

UNIVERSITE LOUIS PASTEUR



INSTITUT DE MECANIQUE DES FLUIDES ET DES SOLIDES

UMR CNRS 7507

THESE

Présentée en vue de l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE LOUIS PASTEUR DE STRASBOURG

Spécialité : Mécanique des Fluides

par

Charles DANQUIGNY

ETUDE EXPERIMENTALE DU TRANSFERT DE MASSE EN MILIEU POREUX HETEROGENE

Soutenue le 17 décembre 2003 devant le jury constitué de :

Y. RémondRapporteur interneB. NoetingerRapporteur externeF. StaufferRapporteur externeP. AckererDirecteur de ThèseA. GuadagniniExaminateur





A Paul Dessaint, mon grand-père...

Avant-propos

La première page lue est la dernière écrite, l'occasion de se retourner vers le travail accompli et les personnes qui l'ont rendu possible. Je pense tout d'abord à Monsieur Philippe Ackerer, Directeur de Recherche au CNRS, qui m'a accueilli chaleureusement au sein de l'équipe « hydrodynamique et transferts en milieux poreux », m'a guidé, soutenu et encouragé pendant ces quatre années. Pour toutes ces qualités qui font de lui un directeur de thèse apprécié, je lui dis un grand merci.

Je remercie M. Yves Remond, Professeur à l'ULP et Directeur de l'IMFS, pour m'avoir accueilli dans son institut, avoir accepté de faire partie du jury en tant que rapporteur interne et pour tout l'intérêt qu'il a montré envers mon travail. J'exprime aussi toute ma reconnaissance aux personnes qui ont accepté d'être membres du jury : Messieurs A. Guadagnini, professeur à l'université de Milan, B. Noetinger, chercheur à l'Institut Français du Pétrole et F. Stauffer, professeur titulaire à l'école polytechnique de Zurich ETHZ.

J'adresse un grand merci à Monsieur Claude Veit, responsable de l'atelier de l'IMFS, qui a construit et réparé le modèle physique de laboratoire présenté dans ce mémoire. Il a su répondre à la plupart de nos demandes, parfois farfelues mais toujours pressées. J'en profite pour m'excuser auprès de lui pour tout le matériel que j'ai pu cassé...

Je pense à mes collègues et amis qui m'ont aidé et supporté : mes collègues de bureau, Luc Pierrejean (O'brother...), Jean-Bernard Bardiaux et Benjamin Belfort, pour leur amitié, leur culture, leur humour et leur patience ; François Lehmann, pour son soutien et toutes ces discussions réconfortantes autour d'un café, mais aussi pour sa vision de l'enseignement et des expériences de laboratoire ; Jérome Carrayrou, pour son amitié, sa sympathie et son appétit ; Abdel Lyazid, pour m'avoir plus que bien encadré pendant mon monitorat ; Anne Engelman, Nicolas Péquignot, Fabrice Lawniczak (un intrus dans les milieux poreux) et toute l'équipe actuelle des milieux poreux ; les anciens doctorants, Manuel de Atocha Cortazar Hernandez etc. (El chico del Mexico), Jean-philippe Carlier, Dana Lintea, Nicolaï Sirbu, Julien Tournebize ; l'ancien permanent qui a su me convaincre de rejoindre l'équipe, Robert Mosé et enfin, M. Frédérick Delay, professeur à l'Université de Poitiers, qui a su m'éclairer à chacun de ses passages à Strasbourg. Je remercie aussi mes parents, en particulier mon frère Laurent, qui les premiers m'ont encouragé et se sont inquiétés... Je remercie aussi mes amies strasbourgeoises, Christine et Stéphanie, pour leur soutien durant ces derniers mois.

Ma dernière pensée va à ma fiancée, Hélène, qui a subit l'envers du décor... Merci pour l'intérêt que tu portes à mon travail, ta patience, ton soutien, ta cuisine et toutes ces lectures, certainement ennuyeuses pour une néophyte.

a	•
Somma	aire

Sommaire	3
Listes des symboles et notations	7
Liste des figures	9
Liste des tableaux	. 13
Introduction	.15
Chapitre 1 : Notions de base et théorie des changements d'échelle	.17
1. Introduction	. 17
2. Hydrodynamique et transport en milieux poreux	. 17
2.1. Propriétés du milieu poreux	. 17
2.1.1. La porosité	. 17
2.1.2. La perméabilité	. 18
2.1.3. La dispersion	. 19
2.2. Intégration spatiale des propriétés	. 22
2.2.1. L'approche déterministe : le Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R)	. 22
2.2.2. L'approche statistique : les Fonctions Aléatoires Spatiales (F.A.S.)	. 23
2.2.3. Milieux uniforme, homogène et hétérogène	. 24
2.3. Equations générales de l'écoulement et du transport en milieu poreux	. 25
2.3.1. L'hydrodynamique	. 25
2.3.2. Le transfert de masse	. 25
3. Notions d'échelles et de paramètres équivalents	. 26
3.1. Classification des échelles de l'écoulement	. 26
3.2. Le milieu homogène équivalent	. 27
3.3. La théorie stochastique	. 28
3.3.1. Présentation	. 28
3.3.2. Exemples d'application : solutions analytiques du transport	. 28
3.4. Calcul théorique des paramètres équivalents	. 30
3.4.1. La perméabilité équivalente	. 30
3.4.2. La macrodispersion	. 38
4. Conclusion	. 42

Chapitre 2 : Etat de l'art dans l'utilisation des modèles physiques de laboratoire	45
1. Introduction	45
2. Protocoles des essais de traçage de laboratoire	46
2.1. Les milieux poreux	46
2.1.1. Les milieux fractals	46
2.1.2. Les milieux aléatoires	47
2.2. Influence de l'hydrodynamique	48
2.3. Les traceurs	49
2.3.1. Les traceurs fluorescents	50
2.3.2. Les traceurs ioniques	50
2.4. Débits et hauteurs piézométriques	51
2.4.1. Mesures de débits	52
2.4.2. Mesures piézomètriques	52
2.5. Méthodes d'analyse	53
2.5.1. La méthode du t _{0,5}	53
2.5.2. La méthode des moments	55
2.5.3. La modélisation numérique	57
2.5.4. L'approche stochastique	58
3. Les modèles physiques de laboratoires	59
3.1. Les expériences 1D	59
3.1.1. Qualités des expériences 1D	62
3.1.2. Matériels et méthodes	62
3.1.3. Résultats et conclusions	62
3.2. Les expériences 2D	64
3.2.1. Qualités des expériences 2D	66
3.2.2. Matériels et méthodes	66
3.2.3. Résultats et conclusions	66
4. Conclusions	69
Chapitre 3 : MARCEAUS, un modèle physique tridimensionnel de laboratoire	71
1. Introduction	71
2. Présentation du MARCEAUS	72
2.1. La cuve expérimentale et le système d'alimentation	72

2.1.1.	Présentation générale	
2.1.2.	L'alimentation en eau et en traceur	73
2.2. Le 1	nilieu poreux	74
2.2.1.	Construction du milieu poreux	74
2.2.2.	Loi de covariance	76
2.3. Le c	lispositif de mesures	77
2.3.1.	Les débits	
2.3.2.	La piézométrie	
2.3.3.	Les concentrations	79
3. Résultat	s expérimentaux	
3.1. Intr	oduction	
3.2. Prot	cocole expérimental	
3.3. Exp	ériences réalisées	
3.3.1.	L'écoulement uniforme : TT1W0	
3.3.2.	Les pompages	
3.3.3.	Les « injection – pompage »	
3.4. Ana	lyse des résultats	
3.4.1.	Vérification de la conservation de la masse	
3.4.2.	Etude de la reproductibilité des expériences	
4. Conclus	ion	100
Chapitre 4 : I	Estimation de paramètres équivalents	103
1. Introduc	tion	103
2. Calcul d	es paramètres équivalents	
2.1. Rés	ultats théoriques	
2.1.1.	Perméabilité équivalente du MARCEAUS	
2.1.2.	Macrodispersivité du MARCEAUS	
2.2. Prei	niers résultats expérimentaux	
2.2.1.	Estimation de la perméabilité équivalente en écoulement uniforme	
2.2.2.	Estimation de la vitesse de pores en écoulement uniforme	105
2.3. Con	clusions	105
3. Cas de l	écoulement uniforme	
4. Cas du p	oompage	

4.1. Présentation du modèle numérique	
4.2. Résultats des simulations	
4.3. Analyse des résultats	
4.3.1. Sensibilité des paramètres fixes du modèles	
4.3.2. Sensibilité des paramètres ajustés	
4.3.3. Etude de la perméabilité équivalente	
4.3.4. Etude de la macrodispersivité	
5. Cas de l'injection – pompage	
5.1. Présentation du modèle numérique	
5.2. Résultats des simulations	
5.3. Analyse des résultats	
5.3.1. Etude de la sensibilité des paramètres ajustées	
5.3.2. Analyse des paramètres ajustés	
6. Effet des conditions aux limites sur les paramètres équivalents	
7. Conclusion	
Chapitre 5 : Modélisation tridimensionnelle des expériences	
1. Introduction	
2. Modélisation par éléments finis mixtes et discontinus	
1	
2.1. Présentation du modèle TRACES	
2.1. Présentation du modèle TRACES2.2. Résultats	
 2.1. Présentation du modèle TRACES 2.2. Résultats 3. Modélisation par marche au hasard 	
 2.1. Présentation du modèle TRACES 2.2. Résultats 3. Modélisation par marche au hasard	
 2.1. Présentation du modèle TRACES 2.2. Résultats	
 2.1. Présentation du modèle TRACES 2.2. Résultats	
 2.1. Présentation du modèle TRACES	
 2.1. Présentation du modèle TRACES	
 2.1. Présentation du modèle TRACES	
 2.1. Présentation du modèle TRACES	

Listes des symboles et notations

A_i	: le coefficient de macrodispersivité	$\begin{bmatrix} L \end{bmatrix}$
С	: la concentration	$\left[M\cdot L^3 ight]$
C_{C_0}	: la concentration réduite	[-]
D_0	: le coefficient de diffusion moléculaire	$\left[L^2\cdot T^{-1}\right]$
D_i	: le coefficient de dispersion dans la direction i	$\left[L^2 \cdot T^{-1}\right]$
е	: le coefficient d'anisotropie	[-]
h	: la charge hydraulique ou hauteur piézométrique	[L]
k	: la perméabilité intrinsèque	$\left[L^2\right]$
K	: la perméabilité	$\begin{bmatrix} L \cdot T^{-1} \end{bmatrix}$
l	: la distance entre la source et le puits	[L]
l_i	: la longueur de corrélation dans la direction i	[L]
N	: le nombre d'Avogadro, N = $6,023 \cdot 10^{23}$	
q	: la vitesse de Darcy	$\left[L\cdot T^{-1} ight]$
Q	: le débit	$\left[L^3 \cdot T^{-1}\right]$
R	: la constante des gaz parfaits, $R = 8,32 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{k}$	- ¹
S	: le coefficient d'emmagasinement spécifique	$\begin{bmatrix} L^{-1} \end{bmatrix}$
Т	: la température absolue	$\left[K ight]$
t	: le temps	[T]
<i>t</i> '	: le temps mis sous forme adimensionnelle	[-]
Y	: la log conductivité, $Y = \ln(K)$	[-]
$lpha_{i}$: le coefficient de dispersivité locale	[L]
	i = L, longitudinal ; $i = T$, transversal	_
γ	: la conductivité électrique	$\left[L^{-3}\cdot M^{-1}\cdot T^3\cdot I^2\right]$
μ	: la viscosité dynamique	$\left[M\cdot L^{-1}\cdot T^{-1} ight]$
ρ	: la masse volumique du fluide	$\left[M\cdot L^3 ight]$
$\sigma_{_{Y}}^{_{2}}$: la variance de la logconductivité	[-]
ω	: la porosité	[-]
ω_{c}	: la porosité cinématique ou efficace	[-]

