of the water content at three positions in the column is compared with the calculated values. Fig. 13(a) deals with Test 3, in which the measurements started at the top of the column, whereas Fig. 13(b) presents Test 4, in which the measurements started at the bottom. A good agreement is observed in both cases at two of three positions in the column, showing the influence of the measurement protocol (see the discussion for sand).

In order to quantify the performance of the model all results dealing with the water content (prediction versus observation) are collected in Fig. 14. We chose arbitrarily a band of ±0.05 as a limit value of prediction precision. The four water content profiles, corresponding to different times, are characterized by the following percentage of results lying within the precision band: 80, 70, 64, and 64%. The decreasing order means that the quality of the prediction of the water content decreases with time. However, one has to take into account that the initial state at saturation is characterized by 80%, which means the initial dispersion of the water content measurements. Therefore, we believe that in the transient phase the model works relatively well. Another way to evaluate the model performance consists in calculating the following indicators (Tedeschi et al. 2006):

$$\text{Mean bias,} \quad \text{MB} = \frac{\sum_{i=1}^{N} (O_i - P_i)}{N} \tag{13}$$

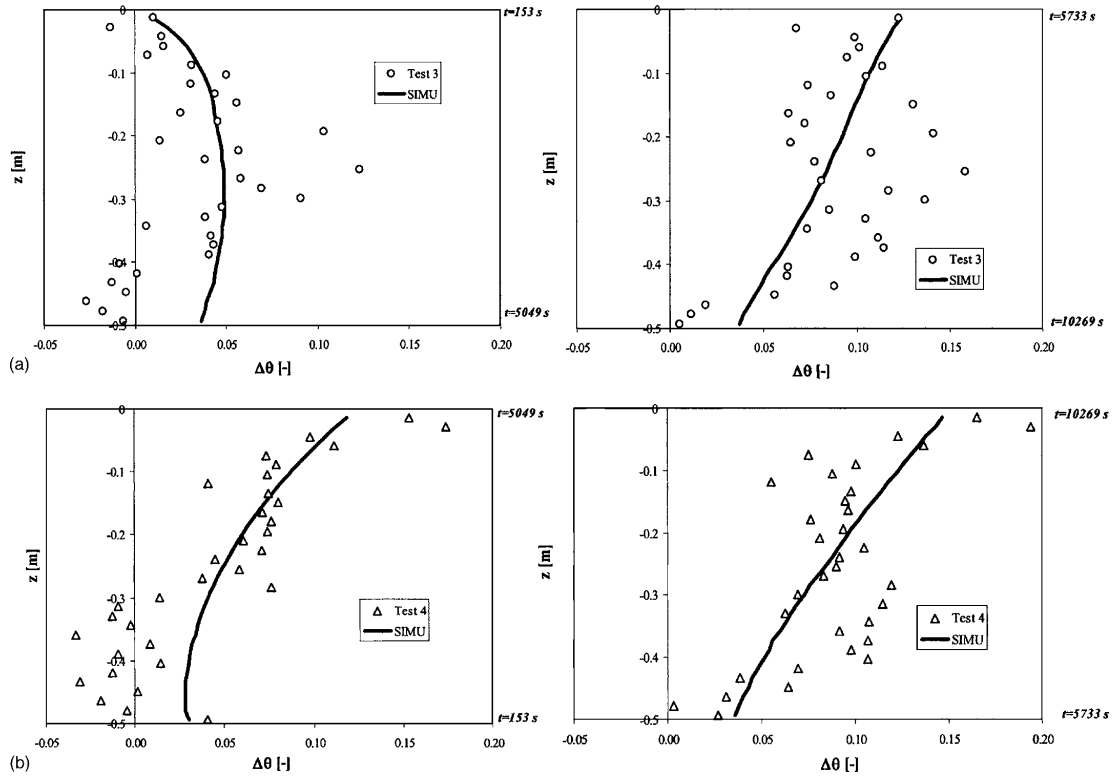


Fig. 12. Double-porosity medium: calculated (lines) and measured (symbols) profiles of water content variations between saturation and transient profiles: $\Delta\theta = \theta_S - \theta(t)$: (a) Test 3: $t = 153-5{,}049$ s and $t = 5{,}733-10{,}269$ s and (b) Test 4: $t = 153-5{,}049$ s and $t = 5{,}733-10{,}269$ s

$$\text{Mean relative error,} \quad \text{MRE} = \frac{100}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{|O_i - P_i|}{O_i}\right] \tag{14}$$

$$\text{Root-mean-square error,} \quad \text{RMSE} = 100 \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(P_i - O_i)^2}{N}} \tag{15}$$

The range of variation of the observed and predicted values of the water content for each profile

$$\text{RV} = (\min O_i,\ \max O_i), \quad (\min P_i,\ \max P_i) \tag{16}$$

where O_i and $P_i = i$th observed and predicted value of the water content, respectively; and N = the number of measurements.

The calculated values of the statistical indicators MB, MRE, RMSE, and RV for each profile of the water content are given in Table 3. The analysis of the indicators shows that the model in average underestimates the water content (MB > 0), or in the other words, it overestimates the time variations of the water content. It can be seen that the values of MB indicator are of the same order of magnitude as the estimated precision of the water content measurements by the gamma attenuation technique (3%). The maximum value of the mean relative error (MRE) occurs at the end of drainage (14.7 and 18.1%). The root mean square error (RMSE) varies between 3.9 and 6.2%. The range of variation of the water content is higher for the observed values (due to scatterings) than the calculated one. In conclusion, the analysis of the statistical indicators confirms that the model gives relatively good results with a slight underestimation of water content (or overestimation of the variations of water content). This is also reflected in the fact that the total calculated cumulative flux drained from the column is greater than the measured one.

Double-Porosity Effect

The presence of the microporous inclusions is responsible for the drainage retardation in the double-porosity medium with respect to the homogeneous case (sand). For instance, whereas 86 mm of water (cumulative flux) was recovered at the outlet of the sand column at the end of drainage [Fig. 4(a)], only 48 mm was measured for the double-porosity medium [Fig. 10(a)] at the same time. Another feature of the observed double-porosity effect is the retention of water in the microporosity that can be seen by comparison of the total water volume drained from the sand [Fig. 4(a)] and the double-porosity column [Fig. 10(a)] after the completion of drainage in both media. The volume difference represents the water retained in the microporosity domain (porous spheres).

The double-porosity effect can also be observed from the re-

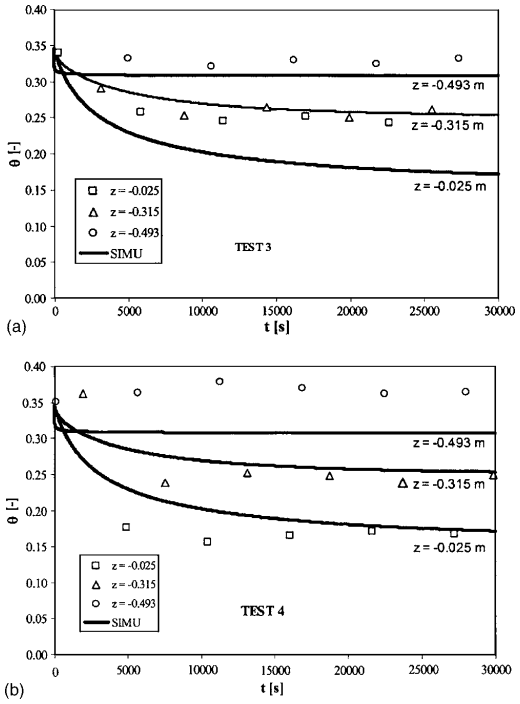


Fig. 13. Double-porosity medium: calculated (lines) and measured (symbols) water content versus time at different depths: (a) Test 3 and (b) Test 4. [Lewandowska et al. (2006), with permission.]

sults of calculations. In Fig. 15 the instantaneous fluxes in the sand and the double-porosity medium (normalized by the saturated hydraulic conductivity of sand, K_{SM}), are plotted versus time. In order to separate the different contributions, the case of totally impervious inclusions is also presented. In this case all the other parameters, like volumetric fraction and arrangement of spheres, are the same. First, it can be seen that the flux in the sand is slightly higher than the flux in the double-porosity medium until $t=22{,}000$ s. Then, this trend is reversed and the flux in sand decreases dramatically, whereas it persists over long time in the double-porosity medium. For instance, at $t=75{,}000$ s, the two fluxes differ by about one order of magnitude. Second, it can be noticed that the flux corresponding to the case of impervious inclusions lies between the two other fluxes. The comparison of these three fluxes shows (1) the influence of spherical obstacles, if we compare the behavior of homogeneous sand with the sand containing impervious spheres; and (2) the effect due to the microporosity domain, when the behavior of sand with porous and with impervious inclusions (spheres) are compared.

Domain of Validity

The domain of validity of the double-porosity model is defined as a function of the ratio of the diffusivity coefficients of the micro- (D_m) and macroporosity (D_M) domains (Lewandowska et al. 2004)

$$D_m/D_M = O(\varepsilon^2) \text{ or } D_m/D_M \ll O(\varepsilon^1) \tag{17}$$

where the water diffusivity coefficient is the ratio of the hydraulic conductivity over the capillary retention capacity, $D=K/C$, and ε=scale separation parameter. It is defined as: $\varepsilon=\ell/\mathrm{L}$, where ℓ=characteristic microscopic length (dimension of the period) and L is the dimension of the macroscopic domain (length of the column). In our case we have: $\ell=12.96\times10^{-3}$ m, L=0.5 m, and consequently $\varepsilon=2.6\times10^{-2}$. It can be concluded that the model is valid when $D_m/D_M \ll O(10^{-2})$, which means of the order $O(10^{-3})$ or less. The ratios of the hydraulic parameters of the microporous domain over those of the macroporous one, as a function of capillary pressure, are plotted in Fig. 16. It can be seen that the condition of validity of the model was satisfied as long as $|h|$ remained smaller than about 0.6 m of water (the "wet" domain). That corresponds to the early stages of the drainage when the porous medium is still wet. It is not verified for higher values of the capillary pressure, i.e., at the upper part of the column at longer time. However, the experimental data presented in this paper were also interpreted using a generalized unsaturated flow model for heterogeneous media which is valid for all ratios of the hydraulic diffusivities (Szymkiewicz and Lewandowska 2006). The results (not presented here) were found to be very close to the double-porosity model, which means that in this case the flow is somehow dominated by the "wet regime."

Conclusions

The double-porosity unsaturated flow model obtained by upscaling using the asymptotic homogenization method was presented. It has been evaluated against a series of laboratory drainage experiments. A good general agreement between numerical simulations and experimental observations illustrates the predictive capacity of the model. Of particular interest was the influence of the microporous inclusions on the dynamics of flow, as compared to the homogeneous medium. The effects are flux retardation and water retention in the microporosity.

Difficulties were encountered in the interpretation of the measurements performed in the double-porosity medium. First, the medium was highly heterogeneous and the size of the heterogeneity was obviously finite. From the point of view of the applicability of the continuous description, the dimensions of heterogeneity should tend to zero. In the experiments they were kept as small as possible to obtain an acceptable scale separation. The scale separation, defined as the ratio of the height of the period over the length of the column, was of the order 1:100, which is often considered as a limit value. The second difficulty dealt with the choice of the measuring technique of the water content, which should be appropriate for transient flow in heterogeneous medium. The question of what was really measured (what kind of time and space average?), which is an important issue in all experiments, appears fundamental in the case of laboratory experiments in highly heterogeneous media. Therefore, even though we tried to respect all the constraints to a maximum extent, the results carry the errors related to the above-quoted issues. Moreover, the statistical treatment of the experimental data turned out to be delicate because of the relatively small number of data and the high nonlinearity of the model. For all these reasons the question concerning the model performance cannot be addressed in a more detailed manner than presented in the paper.

Finally, the results clearly showed qualitative and quantitative differences in the flow dynamics occurring in the homogeneous

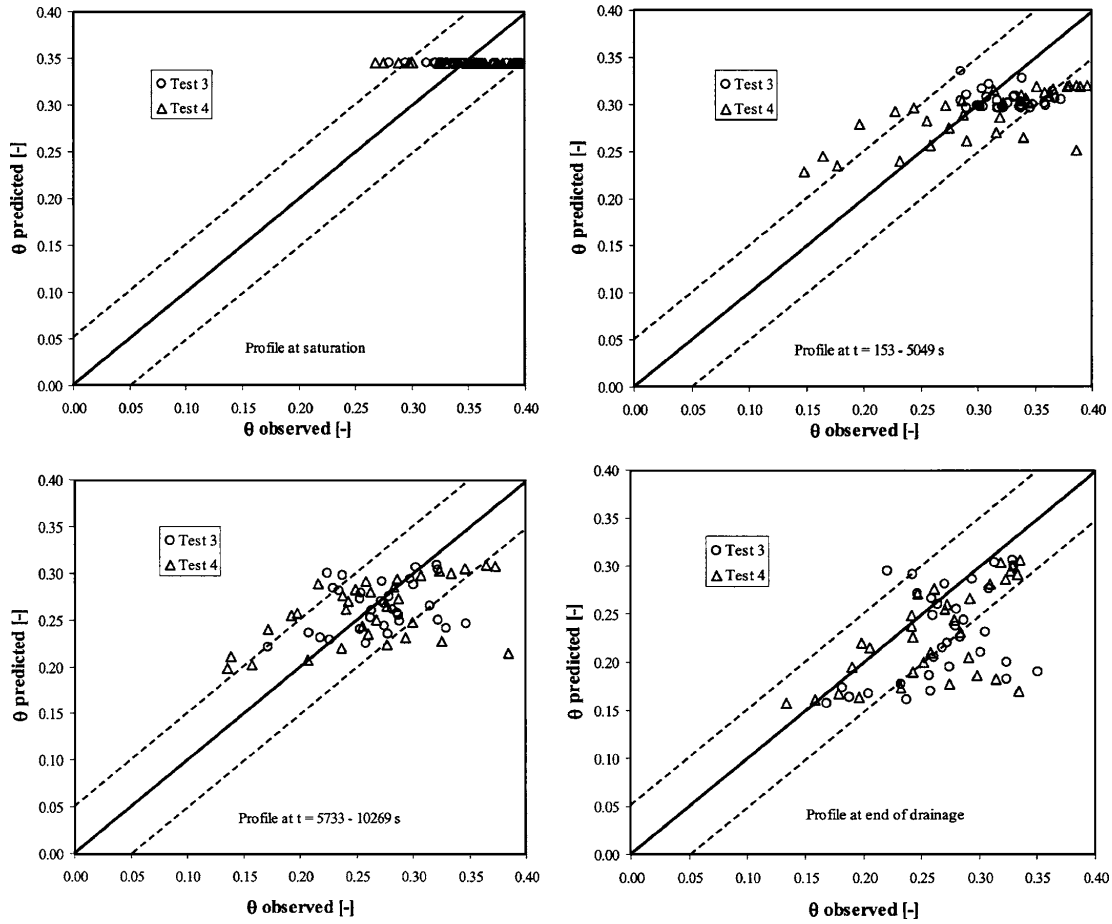


Fig. 14. Double-porosity medium: quantitative comparison between the observed and predicted values of the water content

Table 3. Statistical Indicators of the Model Efficiency for the Calculated Volumetric Water Content

					RV (—)	
Test	Profile	MB (—)	MAE (%)	RMSE (%)	Predicted	Observed
3	Saturation	0.015	8.9	4.4		
	t=153–5,049 s	0.025	9.3	4.0	(0.30–0.34)	(0.29–0.37)
	t=5,733–10,269 s	0.008	11.7	4.1	(0.22–0.31)	(0.17–0.35)
	t=80,000 s	0.040	18.1	6.2	(0.16–0.31)	(0.17–0.35)
4	Saturation	0.008	9.2	3.9		
	t=153–5,049 s	0.019	4.9	5.8	(0.23–0.32)	(0.15–0.41)
	t=5,733–10,269 s	0.005	17.2	5.3	(0.20–0.31)	(0.14–0.35)
	t=80,000 s	0.034	14.7	5.4	(0.16–0.31)	(0.13–0.37)

Note: MB=mean bias; MRE=mean relative error; RMSE=root-mean-square error; and RV=range of variation of the observed and predicted values of the water content.

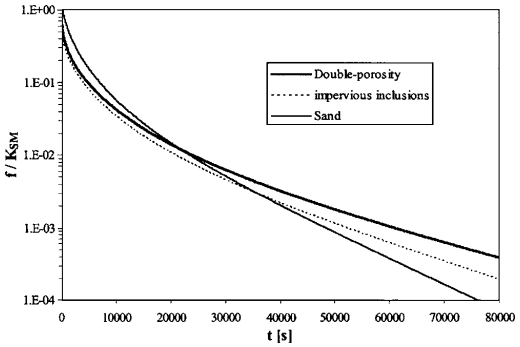


Fig. 15. Normalized instantaneous fluxes as function of time calculated by the model in the case of heterogeneous medium (with porous and impervious inclusions) and homogeneous sand. K_{SM}=saturated hydraulic conductivity of sand.

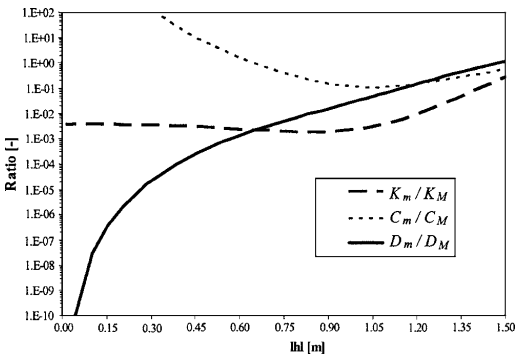


Fig. 16. Ratio of the hydraulic parameters D_m/D_M, C_m/C_M, K_m/K_M as function of the capillary pressure. D=diffusivity; C=capillarity capacity; and K=hydraulic conductivity. Subscripts m and M stand for micro- and macroporosity domain.

and heterogeneous medium. This behavior may have consequences not only for the water flow predictions but also for related aspects such as solute transfer and hydromechanical phenomena occurring in the unsaturated heterogeneous soils and geomaterials.

The results presented in this paper can provide validation data sets for others double porosity models. They are available upon request sent to the following e-mail: Jolanta.Lewandowska@hmg.inpg.fr

Acknowledgments

This research was financially supported by the project ECCO-PNRH, INSU/CNRS France (now the GDR "Hydrodynamique et Transferts dans les Hydrosystèmes Souterrains"). The writers acknowledge CNRS for the BDI-PED doctoral fellowship granted to the second writer.

Notation

The following symbols are used in this paper:

C = capillary capacity;
C^{eff} = effective capillary capacity;
C_M, C_m = macroporosity (sand) and microporosity (sintered clay) capillary capacity;
D = diffusivity;
D_M, D_m = macro and microporosity diffusivities;
$\vec{e}$ = unit vector;
F = cumulative flux;
f = instantaneous flux;
h = pressure head;
h_M, h_m = macroscopic and microscopic pressure heads;
$\mathbf{I}$ = identity matrix;
$\mathbf{K}^{\text{eff}}$ = effective hydraulic conductivity tensor;
$\mathbf{K}_M$, $\mathbf{K}_m$ = conductivity tensors in the macro- and microporosity domain;
K_S = hydraulic conductivity at saturation;
K_{SM} = hydraulic conductivity at saturation of sand;
L = medium length;
ℓ = period size;
m = water retention function parameter;
N = number of measurements;
$\vec{N}$ = unit vector normal to the interface Γ;
n = water retention function parameter;
O_i = ith observed value;
P_i = ith predicted value;
Q = water exchange between the macro- and microporosity domain;
t = time;
w_1, w_2 = volumetric fraction of the macro- and microporosity domain;
z = macroscopic space coordinate;
α = water retention function parameter;
Γ = interface between the macro- and microporosity domain;
Δh = suction imposed;
ε = scale separation parameter;
θ = volumetric water content;
θ_M, θ_m = volumetric water content in the macro- and microporosity domain;
θ_R = residual volumetric water content;
θ_S = saturated volumetric water content;
ρ_d = bulk density of sintered clay material;
ρ_s = skeletal density of sintered clay material;
ϕ = mean porosity of the double-porosity medium;
ϕ_M, ϕ_m = porosity of sand (macroporosity) and spheres (microporosity);
$\vec{\chi}$ = vectorial function;
Ω = period domain; and
Ω_M, Ω_m = macro- and microporosity domain.

References

Arbogast, T., Douglas, J., and Hornung, U. (1990). "Derivation of the double-porosity model of single phase flow via homogenization theory." *SIAM J. Math. Anal.*, 21, 823–836.

Auriault, J. L. (1991). "Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible?" *Int. J. Eng. Sci.*, 29, 785–795.

Barenblatt, G. I., Zheltov, I. P., and Kochina, I. N. (1960). "Basic con-

cepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in the fissured rocks." *J. Appl. Math.*, 24(5), 1286–1303.

Barker, J. A. (1985). "Block-geometry functions characterizing transport in densely fissured media." *J. Hydrol.*, 77, 263–279.

Bensoussan, A., Lions, J. L., and Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures*, North-Holland, Amsterdam, The Netherlands.

Bertin, H., Alhanai, W., Ahmadi, A., and Quintard, M. (1993). "Two-phase flow in heterogeneous nodular porous media." *Advances in core evaluation*, Vol. III, P. Worthington and C. Chardaire-Remière, eds., 387–409.

Brouyère, S. (2006). "Modelling the migration of contaminants through variably saturated dual-porosity, dual-permeability chalk." *J. Contam. Hydrol.*, 82(3-4), 195–219.

Corey, J. C., Peterson, S. F., and Wakat, M. A. (1970). "Measurement of attenuation of Cs and Am gamma rays for soil density and water content determination." *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 35, 215–219.

Doughty, C. (1999). "Investigation of conceptual and numerical approaches for evaluating moisture, gas, chemical, and heat transport in fractured unsaturated rock." *J. Contam. Hydrol.*, 38(1-3), 69–106.

Doughty, C., and Karasaki, K. (2004). "Modeling flow and transport in saturated fractured rock to evaluate site characterization needs." *IAHR J. of Hydraulics*, 42, 33–44.

Douglas, J., Peszynska, M., and Showalter, R. (1997). "Single phase flow in partially fissured media." *Transp. Porous Media*, 278, 285–306.

Dykhuizen, R. C. (1990). "A new coupling term for dual-porosity models." *Water Resour. Res.*, 26(2), 351–356.

Flavigny, E., Descrues, J., and Palayer, B. (1990). "Le sable d'Hostun 'RF': Note technique." *Rev. Fr. Geotech.*, 53, 67–69.

Gerke, H., and van Genuchten, M. Th. (1993a). "A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media." *Water Resour. Res.*, 29(4), 305–319.

Gerke, H., and van Genuchten, M. Th. (1993b). "Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models." *Water Resour. Res.*, 29(4), 1225–1238.

German, P. F., and Beven, K. (1985). "Kinematic wave approximation to infiltration into soils with sorbing macropores." *Water Resour. Res.*, 19(6), 990–996.

Gharbi, D., Bertin, H., and Omari, A. (2004). "Use of gamma ray attenuation technique to study colloids deposition in porous media." *Exp. Fluids*, 37(5), 665–672.

Huyakorn, P. S., Lester, H., and Mercer, J. W. (1983). "An efficient finite element technique for modeling transport in fractured porous media. 1: Single species transport." *Water Resour. Res.*, 19(3), 841–854.

Jarvis, N. J. (1994). "The MACRO model (version 3.1). Technical description and sample simulation." *Rep. and Dissertation No. 19*, Dept. Soil Science, Swed. Univ. of Agricultural Science, Uppsala, Sweden.

Lewandowska, J., Szymkiewicz, A., Burzynski, K., and Vauclin, M. (2004). "Modeling of unsaturated water flow in double-porosity soils by the homogenization approach." *Adv. Water Resour.*, 27, 283–296.

Lewandowska, J., Szymkiewicz, A., Gorczewska, W., and Vauclin, M. (2005). "Infiltration in a double-porosity medium. Experiments and comparison with a theoretical model." *Water Resour. Res.*, 41(2), 1–14.