Liste des figures

Figure 1-1 : Schéma hydrodispersif d'un traceur, convection et dispersion	
(Bear, 1979)	19
Figure 1-2 : Distribution des vitesses entre les pores (Bear, 1979)	21
Figure 1-3 : Evolution de la fonction porosité au voisinage d'un point du milieu	
poreux. Définition du volume élémentaire représentatif (Bear, 1972)	
Figure 1-4 : Configuration étudiée (Carlier, 2002).	
Figure 1-5 : Configuration étudiée (Carlier et Ackerer, 2003).	30
Figure 1-6 : Calcul des bornes de Cardwell et Parsons (Renard, 1996)	32
Figure 2-1 : Remplissage du modèle physique MARCEAUS avec des grilles de	
séparation	48
Figure 2-2 : Détermination des temps $t_{0,16}$, $t_{0,5}$, $t_{0,84}$ pour le calcul de U et α_L	54
Figure 3-1 : Vue générale du MARCEAUS	72
Figure 3-2 : Vue schématique du MARCEAUS.	73
Figure 3-3 : Vue schématique du remplissage du MARCEAUS.	75
Figure 3-4 : Photos des cubes de sable	75
Figure 3-5 : Variogramme des couches du milieu poreux du MARCEAUS	76
Figure 3-6 : Vue schématique du milieu poreux hétérogène du MARCEAUS.	77
Figure 3-7 : Prise et capteur de pression.	
Figure 3-8 : Localisation des puits, piézomètres et cellules de conductivité	79
Figure 3-9 : Photo et schéma des cellules de conductivités du MARCEAU'S	80
Figure 3-10 : Détermination de la concentration relative à une cellule de référence –	
TT4W1	83
Figure 3-11 : Hauteurs d'eau dans la cuve - TT1W0	86
Figure 3-12 : Concentrations moyennes dans les sections 1 et 14 – TT1W0	87
Figure 3-13 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu	
poreux – TT1W0	88
Figure 3-14 : Mesures de pression durant le régime transitoire – TT1W1	89
Figure 3-15 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de	
pompage- TT1W1	90

Figure 3-16 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT1W1	90
Figure 3-17 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de pompage- TT2W1.	
Figure 3-18 : Concentrations dans les sections 1, 14 et à la sortie du puits de pompage- TT3W1	91
Figure 3-19 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT3W1	92
Figure 3-20 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de pompage- TT4W1	93
Figure 3-21 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT4W1	
Figure 3-22 : Concentration à la sortie du puits pour les expériences de pompage Figure 3-23 : Concentrations à l'entrée du puits d'injection et à la sortie du puits de	94
pompage- $TT1W2$.	95
TT1W2.	96
Figure 3-25 : Concentrations à l'entrée du puits d'injection et à la sortie du puits de pompage- TT2W2.	97
Figure 3-26 : Observation de l'évolution de la concentration dans le milieu poreux – TT2W2.	97
Figure 3-27 : Comparaison des résultats expérimentaux aux solutions analytiques – TT1W2 & TT2W2.	
Figure 3-28 : Comparaison des concentrations à la sortie du puits de pompage – TT1W2 a & b	100
Figure 4-1: Schematic presentation of the setup.	111
Figure 4-2: Two representative layers of the channel structured porous medium	113
Figure 4-3 : Typical BTCs for the channel structured porous medium.	116
Figure 4-4: Typical BTCs for the statistical correlated structured porous medium	117
Figure 4-5: Average BTCs for the channel structured porous medium.	118
Figure 4-6: Average BTCs for the statistical correlated porous medium.	119

Figure 4-7: Normal plot for BTCs for the channel structured porous medium	122
Figure 4-8: Fitted velocities (line+symbols) and analytical velocity (line) based on	
the effective hydraulic conductivity	124
Figure 4-9: Measured (symbols) and computed (lines) average arithmetic and flux	
BTCs for the channel structured porous medium.	125
Figure 4-10: Dispersivity coefficients obtained by model fitting on arithmetic and	
flux averaged BTCs.	127
Figure 4-11: Evolution of concentration distribution variance with time	127
Figure 4-12: Normal plot for BTCs for the statistically correlated structured porous medium	129
Figure 4-13: Measured (symbols) and computed (lines) average arithmetic and flux BTCs for the statistical correlated structured porous medium	130
Figure 4-14: Fitted velocities (line+symbols) and analytical velocity (line) based on the effective hydraulic conductivity	131
Figure 4-15: Dispersivity coefficients obtained by model fitting on arithmetic and flux averaged BTCs for the correlated structured medium	133
Figure 4-16: Evolution of concentration distribution variance with time	133
Figure 4-17 : Validation du maillage 140 x 25 mailles - TT4W1	141
Figure 4-18 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT1W1.	143
Figure 4-19 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT2W1.	143
Figure 4-20 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT3W1.	144
Figure 4-21 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT4W1.	144
Figure 4-22 : Evaluation de la sensibilité de la porosité - TT1W1	145
Figure 4-23 : Evaluation de la sensibilité du rapport entre les dispersivités longitudinale et transversale	146
Figure 4-24 : Etude de la sensibilité de la perméabilité et la dispersivité pour les pompages.	146
Figure 4-25 : Validation du maillage "280 x 50" pour un même jeu de paramètres – TT1W1.	150
Figure 4-26 : Résultats des simulations réalisées avec Modflow – TT1W2	151
Figure 4-27 : Résultats des simulations réalisées avec Modflow – TT2W2	152

Figure 4-28 : Etude de la sensibilité de la perméabilité et la dispersivité pour les	
injection – pompage	153
Figure 5-1 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations	
simulées avec TRACES (lignes) – TT1W0.	161
Figure 5-2 : Evolution de la concentration simulée à $x = 0, 50, 100, 150, 200, 250,$	
300, 350, 400 cm et t = 500 min - TT1W0	162
Figure 5-3 : Concentrations et champ de vitesses simulés dans 6 plans horizontaux et	
verticaux à t = 500min- TT1W0	163
Figure 5-4 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations	
simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3,5$ cm – TT1W0	167
Figure 5-5 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations	
simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 2,5$ cm – TT1W0	168
Figure 5-6 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations	
simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3,5$ cm – TT4W1	169
Figure 5-7 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations	
simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3,5$ cm – TT1W2	169

Liste des tableaux

Tableau 2.1 : Présentation synthétique des modèles physiques de laboratoire 1D	61
Tableau 2.2 : Présentation synthétique des modèles physiques de laboratoire 2D	65
Tableau 3.1 : Caractéristiques des sables calibrés	75
Tableau 3.2 : Coordonnées des puits et piézomètres dans le MARCEAUS.	79
Tableau 3.3 : Coordonnées et sable environnant des 10 cellules étudiées en	
écoulement uniforme	87
Tableau 3.4 : Synthèse des conditions aux limites des expériences de pompage	89
Tableau 3.5 : Coordonnées et sable environnant des 10 cellules étudiées pour	
l'injection – pompage.	95
Tableau 4.1 : perméabilités équivalentes théoriques (cm/min)	104
Tableau 4.2 : Paramètres équivalents simulés pour chaque pompage avec le logiciel	
Modflow	142
Tableau 4.3 : Coefficients de sensibilité de la perméabilité et dispersivité pour les	
pompages.	147
Tableau 4.4 : Sommes des écarts relatifs au carré entre les concentrations simulées et	
mesurées pour les pompages	147
Tableau 4.5 : Paramètres équivalents simulés pour chaque injection - pompage avec	
le logiciel Modflow	151
Tableau 4.6 : Coefficients de sensibilité de la perméabilité et dispersivité pour les	
injection -pompage	153
Tableau 4.7 : Paramètres équivalents déterminés pour chaque expérience.	155
Tableau 4.8 : Sommes des écarts relatifs au carré entre les concentrations simulées et	
mesurées pour les injection – pompage.	156
Tableau 5.1 : plages de perméabilité ajustées pour simuler TT1W0 avec TRACES	160

Introduction

Il existe en France environ 33 250 captages d'eau potable, à 94 % d'origine souterraine. La protection de ces captages constitue une nécessité pour assurer la sauvegarde de la qualité des eaux distribuées aux usagers. Obligatoire depuis 1935, mais réellement appliquée depuis une dizaine d'années, la définition de périmètres de protection nécessite une bonne connaissance des caractéristiques hydrodynamiques des nappes concernées.

Parallèlement, 2963 sols ou nappes pollués étaient recensés en 2001 sur la métropole. La surveillance voire la remédiation de ces sites suppose aussi que leur fonctionnement soit connu. La mise en œuvre de pompage ou injection – pompage implique une maîtrise de ces techniques de dépollution et de leur dimensionnement.

L'instauration d'une injection ou d'un pompage modifie l'hydrodynamique de la nappe. Les effets de cette modification du régime d'écoulement sur des caractéristiques à grande échelle telles que la perméabilité, le champ de vitesses ou la dispersivité sont mal connus.

Par ailleurs, le milieu naturel, fortement hétérogène, est difficile à caractériser. La définition des paramètres comme des variables spatiales reste problématique : quelle valeur moyenne faut-il attribuer à l'échelle régionale pour une grandeur qui varie à l'échelle locale ? La géostatistique et les théories stochastiques tentent d'apporter des solutions.

Faut-il encore comprendre le passage d'une échelle à l'échelle supérieure pour adapter les propriétés au milieu étudié. En particulier dans la modélisation numérique, il est souvent nécessaire d'attribuer une valeur de paramètre à une maille qui représente un grand volume dans lequel le paramètre varie. La mesure de ces grandeurs implique aussi la définition d'une échelle de mesure, qui peut être différente de l'échelle de la maille de calcul. Le changement d'échelles est donc important dans la définition des propriétés.

La définition stochastique des propriétés, l'application de solutions théoriques ou le changement d'échelles nécessitent d'une part que ces méthodes aient été validées, d'autre part que des données sur le milieu poreux étudié soient disponibles. L'étude expérimentale des milieux poreux intervient alors pour fournir ces données.

Le but de ce travail de thèse est ainsi d'étudier la détermination de paramètres équivalents à partir de résultats expérimentaux. Il s'agit dans un premier temps de concevoir, à l'échelle du laboratoire, un milieu poreux caractérisé par ses propriétés géostatistiques, de l'équiper d'un dispositif de mesure adéquat pour y réaliser ensuite des essais de traçage selon différents régimes d'écoulement. Dans un deuxième temps, les résultats expérimentaux sont utilisés pour déterminer les paramètres tels que la perméabilité, la vitesse de pores ou la dispersivité à une échelle supérieure. Les valeurs obtenues sont confrontées aux résultats théoriques. Enfin, les expériences réalisées sont reproduites numériquement.

Cette étude fait partie du projet de recherche européen W-SAHaRA (Stochastic Analysis of Well Head Protection and Risk Assessment) financé par le contrat n° EVK1-CT-1999-00041.

Dans un premier chapitre, nous présenterons les notions de base de l'hydrodynamique et du transfert de masse dans un milieu poreux ainsi que les théories du changement d'échelles. Après avoir défini les paramètres intervenant dans les lois de l'hydrodynamique et du transport de masse, nous nous intéresserons aux notions d'échelles et de paramètres équivalents.

Un état de l'art dans l'utilisation des modèles physiques de laboratoire sera réalisé dans le deuxième chapitre. Les techniques expérimentales et les protocoles d'essai de traçage seront étudiés. Nous dresserons ensuite un inventaire des modèles physiques de laboratoire déjà utilisés.

A partir de ces constats, nous présenterons, dans un troisième chapitre, notre modèle physique, le MARCEAUS (Modèle d'Analyse et de Recherche sur la Contamination des EAUx Souterraines) et les expériences que nous avons réalisées pour ces travaux.

Dans le quatrième chapitre, les résultats expérimentaux seront utilisés pour déterminer les paramètres équivalents à l'aide de techniques numériques adaptées aux conditions aux limites. Les valeurs obtenues seront comparées entre elles et confrontées aux résultats théoriques.

Enfin, dans le cinquième chapitre, nous essaierons de reproduire numériquement les expériences réalisés dans le MARCEAUS avec d'une part le code TRACES (Transport RéActif de Contaminant dans les Eaux Souterraines / Transport of Radio Active Elements in Subsurface), d'autre part la méthode de la marche au hasard.

Chapitre 1 : Notions de base

et théorie des changements d'échelle

1. Introduction

L'étude des écoulements et du transfert de polluants en milieu poreux repose sur la détermination des propriétés du milieu que sont la porosité, la perméabilité et la dispersivité. Ces grandeurs apparaissent dans les équations de l'écoulement et du transport qui sont définies pour un milieu continu. Il faut donc les définir sur des volumes suffisamment grands, i.e. macroscopiques, pour pouvoir considérer le milieu continu.

Les propriétés du milieu poreux dépendent de l'échelle de description considérée. Elles ont un sens physique à une échelle macroscopique et leurs valeurs varient avec le volume de mesure qui peut être, par exemple, de la taille d'une hétérogénéité locale, d'une strate ou d'un aquifère. Que ce soit dans le cadre de la modélisation numérique ou celui de la mesure des paramètres, il est nécessaire de pouvoir changer d'échelle et déduire la valeur des paramètres d'une échelle à l'autre. C'est dans ce but que le calcul de paramètres équivalents a fait l'objet de plusieurs études théoriques.

Dans ce chapitre nous présenterons d'abord les paramètres et équations qui régissent l'écoulement et le transport dans un milieu poreux, pour étudier ensuite les théories du changement d'échelle.

2. <u>Hydrodynamique et transport en milieux poreux</u>

2.1. Propriétés du milieu poreux

2.1.1. La porosité

La porosité totale, ω [-], est le rapport entre le volume des vides et le volume total du milieu poreux :

$$\omega = \frac{Volume \ des \ vides}{Volume \ total} \tag{I.1}$$

Une partie de l'eau contenue dans le milieu poreux est liée à celui-ci. Elle ne peut pas circuler. D'un point de vue hydrodynamique, elle peut être considérée comme une partie du solide. Cela nous conduit à définir une porosité cinématique ou porosité efficace, ω_c , liée à la circulation des fluides :

$$\omega_c = \frac{Volume \ des \ vides \ occupés \ par \ un \ fluide \ mobile}{Volume \ total} \tag{I.2}$$

 ω_c varie en général entre 0,25 et 0,45 en fonction du milieu poreux.

2.1.2. <u>La perméabilité</u>

La perméabilité intrinsèque k $[L^2]$ est une propriété intrinsèque du milieu poreux, indépendamment des caractéristiques du fluide.

La perméabilité K [L/T] est le paramètre reliant la vitesse d'écoulement au gradient hydraulique dans la loi de Darcy (cf. 2.3.1). Elle dépend de la perméabilité intrinsèque k mais aussi de la viscosité dynamique μ [M.L⁻¹.T⁻¹] et de la masse volumique du fluide ρ [M.L⁻³] qui y circule :

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} \tag{I.3}$$

Les deux grandeurs ainsi définies sont des propriétés tensorielles :

$$\overline{\overline{K}} = \begin{vmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{vmatrix}$$
(I.4)

Dans le cas d'un milieu anisotrope avec les axes principaux d'anisotropie parallèles aux axes du système de coordonnées, le tenseur est diagonal. Les valeurs de K varient avec le milieu poreux et sont en général comprises entre 10^{-9} et 10^{-2} m/s.

2.1.3. <u>La dispersion</u>

La dispersion se traduit par l'apparition d'une zone de mélange entre deux fluides miscibles se déplaçant dans un milieu poreux. Dans cette zone de transition, la concentration passe progressivement de 100 à 0 %. La taille de cette zone augmente avec le temps ou la distance parcourue par le polluant (cf. Figure 1-1).



Figure 1-1 : Schéma hydrodispersif d'un traceur, convection et dispersion (Bear, 1979).

La dispersion est le résultat de deux phénomènes :

- un phénomène physico-chimique, la diffusion moléculaire,
- un phénomène mécanique, la dispersion cinématique.

La diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est un phénomène lié à l'agitation moléculaire. En effet, s'il existe entre deux points du fluide une différence de concentration, le déplacement aléatoire du à l'agitation brownienne aura tendance à uniformiser la concentration dans le milieu. Le transfert de matière qui en résulte est appelé diffusion moléculaire et est modélisé par la loi de Fick :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D_0 \nabla C) \tag{I.5}$$

avec D_0 le coefficient de diffusion moléculaire $[L^2 \cdot T^{-1}]$:

$$D_0 = \frac{RT}{3\pi N \mu d_m} \tag{I.6}$$

R est la constante des gaz parfaits, R = 8,32 kg·m²·s⁻²·K⁻¹; N est le nombre d'Avogadro, N = 6,023·10²³; T est la température absolue [K]; μ est la viscosité dynamique du fluide [M·L⁻¹·T⁻¹]; d_m est le diamètre moyen des agrégats moléculaires qui diffusent [L].

Dans un milieu poreux, la phase solide constitue un obstacle au mouvement brownien. Le coefficient de diffusion moléculaire dans le milieu poreux, D_{mp} , est ainsi inférieur à D_0 . Le rapport $\frac{D_{mp}}{D_0}$ est appelé tortuosité et varie entre 0,1 et 0,7.

La dispersion cinématique

La dispersion cinématique est un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité du champ des vitesses au sein du milieu poreux et ceci, quelle que soit l'échelle d'observation.

Dans un milieu homogène, trois faits sont à l'origine de ce phénomène (cf. Figure 1-2) :

- a) le profil des vitesses à l'intérieur d'un pore est parabolique ;
- b) il existe des fluctuations des lignes de courant par rapport à la direction principale de l'écoulement;
- c) les dimensions des pores et de leurs ouvertures étant variables, les vitesses d'écoulement le sont aussi.

Si le milieu est hétérogène, il faut ajouter, à une échelle supérieure, la dispersion due aux fluctuations d'une structure géologique à l'autre.



Figure 1-2 : Distribution des vitesses entre les pores (Bear, 1979).

La formule proposée pour décrire la dispersion est une loi de transfert analogue à la loi de Fick, où la diffusion moléculaire est remplacée par un tenseur de dispersion $\overline{\overline{D}}$ défini par :

$$\overline{\overline{D}} = \begin{bmatrix} D_{ij} \end{bmatrix} \quad avec \quad D_{ij} = \delta_{ij} \,\alpha_T \left| U \right| + \left(\alpha_L - \alpha_T \right) \frac{U_i U_j}{\left| U \right|} \tag{I.7}$$

avec δ_{ij} le symbole de Kronecker, α_L et α_T [L] les coefficients de dispersion intrinsèque, ou dispersivités, longitudinale et transversale. |U| est la norme de la vitesse de pore avec $U_{i,j}$ la composante de la vitesse dans les directions i, j [L·T⁻¹]

Pour un milieu isotrope, le tenseur de dispersion est diagonal dans les directions principales de l'écoulement :

$$\overline{\overline{D}} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix}$$
(I.8)

 D_L est le coefficient de dispersion longitudinale $[L^2 \cdot T^{-1}]$, D_T le coefficient de dispersion transversale $[L^2 \cdot T^{-1}]$. Dans le domaine des vitesses usuelles, les relations suivantes sont généralement admises :

$$D_{L,T} = \alpha_{L,T} \left| U \right| \tag{I.9}$$

avec $5 \le \frac{\alpha_L}{\alpha_T} \le 100$ (de Marsily, 1981).

La diffusion moléculaire peut aussi être incluse dans le tenseur de dispersion (en particulier quand la vitesse de Darcy est faible). L'équation (I.9) devient :

$$D_{LT} = D_{mp} + \alpha_{LT} \left| U \right| \tag{I.10}$$

2.2. Intégration spatiale des propriétés

Nous venons de définir des propriétés qui doivent être moyennées sur des volumes plus grands que le volume de pore pour respecter l'hypothèse de continuité du milieu poreux. Le problème est alors de définir localement ces propriétés. Pour cela deux approches existent, l'une déterministe et l'autre statistique.

2.2.1. L'approche déterministe : le Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R..)

La notion de Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R.) consiste à associer à un point mathématique les propriétés d'un volume suffisamment représentatif pour définir ou mesurer des propriétés moyennes du milieu (Bear, 1972).

Le V.E.R peut-être défini comme le fait de Marsily (1981) :

 il est suffisamment grand pour contenir un grand nombre de pores, de façon que l'on puisse y définir une propriété moyenne globale, avec l'assurance que l'effet de fluctuation d'un pore à l'autre sera négligeable;

 il est suffisamment petit pour que les variations de paramètres d'un domaine au domaine voisin puissent être approchées par des fonctions continues.

A cette échelle d'étude, le milieu poreux est équivalent à un milieu continu dans lequel sont définies des grandeurs moyennes. La taille du V.E.R. est généralement définie par l'apparition d'un palier dans la courbe reliant une propriété du milieu à la taille du volume d'observation (cf. Figure 1-3).



Figure 1-3 : Evolution de la fonction porosité au voisinage d'un point du milieu poreux. Définition du volume élémentaire représentatif (Bear, 1972).

Mais rien ne permet d'affirmer que ce palier existe toujours. La taille du VER reste donc assez arbitraire (de Marsily, 1981). Zhang et al. (2000) vérifient même expérimentalement que cette taille varie dans l'espace et en fonction de la propriété étudiée. Ils rectifient la définition de Bear (1972) en ajoutant à la stabilisation de la valeur moyenne un coefficient de variation de la variable qui doit être inférieur à une valeur seuil. Les variations spatiales de la grandeur étudiée sont mieux prises en compte, l'alternative étant le traitement statistique des valeurs locales.

2.2.2. L'approche statistique : les Fonctions Aléatoires Spatiales (F.A.S.)

L'intégration spatiale par des Fonctions Aléatoires consiste en l'utilisation d'une fonction de pondération m(x) intégrable telle que son intégrale étendue à tout l'espace soit égale à l'unité. Une relation entre la grandeur macroscopique $\langle a(x) \rangle$ et la grandeur microscopique (locale) a(x) est alors définie dans un système de coordonnées cartésiennes :

$$\langle a(x)\rangle = \int a(x+x')m(x')dx'$$
 avec $\int m(x)dx = 1$ (I.11)

Le problème du choix de la taille du VER est ici remplacé par le choix de la fonction de pondération. Cette fonction est en fait la loi de probabilité obtenue en étudiant plusieurs réalisations d'un même milieu. Mais, dans la réalité, une seule réalisation du milieu poreux est, en général, disponible. La loi de distribution d'une propriété peut néanmoins être définie dans le cas d'un milieu statistiquement homogène grâce aux hypothèses de stationnarité et d'ergodicité.

L'hypothèse de stationnarité

L'hypothèse de stationnarité permet de supposer que la loi de probabilité étudiée sur un ensemble de réalisations est invariante dans l'espace, i.e. est la même en tout point du domaine.

L'hypothèse d'ergodicité

L'hypothèse d'ergodicité permet de supposer que la réalisation unique déploie dans l'espace la loi de probabilité évoquée.

La loi de distribution inconnue pour l'ensemble des réalisations possibles est ainsi obtenue à partir de la réalisation unique existante en étudiant ses variations spatiales :

$$\lim_{n \to \infty} V_n = \left\langle V(p) \right\rangle \tag{I.12}$$

$$V_n = \frac{1}{S_n} \int_{S_n} V(p) dp$$
(I.13)

avec V(p) le processus aléatoire, V_n la série mathématique de la moyenne spatiale et S_n l'aire du domaine.

2.2.3. <u>Milieux uniforme, homogène et hétérogène</u>

L'intégration spatiale des grandeurs nécessaires à l'application des équations de l'écoulement et du transport reste problématique à l'approche d'une discontinuité : l'utilisation du VER transforme une discontinuité en variation continue, l'intégration avec les fonctions aléatoires nécessitent un milieu statistiquement homogène.

Il faut donc distinguer le milieu uniforme dont les propriétés sont identiques en tout point, le milieu homogène dont les propriétés statistiques vérifient les conditions de stationnarité et d'ergodicité et le milieu hétérogène qui ne possède pas ces propriétés et comporte des discontinuités.

Le type de milieu dépend alors du volume ou de l'échelle considérés : par exemple, un milieu hétérogène peut être constitué de sous-ensembles uniformes et être statistiquement homogène à grande échelle.

2.3. <u>Equations générales de l'écoulement et du transport en milieu poreux</u>

2.3.1. L'hydrodynamique

L'hydrodynamique d'un milieu poreux est régie d'une part par la loi de Darcy :

$$\vec{q} = -\overline{\vec{K}}\,\vec{\nabla}h\tag{I.14}$$

avec \vec{q} le vecteur de vitesse unitaire [L·T⁻¹], \overline{K} le tenseur de perméabilité [L·T⁻¹] et ∇h le gradient de charge [-], d'autre part par l'équation de continuité, issue du principe de conservation de la masse :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{q} + s \frac{\partial h}{\partial t} = f \tag{I.15}$$

avec s le coefficient d'emmagasinement spécifique $[L^{-1}]$, h la charge hydraulique [L] et f le terme puits-source $[T^{-1}]$.