Lewandowska, J., Tran Ngoc, T. D., Vauclin, M., and Bertin, H. (2006). "Modeling by homogeneization of water drainage in double-porosity soils." *Proc., EUROCK 2006—Multiphysics Coupling and Long Term Behaviour in Rock Mechanics*, C. Van Cotthem, Thimus, and Tschibangu, eds., Taylor & Francis Group, London, 513–518.

Mikelic, A., and Rosier, C. (2004). "Modeling solute transport through unsaturated porous media using homogenization." *Comput. Appl. Math.*, 23(2–3), 195–211.

Mualem, Y. (1976). "A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media." *Water Resour. Res.*, 12(3), 513–522.

Pruess, K., and Narasihman, T. N. (1982). "A practical method for modeling fluid and heat flow in fractured porous media." *Soc. Pet. Eng. J.*, 14–26.

Quintard, M., and Whitaker, S. (1988). "Two-phase flow in heterogeneous porous media: The method of large scale averaging." *Transp. Porous Media*, 3, 357–413.

Quintard, M., and Whitaker, S. (1990). "Two-phase flow in heterogeneous porous media. I: The influence of large spatial and temporal gradients." *Transp. Porous Media*, 5, 341–379.

Richards, L. (1931). "Capillary conduction of liquids through porous medium." *Physics (N.Y.)*, 1, 318–333.

Sanchez-Palencia, E. (1980). "Non-homogeneous media and vibration theory." *Lecture notes in physics*, Vol. 127, Springer, Berlin.

Showalter, R. E., and Su, N. (2002). "Partially saturated flow in a composite poroelastic medium." *Proc., Poromechanics II (Grenoble 2002)*, J.-L. Auriault et al., eds., Balkema, Lisse, 549–554.

Šimůnek, J., Jarvis, N. J., van Genucten, M. Th., and Gardenas, A. (2003). "Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone." *J. Hydrol.*, 272, 14–35.

Šimůnek, J., Šejna, M., and van Genuchten, M. Th. (1998). "HYDRUS 1D Software package for simulating the one-dimensional movement of water heat and multiple solutes in variably saturated media, v. 2.0." IGWMC, Colorado School of Mines, Denver.

Šimůnek, J., Wendroth, O., Wypler, N., and van Genuchten, M. Th. (2001). "Non-equilibrium water flow characterized by means of upward infiltration experiments." *Eur. J. Soil. Sci.*, 52, 13–24.

Szymkiewicz, A., and Lewandowska, J. (2006). "Unified macroscopic model for unsaturated water flow in soils of bi-modal porosity." *Hydrol. Sci. J.*, 51(6), 1106–1124.

Tedeschi, L. O., Fox, D. G., Baker, M. J., and Kirschten, D. P. (2006). "Assessment of the adequacy of mathematical models." *Agric. Syst.*, 89, 225–247.

van Genuchten, M. Th. (1980). "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils." *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892–898.

van Genuchten, M. Th., and Wierenga, P. J. (1976). "Mass transfer studies in sorbing porous media. I: Analytical solutions." *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 40, 473–480.

Zimmerman, R. W., Chen, G., Hadgu, T., and Bodvarsson, G. S. (1993). "A numerical dual-porosity model with semianalytical treatment of fracture/matrix flow." *Water Resour. Res.*, 29(7), 2127–2137.

Zurmuhl, T., and Durner, W. (1996). "Modeling transient water and solute transport in biporous soil." *Water Resour. Res.*, 32(4), 819–829.

Chapitre 6

Étude expérimentale de la dispersion dans un milieu à double-porosité non saturé

6.1 Motivation

Il est difficile de trouver dans la littérature des données expérimentales complètes (géométrie, propriétés hydrauliques des milieux) qui permettraient de « valider » le modèle macroscopique développé dans le chapitre 2. Nous avons donc décidé de réaliser des expériences de dispersion en utilisant un modèle physique à double-porosité non saturé dont la microstructure est bien contrôlée. Nous décrivons d'abord les matériels et les méthodes permettant d'effectuer des expériences de dispersion dans les colonnes à simple/double-porosité, en conditions d'écoulement permanent saturé et non saturé. Ces expériences sont effectuées avec deux types d'injection de soluté : échelon et créneau. Dans cette partie, les mesures des paramètres physiques et hydrodynamiques, en particulier celles relatives à la teneur en eau par gammamétrie et la concentration par densimètrie, seront détaillées. Ensuite, la procédure expérimentale retenue pour assurer la reproductibilité des résultats expérimentaux sera présentée. Finalement, nous analyserons qualitativement les résultats d'expériences pour mettre en évidence l'influence des hétérogénéités, du degré de saturation et l'importance de la distribution de la teneur en eau.

6.2 Matériels et méthodes

6.2.1 Matériaux

6.2.1.1 Sable d'Hostun HN38

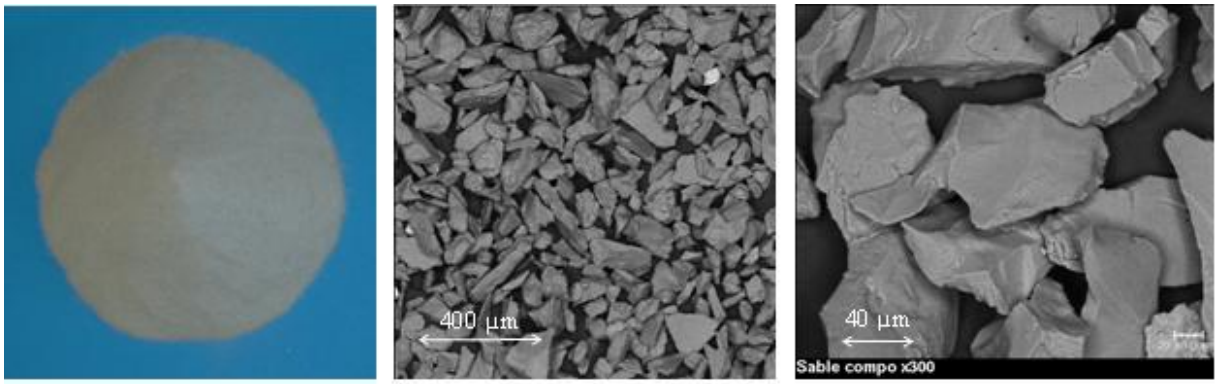


FIG. 6.1: Sable d'Hostun HN38 : vue macroscopique et microscopique avec zoom 50 et 300.

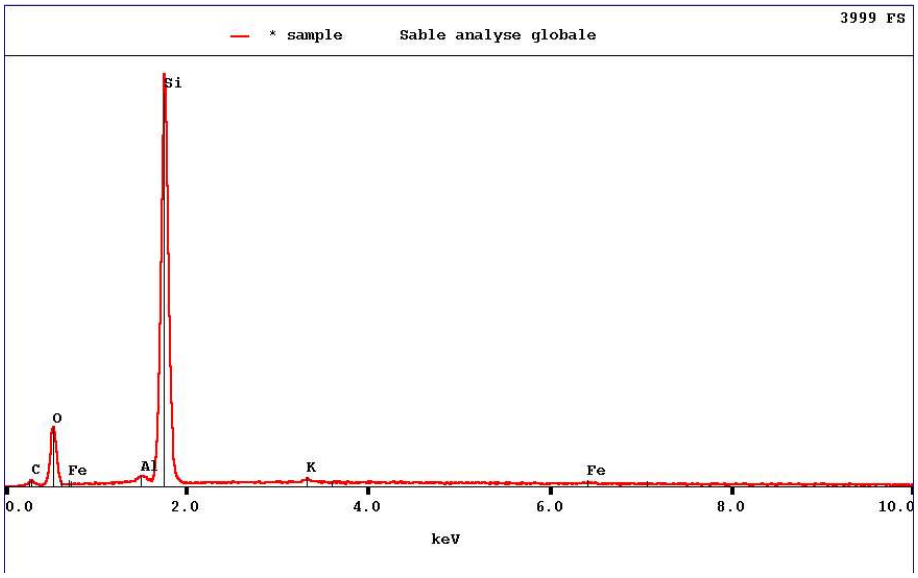


FIG. 6.2: Spectre obtenu en micro-analyse des rayons X au MEB.

Le milieu poreux fortement conductif choisi dans le modèle physique à double-porosité est le sable fin d'Hostun HN38 (FIG. 6.1). Sa composition chimique est principalement du quartz (SiO_2 supérieur à 97,5%) (FIG. 6.2). La distribution des grains est relativement uniforme. Le diamètre moyen est de 162 μm (FIG. 6.3). L'observation par microscope électronique à balayage (MEB) met en évidence la forme anguleuse des particules (FIG. 6.1) dont la masse volumique des grains est de 2,65 g/cm^3 (Flavigny *et al.* 1990). La porosité obtenue par compactage dans toutes les expériences est autour de 0,40.

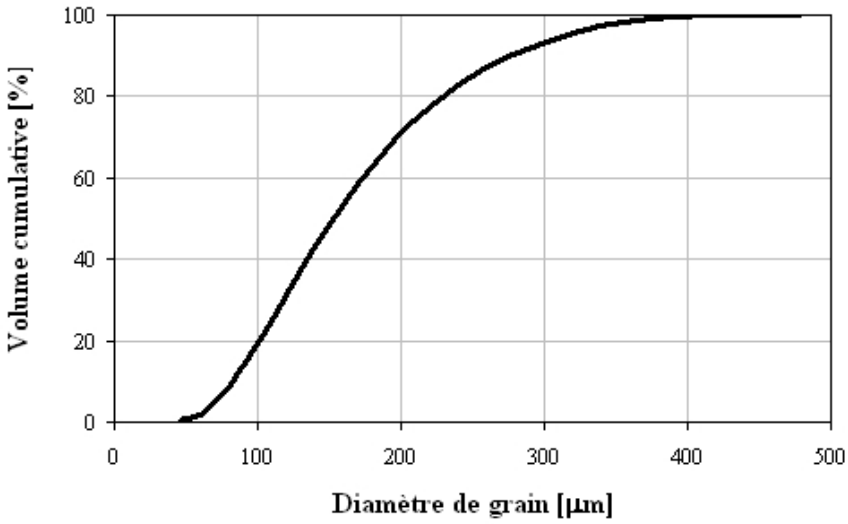


FIG. 6.3: Courbe granulométrique analysée par laser.

6.2.1.2 Argile solidifiée

FIG. 6.4: Vue macroscopique de l'argile solidifiée : un échantillon et des billes.

Nous avons utilisé l'argile d'origine de La Bisbal (Espagne), lavée et solidifiée à 1000°C comme matériau du sous-domaine faiblement conductif (FIG. 6.4). Il a été fabriqué sous forme de billes d'argile cuite dont le diamètre est relativement uniforme avec une valeur moyenne de 6,4 mm (FIG. 6.4). La densité est de 3,01 et la masse volumique sèche est de 1,88 g/cm^3. La figure 6.5 montre que les billes d'argile solidifiée sont composées de silicate, de calcium, de fer, de magnésium, de potassium et de titane.

Plusieurs observations de l'intérieur des billes ont été réalisées au microscope optique. La figure 6.6 permet d'observer l'homogénéité et la structure porale des billes. Les deux analyses par porosimètrie au mercure ont montré que la porosité moyenne de billes est de 0,348 (0,376 et 0,323) et la taille moyenne des pores est de l'ordre de 0,7 μm (FIG. 6.7).

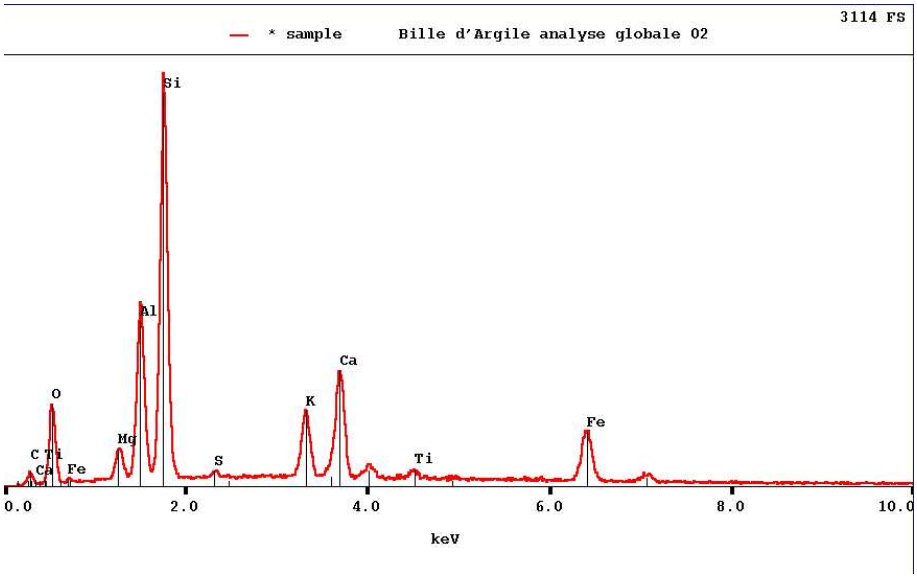


FIG. 6.5: Analyse minéralogique des billes d'argile solidifiée par rayons X au MEB.

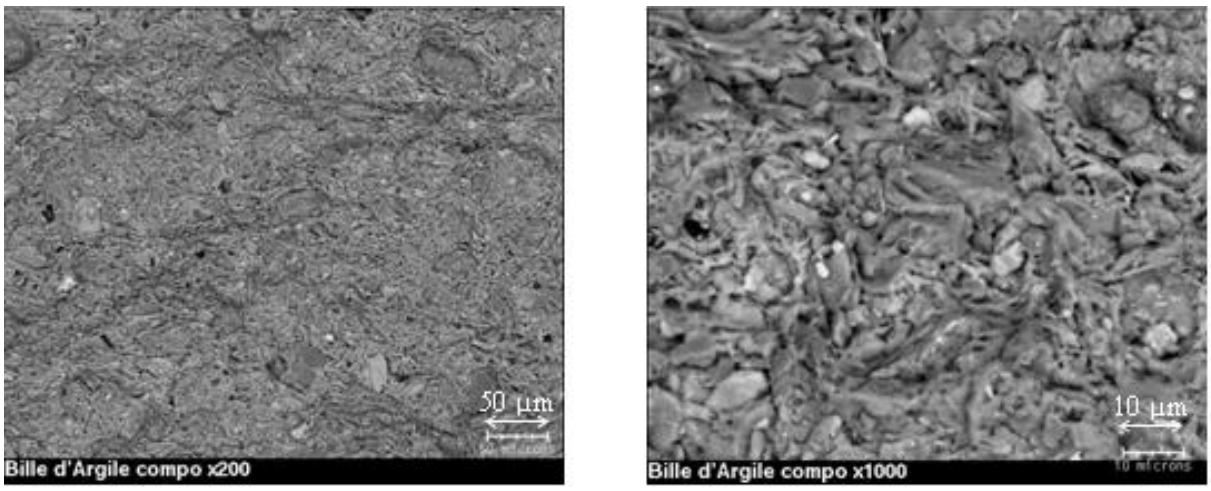


FIG. 6.6: MEB pour billes d'argile solidifiée : zoom 200 et 1000 fois.

6.2.1.3 Milieu à double-porosité

Le milieu à double-porosité (DP) a été fabriqué en remplissant de manière périodique les deux matériaux poreux présentés ci-dessus (FIG. 6.8). Une superposition d'environ 130 couches de sable et de billes d'argile a été réalisée pour l'obtention d'une colonne à double-porosité de 50 cm de hauteur et 6 cm de diamètre. Chaque couche a été compactée. Les deux matériaux utilisés dans le milieu à double-porosité ont les mêmes fractions volumiques, à savoir 50% pour le sable d'Hostun et 50% pour les billes d'argile. Les billes d'argile sont régulièrement distribuées dans la matrice sableuse connexe (FIG.6.8).

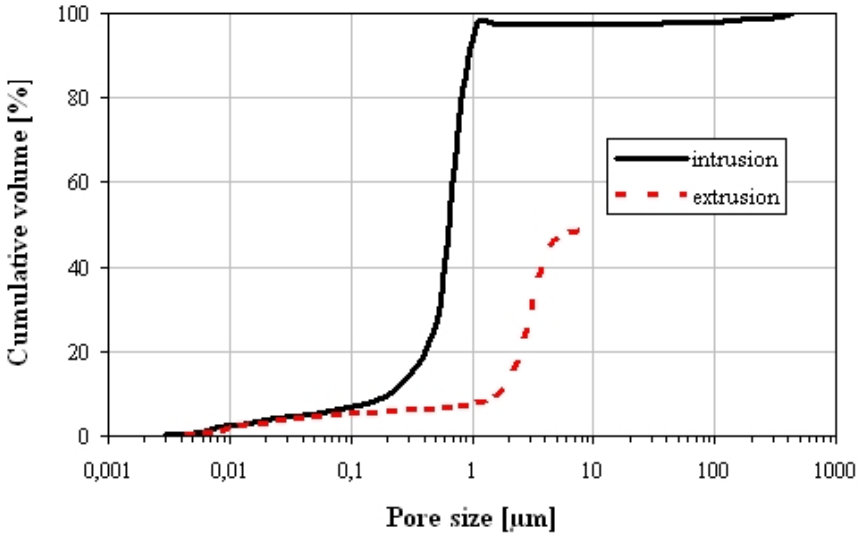


FIG. 6.7: Distribution de taille de pores de l'argile solidifié obtenue par porosimétrie au mercure.

FIG. 6.8: Milieu à double-porosité périodique.

Le rapport de la taille de pores d'argile cuite et du sable est de l'ordre de 1 : 230 si on suppose que la taille caractéristique du pore de sable est du même ordre grandeur que celle du grain moyen.

6.2.1.4 Traceur et solution

Le sel NaCl a été utilisé comme traceur. Le sel est parfaitement dissout dans l'eau purifiée à l'aide d'un système qui peut à la fois dégazer et agiter de l'eau (FIG. 6.9). Pour éviter des problèmes tels que colmatage des pores dans le milieu poreux, les phénomènes de sorption, les réactions biologiques, l'eau (donc la solution) ne doit contenir ni particules, ni micro-macro

FIG. 6.9: Pompe à vide et agitateur.

matières organiques. Pour cela, un appareil Milli-ro 3 Plus de purification d'eau par osmose inverse a été utilisé.

6.2.2 Dispositif et mesures expérimentales

6.2.2.1 Gammamétrie

La spectrométrie gamma a été utilisée pour mesurer la porosité, ainsi que le degré de saturation des milieux (Gharbi *et al.* 2004). Le banc gammamétrique utilisé mis à notre disposition au laboratoire TREFLE-Bordeaux, permet de mesurer non seulement la teneur en eau locale à l'intérieur du milieu, mais encore la teneur en eau durant la phase transitoire d'écoulement.

- **Principe de la mesure**

La mesure repose sur le principe d'atténuation des rayonnements : tout rayonnement émis par une source radioactive, (ici Américium ^{241}Am) traversant un milieu voit son énergie atténuée par les différents constituants traversés. Ainsi, dans notre cas, le rayonnement γ voit son intensité atténuée par des phases présentes dans le milieu poreux (FIG. 6.10) :

– solide et gazeuse, dans le cas d'un comptage en milieu « sec »,

– solide, liquide et gazeuse dans le cas d'un comptage en milieu « humide ».

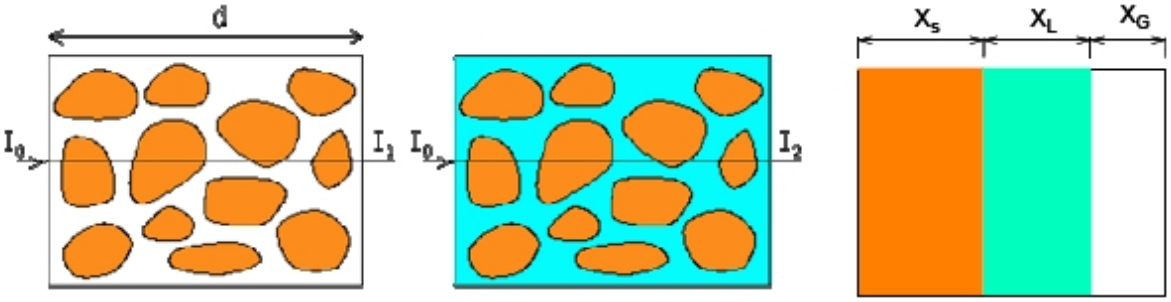


FIG. 6.10: Trois phases dans le milieu poreux.

L'équation d'atténuation de l'intensité incidente est obtenue à partir de la loi de Beer-Lambert (Nicholls et Heaviside 1988), soit :

$$I_1 = I_0 \times e^{-(\zeta_S x_S + \zeta_G x_G)} \text{ pour le milieu sec,} \tag{6.1}$$

et

$$I_2 = I_0 \times e^{-(\zeta_S x_S + \zeta_L x_L)} \text{ pour le milieu humide,} \tag{6.2}$$

où ζ_S, ζ_L et ζ_G sont les coefficients d'atténuation linéique (c'est-à-dire ramenés à l'épaisseur de milieu) des phases solide, liquide et gazeuse, respectivement ; x_S, x_L et x_G sont les « longueurs équivalentes » respectives des phases solide, liquide et gazeuse.

L'intensité I est exprimée par :

$$I = h\,\nu\,N, \tag{6.3}$$

où h est la constante de Planck, ν la fréquence de l'émission gamma et N le nombre de photons. Pour les comptages « sec » et « humide » on obtient

$$N_1 = N_0 \times e^{-(\zeta_S x_S + \zeta_G x_G)}, \tag{6.4}$$

$$N_2 = N_0 \times e^{-(\zeta_S x_S + \zeta_L x_L + \zeta_G x_G)}, \tag{6.5}$$

où N_0 est le nombre de photons émis et $N_{1,\,2}$ sont les nombres de photons transmis.

- **Mesure de la teneur en eau**

Pour disposer de la valeur de la porosité et de la teneur en eau, N_1, N_2 et N_3 (N_2, N_3 sont les comptages saturé et insaturé respectivement) sont mesurés à l'aide d'un scintillateur couplé à un photomultiplicateur (PM). Ceci constitue la chaîne de détection, qui est reliée à un analyseur multicanaux connecté à un système d'acquisition.

La porosité, i. e. la teneur en eau à saturation, mesurée « localement » ne se déduit que des deux comptages à sec et humide en faisant le rapport de la longueur équivalente de la phase liquide (x_L) et la longueur totale (d) traversée par le faisceau, quand le milieu est complètement saturé. Pour cela, nous injectons du CO_2 dans le milieu poreux avant sa saturation en eau. En considérant que le coefficient d'atténuation du gaz est négligeable devant celui du liquide, la porosité n est donc calculée par

$$n = \frac{x_L}{d} = \frac{1}{\zeta_L d} \times ln \frac{N_1}{N_2} \tag{6.6}$$

et le degré de saturation S_w est obtenu par

$$S_w = \frac{1}{\zeta_L d\, n} \times ln \frac{N_1}{N_3} \tag{6.7}$$

où $\zeta_L = 0{,}2$ cm^{-1} est mesuré expérimentalement hors du milieu poreux dans une cuve optique dont la distance est connue (FIG. 6.11).

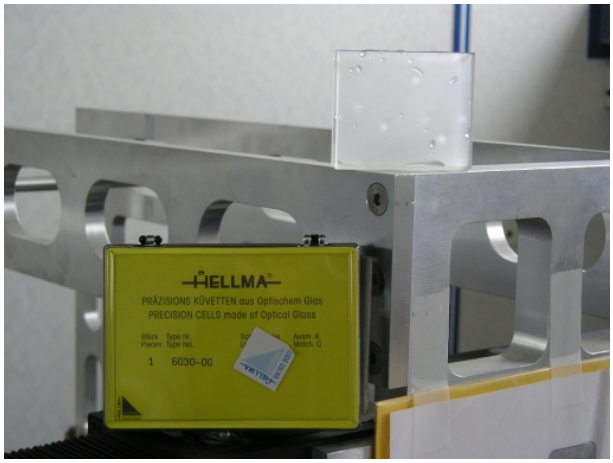


FIG. 6.11: Cuve optique pour la mesure du coefficient d'atténuation de l'eau.

La teneur en eau θ ($\theta = nS_w$) peut être déterminée directement le long de l'échantillon poreux à l'aide d'un banc de déplacement vertical de l'ensemble source/détecteur assuré par un moteur pas à pas. La précision du positionnement est de 0,1 mm.

- **Précision de la mesure**

Les erreurs de mesure par atténuation gamma sur la teneur en eau proviennent :

- de la nature aléatoire et la diminution d'intensité des émissions radioactives,
- du système de comptage,
- des variations thermiques,
- de la déformation du milieu poreux,
- de la non-rigidité absolue du support de la colonne de milieu poreux,
- du déplacement du dispositif pour un mauvais positionnement.

L'émission du rayonnement γ est répartie suivant une distribution de Poisson. Nous pouvons donc déterminer l'écart type

$$\sigma_N = \sqrt{N} \tag{6.8}$$

et en déduire l'erreur relative

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{6.9}$$

L'équation 6.9 montre que plus le nombre de comptage est élevé plus la mesure est précise. Ceci nécessite d'augmenter le temps de comptage. Dans toutes les expériences, ce temps était de 80 s pour que le nombre de comptage soit supérieur à 10000 coups, si on désire une erreur statistique inférieure à 1% (Eq. 6.9). L'incertitude de la teneur en eau mesurée par comptage des photons gamma est déterminée par

$$\Delta\theta = \frac{1}{\zeta_L\, d}\sqrt{\frac{1}{N_1} + \frac{1}{N_2}}. \tag{6.10}$$

En prenant en compte de toutes les sources d'erreur, la précision de la mesure de teneur en eau est de 3%. La figure 6.12 montre le bon accord entre la mesure de la porosité d'un milieu par gammamétrie et gravimétriquement.

6.2.2.2 Conductivité à saturation

La conductivité à saturation K_s [L/T] a été déterminée à l'aide d'un capteur de pression (Rosemount 0 - 3,5 bar) qui permet de mesurer le gradient de pression ΔP [L] entre les deux extrémités de l'échantillon du milieu poreux lors de l'écoulement permanent avec le flux de Darcy q [L/T] imposé à l'aide d'une pompe volumétrique (Amersham Biosciences Pump P-500). K_s est déduit de la loi de Darcy (1856) :

$$q = -K_s\,\frac{\Delta P}{L}, \tag{6.11}$$

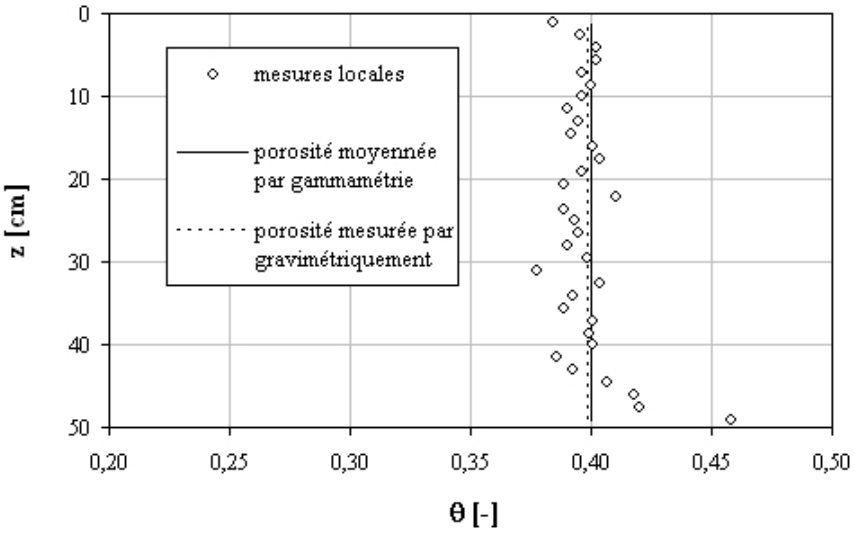


FIG. 6.12: Exemple sur la précision de la mesure de porosité.

où L [L] est la longueur de l'échantillon. K_s est la pente de la relation linéaire entre q et $\frac{\Delta P}{L}$. La figure 6.13 présente le dispositif expérimental. La mesure est effectuée selon le principe « aller-retour », i. e. avec un débit croissant puis décroissant.

FIG. 6.13: Dispositif de la mesure de la conductivité à saturation.

Les valeurs de K_s mesurées pour les trois milieux poreux (sable, DP et argile cuite) sont respectivement de 2,87 $\times$ 10^{-5} m/s ; 1,50 $\times$ 10^{-5} m/s et 1,96 $\times$ 10^{-8} m/s (voir FIG. 6.14). La valeur de la conductivité du sable est la même que celle obtenue par la méthode à pression constante (Gorczewska 2003, Jougnot 2006). Celle de l'argile cuite est comparable à la valeur

obtenue par analyse inverse (1,15 × 10^{-7} m/s, Lewandowska *et al.* 2005) et par le modèle XDQ concernant l'interprétation des caractéristiques des milieux poreux par porosimétrie au mercure (1,8 × 10^{-8} m/s, Daian 2007). On peut noter que la conductivité hydraulique du milieu à DP a été mesurée avec de la saumure, sa valeur pour de l'eau pure est plus faible en raison de la différence de viscosité.

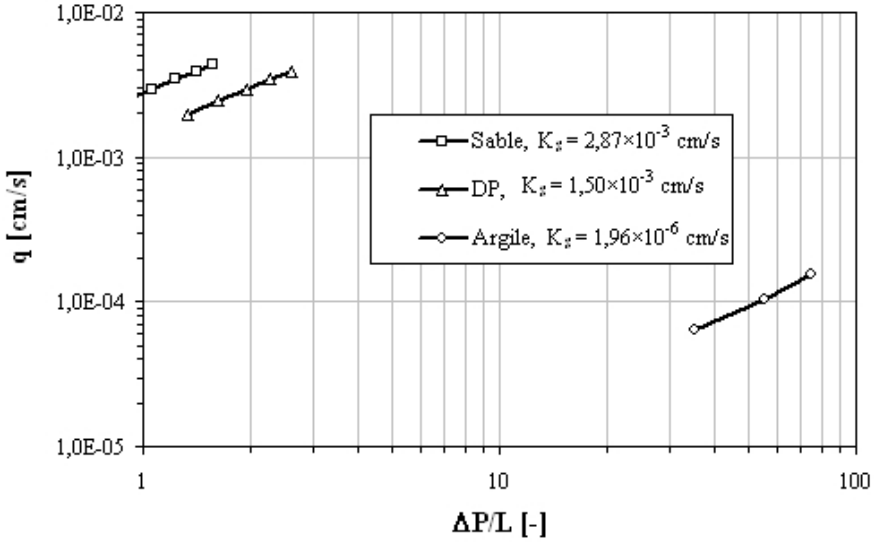


FIG. 6.14: Valeur de la conductivité à saturation K_s mesuré du sable, du milieu à DP et d'argile cuite déduites de la pente de la relation entre le flux Darcy et le gradient pression.

6.2.2.3 Injection des fluides

Une pompe volumétrique de large gamme débit (0 - 500 cm^3/h) est utilisée en conditions saturée et insaturée. Le régime permanent est atteint lorsque l'on a égalité des débits entrant et sortant. Le début sortant est mesuré à l'aide d'une balance connectée à une centrale d'acquisition Campbell Scientific Ltd CR 10. Une autre pompe, de mêmes caractéristiques, est utilisée pour l'injection de la solution de traceur. Les deux pompes sont reliées via une vanne à 4 voies (FIG. 6.15) qui permet d'imposer une condition d'échelon ou de créneau lors des expériences de dispersion.

6.2.2.4 Densimètre

La concentration à la sortie de la colonne est déduite de la mesure de la densité par un densimètre (Anton Paar, mPD 200) fonctionnant selon le principe d'un tube en U (Document technique de densimètre A. Paar). Une mesure est effectuée toutes les 300 s. Cet appareil mesure

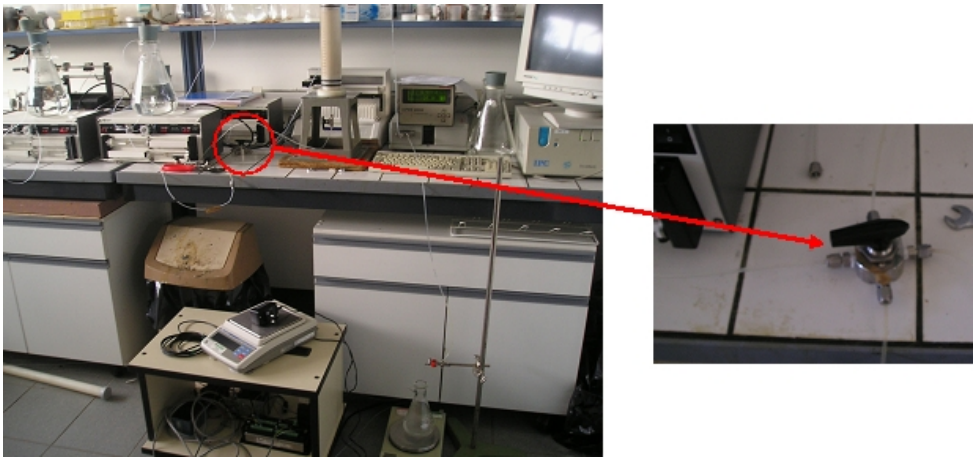


FIG. 6.15: Système d'établissement et d'injection du traceur.

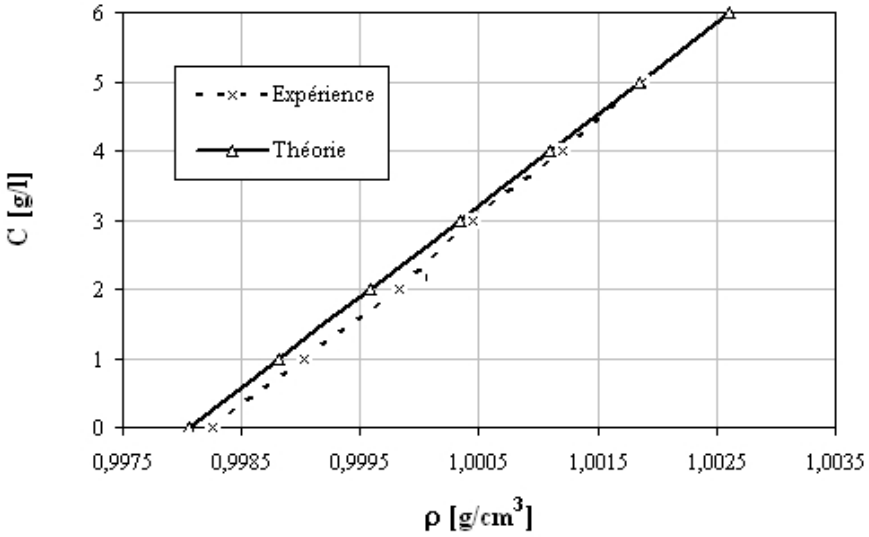


FIG. 6.16: Relation C(ρ) obtenue par mesure et relation à T = 20,7°C

à la fois la température T [°C] et la densité ρ [g/cm^3] avec la précision de 1/100 et 5/10000, respectivement. La courbe de percée (CdP) est obtenue en convertissant la densité mesurée en concentration. La figure 6.16 présente des fonctions linéaires $C(\rho)$ à une température fixée obtenues par l'expérience (mesure de densimètre) et la théorie (l'équation d'état de l'eau de mer (Unesco 1985)). La précision de la mesure par densimètre est bien vérifiée en utilisant cette équation pour le calcul C(ρ) à une température donnée (Le Calvé 1998). La mesure et le calcul sont en bon accord (FIG. 6.16). La différence entre les valeurs théoriques et mesurées est de l'ordre grandeur de la précision du densimètre ($\Delta\rho$=0,0003 g/cm^3).

La mesure de densité étant sensible aux fluctuations de température, nous avons cette variation en mesurant ses variations en fonction de T [°C] à une concentration en sel donnée (voir FIG. 6.17).

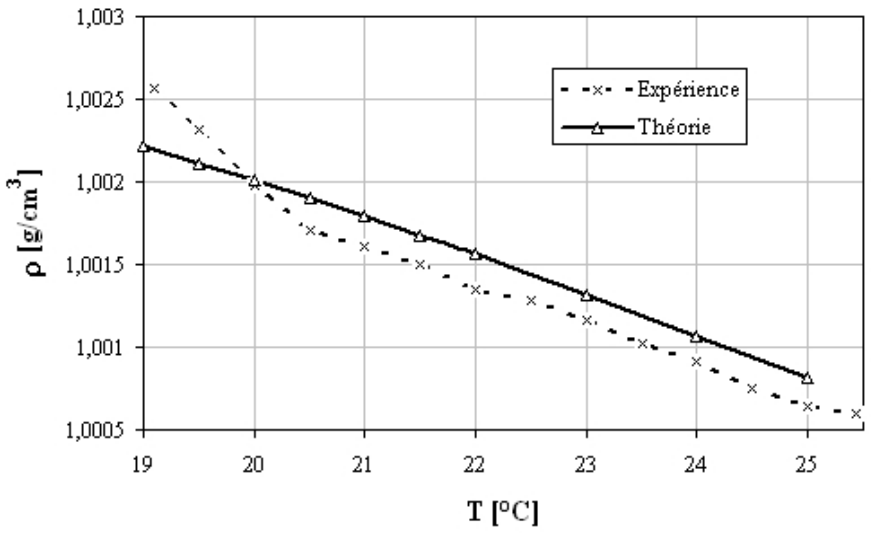


FIG. 6.17: Variation de la densité en fonction de la température (C = 5 g/l).

6.3 Procédure expérimentale

6.3.1 Protocole

Les expériences se déroulent en trois étapes : *i)* préparation du milieux poreux ; *ii)* mise en place de l'écoulement saturé ou insaturé ; *iii)* test de dispersion du traceur.

- **Préparation du milieux poreux**

– Sable et milieu à double-porosité :

Les expériences sur le sable et sur le milieu à DP sont réalisées dans des colonnes en plexiglas, dont la hauteur totale est de 60 cm (50 cm de hauteur utile) et de diamètre interne 6 cm. Ces deux colonnes de sols ont été remplies couche par couche de manière régulière. Les deux extrémités du milieu sont constituées de deux bouchons (même diamètre que la colonne) en plastique couverts par un tissu de maillage 20 μm (voir FIG. 6.18). Pour que la porosité soit la même partout, le poids de couche à remplir et l'énergie de compactage doivent être bien contrôlés. Le protocole de la réalisation des milieux poreux à étudier doit être rigoureusement respecté, notamment pour le milieu à DP qui comporte une structure

périodique. Le temps nécessaire pour réaliser une colonne de DP est d'une journée. La fraction volumique du sable et des billes d'argile est de 50%.

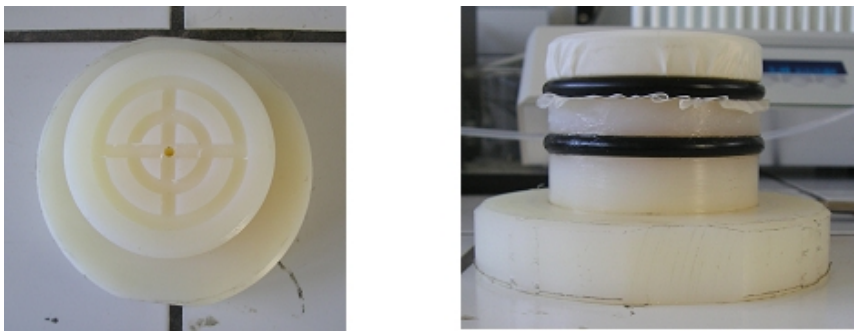


FIG. 6.18: Bouchon rainuré pour homogénéiser d'écoulement.

– Argile solidifiée :

La caractérisation de l'argile solidifiée est effectuée sur un cylindre dont la longueur et le diamètre sont de 25,9 cm et 5,25 cm respectivement. Le matériau, peu perméable, est enveloppé par une membrane en caoutchouc et recouvert de résine pour assurer l'étanchéité pendant les expériences (FIG. 6.19).

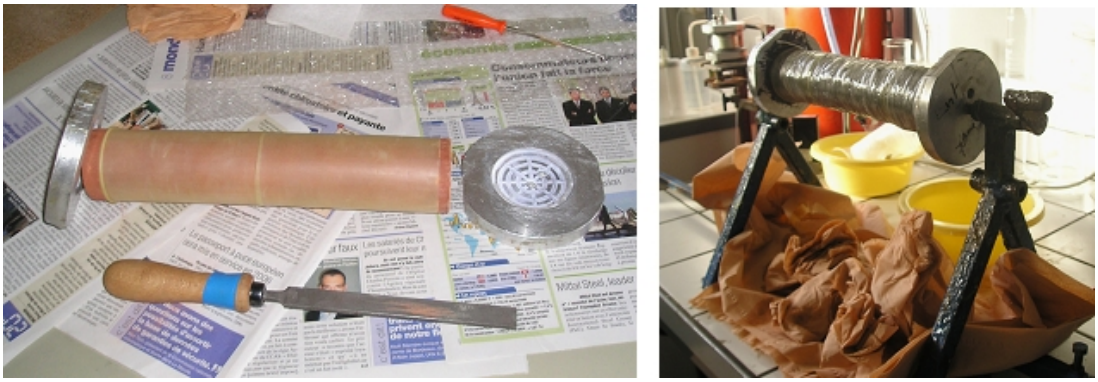


FIG. 6.19: Préparation de l'échantillon d'argile.

Le tableau 6.1 présente les caractéristiques des milieux poreux étudiés.

- **Mise en place de l'écoulement en régime saturé et insaturé**

– Régime saturé :

Pour ce qui concerne le milieu saturé (Tests 1 - 3), on injecte d'abord plusieurs volumes de pores de CO_2 dans le milieu initialement sec. Ensuite, la colonne est alimentée par le bas avec une solution de 20 g/l NaCl et un débit de 60 cm^3/h. La saturation est obtenue après environ 10 h. Les comptages en milieu sec et saturé sont effectués en 33 points régulièrement repartis le long de la colonne. Le temps de mesure est de 80 s par point.

Test	Milieu	L [cm]	D [cm]	ϕ_1 [-]	ϕ_2 [-]	n_1 [-]	n_2 [-]
Condition saturée, injection type « échelon »							
1	Sable	50,1	6			0,399	
2	DP	50,3	6	0,483	0,517	0,386	0,343
3	Argile	25,9	5,25				0.343
Condition non saturée, injection type « échelon »							
4	Sable	50,3	6			0,404	
5	Sable	50,2	6			0,400	
6	DP	51,0	6	0,490	0,510	0,378	0,343
7	DP	46,9	6	0,483	0,517	0,386	0,343
8	Sable	50,2	6			0,400	
9	DP	51,0	6	0,483	0,517	0,386	0,343
Condition non saturée, injection type « créneau »							
10	Sable	21,5	6				0,399
11	Sable	50,2	6				0,399
12	DP	51,0	6	0,490	0,510	0,378	0,343
13	DP	46,9	6	0,483	0,517	0,386	0,343
14	Sable	21,5	6				0,399
15	DP	46,9	6	0,483	0,517	0,386	0,343

TAB. 6.1: Caractéristiques des milieux poreux. *L : longueur du milieu ; D : diamètre de la colonne ;* ϕ_1 *et* ϕ_2 *: fraction volumique du sable et de l'argile ;* n_1 *: porosité du sable mesurée par gravimétrie ;* n_2 *: porosité de l'argile mesurée par gammamétrie.*

– Régime non saturé :

Pour le milieu insaturé, le débit de l'eau pure ou de la solution saline est de 5 ou 35 cm^3/h (selon l'expérience de dispersion envisagée) (voir TAB. 6.2 et 6.3) le fluide est injecté par le bas de la colonne jusqu'à l'obtention d'un écoulement insaturé stationnaire. Le flux cumulé d'exfiltration est mesuré par pesée. La teneur en eau dans cette phase est aussi mesurée par atténuation γ. Nous considérons la mesure de l'infériorité de la teneur en eau à θ_S et l'égalité entre le flux entrant et sortant comme les critères d'établissement de l'écoulement permanent insaturé. On notera que pour les Tests 8 et 9, l'écoulement permanent insaturé a été obtenu différemment par rapport aux Tests 4 - 7 : les milieux saturés en eau sont d'abord drainés en imposant une succion de -85 cm en bas de la colonne. Ils sont ensuite alimentés en solution en haut de la colonne jusqu'à obtenir un écoulement permanent. Après cette étape, on utilise l'atténuation γ pour mesurer le profil de la teneur en eau qui correspond à l'écoulement.

- **Test de dispersion du traceur**

Le test de dispersion débute après que l'écoulement permanent soit établi (FIG.6.20).

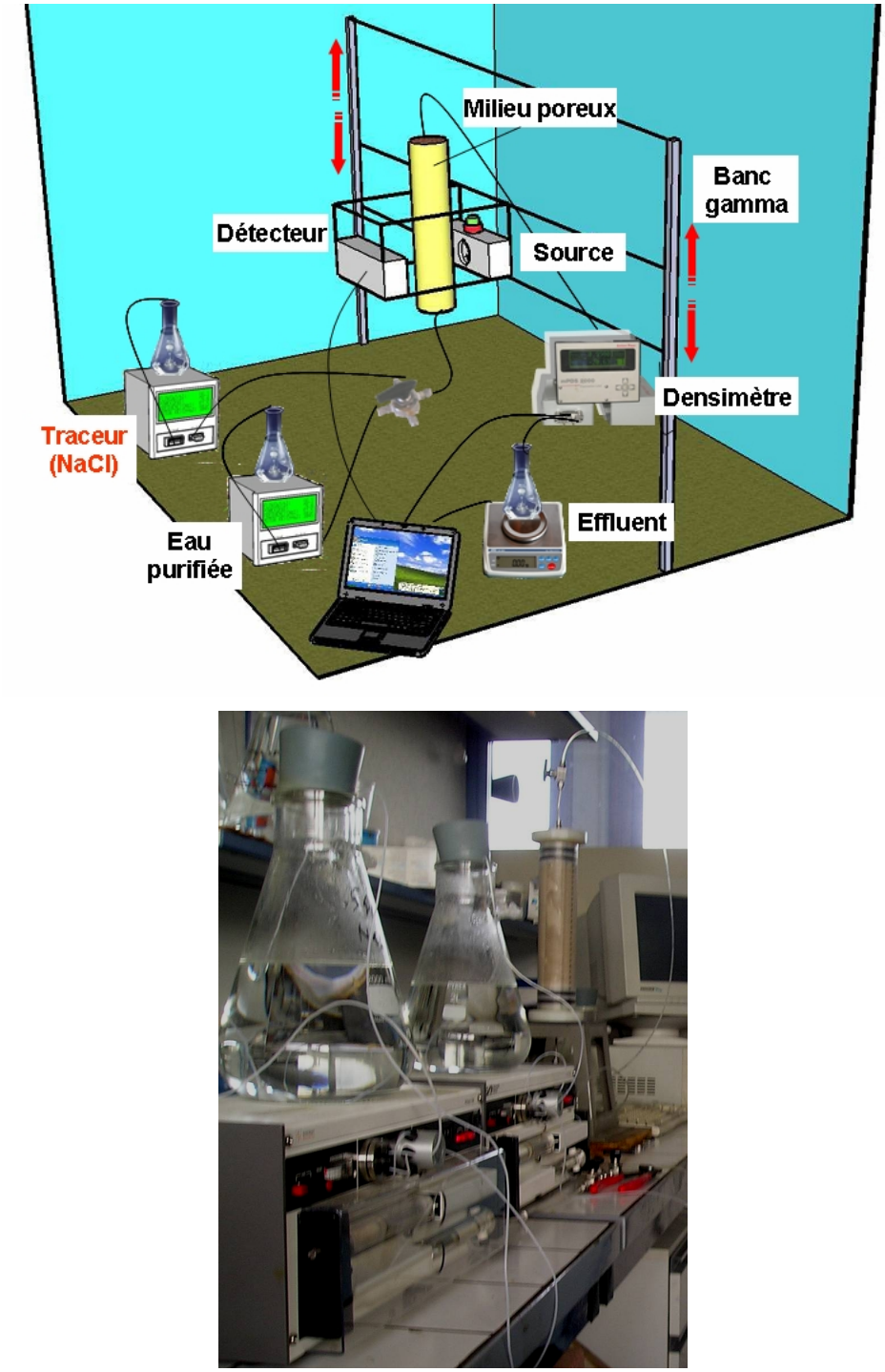


Fig. 6.20: Test de dispersion.