L'équation de diffusivité est obtenue, pour un fluide incompressible de masse volumique et de viscosité dynamique constantes, en associant ces deux équations :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\overline{\overline{K}} \ \vec{\nabla}h\right) + f = s \frac{\partial h}{\partial t} \tag{I.16}$$

Les conditions aux limites permettant d'intégrer cette équation sont de trois types :

- Conditions de Dirichlet, la charge est imposée,
- Conditions de Neumann, le flux est imposé,
- Conditions de Cauchy ou conditions mixtes, le flux est imposé en fonction de la charge.

2.3.2. <u>Le transfert de masse</u>

L'écoulement décrit ci-dessus entraîne des éléments en solution dans le mouvement moyen du fluide qui se déplace : c'est l'advection. L'équation qui régit ce phénomène est obtenue en appliquant le principe de conservation de la masse :

$$-\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{Cq}\right) = \omega_c \frac{\partial C}{\partial t} \tag{I.17}$$

avec C la concentration de soluté $[M \cdot L^{-3}]$.

En ajoutant le phénomène de dispersion, il est admis que toute la phase liquide est concernée par les variations de concentration. La porosité totale remplace donc la porosité cinématique et l'équation d'advection – dispersion est obtenue pour un soluté conservatif :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\overline{\overline{D}} \ \vec{\nabla} C - C \vec{U}\right) = \frac{\partial C}{\partial t} \tag{I.18}$$

Les conditions aux limites sont du même type que pour l'écoulement.

L'intégration de ces équations implique souvent d'avoir une valeur unique pour les paramètres tels que la porosité, la perméabilité et la dispersivité et ce soit à l'échelle du domaine dans le cas d'une solution analytique, soit à l'échelle d'une maille dans le cas d'une modélisation numérique. L'échelle considérée et la notion de paramètres équivalents prennent alors toute leur importance.

3. Notions d'échelles et de paramètres équivalents

3.1. Classification des échelles de l'écoulement

Dagan (1989) propose la classification suivante pour les échelles de l'écoulement :

• L'échelle du laboratoire, qui caractérise les dimensions des expérimentations de laboratoire. Elle est comprise entre 10^{-1} m et 10^{0} m.

L'échelle locale, qui est en général de l'ordre de profondeur des aquifères, i.e. comprise entre 10¹ m et 10² m, dans les directions verticales et horizontales. C'est l'échelle des essais de pompage et de traçage, celle de l'étude de l'écoulement et du transport à proximité des sources de contamination. A cette échelle, l'étude est souvent tridimensionnelle.

L'échelle régionale, qui est de l'ordre de 10⁴ à 10⁵ m dans le plan horizontal et qui correspond aux aquifères dont l'étendue est beaucoup plus large que la profondeur. Ici, les variables sont définies comme des moyennes sur la profondeur et l'écoulement est considéré comme bidimensionnel.

Chaque échelle est donc de la taille d'un volume élémentaire représentatif de l'échelle supérieure. Par exemple, une valeur ponctuelle d'une grandeur à l'échelle locale est définie par une moyenne de cette grandeur sur un volume dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre de l'échelle de laboratoire. Pour passer d'une échelle à l'autre, certaines méthodes d'homogénéisation ou de prise de moyenne volumique (Renard, 1996 ; Cherblanc, 1999) permettent de définir de nouvelles équations à une échelle plus grande, d'autres supposent la loi de Darcy valide à grande échelle et définissent les propriétés d'un milieu homogène équivalent.

3.2. Le milieu homogène équivalent

En 1977, Sauty publie une série d'abaques permettant de déterminer les paramètres de dispersion d'un milieu poreux à partir des essais de traçage. Il observe aussi la possibilité d'assimiler un milieu hétérogène à un milieu homogène équivalent dès que la distance de traçage est assez grande. Il est alors question de perméabilité équivalente et de macrodispersion. La première correspond à une perméabilité moyenne du milieu tandis que la deuxième est causée par la variance des vitesses locales liées aux hétérogénéités locales.

Il faut distinguer dans la perméabilité équivalente, la perméabilité effective, pour un milieu statistiquement homogène, de la perméabilité de bloc, pour un milieu hétérogène représenté par un milieu homogène. Ce deuxième cas apparaît dès lors que le milieu considéré est trop petit pour être statistiquement homogène. Si le volume devient assez grand, la perméabilité équivalente tend vers la perméabilité effective. L'inconvénient de la perméabilité équivalente est qu'elle dépend des conditions aux limites alors que la perméabilité effective est un paramètre intrinsèque du milieu poreux (Wen et Gomez-Hernandez, 1996 ; Renard et de Marsily, 1997).

L'assimilation d'un milieu hétérogène à un milieu homogène caractérisé par sa perméabilité et sa macrodispersivité nécessite donc de considérer le transport à une échelle suffisamment grande pour observer un régime fickien et pouvoir appliquer l'équation d'advection – dispersion (I.18). La taille de cette échelle est relative à la taille des hétérogénéités et de la source du traceur. La connaissance précise du champ des perméabilités semble alors plus intéressante que la définition d'un coefficient de macrodispersion arbitraire pour la modélisation (Matheron et de Marsily, 1980 ; Molz *et al.*, 1983). Une alternative à la description déterministe, impossible dans la réalité, est la description stochastique du milieu poreux.

3.3. <u>La théorie stochastique</u>

3.3.1. <u>Présentation</u>

L'approche stochastique (e.g. Dagan, 1989) consiste à considérer les hétérogénéités comme des variables aléatoires. L'hétérogénéité est alors caractérisée par les lois de probabilité associées aux variables aléatoires qui représentent les propriétés du milieu poreux.

Les paramètres obtenus (vitesse de pore et dispersivité) ne sont plus alors considérés comme des valeurs locales de ces grandeurs, mais comme un échantillonnage de la variable associée. Des valeurs équivalentes de ces paramètres, définies comme les valeurs correspondant à un milieu poreux homogène soumis aux mêmes conditions aux limites, sont obtenues en moyennant ces valeurs locales.

La mise en œuvre de cette méthode statistique repose sur l'hypothèse de stationnarité, l'hypothèse d'ergodicité et la connaissance de la distribution de la conductivité hydraulique. Cette dernière est, en général, modélisée par un champ aléatoire suivant une loi de distribution log-normale complètement déterminée par m_Y et C_Y(r) avec m_Y la moyenne arithmétique de la logconductivité, C_Y(r) sa fonction d'autocorrélation, r étant la distance entre deux points de l'espace. C_Y est une fonction de σ_Y^2 , la variance de la logconductivité, et de l_Y, la longueur de corrélation.

A partir de cette description du milieu, plusieurs développements théoriques existent, notamment quelques solutions analytiques du transport.

3.3.2. <u>Exemples d'application : solutions analytiques du transport</u>

Dagan et Indelman (1999) proposent une solution analytique dans le cas d'une injection-pompage en régime permanent dans un milieu statistiquement homogène infini et anisotrope (e<0,2). Le temps est mis sous forme adimensionnelle :

$$t' = \frac{Q t}{\pi \omega l^2 h} \tag{I.19}$$

avec Q le débit d'injection – pompage $[L^3 \cdot T^{-1}]$, t le temps réel [T], l la distance séparant les puits [L], h la hauteur piézométrique moyenne [L].

La concentration réduite au puits de pompage s'exprime alors en fonction de t' :

$$\frac{C}{Co}(t') = \frac{\theta(t')}{\pi}$$
(I.20)

avec $\theta(t')$ la fonction inverse de la fonction t'(θ) suivante :

$$t'(\theta) = \frac{1 - \theta \cot \theta}{\sin^2 \theta} \tag{I.21}$$

L'étude montre que l'effet des hétérogénéités est semblable à celui de la dispersion locale : le traceur arrive plus tôt, avec une courbe de concentration à la sortie du puits plus étalée qu'en milieu homogène.

Carlier (2002) étend cette solution en prenant en compte des conditions aux limites à flux nul. Il considère deux limites imperméables parallèles et équidistantes d'un doublet d'injection – pompage (cf. Figure 1-4) et introduit un paramètre adimensionnel λ caractérisant cette configuration :

$$\lambda = \frac{l \,\pi}{a} \tag{I.22}$$

avec l la distance entre les puits [L] et a la distance entre les limites imperméables [L].



Figure 1-4 : Configuration étudiée (Carlier, 2002).

Pour un milieu faiblement hétérogène et fortement anisotrope (e<0,2), il obtient la formulation (I.20) avec :

$$t'(\theta) = \frac{\left(\theta \cot \theta - 2\lambda \coth 2\lambda\right) \sinh^2(\lambda)}{\lambda^2 \left(\cos^2 \theta - \cosh^2 2\lambda\right)}$$
(I.23)

Il calcule aussi de manière explicite le temps de percée, i.e. le temps d'arrivée de la première particule de traceur au puits de pompage. Ce temps, mis sous forme adimensionnelle, n'est fonction que du nombre λ :

$$t'_{perc\acute{e}} = \frac{\left(2\lambda \coth\left(2\lambda\right) - 1\right)\sinh^2\lambda}{\lambda^2\sinh^2\left(2\lambda\right)}$$
(I.24)

Carlier et Ackerer (2003) s'intéressent au cas de limites imperméables perpendiculaires à la droite reliant les puits, ceux-ci étant collés aux limites (cf. Figure 1-5). Pour un milieu anisotrope, ils obtiennent aussi la même formulation que Dagan et Indelman (I.20) avec :



 $t'(\theta) = \frac{2\theta}{\pi^2 \sin 2\theta} \tag{I.25}$

Figure 1-5 : Configuration étudiée (Carlier et Ackerer, 2003).

En conclusion, l'approche stochastique permet de mieux quantifier les rapports d'échelles à l'aide des dimensions caractéristiques que sont les longueurs de corrélation ou les échelles intégrales (Dagan, 1989). Il doit alors être possible de relier respectivement la perméabilité équivalente et la macrodispersivité à une moyenne et une variance des perméabilités locales.

3.4. Calcul théorique des paramètres équivalents

3.4.1. La perméabilité équivalente

Le calcul de la perméabilité équivalente a fait l'objet de plusieurs travaux de synthèse intéressants (Wen et Gomez-Hernandez, 1996 ; Renard, 1996 ; Renard et de Marsily, 1997).

Ils concernent surtout les régimes d'écoulement uniforme et que peu de résultats existent pour les écoulements radiaux.

Certains résultats concernent la perméabilité équivalente, qu'elle soit effective ou "de bloc". C'est la nature du milieu poreux considéré qui fait la différence (Renard, 1996).

Cas de l'écoulement uniforme

De nombreux auteurs ont vérifié que la perméabilité effective K_{ef} est toujours comprise entre les bornes de Wiener, i.e. la moyenne arithmétique K_a et la moyenne harmonique K_h des perméabilités locales :

$$K_h \le K_{ef} \le K_a \tag{I.26}$$

En effet, la moyenne arithmétique caractérise la perméabilité équivalente des mailles en parallèle et privilégie les perméabilités locales élevées tandis que la moyenne harmonique caractérise la perméabilité équivalente des mailles en série et privilégie les faibles perméabilités.