– Sollicitation « échelon » :

Les expériences de transport de NaCl débutent en tournant la vanne pour changer le milieu déplaçant : eau pure (Tests 1 - 3 et 8 - 9, appelés Tests de « dépollution » dans la suite) ou solution (Tests 4 - 7, appelés Tests de « pollution » dans la suite) (voir TAB. 6.2).

– Sollicitation « créneau » :

A l'aide du système d'écoulement et d'injection (où les deux pompes fonctionnent en même temps pour assurer le débit d'eau et de solution), un créneau du traceur (NaCl 5 g/l) est envoyé dans le milieu poreux (son volume est environ de 1/10 de volume de pores) en tournant aussi la vanne 4 voies qui permet de connecter le milieu avec le réservoir de solution pendant le temps néccessaire (voir TAB. 6.3).

Test	**Milieu**	**C (t < 0) [g/l]**	**C (t ≥ 0) [g/l]**	**<v> [cm/s]**	**S_w [-]**	**T [°C]**
Condition saturée, type « échelon »						
1	Sable	20	z = L, C = 0	$5{,}90 \times 10^{-4}$	1	19,9 - 19,3
2	DP	20	z = L, C = 0	$5{,}90 \times 10^{-4}$	1	19,1 - 19,5
3	Argile	20	z = L, C = 0	$1{,}28 \times 10^{-4}$	1	24,5 - 24,7
Condition non saturée, type « échelon »						
4	Sable	0	z = L, C = 5	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,86	20,4 - 21,5
5	Sable	0	z = L, C = 5	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,88	20,9 - 22,8
6	DP	0	z = L, C = 5	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,87	20,5 - 22,2
7	DP	0	z = L, C = 5	$3{,}44 \times 10^{-4}$		20,2 - 20,4
8	Sable	5	z = 0, C = 0	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,73	22,6 - 23,2
9	DP	5	z = 0, C = 0	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,82	19,9 - 20,3

TAB. 6.2: Conditions expérimentales de type « échelon » (*<v> : flux de Darcy et S_w : degré de saturation du milieu mesuré par γ après le test de dispersion).*

Test	**Milieu**	**C [g/l] t<0, t>t_0**	**C [g/l] 0≤t≤t_1**	**t_0 [s]**	**<v> [cm/s]**	**S_w [-]**	**T [°C]**
Condition non saturée, type « créneau »							
10	Sable	0	z = 0, C = 5	1800	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,89	24,2 - 24,5
11	Sable	0	z = 0, C = 5	4620	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,87	19,8 - 20,4
12	DP	0	z = 0, C = 5	4620	$3{,}44 \times 10^{-4}$	0,88	24,0 - 24,3
13	DP	0	z = 0, C = 5	4620	$3{,}44 \times 10^{-4}$		20,0 - 20,7
14	Sable	0	z = 0, C = 5	1440	$0{,}49 \times 10^{-4}$	0,89	24,6 - 25,2
15	DP	0	z = 0, C = 5	3600	$0{,}49 \times 10^{-4}$		

TAB. 6.3: Conditions expérimentales de type « créneau » (*<v> : flux de Darcy et S_w : degré de saturation du milieu mesuré par γ après le test de dispersion).*

Le test de dispersion débute dès l'instant où la vanne est tournée, et le densimètre permet de mesurer la concentration dans l'effluent. L'essai est considérée comme terminé, lorsque le signal du densimètre est stable. On mesure ensuite le profil de teneur en eau dans le milieu.

Bien que les expériences aient été réalisées en salle climatisée, quelques interruptions, dues à des coupures d'électricité, ont provoqué quelques pertes de données expérimentales.

6.3.2 Programme expérimental

Chaque essai a duré environ quatre jours pour le milieu sableux et une semaine pour les milieux à DP et argileux. Deux campagnes expérimentales ont été réalisées au laboratoire TREFLE : 9 tests de type « échelon » et 6 tests de type « créneau » (voir TAB. 6.2 et 6.3, respectivement).

6.4 Résultats expérimentaux

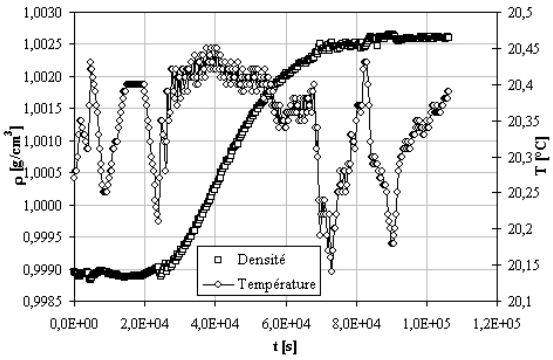
6.4.1 Traitement des données

Test	**R^2**	σ	**F sta**
1	0,99991	6,77740e-5	962295,21
2	0,99924	1,65678e-4	230062,92
3	0,99999	2,52194e-5	3873187,50
4	0,99918	4,93293e-5	84024,36
5	0,99915	4,90860e-5	83779,47
6	0,99899	5,00613e-5	101208,90
7	0,99953	3,37375e-5	186141,30
8	0,99924	0,99885e-5	62580,07
9	0,99914	4,44613e-5	124571,36
10	0,99200	3,05691e-5	6046,06
11	0,99059	4,34717e-5	7012,17
12*			
13	0,93167	4,33422e-5	1861,32
14	0,97694	4,81738e-5	12299,63
15*			

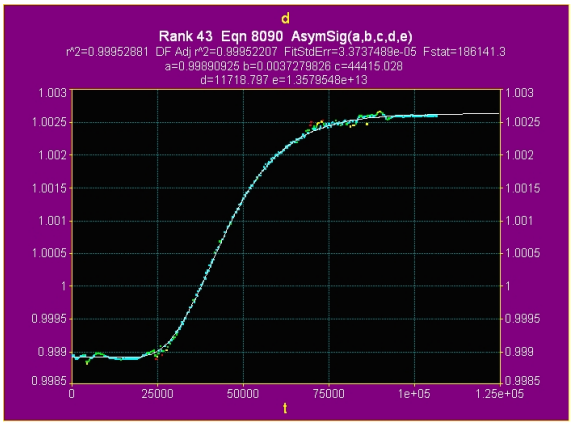
TAB. 6.4: Critères statistiques pour le lissage des courbes à partir des données expérimentales.

Les données expérimentales se présentent sous la forme de la densité en fonction du temps $\rho(t)$. En vue de l'obtention des courbes de percée, ces résultats sont traités comme suit :

– Les points expérimentaux sont filtrés à l'aide du logiciel Table Curve 2D 5. 01 (Systat 2002). On en déduit par optimisation la courbée lissée de la densité en fonction du temps, en se basant sur des critères statistiques (coefficient de détermination R^2, écart type σ et F-statistique (F-sta est le rapport entre « Mean Square Regression » et « Mean Square Error »)) (voir TAB. 6.4). Dans ce tableau, le signe « * » signifie que les données expérimentales sont incomplètes. A titre exemple, on présente dans les figures 6.21 et 6.22 deux courbes $\rho(t)$ obtenues à partir des points filtrés.

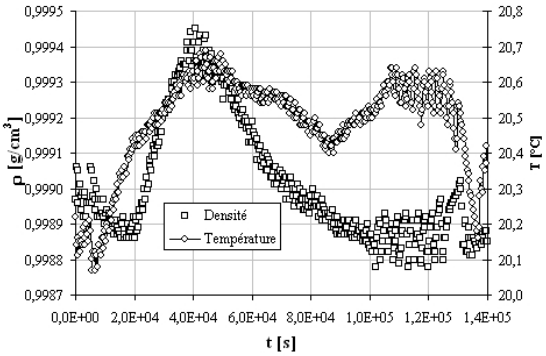


(a) Données brutes.

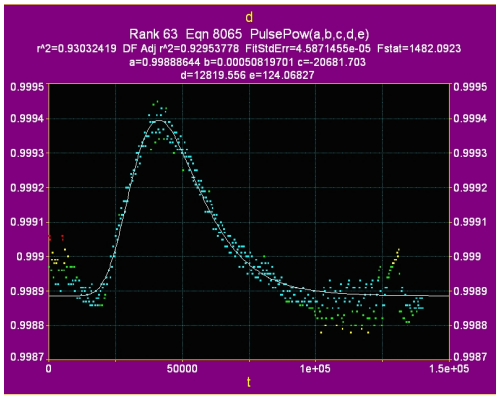


(b) Courbe lissée.

FIG. 6.21: Exemple une courbe expérimentale, filtrée (cas d'un échelon de concentration).



(a) Données brutes.



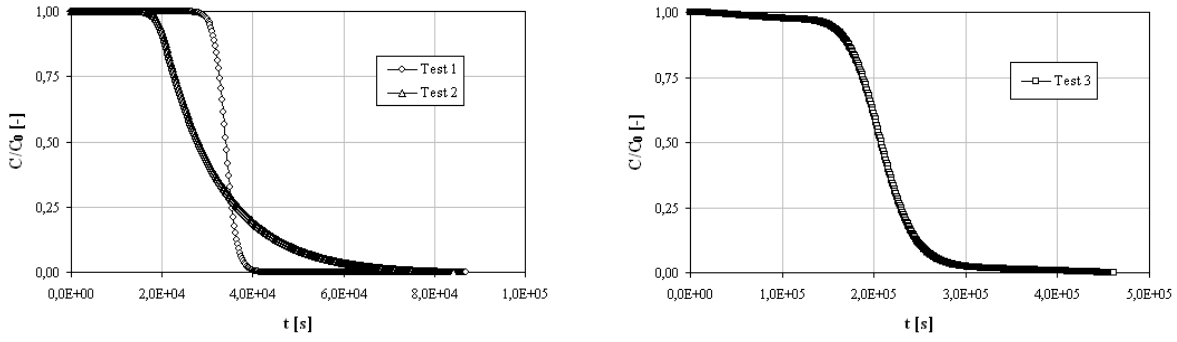
(b) Courbe lissée.

FIG. 6.22: Exemple de courbe expérimentale, filtrée (cas d'un créneau de concentration).

- On convertit $\rho(t)$ en $C(t)$ en utilisant une relation linéaire dans la gamme des concentrations et températures des expériences (FIG. 6.16 et 6.17). Malheureusement, nous ne disposons que d'une seule de cette relation mesurée à T = 20,7 °C. C'est la raison pour laquelle, nous avons utilisé la relation théorique pour calculer $C(\rho)$ (voir partie 6.2.2.4) en supposant une température moyenne pendant l'expérience.
- Les courbes $C(t)$ sont mises sous forme adimensionelle $C/C_0(t)$ où C_0 est une concentration de référence.

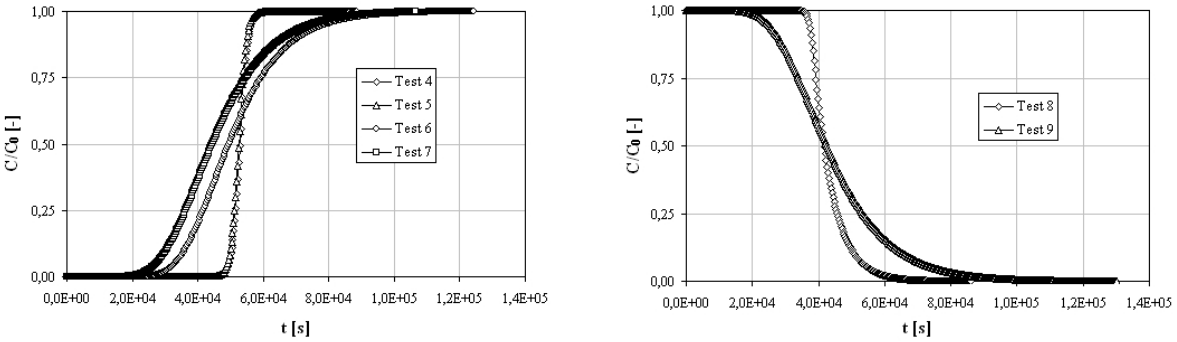
6.4.2 Résumé des courbes de percée

Les courbes adimensionnelles de type « échelon » pour les milieux saturé et non saturé sont respectivement présentées FIGs. 6.23 et 6.24. Les courbes de type « créneau » sont présentées FIG. 6.25 pour les expériences relatives au sable et au milieu à DP et indépendamment FIG. 6.26 pour le test avec une faible vitesse.



(a) (b)

FIG. 6.23: Courbes de percée en milieu saturé pour une injection en échelon : a) Test 1 (sable) et Test 2 (DP) ; b) l'argile solidifiée.

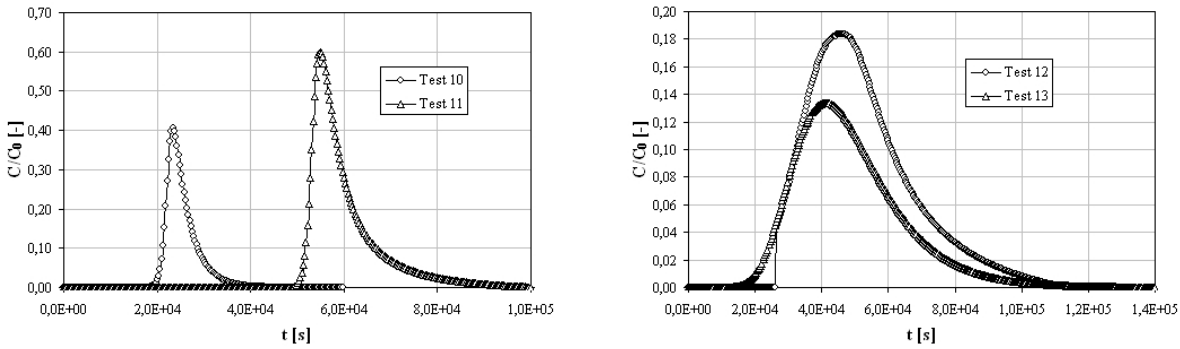


(a) (b)

FIG. 6.24: Courbes de percée en milieu insaturé une injection en échelon : a) Tests 4 et 5 (sable) et Tests 6 et 7 (DP) ; b) Test 8 (sable) et Test 9 (DP).

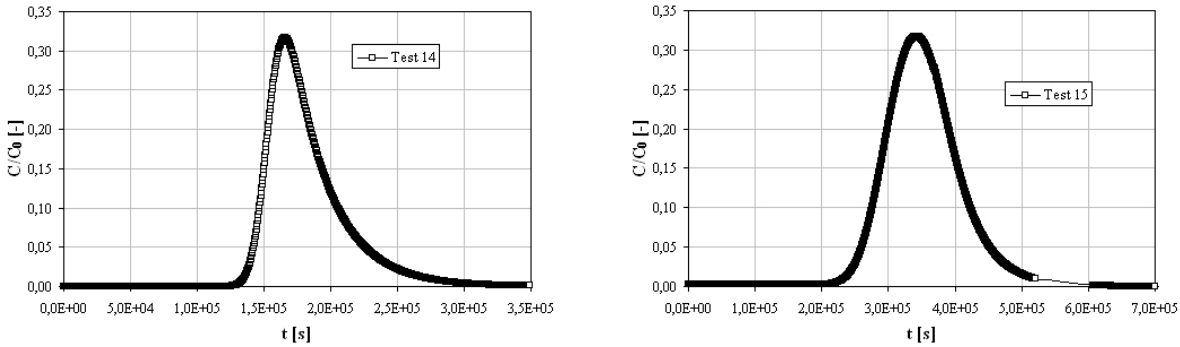
6.4.3 Bilan de masse

Le bilan de masse du sel est effectué pour chaque expérience. Pour l'injection de type « créneau », sont comparées les masses entrante (M_1) et sortante (M_2, valeur de l'aire sous la CdP). Pour l'injection de type « échelon », on doit comparer la différence entre (M_1) et (M_2) avec la



(a) (b)

FIG. 6.25: Courbes de percée en milieu insaturé pour une injection en créneau avec $v = 3{,}44 \times 10^{-4}$ cm/s : a) Tests 10 et 11 (sable) et b) Tests 12 et 13 (DP).



(a) (b)

FIG. 6.26: Courbes de percée en milieu insaturé pour une injection en créneau avec $v = 0{,}49 \times 10^{-4}$ cm/s : a) Test 14 (sable) et b) Test 15 (DP).

Test	**M_1 [g]**	**M_2 [g]**	**M_1 - M_2 [g]**	**M_0 [g]**	**ΔM [%]**
1	0	11,367	11,367	11,298	0,602
2	0	10,512	10,512	10,092	3,995
3	0	3,873	3,873	3,844	0,744
4	4,054	1,496	2,596	2,530	1,492
5	4,185	1,630	2,556	2,459	3,779
6	6,038	3,518	2,520	2,277	9,631
7	5,177	2,910	2,267	2,171	4,236
8	0	2,104	2,104	2,057	2,209
9	0	2,193	2,193	2,140	2,386

TAB. 6.5: Bilan de masse pour une injection en échelon.

masse présente (M_0) dans le milieu poreux. Les deux tables suivantes présentent les résultats du bilan de masse pour les injections « échelon » et « créneau », respectivement.

Test	M_1 [g]	M_2 [g]	ΔM [%]
10	0,089	0,110	19,0
11	0,225	0,440	7,8
12	0,331	0,362	8,5
13	0,225	0,226	0,4
14	0,100	0,111	9,9
15	0,256	0,285	10,0

TAB. 6.6: Bilan de masse pour une injection en créneau.

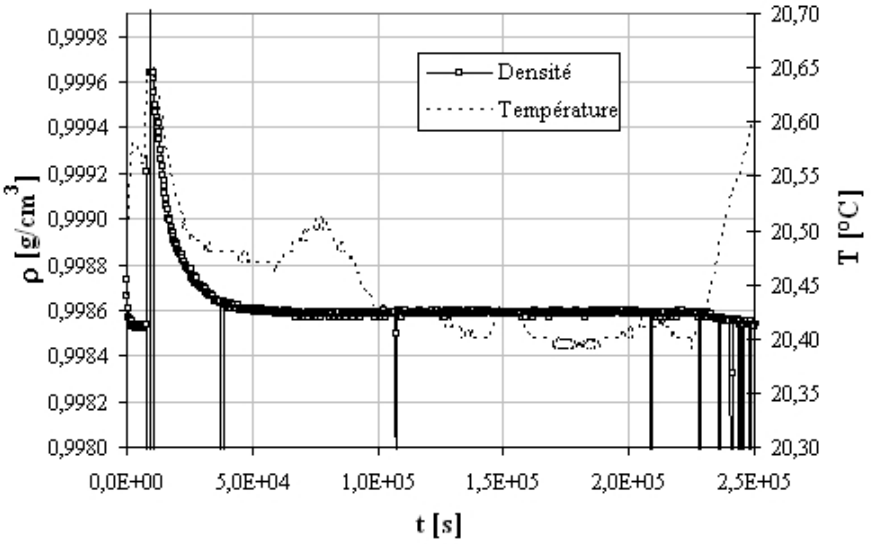


FIG. 6.27: Mesure de la dissolution du sable d'Hostun dans l'eau pure.

Le bilan de masse est vérifié avec une précision de l'ordre de 3% pour les tests en échelon (sauf Test 6) (TAB. 6.5) et de 10% pour les tests en créneau (sauf Test 10) (TAB. 6.6). Une source d'erreur pourrait provenir des interactions (dissolution, échange ionique) entre le sable et la solution saline. Cette hypothèse a été invalidée par des expériences d'injection d'eau pure et de solution saline durant une longue durée (FIG. 6.27 et 6.28) qui ont montré une bonne stabilité du signal de densité. Ceci est conforme au fait que le milieu poreux est constitué quasi-exclusivement de quartz et ne contient pas d'argiles.

Ainsi, les sources d'erreur du bilan de masse résident essentiellement dans :

i) la mesure de la teneur en eau par gammamétrie,

ii) le lavage du milieu incomplet,

iii) l'utilisation de la formule de calcul $C(\rho)$,

iv) la variation de la température pendant l'expérience,

v) des traces minérales éventuelles dans les billes d'argile solidifiée.

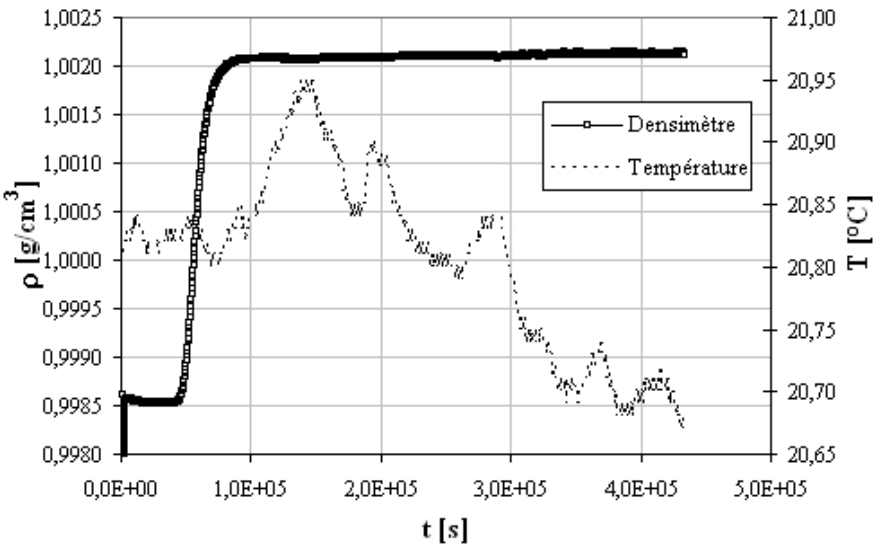


FIG. 6.28: Mesure de la dissolution du sable d'Hostun dans l'eau salée.

6.5 Analyse qualitative des expériences et discussion

Dans ce paragraphe nous analysons les expériences de type « échelon » effectués dans les milieux à simple et double-porosité en condition saturé et non saturé (Tran Ngoc *et al.* 2007). Les courbes sont présentées sous forme de l'évolution de la concentration relative $C(t)/C_0$ en fonction du rapport $V(t)/V_p$ où $V(t)$ est le volume d'eau pure ou de solution saline injecté et V_p le volume de pores. Dans certains cas, quelques points de mesure ont été supprimés pour des raisons de présentation et pour faciliter la distinction entre courbes expérimentales et courbes simulées.

6.5.1 Comparaison des comportements des milieux homogène et hétérogène

6.5.1.1 Cas du milieu saturé en eau

La figure 6.29 présente la distribution de la teneur en eau mesurée par gammamétrie dans les trois matériaux : sable (Test 1), double-porosité (Test 2) et argile (Test 3). Le profil de la teneur en eau du milieu à double porosité est plus dispersé que celui du sable à cause de la présence d'un système de pores secondaires. Le résultat pour le Test 3 _B-B montre l'existence d'une hétérogénéité locale dans le cylindre argileux qui se manifeste par différents profils de la teneur en eau selon la direction de mesure et la présence de pics de teneur en eau. La figure 6.30 présente les courbes de percée obtenues pour les trois matériaux. Les courbes de percée du sable (Test 1)

et de l'argile (Test 3) sont symétriques et correspondent à $C/C_0 = 0{,}5$ pour un volume de pores. La courbe de percée du milieu à double porosité (Test 2) apparaît non-Fickienne : la présence des inclusions est responsable d'une part de la diminution rapide de la concentration aux temps courts et d'autre part de l'effet de retard aux temps longs (effet de traînée à plus de 2,5 V_p).

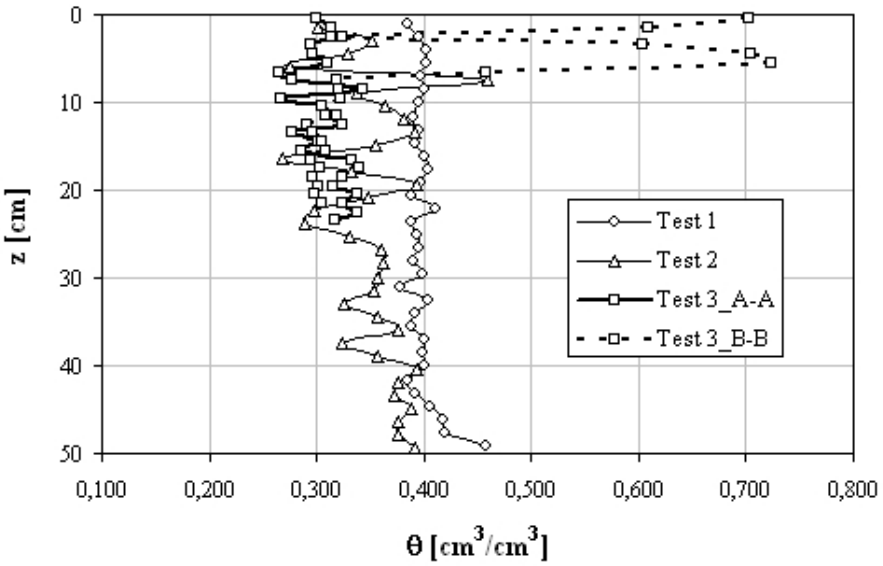


FIG. 6.29: Profil de la teneur en eau à saturation (A-A : mesure le long d'un côté de l'échantillon ; B-B : perpendiculaire à A-A) pour le sable (Test 1), le milieu à DP (Test 2) et l'argile solidifiée (Test 3).

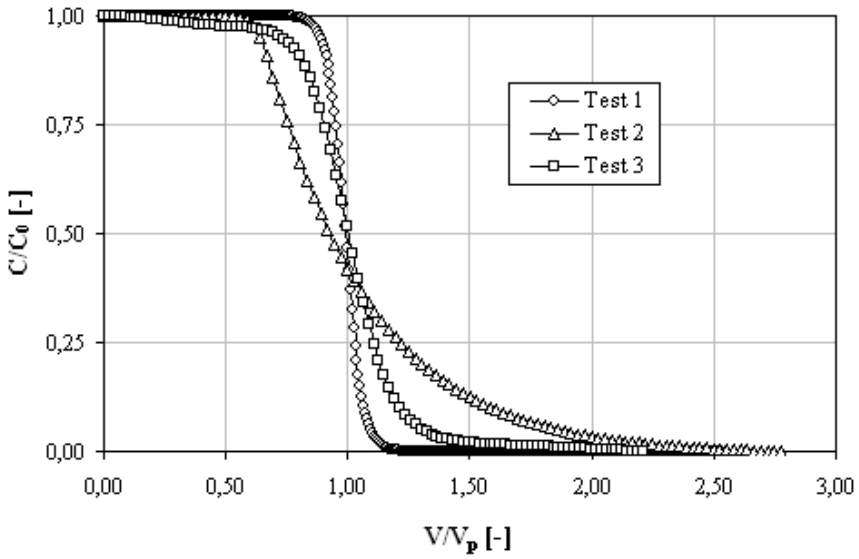


FIG. 6.30: Courbes de percée pour les trois milieux saturés en eau : sable (Test 1), milieu à DP (Test 2) et argile solidifiée (Test 3).

6.5.1.2 Cas du milieu non saturé en eau

Au début de l'expérience, le flux mesuré à la sortie est légèrement plus faible que celui d'entrée du fait de l'accumulation d'eau dans le milieu. Les teneurs en eau mesurées avant et après l'expérience de dispersion confirment cette légère différence (max 5%). La figure 6.31 présente les profils de teneur en eau après le test de dispersion, ils sont plus saturés dans le bas de la colonne à cause de la gravité. Ce problème a été rencontré dans Keller et Sirivithayapakorn (2004), Pôt *et al.* (2005), Nutzmann *et al.* (2002). Les courbes de percée sont présentées Figure 6.32. Le comportement du sable (Tests 4 et 5) correspond à la condition non saturée : $C/C_0 = 0{,}5$ obtenu à $V/V_p < 1$ (FIG. 6.32). Pour les mêmes conditions d'écoulement, les courbes de percée du milieu à double-porosité (Tests 6 et 7) donnent une arrivée de concentration plus rapide (à $V/V_p < 0{,}5$) et une traînée de concentration plus importante aux temps longs. Comme dans le cas du milieu saturé, le milieu à DP présente un comportement non Fickien.

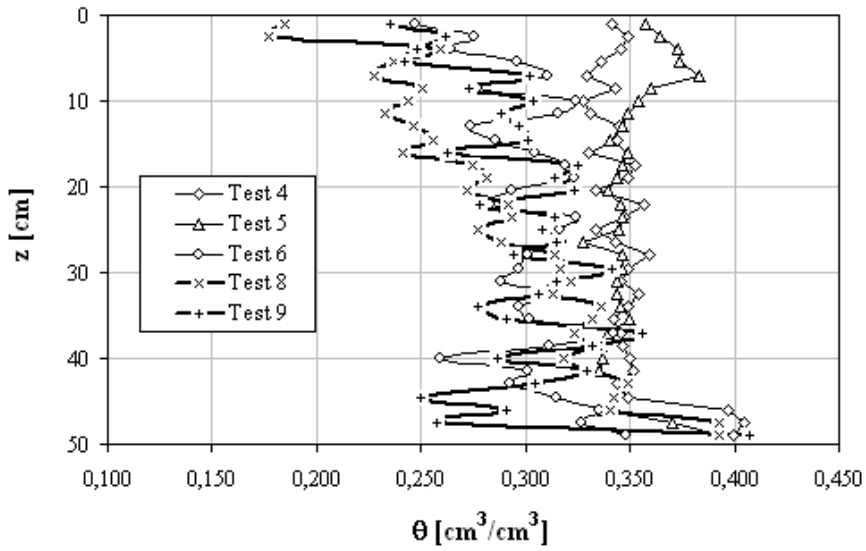


FIG. 6.31: Profil de teneur en eau après le test de dispersion du sable (Tests 4, 5 et 8) et du milieu à DP (Tests 6 et 9).

6.5.2 Comparaison des comportements en fonction de la teneur en eau

6.5.2.1 Milieu homogène : sable

La figure 6.33 présente les courbes de percée obtenues pour le sable en des conditions saturées et insaturées. La comparaison entre les Tests 1, 4 et 5 montre que la dispersivité (qui est déduit du coefficient de dispersion ajusté, voir détail dans le chapitre 7) en condition insaturée semble être

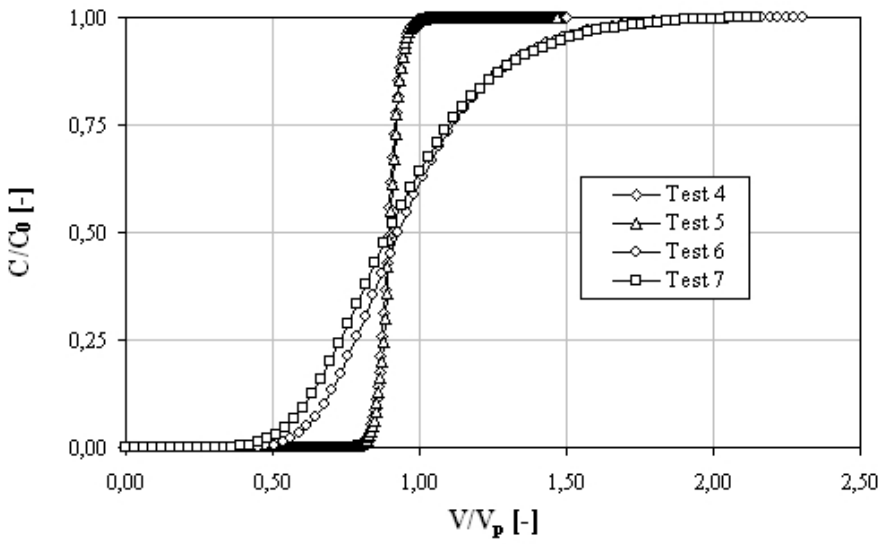


FIG. 6.32: Courbes de percée du sable (Tests 4 et 5) et du milieu à DP (tests 6 et 7).

légèrement plus faible qu'en saturée (profil plus raide). Ce résultat est en contradiction avec ceux de Padilla *et al.* (1999) et Nutzmann *et al.* (2002). Cependant, le Test 8 en condition insaturée présente une dispersivité plus importante, accompagnée d'un comportement non Fickien. Nous supposons donc que ce comportement résulte de la distribution non uniforme de la teneur en eau qui devient d'autant plus significative que le milieu est moins saturé (influence sur la connexité de la phase liquide) (FIG. 6.31).

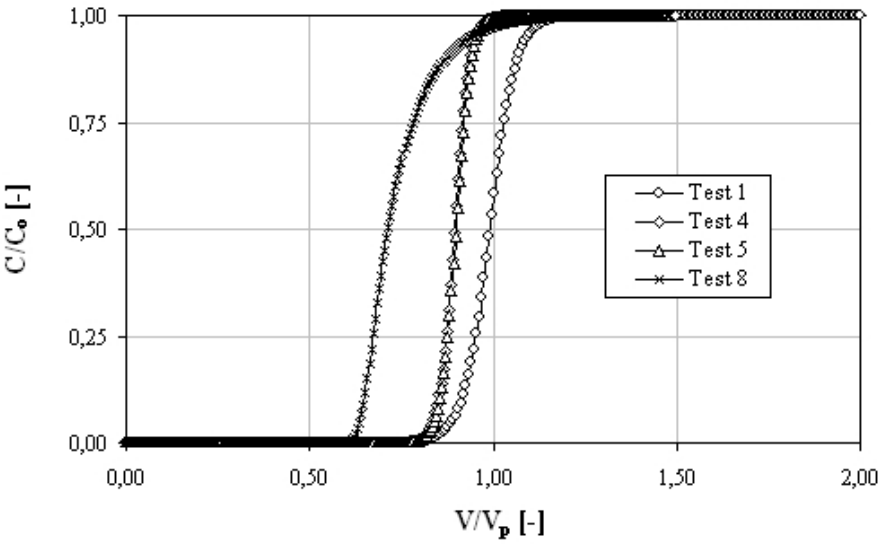


FIG. 6.33: Comportements de la dispersion dans les milieux sableux en condition saturée (Test 1) et insaturé (Tests 4, 5 et 8).

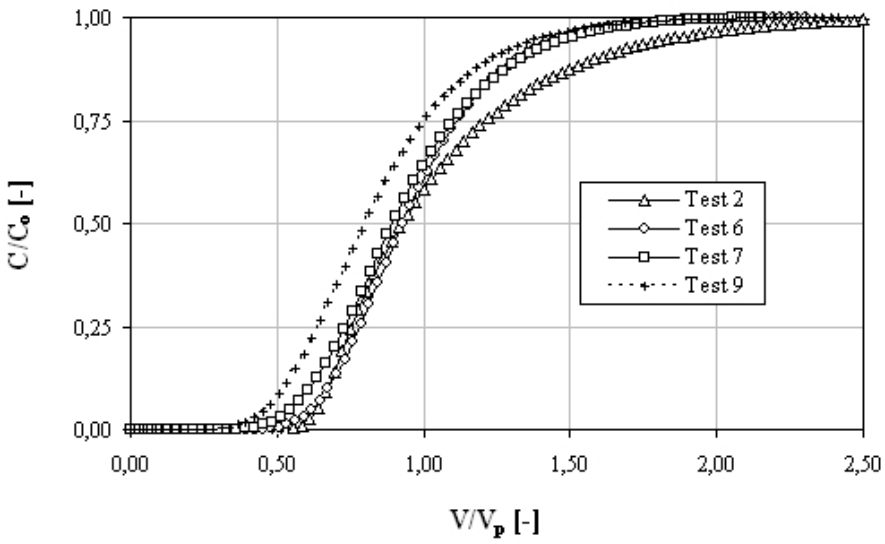


FIG. 6.34: Comportements de la dispersion dans les milieux à DP en condition saturée (Test 2) et insaturée (Tests 6, 7 et 9).

6.5.2.2 Milieu hétérogène à double-porosité

La figure 6.34 présente une comparaison entre les courbes de percée obtenues pour le milieu à double-porosité. Pour rendre possible la comparaison entre les tests réalisés dans des conditions opposées (« pollution » ou « dépollution »), pour les Tests 2 et 9 nous avons tracé les valeurs (1-C/C_0). Cette transformation semble délicate pour le milieu à double porosité et peut introduire des erreurs d'interprétation, mais a été retenue comme première approximation. Nous remarquons que le phénomène de dispersion dans le milieu à double-porosité est non Fickien indépendamment du degré de saturation : les courbes de percée sont asymétriques, avec une arrivée prématurée et un effet de traînée. On peut observer deux types de comportement, aux temps courts et aux temps longs, en fonction de la teneur en eau. Le soluté sort (légèrement) plus vite du milieu le moins saturé en eau (sauf pour Test 6 en raison d'un bilan de masse non respecté (voir TAB. 6.5)). Aux temps longs, la durée de la traînée est d'autant plus longue que le milieu est plus saturé. Ce dernier effet est très marqué dans les courbes de percée. Seyfried et Rao (1987), Gaber *et al.* (1995) ont observé le fait de l'arrivée prématurée de la concentration et la traînée plus longue dans le milieu hétérogène saturé que dans celui non saturé, lorsqu'ils ont réalisé des expériences de traceur dans une colonne de sol. Notons enfin que l'hétérogénéité de la distribution de teneur en eau est multipliée dans le milieu à DP non saturé (FIG. 6.31). Ceci peut avoir un effet important sur le transport de soluté dans un tel milieu.

6.6 Conclusion

Nous avons présenté des expériences de dispersion d'un traceur (NaCl) dans les milieux à SP (sable et argile solidifiée) et dans un milieu à DP. Elles ont été réalisées en condition saturée et insaturée pour différentes valeurs du débit d'écoulement d'eau (ou de la solution saline). Le milieu à DP est un modèle physique dont la microstructure est composée de sable et de sphères d'argile poreuse solidifiée par traitement thermique, arrangées de manière périodique. Les propriétés de transport de ces deux matériaux sont suffisamment contrastées pour pouvoir observer des effets de « double-structure ».

Le dispositif expérimental nous a permis de réaliser un écoulement insaturé uniforme dont le profil de la teneur en eau est vérifié par gammamétrie. Ceci est très important dans l'étude de la dispersion. Cependant, les expériences ont été réalisées dans des conditions de forte saturation en eau (73% - 100%). La teneur en eau pourrait être mesurée avec plus de précision si on effectuait des comptages γ en plusieurs sections de la colonne de sol. Le bilan de masse pourrait être amélioré avec un meilleur lavage des milieux.

Les résultats expérimentaux nous permettent non seulement de mettre en évidence le caractère non-Fickien du transport dans un milieu à double-porosité saturé et non saturé, mais aussi d'identifier la différence entre le comportement dispersif dans les milieux homogène et hétérogène en fonction du degré de saturation. Dans les conditions saturées on observe dans le milieu à double porosité un léger retard de l'apparition du soluté et un effet de traînée plus longue que dans les conditions non saturées. La diminution de la teneur en eau semble donc présenter un effet accélérateur par rapport au cas saturé pour le milieu à simple-porosité, ainsi pour le milieu à double-porosité. Néanmoins, ce comportement peut être fortement affecté par la distribution hétérogène de la teneur en eau. Le comportement non-Fickien a été également observé dans le milieu à simple-porosité et l'effet de traînée dans ce cas se manifeste différemment par rapport au cas du milieu à double-porosité selon le degré de saturation. L'origine de cette observation est associée à la distribution non uniforme de la teneur en eau.

Ces expériences fournissent des données dans un domaine peu abordé dans la littérature, l'influence de la distribution de la teneur en eau sur le transport de soluté. Le transport de soluté est influencé par la morphologie intrinsèque du milieu poreux (hétérogénéités) et par la distribution non uniforme de la teneur en eau.

Dans le chapitre 7, les expériences sont comparées avec les résultats des simulations numériques relatives au modèle développé (chapitre 2). Pour cela, nous avons sélectionné les expériences réalisées dans les mêmes conditions de saturation entre les expériences à simple et double-porosité, du point de vue du bilan de masse : Test 1 et 3 pour les expériences dans le sable et l'argile saturé ; Test 4 et 5 pour les expériences dans le sable non saturé ; Test 2 pour l'expérience du milieu à double-porosité saturé et Test 6, 7 et 13 pour les expérience du milieu à double-porosité non saturé. Les résultats de ces expériences nous donnent l'ensemble suffisant des informations qui permet de confronter avec le modèle théorique pour sa validation.

Chapitre 7

Validation expérimentale du modèle de dispersion-convection dans un milieu à double-porosité non saturé

7.1 Objectif et démarche

L'objectif de ce chapitre est de valider expérimentalement le modèle DP-Dispersion-Convection développé dans le chapitre 2. Nous comparons les résultats des expériences effectuées sur le modèle physique à double-porosité avec les résultats des simulations numériques du modèle DP-Dispersion-Convection, en utilisant le logiciel COMSOL Multiphysics.

La démarche est la suivante. Tout d'abord, les expériences sur le sable et sur l'argile dans les conditions saturées et non saturées ont été interprétées par analyse inverse afin de déterminer le coefficient de dispersion pour chaque expérience. A partir des valeurs obtenues nous avons calculé la dispersivité à saturation pour chacun de deux matériaux $\lambda_{sable}(\theta_S)$ et $\lambda_{argile}(\theta_S)$. Ces valeurs nous ont servit comme valeurs initiales dans la calibration du modèle à double-porosité. Il faut noter que nous n'avons pas pu utiliser la dispersivité du sable $\lambda_{sable}(\theta < \theta_S)$ obtenue à partir des expériences dans les conditions non saturées pour calculer le coefficient de dispersion du matériau à double-porosité non saturé. La raison est que nous avons obtenu une valeur inférieure à la dispersivité du milieu saturé. Ce qui présente une incohérence par rapport à certains résultats trouvés dans la littérature (Padilla *et al.* 1999, Nutzmann *et al.* 2002, Toride *et al.* 2003).

Dans la validation du modèle à double-porosité, nous avons utilisé les résultats de quatre expériences : Test 2 (condition saturée), Tests 6, 7 et 13 (condition non saturée). Les Tests 2 et 6 ont servit à calibrer le modèle DP-Dispersion-Convection, c-à-d déterminer le coefficient de dispersion longitudinale du milieu à double-porosité saturé et non saturé. Tandis que les Tests 7 et 13 ont été utilisés pour comparer les résultats de simulations numériques avec les résultats expérimentaux, et ainsi valider le modèle.

Dans les parties qui suivent, la procédure de la validation expérimentale est présentée. L'effet de double-porosité est mise en évidence par comparaison avec le comportement du milieu à simple-porosité. En fin, nous présentons une discussion concernant le domaine de validité de la modélisation effectuée.

7.2 Simulations numériques des expériences de dispersion dans le sable et dans l'argile solidifiée

Nous analysons les résultats d'expériences de type échelon, effectuées sur le sable dans les conditions saturées (Test 1) et non saturées (Tests 4 et 5), ainsi que sur l'argile solidifiée dans les conditions saturées (Test 3). Les expériences ont été présentées en détail dans le chapitre 6.

7.2.1 Principe de l'analyse inverse

Les courbes de percée de Test 1, 3, 4 et 5 (FIGs. 6.23 et 6.27 du chapitre 6) sont utilisées pour déterminer le coefficient de dispersion du modèle classique Dispersion-Convection, par analyse inverse avec l'aide du code CXTFIT (Toride *et al.* 1999). Ce logiciel utilise la méthode des moindres carrées de Levenberg-Marquardt (Marquardt 1963). Les paramètres du modèle sont déterminés par la minimisation d'une fonction coût SSQ

$$SSQ(b) = \sum_{i=1}^{N} \left[C(x_i) - f(x_i, b)\right]^2, \tag{7.1}$$

où $\vec{b}$ représente le vecteur des paramètres à ajuster b_j $(j = 1, ...M)$; C et f sont les concentrations observée et ajustée pour la donnée i ème $(i = 1, ...N)$ respectivement. La qualité de l'ajustement

est décrite par le coefficient de détermination R^2 et la moyenne d'erreur de racine au carré MSE

$$R^2 = 1 - SSQ/\sum_{i=1}^{N}\left(C_i - \overline{C}\right)^2, \tag{7.2}$$

$$MSE = SSQ/(N - M), \tag{7.3}$$

avec $\overline{C}$ est la moyenne de N concentrations observées.

7.2.2 Equations à résoudre, conditions initiales et aux limites

Dans le cas unidimensionnel, l'équation de transport CDE d'un soluté inerte sous la condition de l'écoulement permanent saturé/non saturé dans le milieu homogène est

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_p \frac{\partial C}{\partial z} \tag{7.4}$$

où $v_p = \langle v \rangle / \theta$ est la vitesse moyenne de pores et D_p est le coefficient de dispersion dans la phase liquide.

Le problème nécessite des conditions initiale et aux limites :

– Condition initiale :

$$t \leq 0, \;\; C(z,0) = C_i, \;\; C_i \text{ est la concentration initiale.} \tag{7.5}$$

– Conditions à l'entrée :

$$t > 0, \;\; v_p\, C(0,t) - D_p \frac{\partial C}{\partial z} = v_p\, C_e, \tag{7.6}$$

où C_e est la concentration imposée à l'entrée.

– Conditions à la sortie :

$$t > 0, \;\; \frac{\partial C(\infty, t)}{\partial z} = 0. \tag{7.7}$$

Nous utilisons la condition de flux à l'entrée (7.6), car elle est physiquement en accord avec notre protocole expérimental. Ce type de condition est préféré pour la plupart des scénarios du transport, parce qu'il conserve la masse si on ignore la dispersion hors le milieu (van Genuchten et Parker 1984).

La condition (7.7) est prise en compte dans toutes les solutions dans le code CXTFIT. Notons que ce code utilise la solution analytique pour le problème (7.4) - (7.7) (Toride *et al.* 1999).

Test	**L** [m]	$\boldsymbol{\theta}$ [-]	$\langle \boldsymbol{v} \rangle$ [m/s]	$\boldsymbol{v_p}$ [m/s]	C_i [g/l]	C_e [g/l]
1	0,501	0,399	5,90e-6	14,78e-6	20	0
3	0,259	0,343	1,28e-6	3,73e-6	20	0
4	0,503	0,355	3,44e-6	9,66e-6	0	5
5	0,502	0,357	3,44e-6	9,61e-6	0	5

TAB. 7.1: Conditions initiales et aux limites pour les Tests 1, 3, 4 et 5.

Les conditions initiales et aux limites de chaque test sont reportées dans le tableau 7.1. L'analyse inverse consiste donc à déterminer le paramètre D_p.

7.2.3 Résultats et discussions

Les résultats de l'ajustement de Tests 1 et 3 sont reportés dans le tableau 7.2 : le coefficient de dispersion ajusté (D_1=θ D_p) et les critères statistiques. Les figures 7.1 et 7.2 présentent les courbes de percée ajustées et expérimentales dans le milieu saturé : Test 1 (sable) et Test 3 (argile solidifiée). La qualité de l'ajustement est très bonne. Les coefficients de détermination du Test 1 et 3 sont très proches de 1 (0,9996 et 0,9989 respectivement). Alors que la courbe du calage de Test 1 est superposé sur les data expérimentales, celle de Test 3 est un peu décalée au début (voir explications dans le chapitre 6). Nous pouvons remarquer que la dispersivité du sable à saturation $\lambda(\theta_S = 0,399)$=0,092 cm correspond aux ordres de grandeur reportés dans la littérature pour les matériaux granulaires, (10^{-4} - 10^{-3}) m (TAB. 7.3). Notons que la dispersivité a été calculé, selon la définition donnée par Bear (1972), de Marsily (1981), par la formule $\lambda = D_p/v_p$,.