Cette inégalité fondamentale (I.26) est à l'origine de plusieurs études dont le but est de borner la perméabilité équivalente et de proposer une formulation pour le calcul de celle-ci. Citons tout d'abord les bornes de Cardwell et Parsons (Cardwell et Parsons, 1945) :

 la moyenne arithmétique des moyennes harmoniques des perméabilités locales calculées sur l'axe parallèle à l'écoulement principal (selon x) pour la borne inférieure K_{C.P.min} (cf. Figure 1-6) :

$$K_{C.P.\min} = \mu_a^z \left(\mu_a^y \left(\mu_h^x \right) \right) \tag{I.27}$$

 la moyenne harmonique des moyennes arithmétiques des perméabilités locales calculées pour chaque plan perpendiculaire à l'écoulement principal pour la borne supérieure K_{C.P.max} (cf. Figure 1-6) :

$$K_{C.P.\max} = \mu_h^x \left(\mu_a^y \left(\mu_a^z \right) \right) \tag{I.28}$$



Figure 1-6 : Calcul des bornes de Cardwell et Parsons (Renard, 1996)

D'après Renard et al. (2000a), Le Loc'h propose de prendre la moyenne géométrique des ces bornes K_{C.P.} comme estimation de la perméabilité équivalente :

$$K_{C.P.} = \sqrt{K_{C.P.\max} K_{C.P.\min}}$$
(I.29)

Il propose aussi une nouvelle méthode de renormalisation simplifiée, c'est-à-dire un algorithme d'agrégation itératif, pour calculer les termes diagonaux du tenseur de perméabilité équivalente. Il s'agit de regrouper les mailles par paquets de deux et de leur affecter la moyenne harmonique des deux valeurs locales si elles sont en série par rapport à la direction u (u étant l'un des axes principaux d'anisotropie), la moyenne arithmétique si elles sont en parallèle. L'application de regroupements successifs, alternativement en parallèle et en série, permet de réduire progressivement le nombre de mailles de la grille, jusqu'à ne plus avoir qu'une seule maille, i.e. une seule valeur de perméabilité. Selon que les mailles sont d'abord regroupées en série ou en parallèle, une valeur inférieure K_{\min}^{uu} ou supérieure K_{\max}^{uu} est déterminée. Finalement, Renard et Le Loc'h (1996) calculent la perméabilité équivalente dans la direction u en composant ces deux valeurs :

$$K_e^{uu} = \left(K_{\max}^{uu}\right)^{\alpha} \left(K_{\min}^{uu}\right)^{1-\alpha}$$
(I.30)

L'exposant α est fonction des rapports d'anisotropie a_v^u et a_w^u :
$$\begin{cases} \alpha \left(a_{v}^{u}, a_{w}^{u}\right) = \frac{f\left(a_{v}^{u}\right) + f\left(a_{w}^{u}\right) - 2 f\left(a_{v}^{u}\right) f\left(a_{w}^{u}\right)}{1 - f\left(a_{v}^{u}\right) f\left(a_{w}^{u}\right)} \\ a_{v}^{u} = \frac{K^{vv}}{K^{uu}} \left(\frac{d_{u}}{d_{v}}\right)^{2}, u \neq v \neq w \in \{x, y, z\} \\ f\left(t\right) = \frac{2}{\pi} \arctan \sqrt{t} \end{cases}$$
(I.31)

avec d_u et d_v les tailles de mailles de la grille dans les directions u et v, et $\frac{K^{uu}}{K^{vv}}$ le rapport d'anisotropie des perméabilités locales. Une alternative à cette méthode est la méthode de renormalisation tensorielle proposée par Gautier et Noetinger (1997) qui permet de calculer tous les termes du tenseur de perméabilité. Renard et al. (2000a) montrent que ces deux méthodes de renormalisation sont plus efficaces que d'autres méthodes d'estimation rapide de la conductivité équivalente.

A partir des moyennes arithmétique et géométrique, Matheron (1967) propose une moyenne pondérée comme approximation au premier ordre de la perméabilité effective dans la direction u :

$$K_e^{uu} = K_a^{\alpha_u} K_h^{(1-\alpha_u)} \qquad avec \ \alpha_u \in [0,1]$$
(I.32)

Ababou (1995) exprime α en fonction du nombre de dimensions de l'espace D (1, 2 ou 3), de la longueur de corrélation dans la direction u considérée l_u [L] et de la moyenne harmonique des longueurs de corrélation l_h [L] :

$$\alpha_i = \frac{D - \frac{l_h}{l_i}}{D} \tag{I.33}$$

La perméabilité équivalente peut aussi être calculée à l'aide d'une moyenne de puissance :

$$\mu_{p} = \left\langle K^{p} \right\rangle^{\frac{1}{p}} = \left(\frac{1}{V} \int_{V} K(x)^{p} dV \right)^{\frac{1}{p}} \quad avec \ p \in [-1, 1]$$
(I.34)

Cette formulation inclut les bornes de Wiener : la moyenne harmonique quand p vaut -1, la moyenne arithmétique quand p vaut 1. Nœtinger (1994) utilise cette méthode et propose une formulation de p dans le cas d'un milieu statistiquement homogène et isotrope :

$$p = 1 - \frac{2}{D} \tag{I.35}$$

Le résultat est alors équivalent à la conjecture de Matheron (I.32) et à la formulation géostatistique pour les milieux log-normaux tridimensionnels :

$$K_e = K_g \exp\left[\sigma_Y^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{D}\right)\right]$$
(I.36)

avec K_g, la moyenne géométrique des conductivités, σ_{γ}^2 , la variance de ln(K)

Pour les faibles variances de la logconductivité, Gutjahr et al. (1978) utilisent le développement au premier ordre :

$$K_e = K_g \left(1 + \sigma_Y^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{D} \right) \right) \tag{I.37}$$

En tenant compte du coefficient d'anisotropie e, ce développement devient (Dagan, 1989) :

$$K_{e} = K_{g} \left(1 + \sigma_{Y}^{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} \right) \right) \qquad avec \qquad \lambda = \frac{e^{2}}{1 - e^{2}} \left[\frac{1}{e\sqrt{1 - e^{2}}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{1}{e^{2}} - 1} - 1 \right]$$
(I.38)

Ainsi, dans le cas d'un milieu isotrope, e=1 et $K_e = K_g \left(1 + \frac{\sigma_Y^2}{6}\right)$. Dans le cas d'un milieu parfaitement stratifié (e=0), la moyenne arithmétique des conductivités est retrouvée pour un écoulement parallèle aux strates.

Par ailleurs, dans le cas de l'écoulement bidimensionnel, en particulier à l'échelle de l'aquifère, la transmissivité équivalente T_{ef} est souvent utilisée à la place de la perméabilité équivalente K_{ef} , avec la même relation entre les paramètres locaux et les paramètres équivalents :

$$T_{ef} = B K_{ef} \tag{I.39}$$

B est l'épaisseur de l'aquifère. Tartakovsky et al. (1999a) montrent que cette relation entre la transmissivité et la perméabilité équivalentes n'est valable que pour un milieu faiblement hétérogène ($\sigma_Y^2 \ll 1$) et une longueur de corrélation verticale l_v négligeable devant l'épaisseur de l'aquifère ($l_v \ll B$). Ils proposent un développement au premier ordre de leur solution dans le cas général :

$$\frac{T_{ef}}{BK_g} = 1 - \frac{1 - 2\beta}{2}\sigma_Y^2 \quad avec \quad \beta = \lambda_v^2 \left(\sqrt{\pi}\lambda_v^{-1}\operatorname{erf}\left(\lambda_v^{-1}\right) + \exp\left(-\lambda_v^{-2}\right) - 1\right) \quad et \quad \lambda = \frac{l_v}{B} \quad (I.40)$$

Enfin, Tartakovsky et al. (1999b) montrent que, même avec un gradient de charge uniforme dans un milieu gaussien isotrope, une seule valeur de perméabilité équivalente ne peut être définie. Pour un milieu bidimensionnel, ils proposent une solution analytique de la perméabilité équivalente qui est, en approximation au premier ordre, un tenseur non symétrique à diagonale dominante. Le caractère non-symétrique est causé par les conditions aux limites. Quand la taille du domaine grandit, ils retrouvent les résultats précédents, i.e. les termes diagonaux du tenseur tendent vers la moyenne géométriques des perméabilités locales tandis que les autres termes tendent vers zéro.

Tartakovski et Guadagnini (2003) constatent l'incapacité des méthodes de calcul des paramètres équivalents à inclure d'importants phénomènes, tels que les écoulements préférentiels existants dans le milieu poreux. Ils proposent ainsi de déterminer des paramètres équivalents qui tiennent compte des incertitudes sur les propriétés du milieu et les conditions aux limites. L'étude de deux milieux aléatoires, Ω_1 et Ω_2 ,non corrélés associés en série par une limite β ($\Omega_1 \in [0; \beta] et \Omega_2 \in [\beta; 1]$) elle-aussi aléatoire (caractérisée par sa moyenne $\langle \beta \rangle$, sa variance σ_{β}^2 et sa fonction de densité de probabilité p(β)) fournit une expression de la perméabilité équivalente au premier ordre :

$$K_{app}^{-1}(x) = \frac{\operatorname{erf}(u) - \operatorname{erf}(u_0)}{\operatorname{erf}(u_1) - \operatorname{erf}(u_0)} \left(\frac{1}{K_{h_1}} - \frac{1}{K_{h_2}}\right) + \frac{1}{K_{h_1}}$$
(I.41)

avec :

$$u = \frac{x - \langle \beta \rangle}{\sqrt{2} \sigma_{\beta}} \quad ; \qquad u_0 = \frac{-\langle \beta \rangle}{\sqrt{2} \sigma_{\beta}} \quad ; \qquad u_1 = \frac{1 - \langle \beta \rangle}{\sqrt{2} \sigma_{\beta}} \quad (I.42)$$

et K_{h_i} la moyenne harmonique des perméabilités locales du milieu Ω_i . Cette formule est validée pour les milieux mono et bidimensionnels.

Cas de l'écoulement radial

Les formulations de la perméabilité équivalente présentées ci-dessus sont valables pour un régime d'écoulement uniforme. Dans la pratique, elles sont souvent utilisées quelque soit le type d'écoulement. Cette hypothèse est-elle acceptable à proximité d'un puits ?

Dagan (1989) explique que la convergence des lignes de courant due à l'écoulement radial entraîne une diminution du flux moyen, d'où une conductivité équivalente plus faible. Ainsi, la perméabilité équivalente tend vers la moyenne harmonique des perméabilités locales K_h à proximité du puits et vers la moyenne géométrique K_g à une distance suffisamment grande pour considérer l'écoulement uniforme. Les résultats numériques de Neuman et Orr (1993) confirment cette théorie. Sanchez-Vila (1997) retrouve aussi ces résultats et estime la distance d'établissement de la valeur asymptotique à 1,5 - 2 échelles intégrales pour un modèle gaussien et 3 à 5 échelles intégrales pour un modèle exponentiel.

Naff (1991) trouve que la perméabilité équivalente est toujours égale à la moyenne arithmétique des perméabilités locales à proximité du puits. Elle est constante pour un milieu tridimensionnel stratifié et tend vers la moyenne harmonique pour un milieu bidimensionnel quand la distance au puits augmente.

Desbarats (1992) étudie le cas d'un puits au débit imposé placé au centre d'un champ carré avec des hauteurs fixées comme conditions aux limite. Il rappelle que la conductivité équivalente tend vers la moyenne géométrique loin du puits, est quasi-constante et égale à la moyenne harmonique à quelques échelles intégrales de celui-ci et tend vers la moyenne arithmétique à proximité de lui. Il propose une expression de la transmissivité équivalente T_s, à proximité d'un puits de rayon r_w pour une surface S de rayon r_s :

$$\ln(T_s) = \frac{1}{W} \int_s \frac{\ln T(x)}{r^2(x)} dx \quad \text{avec} \quad W = 2\pi \ln\left(\frac{r_s}{r_w}\right)$$
(I.43)

Il souligne néanmoins que cette solution est contradictoire avec les résultats de Naff (1991). A partir de celle-ci, il propose une expression de la transmissivité dans le cas d'un doublet d'injection – pompage (Desbarats, 1993) :

$$\frac{1}{T_{I}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{T_{Si}} + \frac{1}{T_{Sp}} \right)$$
(I.44)

avec T_I , la transmissivité équivalente du système, T_{Si} et T_{Sp} , les transmissivités calculées en considérant uniquement l'injection d'une part et uniquement le pompage d'autre part.

Indelman et al. (1996) proposent une solution théorique de la perméabilité équivalente pour le cas d'un écoulement radial dans un milieu tridimensionnel aléatoire présentant une anisotropie axisymétrique. La première particularité de cette étude est de considérer une charge constante plutôt qu'un flux constant comme condition aux limites dans le puits, ce qui est plus réaliste. La deuxième est d'exprimer la conductivité équivalente en écoulement radial K_{eq} en fonction de la conductivité équivalente en régime uniforme K_{efu} :

$$K_{eq} = K_a \left(1 - \xi \right) + K_{efu} \xi \tag{I.45}$$

$$\begin{cases} \xi = \frac{\ln\left(\frac{r}{l_h}\right)}{\ln\left(\frac{r}{r_w}\right)} & pour \quad \frac{r_w}{l_h} < 0,2 \quad et \quad \frac{r}{l_h} \gg 1 \\ \xi \to 0 \quad et \quad K_{eq} \to K_a \quad pour \quad \frac{r}{l_h} \quad fixé \quad et \quad \frac{r_w}{l_h} \to 0 \\ \xi \to 1 \quad et \quad K_{eq} \to K_{efu} \quad pour \quad \frac{r_w}{l_h} \quad fixé \quad et \quad \frac{r}{l_h} \to \infty \end{cases}$$
(I.46)

avec r la distance, r_w le rayon du puits et l_h la longueur de corrélation horizontale.