Test	**Milieu**	$\mathcal{P}e$	$\mathbf{D_p}$ **[m²/s]**	$\mathbf{D_1}$ **[m²/s]**	λ **[m]**	**SSQ**	$\mathbf{R^2}$	**MSE**
1	Sable	1,6	1,36e-8	5,43e-9	9,20e-4	3,37e-2	0,9996	9,28e-5
3	Argile	0,2e-2	1,27e-8	4,34e-9	3,25e-3	3,61e-2	0,9989	2,11e-4

TAB. 7.2: Résultats de l'ajustement du coefficient de dispersion dans le sable saturé, Tests 1 et 3. ($\mathcal{P}e = v_p\, d_{50}/D_0$, D_0=1,545×10^{-9} m^2/s)

La courbe d'ajustement pour les Tests 4 et 5 (sable non saturé avec le profil de la teneur en eau dite uniforme, FIG. 6.31, chapitre 6) est présentée sur la figure 7.3. Le tableau 7.4 présente les paramètres du modèle, ainsi que le coefficient de dispersion D_p obtenu par l'analyse inverse, accompagnés des critères statistiques. La dispersivité obtenue est $\lambda(\theta = 0,355)$=0,044 cm qui

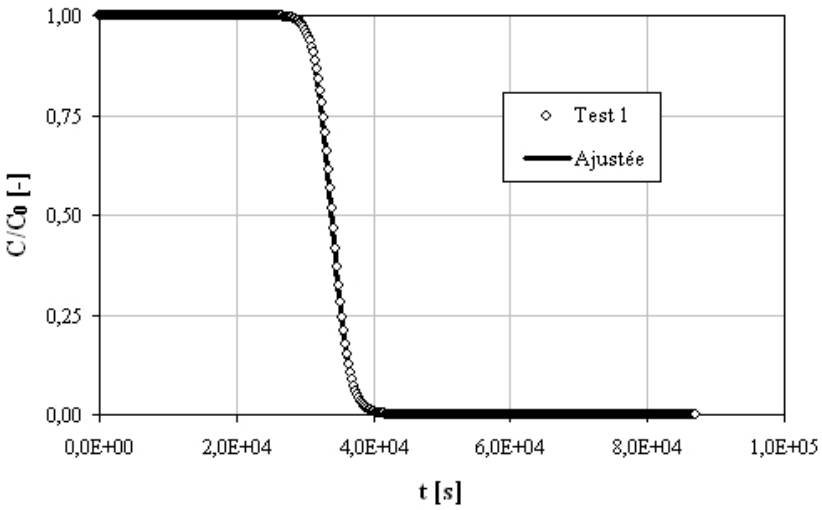


FIG. 7.1: Courbes de percée de l'ajustement et Test 1 (sable saturé).

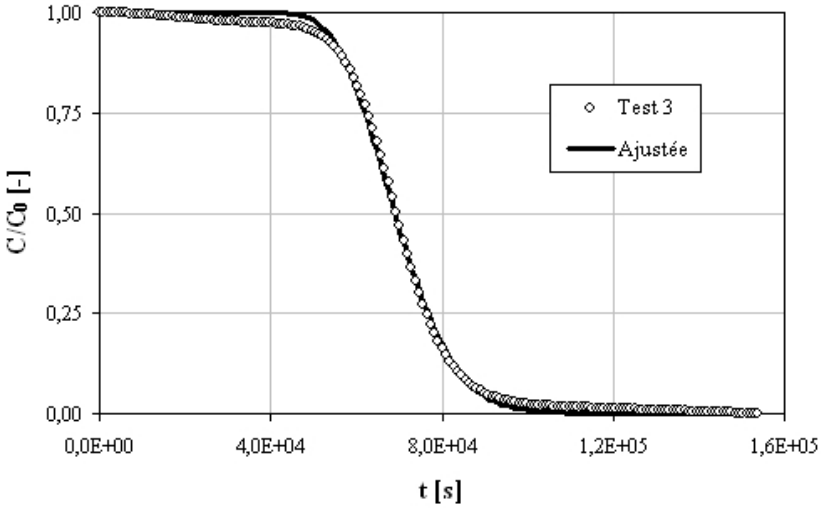


FIG. 7.2: Courbes de percée de l'ajustement et Test 3 (argile saturée).

Milieu	d_{50} **[μm]**	θ_S **[-]**	λ **[m]**	**Ref.**
Sable silicat	250	0,45	3×10^{-4}	Padilla *et al.* 1999
Bille de verre	503	0,370	5×10^{-4}	Nutzmann *et al.* 2002
Sable grossier	603	0,370	4×10^{-3}	Nutzmann *et al.* 2002
Sable	280	0,340	1×10^{-3}	Toride *et al.* 2003
Sable	190	0,415	6×10^{-4}	Sato *et al.* 2003
Sable	140	*	6×10^{-4}	Torkzaban *et al.* 2006

TAB. 7.3: Dispersivité à saturation de certains milieu homogène (* : pas communiqué).

Test	Milieu	θ [-]	$\mathcal{P}e$	D_p [m²/s]	D_1 [m²/s]	λ [m]	SSQ	R^2	MSE
4 et 5	Sable	0,355	1	4,20e-9	1,50e-9	4,37e-4	1,82e-1	0,9969	6,34e-4

TAB. 7.4: Résultats de l'ajustement du coefficient de dispersion dans le sable non saturé, Test 4 et 5. ($\mathcal{P}e = v_p\, d_{50}/D_0$, D_0=1,545×10^{-9} m^2/s).

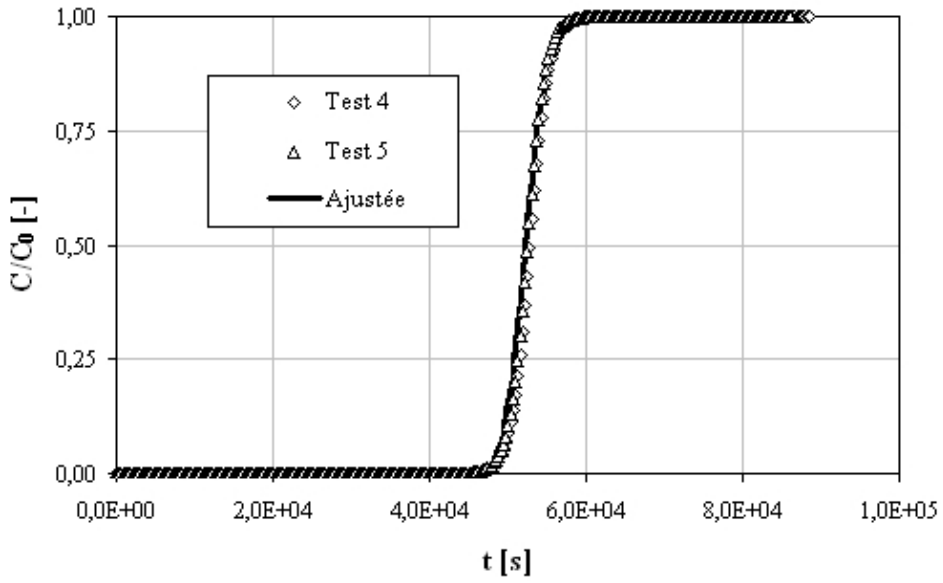


FIG. 7.3: Courbes de percée de l'ajustement et Test 4 et 5 (sable non saturé).

est inférieure à celle dans le milieu saturé, Test 1 $\lambda(\theta_S = 0,399)$=0,092 cm. Ce résultat est en contradiction par rapport aux résultats reportés dans Padilla *et al.* (1999), Nutzmann *et al.* (2002), Toride *et al.* (2003). Notons que ces dispersivités ont été trouvées à partir d'expériences non saturées dont l'uniformité du profil de la teneur en eau n'est pas précisée.

Puisque les expériences dans les conditions non saturées s'avèrent délicates, dans la suite nous avons privilégié notre résultat concernant la dispersivité obtenu dans le cas saturé.

Le résultat concernant la dispersivité de l'argile $\lambda_{arg}(\theta_S = 0,343) = 3,25 \times 10^{-3}$ m dans le cas saturé n'est pas fiable à cause du problème de la fissuration de l'échantillon.

7.2.4 Conclusion

Nous avons utilisé les expériences de dispersion dans le sable et dans l'argile solidifiée pour déterminer la dispersivité de ces deux matériaux, qui pourraient être utilisées dans le calcul des paramètres effectifs du matériau à double-porosité (sable et argile). Cependant, les résultats obtenus n'ont été utilisé que partiellement à cause des problèmes de différents nature (incohé-

rence entre les résultats obtenus dans le cas saturé et non saturé, problèmes expérimentaux). Concrètement, les résultats d'expériences sur les matériaux (sable et argile solidifiée) constituant les matériaux à double-porosité ont été utilisé comme les valeurs initiales dans la phase de la calibration du modèle à double-porosité.

7.3 Simulations numériques de l'expérience de dispersion dans le milieu à double-porosité saturé

Nous avons utilisé l'expérience dans le milieu à double-porosité saturé (Test 2) pour déterminer le coefficient de dispersion à saturation du milieu à double-porosité, D_{disp}^{DP}.

Pour le milieu à double-porosité saturé, nous considérons que la teneur en eau dans le sable est la même que la porosité du sable mesurée par gravimétrie, $\theta_{1S} = 0,386$ (très proche de la valeur $\theta_S = 0,399$ de Test 1) et que la teneur en eau dans l'argile est la même que la porosité mesurée par gammamétrie (Test 3), $\theta_{2S} = 0,343$. La valeur moyenne calculée $\langle\theta_S\rangle = \phi_1\,\theta_{1S}(sable) + \phi_2\,\theta_{2S}(argile) = 0,364$ est légèrement différente de la valeur moyenne mesurée par gammamétrie $\langle\theta_S\rangle = 0,354$ (la différence est de 3% comme la précision de la mesure prononcée).

7.3.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites

Les simulations numériques de l'expérience de la dispersion dans le milieu à double-porosité saturé sont réalisées à partir du modèle macroscopique DP-Dispersion-Convection qui est développé dans le chapitre 2 Eqs. (2.191 - 2.193). Dans la condition unidimensionnelle ce modèle est décrit par deux équations couplées

$$\phi_1 \frac{\partial\,(\theta_{1S}\,C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{disp}^{DP}\,(\theta_{1S})\,\frac{\partial C}{\partial z} - \langle v\rangle\,C\right) - Q(C,t), \tag{7.8}$$

$$\frac{\partial(\theta_{2S}\,C_2)}{\partial t} = D_2(\theta_{2S})\left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_2}{\partial r}\right) \quad \text{dans } \Omega_2. \tag{7.9}$$

Le terme source $Q(C,t)$ est déterminé par

$$Q(C,t) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Gamma} D_2(\theta_{2S})\,\frac{\partial C_2}{\partial r}\,d\Gamma. \tag{7.10}$$

Nous utilisons l'implémentation numérique du modèle DP-Dispersion-Convection présentée dans le chapitre 3. Les conditions initiales et aux limites sont comme suit :

– Condition initiale pour Eqs. (7.8 - 7.9)

$$t \leq 0, \quad C = C_2 = C_0 = 20\,(\mathrm{g/l}). \tag{7.11}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.8) :

$$z = 0,\ t > 0\ : \quad C_e = 0, \tag{7.12}$$

$$z = L,\ t > 0\ : \quad D_{disp}^{DP}(\theta_S)\ \frac{\partial C}{\partial z} = 0. \tag{7.13}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.9) :

$$t > 0,\ C_2 = C \quad \text{sur l'interface} \quad r = 0, \tag{7.14}$$

$$t > 0,\ D_2(\theta_{2S})\ \frac{\partial C_2}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R. \tag{7.15}$$

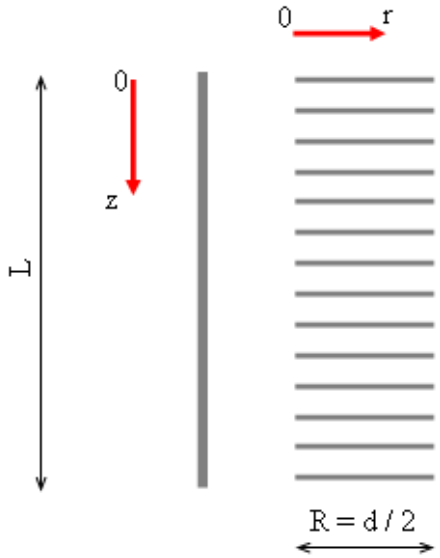


FIG. 7.4: Schéma de la résolution numérique du problème (7.8) - (7.15).

7.3.2 Paramètres de la solution numérique

La simulation numérique est réalisée avec le code COMSOL Multiphysics, en respectant la stratégie de l'implémentation présentée dans le chapitre 2. Le domaine macroscopique est uni-

formément discrétisé en 100 d'éléments ($\Delta z = 0,5$ cm, 101 noeuds). Du fait que le rayon des inclusions sphériques est petit $r = 3,2 \times 10^{-3}$ m devant la longueur macroscopique $L = 0,5$ m, le domaine d'inclusions est finement maillé en multipliant le facteur de re-échelle L/r pour la direction r afin d'augmenter le nombre d'éléments(1483 d'éléments triangulaires). Selon la direction r, on a 20 noeuds, soit 19 de segments (Δr =0,017 cm). Le maillage est plus fin, quand il est plus proche de l'interface avec le domaine macroscopique. Le pas de temps varie de 0,001 s à 1 s. Le critère de convergence n'est pas modifié par rapport au présenté dans le chapitre 3. Le temps de résolution est de l'ordre de 1 s à l'aide d'un ordinateur 1,99 GHz/1,99 Go de RAM.

7.3.3 Calibration du modèle à double-porosité saturé

L'expérience dans le milieu à double-porosité saturé (Test 2) a été réalisée dans les conditions qui sont reportées dans le tableau 7.5. Nous calibrons deux paramètres : le coefficient de dispersion D_{disp}^{DP} et le coefficient de diffusion dans les billes d'argile solidifiée D_2). La valeur de D_2 est déduite à partir de celle de la brique ancienne étudiée par Ahl (2003) ($1,469 \times 10^{-10}$ m^2/s). D_{disp}^{DP} est initialement estimé par celui obtenu dans le sable saturé, dans les mêmes conditions d'expériences, c-à-d la même vitesse d'écoulement ($D_{disp}^{SP}(\theta_S) = 5,246 \times 10^{-9}$ m^2/s).

Test	**L** [m]	ϕ_1 [-]	ϕ_2 [-]	θ_{1S} [-]	θ_{2S} [-]	$\langle v \rangle$ [m/s]
2	0,503	0,483	0,517	0,386	0,343	5,90e-6

TAB. 7.5: Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP saturé (Test 2).

Test	$\mathbf{D}_2$ [m^2/s]	$\mathbf{D}_{disp}^{DP}$ [m^2/s]	λ_{sat}^{DP} [m]
2	7,345e-11	2,713e-8	4,6e-3

TAB. 7.6: Paramètres calés du modèle à DP saturé (Test 2).

La figure 7.5 présente la courbe de percée de l'expérience (Test 2) et de la simulation pour le milieu à double-porosité saturé. Les deux paramètres calés (D_{disp}^{DP} et D_2 (TAB. 7.6)) nous donne une courbe de simulation qui reproduit bien l'expérience. Les critères de l'analyse inverse sont présentées dans le tableau 7.7.

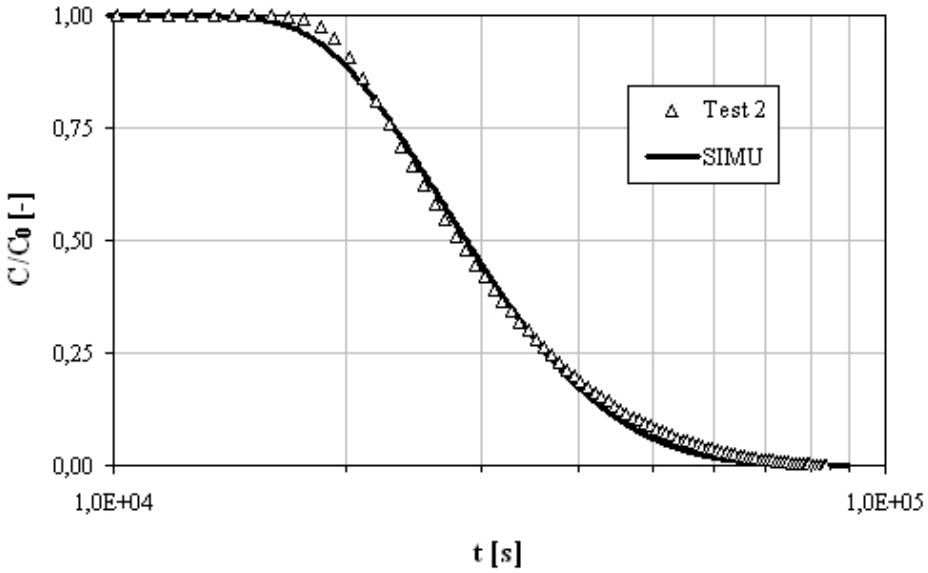


FIG. 7.5: Courbes de percée de l'expérience du milieu à DP saturé (Test 2) et de la simulation.

Critères	SSQ	R^2	MSE
Test 2	0,192	0,9983	2,73e-4

TAB. 7.7: Indicateurs statistiques pour la simulation de l'expérience du milieu à DP saturé (Test 2).

La dispersivité du matériau à double-porosité est calculé comme le rapport de $D_{disp}^{DP}/\langle v \rangle$. La valeur obtenue est λ_{sat}^{DP}=4,6×10^{-3} m.

7.4 Simulations numériques de l'expérience de dispersion dans le milieu à double-porosité non saturé

L'expérience dans le milieu à double-porosité (Test 6) a été utilisée pour déterminer le coefficient de dispersion du milieu à double-porosité dans la condition non saturée D_{disp}^{DP}. La teneur en eau moyenne mesurée par gammamétrie dans le milieu à double-porosité non saturé est de $(\langle \theta \rangle = 0,313$.

7.4.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites

Les équations à résoudre dans le cas du milieu à double-porosité non saturé s'écrivent (Eqs. 2.191 - 2.193)

$$\phi_1 \frac{\partial\left(\theta_1 C\right)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{disp}^{DP}\left(\theta_1\right)\frac{\partial C}{\partial z} - \langle v\rangle C\right) - Q(C,t), \tag{7.16}$$

$$\frac{\partial(\theta_2 C_2)}{\partial t} = D_2(\theta_2)\left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_2}{\partial r}\right) \quad \text{dans } \Omega_2. \tag{7.17}$$

Le terme source $Q(C,t)$ est déterminé par

$$Q(C,t) = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Gamma} D_2(\theta_2)\,\frac{\partial C_2}{\partial r}\,d\Gamma. \tag{7.18}$$

Les conditions initiales et aux limites sont suivantes :

– Condition initiale pour Eqs. (7.16 - 7.17)

$$t \leq 0,\ C = C_2 = 0\ (\text{g/l}). \tag{7.19}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.16) :

$$z = 0,\ t > 0\ :\quad \langle v\rangle\ C - D_{disp}^{DP}\left(\theta_1\right)\frac{\partial C}{\partial z} = \langle v\rangle\ C_e, \tag{7.20}$$

$$\text{où } \langle v\rangle = 3,44\times 10^{-6}\ (\text{m/s});\quad C_e = 5\ (\text{g/l}),$$

$$z = L,\ t > 0\ :\quad D_{disp}^{DP}\left(\theta_1\right)\frac{\partial C}{\partial z} = 0. \tag{7.21}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.17) :

$$t > 0,\ C_2 = C \quad \text{sur l'interface} \quad r = 0, \tag{7.22}$$

$$t > 0,\ D_2(\theta_2)\,\frac{\partial C_2}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R. \tag{7.23}$$

7.4.2 Calibration du modèle à double-porosité non saturé

La première étape de calibration consiste en estimation de la teneur en eau du chaque domaine (i. e. θ_1 et θ_2) . Nous disposons de la mesure de la teneur en eau moyenne par gammamétrie. Les teneurs en eau dans chaque domaine seront estimées. On suppose que dans le domaine 1 (sable),

θ_1 est égale à celle dans Tests 4 et 5 (0,355) du fait de la même condition d'écoulement non saturé. D'autre part, l'expérience a été réalisée près de la saturation, donc nous considérons que θ_2=θ_{2S}=0,343. Compte tenu de ces deux valeurs, la teneur en eau moyenne peut être calculée comme $\langle\theta\rangle = \phi_1\,\theta_1 + \phi_2\,\theta_2 = 0,49 \times 0,355 + 0,51 \times 0,343 = 0,348$. Nous trouvons que cette valeur est supérieure à la valeur mesurée par gammamétrie $\langle\theta\rangle_{mes} = 0,313$ (10% de différence qui correspond à la précision du bilan de masse pour Test 6, TAB. 6.5 chapitre 6). Ceci peut être expliqué par le fait que la saturation du milieu augmente très légèrement avec la durée (longue) du test. Nous considérons donc comme représentative les valeurs estimées $\theta_1 = 0,355$, $\theta_2 = 0,343$ et $\langle\theta\rangle = 0,348$.

Le tableau 7.8 présente les paramètres physiques de l'expérience dans le milieu à double-porosité non saturé. Nous avons supposé que le coefficient de diffusion $D_2(\theta_2)$ est le même que dans le cas saturé.

Test	**L** [m]	ϕ_1 [-]	ϕ_2 [-]	θ_1 [-]	θ_2 [-]	$\langle v\rangle$ [m/s]
6	0,510	0,490	0,51	0,355	0,343	3,44e-6

TAB. 7.8: Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 6).

La calibration nous a donné le coefficient de dispersion D_{disp}^{DP}=2,374×10^{-8} m^2/s. Les paramètres du modèle sont reportés dans le tableau 7.9.

Test	$\mathbf{D}_2$ [m^2/s]	$\mathbf{D}_{disp}^{DP}$ [m^2/s]	λ_{nsat}^{DP} [m]
6	7,345e-11	2,374e-8	6,9e-3

TAB. 7.9: Paramètres du modèle à DP non saturé (Test 6).

Le résultat de la simulation est présenté sur la figure 7.6. Les courbes de percée simulées et observée sont très bon en accord. La qualité de la calibration est décrite par les indicateurs statistiques (voir TAB. 7.10).

La dispersivité du matériau à double-porosité non saturé est calculée comme dans le cas saturé à partir du rapport $D_{disp}^{DP}/\langle v\rangle$. Nous avons obtenu λ_{nsat}^{DP}=6,9×10^{-3} m.

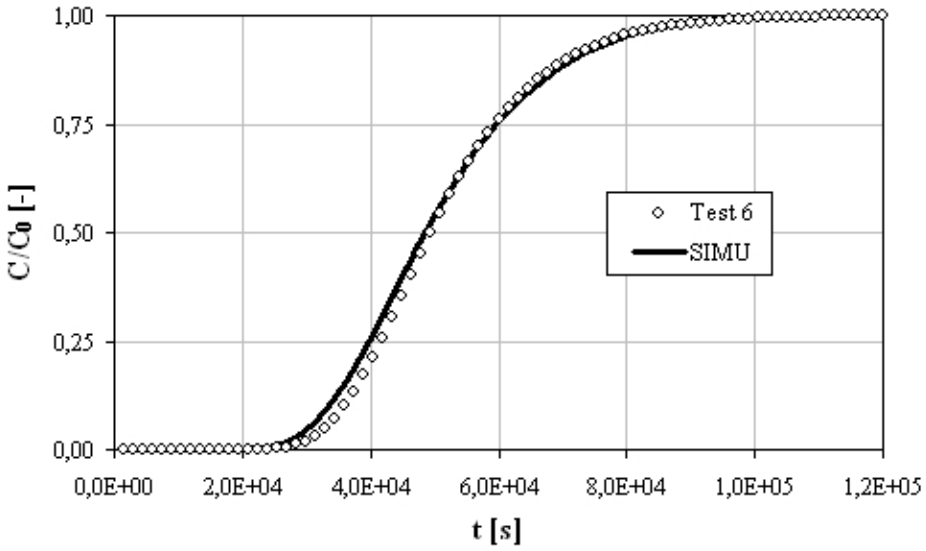


FIG. 7.6: Courbes de percée de la simulation et l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 6).

Critères	SSQ	R^2	MSE
Test 6	0,028	0,9981	3,50e-4

TAB. 7.10: Indicateurs statistiques pour la simulation de l'expérience du milieu à DP non saturé (Test 6).

7.5 Validation expérimentale du modèle à double-porosité non saturé

Nous comparons les résultats du Test 7 (type de sollicitation « échelon ») et du Test 13 (type de sollicitation « créneau ») en vue de valider expérimentalement le modèle à double-porosité DP-Dispersion-Convection dans les conditions non saturées, en utilisant les paramètres obtenus à partir du Test 6, TAB. 7.9. Notons que la teneur en eau des Tests 7 et 13 n'a pas pu être mesurée. Nous pouvons utiliser les valeurs θ_1 et θ_2 du Test 6 pour la simulation numérique des Test 7 et 13, parce que ces tests ont été réalisées dans la même condition d'écoulement non saturé.

7.5.1 Équations à résoudre, conditions initiales et aux limites

Les équations à résoudre sont les Eqs. 7.16 - 7.17. Pour le Test 7, les conditions initiales et aux limites sont les mêmes que celles pour le Test 6. Pour le Test 13, les conditions de sollicitation, les conditions initiales et aux limites sont comme suit :

– Condition initiale :

$$t \leq 0,\ C = C_2 = C_0 = 0. \tag{7.24}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.16) :

$$z = 0,\ 0 < t \leq t_0\ :\quad \langle v \rangle\ C - D_{disp}^{DP}(\theta_1)\ \frac{\partial C}{\partial z} = \langle v \rangle\ C_e, \tag{7.25}$$

$$z = 0,\ t > t_0\ :\quad \langle v \rangle\ C - D_{disp}^{DP}(\theta_1)\ \frac{\partial C}{\partial z} = \langle v \rangle\ C_0, \tag{7.26}$$

$$\text{avec}\quad t_0 = 4620\,\text{s};\quad \langle v \rangle = 3,44 \times 10^{-6}\ (\text{m/s});\quad C_e = 5\ (\text{g/l}).$$

$$z = L,\ t > 0\ :\quad D_{disp}^{DP}(\theta_1)\ \frac{\partial C}{\partial z} = 0. \tag{7.27}$$

– Condition aux limites pour Eq. (7.17) :

$$t > 0,\ C_2 = C \quad \text{sur l'interface} \quad r = 0, \tag{7.28}$$

$$t > 0,\ D_2(\theta_2)\ \frac{\partial C_2}{\partial r} = 0 \quad \text{pour} \quad r = R. \tag{7.29}$$

7.5.2 Comparaison entre la simulation numérique et l'expérience de type échelon

Nous avons utilisé les résultats du Test 7 qui a été effectué dans les mêmes conditions expérimentales que le Test 6, mais avec la longueur du milieu différente (voir TAB. 7.8 et 7.11). Les paramètres du modèle à double-porosité obtenus par la calibration du Test 6 (D_{disp}=2,374×10^{-8} m^2/s et D_2=7,345×10^{-11} m^2/s) sont appliqués. La figure 7.7 présente un excellent accord entre la simulation et l'expérience. Les indicateurs statistiques SSQ, R^2 et MSE qui sont de 0,002 ; 0,9999 et 2,44e-5 respectivement nous confirment le bon résultat.

Test	**L** [m]	ϕ_1 [-]	ϕ_2 [-]	θ_1 [-]	θ_2 [-]	$\langle v \rangle$ [m/s]
7 et 13	0,469	0,483	0,517	0,355	0,343	3,44e-6

TAB. 7.11: Paramètres physiques pour la simulation de l'expérience dans le milieu à DP non saturé (Test 7 et 13).

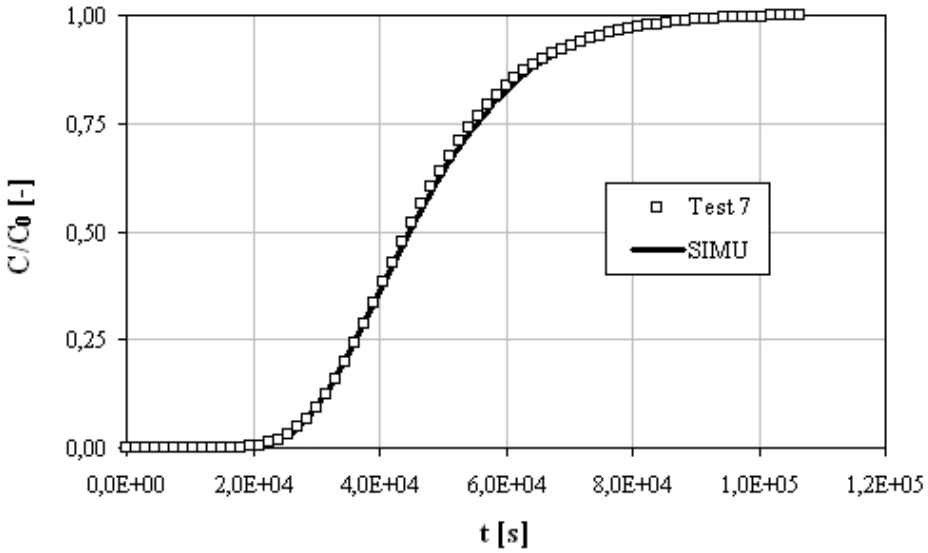


FIG. 7.7: Courbes de percée de la simulation et l'observation dans le milieu à DP non saturé (Test 7).

7.5.3 Comparaison entre la simulation numérique et l'expérience de type créneau

Nous avons utilisé les résultats du Test 13 dont les paramètres physiques sont reportés sur le tableau 7.11. Les paramètres du modèle à double-porosité utilisés dans les calculs sont ceux obtenus par calibration du test 6, D_{disp}^{DP}= 2,374×10^{-8} m^2/s et D_2=7,345×10^{-11} m^2/s. Une bonne correspondance entre les courbes de percée calculée et observée est de nouveau constatée (FIG. 7.8). Le tableau 7.12 présente les indicateurs statistiques pour montrer la qualité de la concordance entre les deux courbes.

Critères	**SSQ**	**R^2**	**MSE**
Test 7	0,002	0,9999	2,44e-5
Test 13	0,016	0,9820	3,55e-5

TAB. 7.12: Indicateurs statistiques pour la simulation des expériences dans le milieu à DP non saturé (Test 7 et 13).

7.5.4 Conclusion

Les résultats de simulations numériques présentés dans ce chapitre montrent que le modèle DP-Dispersion-Convection est capable de reproduire les expériences dans le milieu à double-porosité

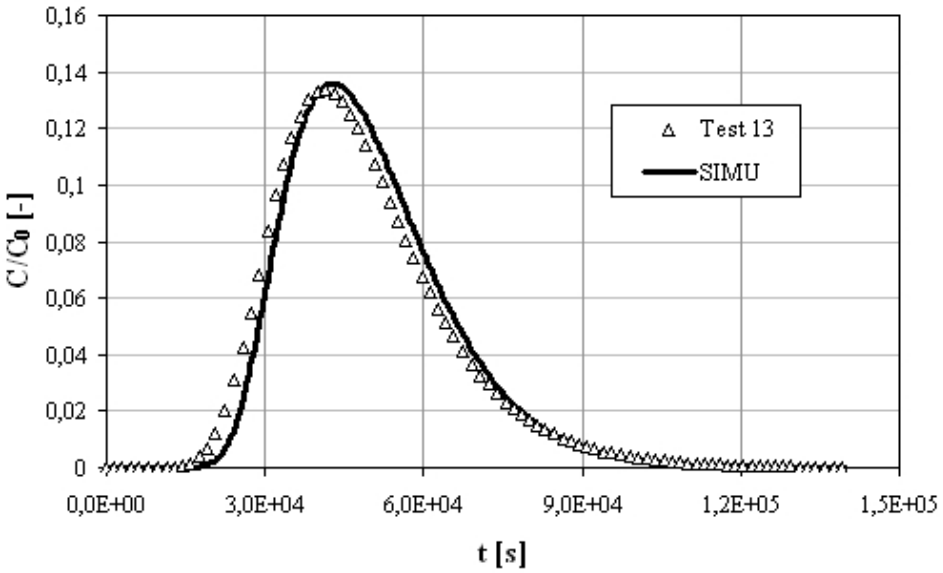


FIG. 7.8: Courbes de percée de la simulation et l'expérience dans le milieu à DP non saturé avec type créneau de soluté (Test 13).

non saturé avec différentes conditions de sollicitation. Les paramètres du modèle à double-porosité non saturé sont : D_{disp}^{DP}=2,374×10^{-8} m^2/s et $D_2(\theta_2)$=7,345×10^{-11} m^2/s.

L'expérience non saturée correspond à la teneur en eau moyenne $\langle\theta\rangle_{nsat}$=0,348 avec θ_1=0,355 et θ_2=0,343. Dans l'expérience saturée, la teneur en eau moyenne est $\langle\theta\rangle_{sat}$=0,364 avec θ_{1S}=0,386 et θ_{2S}=0,343. Dans ce dernier, nous avons obtenu : D_{disp}^{DP}=2,713×10^{-8} m^2/s et $D_2(\theta_2)$=7,345×10^{-11} m^2/s. Les tests saturé et non saturé ont été effectués avec des vitesses de Darcy différentes. Afin de comparer des résultats obtenus, nous avons calculé la dispersivité.

La dispersivité du matériau à double-porosité obtenue à partir des expériences peut être considérée comme un paramètre intrinsèque, mais dépendant de la saturation. Nous avons obtenu λ_{nsat}^{DP}=6,9×10^{-3} m et λ_{sat}^{DP}=4,6×10^{-3} m ($\lambda_{nsat}^{DP} > \lambda_{sat}^{DP}$). Ce résultat est cohérent avec certains résultats expérimentaux publiés dans la littérature sur des matériaux homogènes granulaires à simple-porosité (Padilla *et al.* 1999, Nutzmann *et al.* 2002, Toride *et al.* 2003).

7.6 Effet de double-porosité

L'effet de double-porosité peut être observé en comparant la courbe de percée du milieu à double-porosité non saturé (Test 7) avec celle du milieu à simple-porosité non saturé, c-à-d sable (Test 5) à la même valeur de la teneur en eau du sable θ=0,355, FIG. 7.9. L'arrivée de

la concentration C/C_0=0,5 de la courbe du milieu à double-porosité est retardée par rapport à la courbe du milieu à simple-porosité. Notons que la concentration C/C_0 =0,5 arrive au temps adimensionnel $V/V_p < 1$ dans les deux cas.

La courbe du milieu à simple-porosité est symétrique et moins dispersif (plus raide) que la courbe du milieu à double-porosité. On observe l'effet de traînée dans la courbe du milieu à double-porosité.

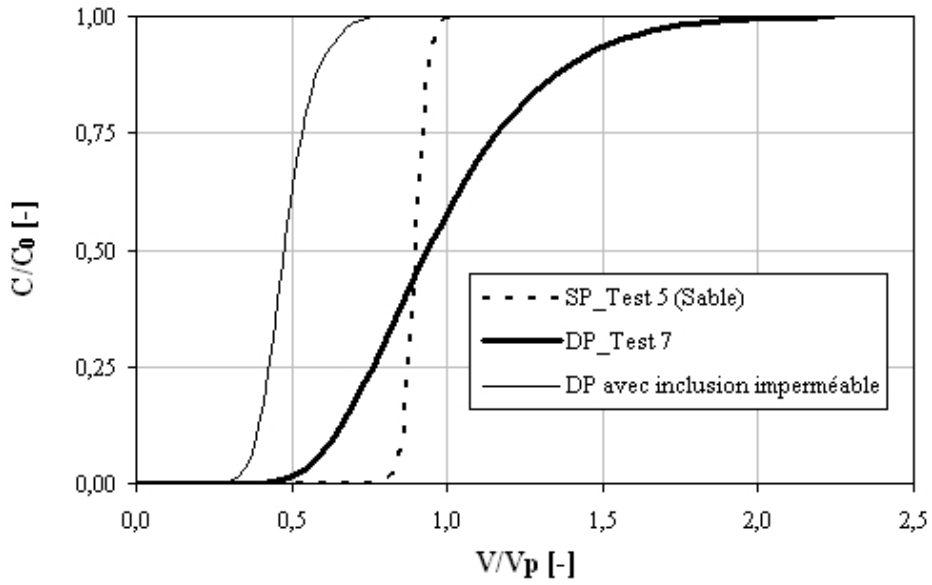


FIG. 7.9: Courbes de percée de simulation dans les milieux insaturés : sable-Test 5 (SP), DP-Test 7 (DP) et DP avec inclusion imperméable.

L'effet de double-porosité peut être aussi observé en comparant des courbes de percée du milieu à double-porosité et du milieu à double-porosité avec inclusion imperméable, obtenus dans les mêmes conditions de simulation (FIG. 7.9). Le transport préférentiel est visible dans ces deux courbes due à la présence des hétérogénéités. Dans le cas du milieu avec l'inclusion imperméable, la concentration sort de la colonne plus rapidement, c-à-d on obtient C/C_0=0,5 au temps adimensionnel $V/V_p < 0{,}5$, en plus il n'y a pas de traînée dans la courbe. La présence des inclusions poreuses provoque le retard de l'arrivée de concentration et l'effet de traînée.

L'échange du soluté entre la micro et macro-porosité est responsable de la traînée de la courbe de percée du milieu à double-porosité. Cet échange est décrit par le terme source $Q(x,t)$ et peut

être intégré sur le domaine Ω_1 par

$$TS = \frac{1}{\langle v \rangle \; C_0} \int_0^L Q(x,t)\, dx. \tag{7.30}$$

La figure 7.10 présente le terme source calculé et normalisé par le flux convectif pour le Test 7 (type échelon) et Test 13 (type créneau).

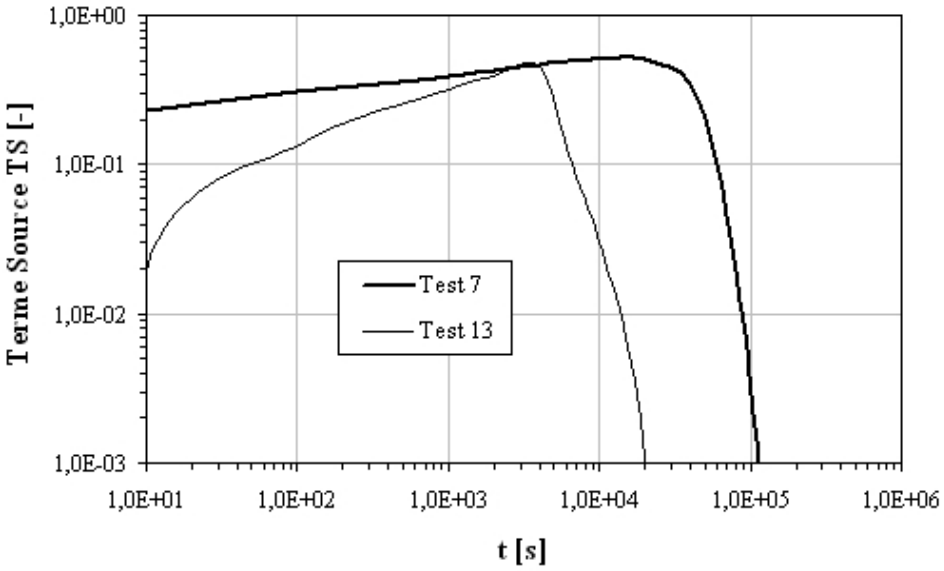


FIG. 7.10: Termes sources calculés sur tout le domaine pour le Test 7 et Test 13.

Nous trouvons donc les caractéristiques du comportement dit « à double-porosité » dans notre matériau modèle.

7.7 Domaine de validité

Nous analysons le domaine de validité du modèle DP-Dispersion-Convection (2.191 - 2.193) qui a été utilisé dans les simulations numériques des expériences Test 6, 7 et 13. Il s'agit de vérifier les conditions (2.185 - 2.186) :

$$K_2/K_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^2), \tag{7.31}$$

$$D_2/D_1 = \mathcal{O}(\varepsilon), \tag{7.32}$$

$$\mathcal{P}e_l = \frac{v_{1c}\, l}{D_1} = \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}). \tag{7.33}$$

Le petit paramètre ε est calculé à partir des caractéristiques géométriques des expériences (FIG. 7.11)

$$\varepsilon = \frac{l}{L} = 2,6 \times 10^{-2}. \tag{7.34}$$

où l=12,96 (mm) et L=500 (mm)

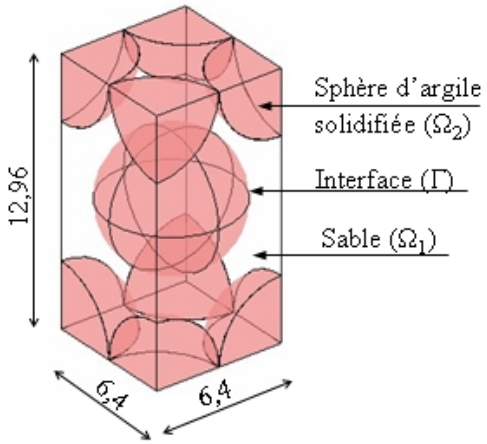


FIG. 7.11: Géométrie de la période du milieu à double-porosité (unité en mm)

Compte tenu des conditions des expériences près de la saturation nous considérons que les coefficients K sont des conductivités à saturation (voir FIG. 6.14 du chapitre 6). Donc, nous avons

$$K_1 = 2,86 \times 10^{-5} \text{ (m/s)}, \tag{7.35}$$

$$K_2 = 1,96 \times 10^{-8} \text{ (m/s)}, \tag{7.36}$$

et leur rapport est égale à

$$\frac{K_2}{K_1} = \frac{1,96 \times 10^{-8}}{2,86 \times 10^{-5}} = 6,9 \times 10^{-3}, \tag{7.37}$$

En ce qui concerne les coefficients de diffusion de deux matériaux (argile solidifiée D_2 et sable D_1), nous avons pour l'argile

$$D_2 = 7,345 \times 10^{-11} \text{ (m}^2\text{/s)} \tag{7.38}$$

et nous estimons à partir de la littérature la valeur pour le sable d'Hostun

$$D_1 = 10^{-9} \text{ (m}^2\text{/s)}, \tag{7.39}$$

Donc, le rapport est

$$\frac{D_2}{D_1} = \frac{7,345 \times 10^{-11}}{1 \times 10^{-9}} = 7,3 \times 10^{-2}. \tag{7.40}$$

En fin, le nombre de Péclet est calculé pour les Tests 6, 7 et 13 :

$$\mathcal{P}e_l = \frac{v_{1c}\, l}{D_1}, \tag{7.41}$$

où v_{1c}=3,44×10^{-6} (m/s), l=12,96×10^{-3} (m) et $D_1 = 10^{-9}$ (m^2/s), donc

$$\mathcal{P}e_l = 44. \tag{7.42}$$

Pour respecter le domaine de validité on devrait avoir

$$17,6 \times 10^{-6} \;<<\; \frac{K_2}{K_1} = \mathcal{O}(\varepsilon^2) \;<<\; 2,6 \times 10^{-2}, \tag{7.43}$$

$$6,7 \times 10^{-4} \;<<\; \frac{D_2}{D_1} = \mathcal{O}(\varepsilon) \;<<\; 1, \tag{7.44}$$

et

$$1 \;<<\; \mathcal{P}e_l = \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}) \;<<\; 14,79 \times 10^2. \tag{7.45}$$

En regardant les valeurs obtenues pour nos expériences, on peut conclure que le domaine de validité a été respecté.

Cette analyse pourrait être étendu pour prendre en compte la longueur interne du phénomène (Auriault et Lewandowska 1998).

7.8 Conclusion

Le modèle à double-porosité dispersion-convection non saturée a été validé par une série d'expériences de dispersion réalisées en conditions différentes. La procédure de cette validation a été présentée. Les simulations numériques dans la partie « validation » ont été réalisées à l'aide des paramètres déterminés à partir des expériences indépendantes. L'excellent accord de la comparaison entre ces simulations avec les différents types d'expériences (condition de sollicitation,

longueur macroscopique) a confirmé sa capacité de la prédiction du transport de soluté dans le milieu à double-porosité.

La dispersivité du matériau à double-porosité dépend de la saturation. Pour notre matériau modèle, nous avons obtenu λ_{nsat}^{DP}=6,9×10^{-3} m et λ_{sat}^{DP}=4,6×10^{-3} m. Enfin, nous pouvons observer que la dispersivité du milieu à double-porosité est de l'ordre de la taille de l'hétérogénéité (diamètre de bille d'argile d=6,4×10^{-3} m).

Chapitre 8

Conclusion et perspectives

8.1 Conclusion

Cette thèse présente le développement des modèles de transport de soluté associés au modèle de l'écoulement d'eau dans un milieu poreux à double-porosité non saturé, en utilisant la méthode d'homogénéisation périodique. Ces modèles ont été obtenus en supposant un fort contraste entre les propriétés physiques à l'échelle locale. En effet, nous avons fait l'hypothèse que le rapport des conductivités est de l'ordre ε^2 et le rapport des coefficients de diffusion est de l'ordre de ε^2 ou ε, ε étant un petit paramètre. Selon le nombre de Péclet local $\mathcal{P}\mathrm{e}_l$ nous obtenons différents modèles à double-porosité au niveau macroscopique : Diffusion (DP-Diffusion) ; Diffusion-Convection (DP-Diffusion-Convection) et Dispersion-Convection (DP-Dispersion-Convection). Ces modèles sont composés de deux équations micro-macro couplées. Ils sont capables de capturer le transport préférentiel dans le milieu hétérogène non saturé qui montre le non-équilibre local des concentrations. Le terme source dans le milieu à double-porosité représentant l'échange de soluté entre la micro- et macro-porosité est calculé à partir de la solution de l'équation locale.

L'homogénéisation donne la définition du tenseur de diffusion effective ou de dispersion qui dépend de la microstructure du milieu, ainsi que les propriétés de transport de la micro-porosité. Une série de calculs numériques nous a permis de trouver la relation entre la dispersivité et la teneur en eau dans le milieu à double-porosité, la dispersivité augmentant avec la diminution de la teneur en eau. Ce résultat a été confirmé par l'expérience sur le modèle physique à double-porosité.

L'implémentation numérique des modèles à double-porosité du transport a été réalisée à l'aide du logiciel COMSOL Multiphysics. Une stratégie particulière de cette implémentation permet de résoudre de façon couplée l'équation 1D à l'échelle macroscopique et une série d'équations 1D à l'échelle locale (calcul à deux échelles). Elle permet aussi d'accéder à la concentration dans la micro-porosité et de calculer le terme d'échange massique entre la micro- et macro-porosité.

Une série d'expériences de drainage a été réalisée dans le modèle physique à double-porosité, formé du sable Hostun et de billes d'argile solidifiée, arrangées périodiquement. Les simulations numériques de ces expériences ont été effectuées à l'aide du code DPOR-1D dans lequel le modèle macroscopique de l'écoulement obtenu par homogénéisation, a été implémenté (Thèse Szymkiewicz 2004). Un bon accord entre les simulations numériques et les mesures a permis de valider définitivement le modèle macroscopique de l'écoulement d'eau dans le milieu à double-porosité.

D'autre part, des expériences du transport d'un traceur passif (NaCl) dans le milieu physique à double-porosité, aont été réalisées. Elles ont été effectuées dans différentes conditions de saturation. Les résultats expérimentaux ont été confrontés avec les simulations numériques du modèle à double-porosité DP-Dispersion-Convection macroscopique obtenu par homogénéisation. Une excellente concordance entre les résultats numériques et expérimentaux dans différentes conditions a permis de « valider » le modèle théorique.

Néanmoins, un certain nombre de difficultés expérimentales a été mis en évidence. Le dispositif expérimental permet d'obtenir le profil de la teneur en eau uniquement près de la saturation. Pour le milieu à double-porosité, pendant le test de dispersion, ce dispositif n'a pas permis de obtenir le profil de teneur en eau totalement constant dans le temps. L'explication de la contradiction de la dispersivité entre le sable saturé et non saturé par rapport à la littérature reste ouverte. Finalement, le nombre d'expériences sur le sable n'a pas été suffisant pour pouvoir déterminer de façon fiable les caractéristiques de transport. Cette information est nécessaire pour permettre de calculer le coefficient de dispersion du milieu à double-porosité, en utilisant le problème local aux limites qui vient de l'homogénéisation.