Plus récemment, Riva et al. (2001) ont proposé une expression analytique de la transmissivité équivalente T_{eq} à proximité d'un puits de pompage en régime permanent, situé au centre d'un milieu aléatoire hétérogène cylindrique de rayon L :

$$\frac{T_{eq}(r')}{T_g} = \left[1 + \sigma_Y^2 \left(-\frac{1}{2} + \exp\left[-\frac{\pi}{4}\frac{L^2}{l_h^2}r'^2\right] + \frac{r'}{8\pi}\frac{L^2}{l_h^2}I_K\right)\right]^{-1}$$
(I.47)

avec T_g la moyenne géométrique des transmissivités locales, $r' = \frac{r}{L}$ le rayon normalisé, l_h la longueur de corrélation et I_K une intégrale définie par les auteurs.

Au niveau du puits cette solution est égale à la moyenne harmonique des perméabilités locales. Pour des distances intermédiaires, elle croît vers la moyenne géométrique à mesure que la taille du domaine grandit devant la longueur de corrélation. Pour les grandes distances, elle continue de croître et décroît à proximité de la condition au limites de Dirichlet (à r'=1) vers une valeur supérieure à la moyenne géométrique.

Ainsi, la perméabilité équivalente est bien fonction du régime d'écoulement du système mais aussi des conditions aux limites extérieures. Les études concernant l'écoulement radial restent peu nombreuses et se réduisent souvent à l'étude d'un cas spécifique aux hypothèses simplificatrices du fait de la complexité du problème.

3.4.2. <u>La macrodispersion</u>

Matheron et de Marsily (1980) et Molz et al. (1983) détaillent des propriétés du phénomène de dispersion en milieu stratifié :

- La macrodispersion apparaît lorsqu'il y a des échanges entre les strates. En particulier a proximité de la source, la dispersion locale est négligeable devant la macrodispersion longitudinale. Cette dernière dépend surtout des variations de vitesse entraînées par les différentes perméabilités mais aussi de la dispersion transversale locale.
- Si la dispersion transversale, ainsi que la diffusion moléculaire, est nulle, le régime fickien ne s'établit pas et la dispersion longitudinale n'a pas d'asymptote.
- Pour une valeur finie et non nulle de la dispersion transversale, la dispersion longitudinale croît vers une valeur asymptotique quand la distance de transport tend vers l'infini.
- L'équation d'advection dispersion n'est valable que lorsqu'un régime fickien est atteint et que la dispersion s'approche de sa valeur asymptotique, donc suffisamment loin de la source.
- L'estimation de la dispersion longitudinale à l'aide d'essais de traçage et d'une équation du type advection-dispersion ne donne pas une valeur unique. La valeur de

macrodispersion déterminée est très dépendante de la distance entre la source et le point de mesure et n'a pas de relation particulière avec la dispersion longitudinale locale.

Ces résultats soulignent l'importance de la variance des perméabilités locales et de la distance parcourue dans la valeur de la macrodispersion, la valeur asymptotique étant atteinte alors que le milieu est suffisamment grand pour être statistiquement homogène. Il apparaît aussi que la relation entre la paramètre équivalent de la dispersion et sa valeur locale est complexe. Ces conditions rendent intéressant l'estimation de la dispersion par les théories stochastiques.

Cas de l'écoulement uniforme

La macrodispersivité longitudinale peut s'exprimer en fonction de la distance parcourue, d, et de la variance de déplacement, σ_x^2 , i.e. la variance de la distribution des concentrations :

$$A_L = \frac{\sigma_x^2}{2d} \tag{I.48}$$

Dagan (1989) distingue aussi la macrodispersivité effective de la macrodispersivité apparente. Pour une loi de covariance des logconductivités exponentielle axisymétrique, il obtient comme approximation au premier ordre :

Macrodispersivité effective :
$$A_{ii} = \frac{1}{2\overline{U}} \frac{dX_{ii}}{dt}$$
 (I.49)

Macrodispersivité apparente :
$$A_{ii} = \frac{1}{2\overline{U}} \frac{X_{ii}}{t}$$
 (I.50)

avec X_{ii} la variance du déplacement dans la direction i, \overline{U} la vitesse moyenne d'écoulement et t, le temps de parcours. A₁₁ est la dispersivité longitudinale, A₂₂ et A₃₃ sont les dispersivités transversales.

Pour les petits temps de séjour $\left(\frac{t\overline{U}}{l_Y} \ll 1\right)$, i.e. tant que le traceur n'a pas parcouru suffisamment d'échelles intégrales ou longueurs de corrélation l_Y dans le cas d'une loi de

covariance exponentielle, le régime asymptotique fickien n'est pas atteint, l'équation d'advection – dispersion ne peut pas être appliquée et X_{ii} prend la forme suivante :

$$X_{11} \rightarrow \frac{8}{15} \sigma_Y^2 \overline{U}^2 t^2 \qquad et \qquad X_{22,33} \rightarrow \frac{1}{15} \sigma_Y^2 \overline{U}^2 t^2 \tag{I.51}$$

Pour les temps de séjour plus grands, les deux macrodispersivités, effective et apparente, tendent vers une même limite asymptotique :

$$A_{11} \to \sigma_Y^2 l_Y \quad et \qquad A_{22,33} \to 0 \tag{I.52}$$

Gelhar et Axness (1983) incluent la dispersion locale dans leur calcul des valeurs asymptotiques de la macrodispersivité. Dans le cas isotrope, ils obtiennent :

$$\begin{cases}
A_{L} = \frac{\sigma_{Y}^{2} l_{Y}}{\gamma^{2}} \\
A_{T} = \frac{\sigma_{Y}^{2} \alpha_{L}}{15\gamma^{2}} \left(1 + 4\frac{\alpha_{T}}{\alpha_{L}}\right)
\end{cases}$$
(I.53)

Dans le cas anisotrope, avec $l_{Y_1}, l_{Y_2} \gg l_{Y_3}$ et $r_* = \frac{\alpha_T \cdot l_{Y_1}}{l_{Y_3}^2} \gg 1$, leurs résultats deviennent :

$$\begin{cases}
A_{11} = \frac{1,311 r_*^{\frac{1}{2}} \sigma_Y^2 l_{Y3}^2}{\gamma^2 \alpha_T} \\
A_{22} = \frac{0,599 \sigma_Y^2 \alpha_T l_{Y3}^2}{\gamma^2 l_{Y2}^2 r_*^{\frac{1}{2}}} \\
A_{33} = \frac{0,656 \sigma_Y^2 \alpha_T}{\gamma^2 r_*^{\frac{3}{2}}}
\end{cases}$$
(I.54)

Si
$$r_* = \frac{\alpha_T l_{Y1}}{l_{Y3}^2} \ll 1$$
, alors :

$$\begin{cases}
A_{11} = \frac{\sigma_Y^2 l_{Y1}}{\gamma^2} (1 - r_*) \\
A_{22} = \frac{\sigma_Y^2 \alpha_T l_{Y3}^2}{\gamma^2 l_{Y2}^2} \\
A_{33} = \frac{\sigma_Y^2 \alpha_T}{\gamma^2}
\end{cases}$$
(I.55)

avec $\gamma = \frac{K_e}{K_g}$, défini par l'équation (I.38).

Zhan et Wheatcraft (1996) étendent ces résultats aux milieux fractals en introduisant le concept d'échelle intégrale maximale L_{max} . Cette échelle de référence est délimitée par les limites de flux nul :

$$L_{\max} = \frac{L_x^2 L_y^2 L_z^2}{L_x^2 L_y^2 + L_y^2 L_z^2 + L_z^2 L_x^2}$$
(I.56)

avec L_x , L_y , L_z , les distances entre les limites de flux nuls dans les directions x, y et z [L]. Par exemple, pour un aquifère infini dans les directions horizontales, L_{max} est égale à L_z la hauteur de l'aquifère.

Dans le cas mono dimensionnel, la macrodispersivité longitudinale est proportionnelle à L_{max}^2 et pour les milieux multidimensionnels, elle est du même ordre de grandeur que L_{max} . Pour les milieux tridimensionnels isotropes, la macrodispersivité longitudinale devient :

$$A_{L} = \frac{\sigma_{Y}^{2}}{\gamma^{2}} \frac{\pi}{2} \frac{8 - 2D}{9 - 2D} \left(\frac{L_{\max}}{2\pi}\right)$$
(I.57)

avec D la dimension fractale du milieu et avec $\gamma = \frac{K_e}{K_g}$.

Cas de l'écoulement radial

Comme pour les perméabilités équivalentes, les formules définies ci-dessus sont valables avec un régime d'écoulement uniforme mais sont souvent utilisées dans le cas général. Il convient de se demander quelle est leur validité en écoulement radial. Indelman et Dagan (1999) étudient le cas d'un puits d'injection dans un milieu tridimensionnel et trouvent une macrodispersivité asymptotique trois fois plus petite pour un puits vertical, cinq fois pour une source ponctuelle, que leur résultat (I.52) en écoulement uniforme.

Maugis et al. (2002) s'appuient sur des développements théoriques et numériques pour montrer que la dispersivité est très dépendante de la proximité de conditions aux limites et des régimes d'écoulement non-uniforme. Par exemple, dans le cas du dipôle d'injection – pompage, la dispersion est plus faible quand le débit, plutôt que le rabattement, est imposé. Finalement, ils observent que l'hypothèse de l'écoulement uniforme est acceptable dans le cas du pompage. La dispersivité longitudinale déterminée avec un pompage peut-être utilisée en écoulement uniforme. L'extension au doublet est plus problématique : la relation entre les paramètres obtenus avec chaque approche reste encore à établir afin de pouvoir utiliser les résultats d'un essai de traçage dans le cas général.

4. <u>Conclusion</u>

Les équations de l'hydrodynamique et du transport présentées dans ce chapitre sont associées aux propriétés du milieu poreux. Pour mettre en œuvre ces équations sur un certain volume, comme, par exemple, une maille d'un modèle numérique, les grandeurs doivent être définies à l'échelle de cette maille.

La première difficulté est de définir localement les propriétés. La définition géostatistique contient plus d'informations qu'une simple moyenne spatiale sur un VER. Elle tient compte des variations spatiales de la grandeur considérée, quelque soit l'échelle de variation. Cette approche est donc bien adaptée au changement d'échelles.

Il existe des développements théoriques qui permettent de déterminer la valeur des paramètres à l'échelle voulue à partir des valeurs locales ainsi définies. Néanmoins, ces solutions sont peu nombreuses pour les régimes d'écoulement non uniformes comme les écoulements radiaux et elles sont d'autant moins valables que les conditions aux limites sont proches.

La définition d'un paramètre effectif, indépendant des conditions aux limites, nécessite l'observation d'un milieu statistiquement homogène, i.e. suffisamment grand pour vérifier les conditions de stationnarité et d'ergodicité. Cette hypothèse est incompatible avec l'étude de zones locales, proches des conditions aux limites. L'étude expérimentale de l'influence des conditions aux limites sur les grandeurs caractérisant leur environnement proche est ainsi justifiée.

Enfin, pour appliquer ces formulations théoriques à des cas rééls, il faut disposer des lois de distribution des propriétés, i.e. les déterminer à partir de mesures des paramètres. Interviennent alors l'échelle de mesure ainsi que le protocole expérimental. C'est pourquoi le Chapitre 2 présente un état de l'art des techniques expérimentales qui permettent de déterminer les paramètres de l'écoulement et du transport en milieu poreux.

Chapitre 2 : Etat de l'art dans l'utilisation des modèles physiques de laboratoire

1. Introduction

Dans le cas du milieu naturel, fortement hétérogène, les propriétés définies précédemment ne sont pas mesurables directement.

L'essai de traçage consiste à suivre le déplacement et la dispersion d'un traceur dans le milieu poreux où est instauré un écoulement particulier. L'objectif est d'estimer la porosité, la perméabilité et la dispersivité à partir des résultats obtenus, le champ de vitesse et la perméabilité pouvant aussi être déterminés par essais de pompage. Il convient alors de développer les protocoles d'essais de traçage : leur complexité et leur coût nous poussent à optimiser la quantité et la qualité des informations qu'ils fournissent.

Renard et al. (2001) mettent en avant l'erreur commise sur la valeur de la perméabilité lorsqu'elle est mesurée avec un perméamètre qui ne tient pas compte de l'anisotropie du milieu. La notion d'échelle et la technique expérimentale apparaissent être des facteurs importants dans la valeur des paramètres déterminés. Les études à grande échelle, dans le milieu naturel, sont difficiles à mettre en œuvre, peu précises et coûteuses. L'étude du changement d'échelle, de l'effet des hétérogénéités, des phénomènes de dispersion et le développement de techniques expérimentales ont donc trouvé leur place au laboratoire.