Nonobstant ces remarques, ces résultats expérimentaux (du drainage d'eau et du transport de NaCl dans le modèle physique à double-porosité) peuvent être utilisés pour valider d'autres modèles à double-porosité. L'ensemble de ces résultats complète la littérature, pour laquelle on dispose rarement de données dans le domaine du transfert de masse en milieu à double-porosité.

Nous disposons d'un modèle complet de l'écoulement d'eau et du transport d'un soluté dans un milieu à double-porosité, obtenus par homogénéisation asymptotique. Cette méthode s'avère efficace pour la prédiction rigoureuse mathématiquement et physiquement des processus hydrodynamiques dans le milieu poreux multi-échelle.

8.2 Perspectives

Plusieurs voies de recherche peuvent être poursuivies pour le milieu à double-porosité. Au niveau théorique, une extension de l'étude présentée dans la thèse au cas du transport d'un soluté réactif, en prenant en compte les phénomènes de l'adsorption et de réactions chimiques, serait intéressante.

Les résultats obtenus dans la thèse ouvrent une voie pour une analyse approfondie de la dispersivité d'un matériau hétérogène, notamment dans le cas non saturé.

Sur le plan numérique, la poursuite du développement des calculs à deux échelles sous COMSOL Multiphysics peut être envisagée notamment dans le but de prendre en compte le couplage Thermo-Hydro-Mécanique, ainsi que le transport chimique.

Sur le plan expérimental, des expériences dans les conditions de faible saturation seraient nécessaires à l'aide de dispositifs plus sophistiqué.

Références

Ackerer P. et R. Mose (2000). An attempt at 3-d mass transport model verification by tracer test simulations. In A. Dassargues (Ed.), *Tracers and modelling in hydrogeology*, Volume 262, Liège, pp. 565. IAHA Publ.

Ackerer P. et A. Younes (2008). Efficient approximations for the simulation of density driven flow in porous media. *Adv. Water Res.* **31**(1), pp. 15–27.

Ackerer P., A. Younes et R. Mose (1999). Modeling variable density flow and solute transport in porous medium : 1. numerical model and verification. *Trans. Porous Media* **35**, pp. 345–373.

Ahl J. (2003). Salt diffusion in brick structures. *J. Mat. Sci.* **38**, pp. 2055–2061.

Ahmadi A., M. Quintard et S. Whitaker (1998). Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. v : Two-equation model for solute transport with adsorption. *Adv. Water Res.* **22**, pp. 59–86.

Auriault J. (1991). Heterogeneous medium. is an equivalent macroscopic description possible ? *Int. J. Engng Sci.* **29**, pp. 785–795.

Auriault J. (2002). *Cours de DEA « Homogénéisation »*. Ecole doctorale Mécanique et Energétique UJF-INPG.

Auriault J. et P. Adler (1995). Taylor dispersion in porous media : Analysis by multiple scale expansions. *Adv. Water Res.* **18**, pp. 217–226.

Auriault J. et J. Lewandowska (1993). Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media : macrotransport in the absence of advection. *Géotechnique* **43**(3), pp. 457–469.

Auriault J. et J. Lewandowska (1995). Non-gaussian diffusion modeling in composite porous medium by homogenization : tail effect. *Transp. Porous Media* **21**, pp. 47–74.

Auriault J. et J. Lewandowska (1996). Diffusion/adsorption/advection macrotransport in soils. *Eur. J. Mech., A/Solids* **15**(4), pp. 681–704.

Auriault J. L. (1987). Nonsaturated deformable porous media : Quasistatic. *Trans. Porous Media* **2**, pp. 45–64.

Auriault J. L. et J. Lewandowska (1998). Scale separation in diffusion/dispersion tests in porous media. In J. Thimus et al. (Ed.), *1ère BIOT Conference on Poromechanics*, Belgique, pp. 599–604. Balkema.

Baltean D., T. Lévy et S. Balint (2003). Diffusion-convection in a porous medium with impervious inclusions at low flow rates. *Transp. Porous Media* **51**, pp. 19–39.

Barenblatt G., I. Zheltov et I. Kochina (1960). Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in the fissured rocks. *J. Appl. Math.* **24**(5), pp. 1286–1303.

Bear J. (1961). On the tensor form of dispersion in porous media. *J. Geophys. Res.* **66**, pp. 1185–97.

Bear J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media.* New York : Elsevier.

Bejat L., E. Perfect, V. L. Quisenberry, M. S. Coyne et G. R. Haszler (2000). Solute transport as related to soil structure in unsaturated intact soils blocks. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **64**, pp. 818–826.

Bensoussan A., J. Lions et G. Papanicolaou (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures.* North-Holland.

Berkowitz B., H. Scher et S. Silliman (2000). Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.* **36**(1), pp. 149–158.

Beydoun H. et F. Lehmann (2006). Drainage experiments and parameters estimation in unsaturated porous media. *C. R. Geoscience. Académie des Sciences, Paris* **338**, pp. 180–187.

Bibby R. (1981). Mass transport of solutes in dual-porosity media. *Water Resour. Res.* **17**(4), pp. 1075–1081.

Buchwald A. et C. Kaps (2000). Materials for buildings and structures. In F. H. Wittmann (Ed.), *The Ion Mobility of Deteriorating Salts in Masonry Materials of Different Moisture Content*, Volume 18, pp. 220. Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.

Cherblanc F., A. Ahmadi et M. Quintard (2003). Two-medium description of dispersion in heterogeneous porous media : Calculation of mascrosopic properties. *Water Resour. Res.* **39**(6), pp. 1559–1579.

Cherblanc F., A. Ahmadi et M. Quintard (2007). Two-domain description of solute transport in heterogeneous porous media : Comparison between theoretical predictions and numerical experiments. *Adv. Water Res.* **30**, pp. 1127–1143.

Coats K. et B. Smith (1964). Dead-end volume and dispersion in porous media. *Soc. Petrol. Eng. J.*, pp. 73–84.

Comegna V., A. Coppola et A. Sommella (2001). Effectiveness of equilibrium and physical non-equilibrium approaches for interpreting solute transport through undisturbed soil columns. *J. Contam. Hydrol.* **50**, pp. 121–138.

ComsolGroup (2006). *Comsol multiphysics users manual, version 3.2.* Burlington, Mass.

Cote C., K. Bristow et P. Ross (1999). Quantifying the influence of intra-aggregate concentration gradients on solute transport. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **63**, pp. 759–767.

Daian J. F. (2007). Porométrie au mercure et interprétation : le modèle `XDQ`. consulté le 17/12/2007 sur `http://ltheln21.hmg.inpg.fr/LTHE/spip.php?article226`.

Darcy H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon.* Paris : Dalmont.

de Marsily G. (1981). *Hydrogéologie quantitative.* Paris : Masson.

Flavigny E., J. Descrues et B. Palayer (1990). Le sable d'`Hostun "RF"` : Note technique. *Rev. FR. Geotech.* **53**, pp. 67–69.

Gaber H. M., W. P. Inskeep, S. D. Comfort et J. M. Wraith (1995). Non-equilibrium transport of atrazine through large intact soil cores. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **59**, pp. 60–67.

Gelhar L. W., C. Welty et R. K. Rehfeldt (1992). A critical review of data on field-scale dispersion aquifers. *Water Resour. Res.* **28**, pp. 1955–974.

Gerke H. et M. T. van Genuchten (1993). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resour. Res.* **29**, pp. 305–319.

Gerke H. H. (2006). Preferential flow description for structured soils. *J Plant Nutr. Sol Sci.* **169**, pp. 382–400.

Gharbi D., H. Bertin et A. Omari (2004). Use of gamma rays attenuation technique to study colloids deposition in porous media. *Experiments in Fluids* **37**(5), pp. 665–672.

Golfier F., M. Quintard, F. Cherblanc, B. Zinn et B. D. Wood (2007). Comparison of theory and experiment for solute transport in highly heterogeneous porous medium. *Adv. Water Res.* **30**, pp. 2235–2261.

Gorczewska W. (2003). *Badania eksperymentalne wplywu niejednorrodnosci w osrodku o podwojnej porowatosci na przeplyw wody w warunkach nienasyconych (Experimental analysis of the influence of the heterogeneity on the unsaturated water flow in a double-porosity medium).* Master, Gdanks University of Technology.

Gwo J., P. Jardine, G. Wilson et G. Yeh (1995). A multiple-pore-region concept to modeling mass transfer in subsurface media. *J. Hydrol.* **164**, pp. 217–237.

Haws N., B. Das et P. Rao (2004). Dual-domain solute transfer and transport processes : evaluation in batch and transport experiments. *J. Contam. Hydrol.* **75**, pp. 57–280.

Hornung U. (1991). *Homogenization of miscible displacement in unsaturated aggregated soils.* Dynamical systems. St. Petersburg.

Hutson J. et R. Wagenet (1995). A multiregion model describing water flow and solute transport in heterogeneous soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **59**, pp. 743–751.

Inoue M., J. Simunek, S. Shiozawa et J. Hopmans (2000). Simultaneous estimations of soil hydraulic and solute transport parameters from transient infiltration experiments. *Adv. Water Res.* **23**, pp. 677–688.

Jarvis N. (1994). The macro model (version 3.1). Technical description and sample simulation. Report and dissertation, Report and dissertation 19, Dept. Soil Sci., Sweden University of Agricultural Sciences, 51 pp.

Jougnot D. (2006). *Etude expérimentale et numérique de la conductivité non-saturée dans les milieux à double-porosité.* Master 2 R, Université Joseph Fourier.

Katterer T., B. Schmied, K. C. Abbaspour et R. Schulin (2001). Single- and dual porosity modelling of multiple tracer transport through soil columns : effects of initial moisture and mode of application. *Eur. J. Soil Sci.* **52**, pp. 25–36.

Keller A. et S. Sirivithayapakorn (2004). Transport of colloids in unsaturated porous media : Explaining large-scale behavior based on pore-scale mechanisms. *Water Resour. Res.* **40**, pp. 1–8.

Kohne J. M., S. Kohne et J. Simunek (2006). Multi-process herbicide transport in structured soil columns : Experiments and model analysis. *J. Contam. Hydrol.* **85**, pp. 1–32.

Kohne S., B. Lennartz, J. Kohne et J. Simunek (2006). Bromide transport at a tile-drained field site : experiment, and one- and two- dimensional equilibrium and non-equilibrium numerical modeling. *J. Hydrol.* **321**, pp. 390–408.

Koliji A., L. Vulliet et L. Laloui (2008). New basis for the constitutive modelling of aggregated soils. *Acta Geotechnica* **3**, pp. 61–69.

Larsbo M. et N. Jarvis (2006). Information content of measurement from tracer microlysimeter experiments designed for parameter identification in dual-permeability models. *J. Hydrol.* **325**, pp. 273–287.

Larsson M. et N. Jarvis (1999). Evaluation of a dual-porosity model to predict field-scale solute transport in a macorporous soil. *J. Hydrol.* **215**, pp. 153–171.

Le Calvé O. (1998). Température et densité (cours en ligne). consulté le 04/12/2006 sur `http://isitv.univ-tln.fr/~lecalve/oceano/fiches/fiche3C.htm`.

Lewandowska J., A. Szymkiewicz, K. Burzynski et M. Vauclin (2004). Modeling of unsaturated water flow in double - porosity soils by the homogenization approach. *Adv. Water Res.* **27**, pp. 283–296.

Lewandowska J., A. Szymkiewicz, W. Gorczewska et M. Vauclin (2005). Infiltration in a double-porosity medium : Experiments and comparison with a theorical model. *Water Resour. Res.* **41**(2), pp. 1–14.

Lewandowska J., T. Tran Ngoc, M. Vauclin et H. Bertin (2008). Water drainage in double-porosity soils : experiments and micro-macro modelling. *ASCE J. Geotec. Geoenv. Eng.* **134**(2), pp. 231–243.

Maineult A., Y. Bernabé et P. Ackerer (2004). Electrical response of flow, diffusion, and advection in a laboratory sand box. *Vadose Zone J.* **3**, pp. 1180–1192.

Marquardt D. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *SIAM J. Appl. Math.* **11**, pp. 431–441.

Matheron G. et G. de Marsily (1980). Is transport in porous media always diffusive ? `A` counter example. *Water Resour. Res.* **16**, pp. 901–917.

Mikelic A. et C. Rosier (2004). Modeling solute transport through unsarurated porous media using homogenization i. *Computational & Applied Mathematics* **23**(N. 2-3), pp. 195–211.

Millington R. J. et J. M. Quirk (1961). Permeability of porous solids. *Transaction of Faraday Soc.* **57**, pp. 1200–1207.

Mortensen A., J. Hopmans, Y. Mori et J. Simunek (2006). Multi-functional heat pulse probe measurements of coupled vadose zone flow and transport. *Adv. Water Resour.* **29**, pp. 250–267.

Musy A. et M. Soutter (1991). *Physique du sol.* Lausanne : Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.

Nicholls C. I. et J. Heaviside (1988). Gamma ray absorption technique to improve analysis of core displacement test. *SPE Format. Eval.* **march**, pp. 69–75.

Nutzmann G., S. Maciejewski et K. Joswig (2002). Estimation of water saturation dependence of dispersion in unsaturated porous media : experiments and modelling analysis. *Adv. Water Res.* **25**, pp. 565–576.

Padilla I. Y., T.-C. Jim Yeh et M. H. Conklin (1999). The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* **35**(11), pp. 3303–3313.

Peszynska M. et R. Showalter (2007). Multiscale elliptic-parabolic systems for flow and transport. *Elec. J. Diff. Eq.* **147**, pp. 1–30.

Pfannkuch H. (1962). Contribution à l'étude des déplacements de fluides miscibles dans un milieu poreux. *Rev. de l'Ins. Fr. du Pétrole* **18**, pp. 215–270.

Pôt V., J. Simunek, P. Benoit, Y. Coquet, A. Yra et M. J. Martinez-Cordon (2005). Impact of rainfall intensity on the transport of two herbicides in undisturbed grassed filter strip soil cores. *J. Contam. Hydrol.* **81**, pp. 63–88.

Quintard M., F. Cherblanc et S. Whitaker (2001). One-equation non-equilibrium model. *Transp. Porous Media* **44**, pp. 181–203.

Quintard M. et S. Whitaker (1987). Ecoulement monophasique en milieux poreux : effet des hétérogénéité locales. *J. Meca. Théorique et Appliquée* **6**, pp. 691–726.

Quintard M. et S. Whitaker (1988). Two-phase flow in heterogeneous porous media : The method of large scale averaging. *Transp. Porous Media* **3**, pp. 357–413.

Rao P., D. Rolston, R. Jessup et J. Davidson (1980). Solute transport in aggregated porous media : theoretical and experiment evaluation. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **44**, pp. 1139–1146.

Richards L. (1931). Capillary conduction of liquids through porous medium. *Physics* **1**, pp. 318–333.

Rowe R. K. (2001). *Geotechnical and Geoenvironmental Engineering Handbook.* Springer.

Rowe R. K. et K. Badv (1996a). Advective-diffusive contaminant migration in unsaturated sand and gravel. *ASCE J. Geo. Eng.* **122**(12), pp. 965–975.

Rowe R. K. et K. Badv (1996b). Chloride migration through clayey silt underlain by fine sand or silt. *ASCE J. Geo. Eng.* **122**(1), pp. 60–68.

Sanchez-Palencia E. (1980). *Non-homogeneous media and vibration theory.* Vol. 127 of Lecture Notes in Physics. Berlin : Springer-Verlag.

Sato T., H. Tanahashi et H. A. Loaiciga. (2003). Solute dispersion in a variably saturated sand. *Water Resour. Res.* **39**(6), pp. 1155–1162.

Saxena R. K., N. J. Jarvis et L. Bergstrom (1994). Interpreting non-steady state tracer breakthrough experiments in sand and clay soils using a dual-porosity model. *J. Hydrol.* **162**, pp. 279–298.

Schwartz R. C., A. S. R. Juo et K. J. McInnes (2000). Estimating parameters for a dual-porosity model to describe nonequilibrium, reactive transport in a fine-textured soil. *J. Hydrol.* **229**, pp. 149–167.

Seyfried M. S. et P. S. C. Rao (1987). Solute transport in undisturbed columns of an aggregated tropical soil : Preferential flow effects. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **51**, pp. 1434–1444.

Silliman S. et E. S. Simpson (1987). Laboratory evidence of the scale effect in dispersion of solutes in porous media. *Water Resour. Res.* **23**(8), pp. 1667–1673.

Simůnek J., N. Jarvis, M. T. van Genucten et A. Gardenas (2003). Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *J. Hydrol.* **272**, pp. 14–35.

Simůnek J., M. Sejna et M. T. van Genuchten (1998). Hydrus 1D software package for simulating the one-dimensional movement of water heat and multiple solutes in variably saturated media : v. 2.0. Technical report, IGWMC, Colorado School of Mines.

Systat (2002). *TableCurve 2D 5. 01 for Windows User's Manual.* Richmond : Systat Software.

Szymkiewicz A. (2004). *Modeling of unsaturated water flow in highly heterogeneous soils.* Ph. d, Universite Joseph Fourier-Grenoble & Gdansk University of Technology.

Szymkiewicz A., J. Lewandowska, R. Angulo-Jaramillo et J. Butlańska (2008). Two-scale modeling of unsaturated water flow in a double-porosity medium under axi-symmetric conditions. *Can. Geotech. J.* **45**, pp. 238–251.

Toride N., M. Inoue et F. J. Leij (2003). Hydrodynamic dispersion in an unsaturated dune sand. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **67**, pp. 703–712.

Toride N., F. J. Leij et M. T. van Genuchten (1999). The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. version 2.1. Salinity laboratory Res. Rep. 137. U. S. Salinity , Riverside, CA.

Torkzaban S., S. M. Hassanizadeh, J. F. Schijven, H. A. M. de Bruin et A. M. de Roda Husman (2006). Virus transport in saturated and unsaturated sand columns. *Vadose Zone J.* **5**, pp. 877–885.

Tran Ngoc T. D. et J. Lewandowska (2007). Tenseur de dispersion dans un milieu saturé à double-porosité : calculs à deux échelles par homogénéisation. In *Journée d'Etude sur les Milieux Poreux*, Lyon, pp. 149–150.

Tran Ngoc T. D., J. Lewandowska et H. Bertin (2007). Etude expérimentale de la dispersion dans un milieu à double-porosité. In *Congrès Français de Mécanique*, Grenoble, pp. 6 (CD–rom).

Unesco (1985). The practical salinity scale 1978 and the international equation of state of seawater 1980. *Tech. Pap. Mar. Sci.* **36**, pp. 25.

van Genuchten M. et P. Wierenga (1976). Mass transfer studies in sorbing porous media : `I`. analytical solutions. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **40**, pp. 473–80.

van Genuchten M. et P. Wierenga (1977). Mass transfer studies in sorbing porous media : `II`. experimental evaluation with tritium. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **41**, pp. 272–8.

van Genuchten M. T. (1980). A closed- form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **44**, pp. 892–898.

van Genuchten M. T. et J. C. Parker (1984). Boundary conditions for displacement experiments throught short laboratory soil columns. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **48**, pp. 703–708.

Vauclin M. (1994). Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée : revue et état de l'art. *Rev. des Sci. de l'Eau,* **7**, pp. 81–102.

Villholth K. et K. Jensen (1998). Flow and transport processes in a macroporous subsurface-drained glacial till soil. ii : Model analysis. *J. Hydrol.* **207**, pp. 121–135.

Villholth K., K. Jensen et J. Fredericia (1998). Flow and transport processes in a macroporous subsurface-drained glacial till soil. i : Field investigations. *J. Hydrol.* **207**, pp. 98–120.

Whitaker S. (1986). Transport processes with heterogeneous reaction. In S. Whitaker et A. E. Cassano (Eds.), *Concepts and Design of Chemical Reactors*, New York, pp. 1–94. Gordon & Breach.

Whitaker S. (1999). *The method of volume averaging.* Kluwer Academic Publishers.

Younes A., P. Ackerer et R. Mose (1999). Modeling variable density flow and solute transport in porous medium : 2. re-evaluation of the salt dome flow problem . *Trans. Porous Media* **35**, pp. 375–394.

Zaoui A. (2001). Changement d'échelle : motivation et méthodologie. In M. Bornert, T. Bretheau, et G. P. (Eds.), *Homogénéisation en Mécanique des Matériaux,*, Volume 1, pp. 19–39. Hermes Science Publications.

Zinn B., L. C. Meigs, C. F. Harvay, R. Haggerty, W. J. Peplinski et C. F. Von Schwerin (2004). Experiments visualization of solute transport and mass transfer processes in two-dimensional conductivity fields with connected regions of high conductivity. *Envron. Sci. Technol.* **38**, pp. 3916–3926.

Thèse de doctorat :

TRANSPORT DE SOLUTES DANS UN MILIEU A DOUBLE-POROSITE NON SATURE. MODELISATION PAR HOMOGENEISATION & APPLICATIONS

Nom de l'auteur :

Tien Dung TRAN NGOC

Etablissement :

Université Joseph Fourier - Grenoble 1

Laboratoire :

Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement (LTHE, UMR 5564, CNRS-INPG-IRD-UJF)

Résumé :

Cette thèse présente le développement des modèles du transport de solutés dans un milieu à double-porosité non saturé, en utilisant la méthode d'homogénéisation asymptotique. Les modèles macroscopiques concernent les phénomènes de diffusion, diffusion-convection et dispersion-convection, selon les nombres adimensionnels caractérisant le régime du transport. Les modèles consistent en deux équations couplées, traduisant le transport préférentiel et le non-équilibre local des concentrations. L'implémentation numérique des modèles à double-porosité est réalisée à l'aide du code COMSOL Multiphysics et confrontée avec la solution du même problème à l'échelle fine. Cette implémentation permet de résoudre de manière couplée l'équation de la concentration dans la macro-porosité et celle dans la micro-porosité (calculs à deux échelles). Les calculs du tenseur de dispersion ont été également réalisés. La dispersivité calculée à partir du coefficient de dispersion met en évidence l'influence du degré de saturation, des propriétés physiques du domaine de la macro-porosité et de la structure interne du milieu à double-porosité. Deux séries d'expériences ont été effectuées sur le modèle physique à double-porosité, constitué de billes d'argile solidifiée, distribuées périodiquement dans le sable d'Hostun HN38. La première série a concerné la validation du modèle de l'écoulement non saturé par des expériences du drainage. La deuxième série a été dédiée aux expériences de dispersion en régime permanent d'écoulement non saturé (teneur en eau mesurée par rayonnement gamma). La comparaison entre les simulations numériques et les observations montre un très bon accord. Ceci permet de valider les modèles développés.

Mots clés :

milieu double-porosité ; homogénéisation ; dispersion ; non saturé ; transport préférentiel ; non-équilibre local ; expériences ; calculs à deux échelles.

Abstract :

This Ph.D thesis presents the development of the solute transport models in unsaturated double-porosity medium, by using the asymptotic homogenization method. The obtained macroscopic models concern diffusion, diffusion-convection and dispersion-convection, according to the transport regime which is characterized by the non-dimensional numbers. The models consist of two coupled equations that show the preferential transport and local non-equilibrium of concentrations. The double-porosity transport models were numerically implemented using the code COMSOL Multiphysics (finite elements method), and compared with the solution of the same problem at the fine scale. The implementation allows solving the coupled equations in the macro- and micro-porosity domains (two-scale computations). The calculations of the dispersion tensor as a solution of the local boundary value problems, were also conducted. It was shown that the dispersivity depends on the saturation, the physical properties of the macro-porosity domain and the internal structure of the double-porosity medium. Finally, two series of experiments were performed on a physical model of double-porosity that is composed of a periodic assemblage of sintered clay spheres in Hostun sand HN38. The first experiment was a drainage experiment, which was conducted in order to validate the unsaturated flow model. The second series was a dispersion experiment in permanent unsaturated water flow condition (water content measured by gamma ray attenuation technique). A good agreement between the numerical simulations and the experimental observations allows the validation of the developed models.

Keywords :

double-porosity medium ; homogenization ; dispersion ; unsaturated ; local non-equilibrium ; preferential transport ; experiments ; two-scale computations.