Les conditions expérimentales y sont mieux contrôlées (Huang et al., 1995) : les mesures peuvent être plus précises et moins coûteuses, les phénomènes non souhaités (sorption, compression, ...) évités, plusieurs échelles d'observation sont possibles et les expériences peuvent être reproductibles. Ainsi, les « expériences à échelle intermédiaire » (Silliman et al., 1998) sont intéressantes pour affiner une théorie avant les essais de terrain (Sternberg et al., 1996).

Le but de ce travail est la détermination de paramètres équivalents à partir des essais de traçage réalisés au laboratoire. Nous nous intéresserons d'abord à l'évolution des techniques

expérimentales et d'analyse. Ensuite, les différents types de modèles physiques de laboratoires seront présentés.

2. <u>Protocoles des essais de traçage de laboratoire</u>

L'expérimentation de laboratoire permet l'utilisation de divers milieux poreux, types d'écoulement, traceurs et techniques de mesure. Une fois l'essai réalisé, différentes méthodes d'analyse des résultats sont aussi à notre disposition.

2.1. Les milieux poreux

Des billes de verre (Sternberg et Greenkorn, 1994 ; Sternberg *et al.*, 1996) à la carotte de milieu naturel intact (Khan et Jury, 1990 ; Nelson *et al.*, 2003) en passant par les milieux constitués de différentes granulométries de sables et argiles (Huang et al., 1995), différents types de milieux poreux sont utilisés, en particulier dans les installations monodimensionnelles. D'un côté, les billes de verres permettent une plus grande reproductibilité et un meilleur contrôle des expériences. De l'autre, les carottes prélevées dans le sol assurent une meilleure représentation de la réalité. Les cuves expérimentales bi ou tridimensionnelles sont en général remplies avec un agencement de sables ayant les caractéristiques voulues.

Le développement des modèles physiques de laboratoire a donné la possibilité de créer des milieux poreux de plus en plus complexes et proches de la réalité du terrain. Après l'étude des milieux homogènes, celle des milieux structurés (strates, fractales), il est aujourd'hui possible de créer des milieux ayant une distribution aléatoire corrélée des perméabilités déterminée a priori (Silliman et al., 1998).

2.1.1. Les milieux fractals

Un milieu poreux est constitué de plusieurs échelles allant de la taille représentative de la phase solide à la taille représentative de l'aquifère. Entre ces deux limites, différentes d'au moins un ordre de grandeur, il peut exister une structure fractale du milieu poreux (Adler, 1996). A la différence des fractales mathématiques, les structures fractales ainsi établies ont des échelles finies. Cette similitude entre les milieux poreux et les structure fractales a conduit les expérimentateurs à réaliser des milieux poreux de type fractales, comme par exemple le milieu bidimensionnel de Silliman et Caswell (1998) construit sur la base de l'éponge de Sierpinski (Mandelbrot, 1983).

2.1.2. <u>Les milieux aléatoires</u>

Plus récemment, le développement des théories stochastiques a entraîné dans l'approche expérimentale la création de milieux dits aléatoires. La structure statistique du champ de conductivités suit le plus souvent une loi de covariance exponentielle (Refsgaard, 1986 ; Welty et Elsner, 1997 ; Silliman et Caswell, 1998 ; Chao *et al.*, 2000 ; Silliman et Zheng, 2001 ; Silliman, 2001). Une grandeur caractéristique du milieu telle que la longueur de corrélation peut alors directement être reliée aux échelles de mesure, donc aux techniques mises en place.

Pour construire physiquement de tels modèles, un milieu ayant les propriétés voulues (loi de covariance, perméabilité moyenne) est d'abord modélisé à l'aide d'un générateur de champ gaussien selon le maillage du modèle physique à construire. En général, celui-ci est construit avec des blocs de sable parallélépipédiques. Une répartition continue des perméabilités est ainsi obtenue. L'ensemble de ces valeurs est ensuite réparti en classes dont les médianes sont les perméabilités des sables disponibles au laboratoire. La perméabilité de chaque bloc est remplacée par la médiane de sa classe. Le variogramme du nouveau champ de perméabilités est construit en respectant le champ de perméabilités ainsi créé.

Pour remplir le modèle physique avec les différents milieux poreux, plusieurs techniques existent. La première consiste à utiliser des blocs de sable saturés en eau et congelés pour maintenir la cohésion des blocs et permettre leur manipulation (Silliman et al., 1998). Les blocs sont ainsi découpés et agencés de manière à reproduire le champ réalisé précédemment. La deuxième méthode consiste à remplir le modèle couche par couche en séparant les blocs avec de fines plaques (Silliman et Simpson, 1987 ; Ruch, 1992 ; Silliman *et al.*, 1998). Le sable est versé humide dans les blocs déjà remplis d'eau pour assurer la saturation et la cohésion du milieu (cf. Figure 2-1). Quand une couche est finie, les plaques sont retirées et la couche est compactée.



Figure 2-1 : Remplissage du modèle physique MARCEAUS avec des grilles de séparation.

Une fois le milieu poreux installé dans le modèle physique, il doit être maintenu dans des conditions évitant le développement de biofilms, qui peuvent entraîner une chenalisation des écoulements. Le transport dans un milieu rempli de biofilms se déroule comme celui dans une roche fracturée : les vitesses et les coefficients de dispersion sont alors plus élevés (Sharp et al., 1999).

2.2. Influence de l'hydrodynamique

Les essais de traçage sont réalisés soit en écoulement uniforme, soit en écoulement radial (pompage simple ou doublet d'injection – pompage). L'écoulement naturel d'une nappe est uniforme. Dans ces champs de grandes dimensions, les essais de traçage sont coûteux à réaliser et les incertitudes sur les mesures et sur la connaissance du terrain sont grandes. Les essais en écoulement radial ont ainsi été développés pour réduire le champ de mesure à la zone de capture du puits. De plus, dans le cadre de la protection des captages d'eau potable ou de la dépollution des sols, il s'agit souvent d'étudier une zone où la nappe subit un écoulement radial. Les abaques proposés par Sauty (1977) traitent des deux types d'écoulement. Ptak et Schmid (1996) soulignent les avantages des expériences en écoulement radial : la faible durée des expériences, l'effet réduit du gradient naturel et un meilleur bilan de masse.

La question est alors de savoir si les paramètres de l'écoulement et du transport sont fonctions du type d'écoulement. Pour un même milieu, les valeurs déterminées en écoulement radial sont-elles applicables en écoulement uniforme et réciproquement ?

L'étude théorique a révélé que les paramètres équivalents sont fonctions des conditions aux limites de l'hydrodynamique dès que le milieu n'est pas statistiquement homogène. Il existe des résultats qui permettent de calculer la perméabilité équivalente en écoulement radial en fonction de celle calculée pour l'écoulement uniforme (cf. équation (I.45)). De même, il semble possible d'utiliser une même valeur de dispersivité pour des régimes d'écoulement différents. Mais l'utilisation de ces résultats nécessite des conditions particulières et une certaine distance entre la zone étudiée et les conditions aux limites.

L'étude expérimentale de la relation entre les paramètres du transport et le type d'écoulement est plus récente. Les expériences réalisées sur un même milieu poreux révèlent que les paramètres déterminés sont très différents selon que le traçage est réalisé en écoulement radial ou en écoulement uniforme. Chao et al. (2000) trouvent une dispersivité de 12 cm en écoulement uniforme et moins de 1 cm en écoulement radial. Les travaux de Silliman et Zheng (2001) poursuivis ensuite par Silliman (2001) donnent des résultats contraires : la dispersion estimée avec un pompage est plus grande qu'avec un écoulement uniforme. Quelques soient les conditions expérimentales mises en œuvres, il apparaît difficile d'établir une équivalence entre les dispersivités mesurées en écoulement radial et uniforme.

Par conséquent, pour généraliser le changement d'échelle, il faudrait établir des relations entre les paramètres équivalents déterminés pour un même milieu mais des conditions aux limites différentes.

2.3. Les traceurs

Est appelée traceur d'une population dont l'évolution est étudiée, toute substance ayant un comportement identique à celle-ci et possédant un caractère permettant de l'identifier.

Il existe de nombreux types de traceurs. Certains auteurs emploient des traceurs radioactifs (Refsgaard, 1986) mais la complexité et le coût des mesures rendent ces procédés relativement rares. Les traceurs les plus courants sont les traceurs fluorescents et les traceurs ioniques.

2.3.1. Les traceurs fluorescents

Les traceurs fluorescents ont fait l'objet de plusieurs études comparatives (Smart et Laidlaw, 1977 ; Sabatini et Al Austin, 1991 ; Ptak et Schmid, 1996 ; Gutierrez *et al.*, 1997 ; Käss, 1998)

Ils présentent plusieurs avantages : ils ont un seuil de détection très faible et sont peu sensibles aux variations de température et de salinité. En revanche, la mesure de concentration nécessite un prélèvement. Ptak et Schmid (1996) ont ainsi mis au point en un dispositif de mesure à base de fibre optique offrant une meilleure précision spatiale et temporelle de la mesure. Les traceurs fluorescents sont aussi sensibles à la lumière et au pH. Il existe plusieurs traceurs fluorescents ayant des propriétés différentes. Par exemple, la fluorescéine peut être considérée comme un traceur parfait, sans adsorption (Sabatini et Al Austin, 1991) alors que la rhodamine WT présente un facteur de retard dû à l'adsorption (Ptak et Schmid, 1996).

Ces caractéristiques font que les traceurs fluorescents sont surtout utilisés pour les essais sur le terrain. Il faut alors tenir compte de la fluorescence naturelle et de la turbidité de l'eau.

2.3.2. Les traceurs ioniques

Les traceurs ioniques les plus courants sont les chlorures (NaCl ou KCl). Pourtant il existe peu d'études établissant les qualités de ces derniers. Ils sont le plus souvent détectés à l'aide d'une mesure de conductivité électrique qui peut-être réalisée directement dans le sol en insérant des électrodes dans le milieu poreux. La relation entre la conductivité électrique et la concentration est linéaire pour les faibles concentrations (Richards, 1954). De plus, la mesure de la conductivité électrique est possible sur un échantillon mais aussi in situ dans le milieu poreux (Blanc, 1967). Ces mesures sont assez précises, facile à mettre en œuvre et peu coûteuses. Il n'y a pas de phénomène d'adsorption. En revanche, la conductivité électrique varie avec la température et les électrodes nécessitent un étalonnage in situ à cause de l'influence du milieu poreux et de la conductivité initiale de l'eau. De plus, les concentrations utilisées doivent rester faibles pour éviter une trop grande modification des écoulements, générée par les gradients de densité et de viscosité.

Pour tenir compte de l'effet de ces contrastes de densité, Barth et al. (2001) proposent un nouveau critère. Ils généralisent le critère α_1 proposé pour les milieux homogènes par Oostrom et al. (1992) au cas des milieux hétérogènes (α_2) :

$$\alpha_1 = \frac{K \frac{\Delta \rho}{\rho}}{q} \tag{II.1}$$

$$\alpha'_{1} = \frac{\Delta \rho}{J}$$
(II.2)

$$\alpha_2 = \frac{\Delta \rho / \rho}{J - 2\sigma_{J_1}} \tag{II.3}$$

avec K, la perméabilté du milieu homogène [L/T], $\Delta\rho$, la différence entre la masse volumique du traceur et celle de l'eau [M/L³], ρ , la masse volumique de l'eau [M/L³], q la vitesse de Darcy [L/T], J le gradient hydraulique moyen dans le milieu poreux et σ_J , la variance de J dans la direction principale de l'écoulement. Le facteur 2 provient de l'utilisation d'un intervalle de confiance à 95 %.

Les études expérimentales font apparaître une valeur critique pour ces paramètres égale à 0,3 : pour $\alpha_i > 0,3$, le contraste de densité a une influence sur le transport. Le soluté n'est plus un traceur. De plus, le contraste de densité a d'autant plus d'effet sur le transport que le milieu poreux est hétérogène (σ_J augmente).

Enfin, l'emploi de plusieurs traceurs simultanément permet d'étudier leurs comportements relatifs et de vérifier que ce sont bien des traceurs. Nelson et al. (2003) utilisent aussi cette méthode pour étudier la contribution de la diffusion moléculaire sur le phénomène de dispersion.

2.4. Débits et hauteurs piézométriques

Dans l'essai de traçage, la mesure de concentration doit être corrélée aux conditions aux limites que sont les débits et les hauteurs piézomètriques. La mesure de ces paramètres apporte aussi son lot d'informations. Plusieurs études ont été réalisées afin d'optimiser les résultats obtenus à partir de ces mesures.

2.4.1. <u>Mesures de débits</u>

Genereux et Guardiario (2001) s'intéressent à la mesure de débit dans un puits de pompage : ils ont mis au point un dispositif permettant de déterminer le profil vertical des vitesses dans l'aquifère avec ou sans pompage. Plusieurs mesures de débit sont réalisées à différentes côtes d'un puits de pompage. Pour cela, ils utilisent des obturateurs qui permettent d'isoler une partie d'un puits et mesurent le débit sortant de la zone isolée.

Ils en déduisent la perméabilité de chaque horizon ainsi caractérisé :

$$K_{j} = \frac{K_{f} b_{f} \Delta (Q_{i} - Q_{a})_{j}}{Q_{p} b_{j}}$$
(II.4)

avec, K_j et b_j , la conductivité hydraulique et l'épaisseur de la couche j située entre deux mesures de débits, K_f et b_f , la conductivité hydraulique et l'épaisseur de l'aquifère, Q_p , le débit pompé, Q_a , le débit de la couche j sans pompage, Q_i , le débit de la couche j pendant le pompage. Ainsi $\Delta(Q_i - Q_a)$ est la contribution de la couche j au débit pompé.

Une méthode semblable d'échantillonnage entre obturateurs avait déjà été utilisée par Ackerer (1985) pour déterminer la distribution verticale des vitesses d'écoulement et de concentration d'un contaminant au droit d'un sondage.

2.4.2. <u>Mesures piézomètriques</u>

La conductivité hydraulique d'un milieu peut aussi être déterminée à partir du variogramme du gradient de charge. Conwell et al. (1997) s'interrogent ainsi sur la meilleure répartition possible d'un ensemble de piézomètres pour déterminer le variogramme du gradient de charge d'un milieu poreux hétérogène.

Plusieurs configurations sont étudiées, en particulier un maillage régulier de piézomètres et un maillage fractal, basé sur la poussière de Cantor (Mandelbrot, 1983). Pour faciliter la comparaison, un taux d'efficacité est défini par le rapport entre le nombre de valeurs de gradient déterminées et le nombre de piézomètres.

Le maillage régulier a deux inconvénients majeurs : le nombre d'échantillons par classe de distance du variogramme varie beaucoup. Les mesures pour les petites et les grandes distances coûtent très chères. Cette répartition a un taux d'efficacité de 0,85 estimation de gradient par piézomètre. Pour une répartition aléatoire des piézomètres dans une grille uniforme, ce coefficient tombe à 0,33.

En revanche, les réseaux qui tiennent compte du changement d'échelle, telles que les fractales, semblent mieux convenir à ce genre d'étude. Ainsi, une répartition des piézomètres établie à partir d'une poussière de Cantor modifiée a permis d'obtenir un taux d'efficacité de 1,2.

2.5. <u>Méthodes d'analyse</u>

Une fois l'essai de traçage réalisé, les paramètres ne sont pas déduits directement : différentes méthodes ont été mises au point pour les interpréter. Nous présentons ici les méthodes les plus utilisées : la méthode du $t_{0,5}$ et celle des moments pour les méthodes directes, la modélisation numérique et l'approche stochastique pour les méthodes indirectes.

2.5.1. La méthode du $t_{0,5}$

Pour un écoulement unidirectionnel à vitesse constante, l'équation de transport devient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x}$$
(II.5)

avec C, la concentration, D_L, la dispersion longitudinale et U, la vitesse de pore.

Dans le cas d'une injection continue d'un traceur et pour les conditions initiales et aux limites suivantes, la solution analytique de cette équation est donnée par Ogata et Banks (1961) :

$$\begin{cases} C(x,0) = 0 \ ; \ C(0,t) = C_0 \ ; \ C(\infty,t) = 0 \\ \frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{2} \left[erfc \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) + exp \left(\frac{Ux}{D_L} \right) erfc \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \end{cases}$$
(II.6)

avec erfc(u) fonction d'erreur complémentaire :

$$erfc(u) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-v^2} dv$$
 (II.7)

A t donné, en négligeant le second terme, cette solution est une distribution normale de moyenne m = Ut et d'écart-type $\sigma = \sqrt{2D_L t}$. Fried et Combarnous (1971) proposent

d'utiliser les termes d'une telle loi pour déterminer la vitesse moyenne de pore U et le coefficient de dispersion longitudinale D_L qui sont liés par la relation :

$$D_{L} = \frac{1}{8} \left(\frac{x - U \cdot t_{0,16}}{\sqrt{t_{0,16}}} - \frac{x - U \cdot t_{0,84}}{\sqrt{t_{0,84}}} \right)^{2}$$
(II.8)

avec t_r ($r \in \{0, 16; 0, 5; 0, 84\}$) le temps pour lequel la concentration réduite atteint la valeur r (cf. Figure 2-2).



Figure 2-2 : Détermination des temps $t_{0,16}$, $t_{0,5}$, $t_{0,84}$ pour le calcul de U et α_L

Si la zone de transition est petite par rapport à la distance entre les points d'injection et d'observation, $t_{0,16}$ et $t_{0,84}$ peuvent être approchés par $t_{0,5}$. La relation (II.8) devient :

$$D_L = \frac{U^2 \left(t_{0.84} - t_{0.16} \right)^2}{8 t_{0.5}}$$
(II.9)

Par conséquent, pour déterminer la vitesse, U, et la dispersivité, α_L ($D_L = \alpha_L U$), il suffit de connaître trois points d'observations, qui sont $t_{0,16}$, $t_{0,5}$, et $t_{0,84}$. Pour une distance parcourue d, les formulations sont les suivantes :

$$U = \frac{d}{t_{0.5}} \tag{II.10}$$

$$\alpha_L = \frac{d T^2}{2 t_{0,5}^2} \quad avec \quad T = \frac{t_{0,84} - t_{0,16}}{2}$$
(II.11)

Silliman et Simpson (1987) utilisent cette même solution pour déterminer graphiquement le coefficient de dispersion : la courbe de sortie est reproduite dans un graphique ayant les concentrations réduites sur un axe normal de probabilité en abscisse et le paramètre v en ordonnée :

$$\upsilon = \frac{\left(x - Ut\right)}{\sqrt{2t}} \tag{II.12}$$

La pente de la droite ainsi obtenue est le coefficient de dispersion. Cette méthode graphique est fort utile pour vérifier que la distribution des concentrations est normale et observer les variations du coefficient de dispersion et les effets d'échelle.

2.5.2. La méthode des moments

Cette méthode est basée sur l'assimilation de la courbe de réponse C(t), une fois normée, à la distribution des temps de séjour (DTS), au sens de la théorie des distributions. Elle consiste à calculer les moments d'un signal choisi comme signal d'entrée e(t) et ceux de la réponse correspondante s(t) et d'en déduire la vitesse et la dispersivité. Par définition, le moment d'ordre p de e(t) s'écrit :

$$X_P(e(t)) = \int_0^\infty t^P e(t) dt$$
 (II.13)

Supposons, de plus, que ces signaux soient normés, c'est-à-dire :

$$\int_{0}^{\infty} e(t)dt = \int_{0}^{\infty} s(t)dt = 1$$
 (II.14)

Si le signal d'entrée est un dirac, $e(t) = \delta(t)$, alors le moment d'ordre 1 du signal de sortie représente le temps moyen de parcours et le moment d'ordre 2 s'apparente à l'étalement du panache. A une distance d entre la source et le point de mesure, la vitesse et la dispersivité peuvent être calculées de la façon suivante :

$$U = \frac{d}{X_1(s)} \tag{II.15}$$

$$\alpha_{L} = \frac{\sigma^{2}(s) \cdot U^{2}}{2d} \operatorname{avec} \ \sigma^{2}(s) = X_{2}(s) - X_{1}^{2}(s)$$
(II.16)

Ces relations sont établies pour une injection de type impulsion. En pratique, la réalisation d'un signal d'entrée de ce type est difficile. La théorie des systèmes linéaires permet d'étendre la méthode des moments aux signaux d'entrée quelconques à condition qu'ils soient connus. s(t) et e(t) sont alors reliés par le produit de convolution :

$$s(t) = e(t) \otimes \varphi(t) = \int_0^t \varphi(t)e(t-\tau)d\tau = \int_0^t \varphi(t-\tau)e(t)d\tau$$
(II.17)

avec $\varphi(t)$, la réponse du système à une impulsion unité.

Cette relation découle du fait que e(t) peut être décomposé en une succession continue d'injections impulsion de poids $e(\tau)d\tau$ effectuées à des instants t successifs. Chacune de ces impulsions contribue pour $\varphi(t-\tau)e(\tau)d\tau$ au signal s(t).

Dans la pratique, le signal d'entrée est égal à la concentration mesurée au point d'injection du traceur et le signal de sortie, égal à la concentration relevée au point de mesure considéré. Pour respecter le bilan de masse et pouvoir comparer les signaux, le moment d'ordre 0 doit être le même pour e(t) et s(t). X₀ est utilisé pour normer les autres moments et respecter la condition (II.14). Les formules de la vitesse et la dispersivité deviennent :

$$U = \frac{d \cdot X_0}{X_1(s) - X_1(e)}$$
(II.18)

$$\alpha_{L} = \frac{d}{2} \cdot \frac{\left(X_{0} \cdot X_{2}(s) - X_{1}^{2}(s)\right) - \left(X_{0} \cdot X_{2}(e) - X_{1}^{2}(e)\right)}{\left(X_{1}(s) - X_{1}(e)\right)^{2}}$$
(II.19)

Cette méthode est peu précise à cause de la présence du terme t² dans le moment d'ordre 2 qui donne plus de poids aux mesures faites aux temps longs. Ainsi, le début de l'essai de traçage, où la concentration augmente, a moins de poids que les mesures suivantes du palier ou des faibles concentrations de la fin de l'essai alors que c'est la partie la plus importante pour déterminer les paramètres. De plus, l'impact des erreurs et du bruit de mesure est d'autant plus important que la concentration mesurée est faible.

Pour remédier à cela, deux approches existent. La première consiste à appliquer la méthode des moments à la dérivée de la concentration. Le problème lié au palier et à la queue des signaux disparaît (dérivée nulle) mais le bruit présent dans les mesures de concentration

est amplifié par la dérivée : les changements de pente dues aux oscillations se traduisent par une alternance de valeurs négatives et positives élevées dans la dérivée.

La deuxième approche consiste à n'utiliser que la première partie des mesures de concentration, jusqu'au début du palier. Il faut juste s'assurer de conserver la partie de la courbe d'entrée telle que l'égalité des moments d'ordre 0 soit conservée.

La méthode des moments, appliquée ici dans le temps, peut aussi l'être dans l'espace. La concentration est exprimée en fonction de la position à un temps donné. Les moments d'ordre 1 donnent alors le déplacement moyen dans chaque direction. Cette méthode est moins utilisée car il est plus facile de mesurer la concentration à différents temps en un point donné que de mesurer la concentration en plusieurs points du domaine à un temps donné.

2.5.3. La modélisation numérique

Les méthodes indirectes sont des méthodes d'optimisation de paramètres qui cherchent à minimiser l'écart entre les valeurs mesurées et celles calculées par le modèle numérique ou analytique choisi. Dans ce but, une fonction objectif, en général égale à la somme des carrés des écarts, est définie. L'optimisation se résume alors à un problème de minimisation de la fonction suivante :

$$\chi^{2} = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{y_{i} - y(x_{i}; a_{1}, a_{2}, .., a_{m})}{\sigma_{i}} \right)^{2}$$
(II.20)

où (x_i, y_i) représentent les n points de mesure, σ_i l'erreur de mesure au point x_i et $y(x_i, a_1, a_2,...,a_m)$, la valeur calculée au point x_i avec les m paramètres $a_1, a_2,..., a_m$.

Le fait de diviser chaque écart entre valeur mesurée et valeur calculée par l'erreur de mesures permet de donner une moindre importance aux valeurs imprécises, chacune étant pondérée en fonction de sa qualité.

La fonction objectif χ^2 est minimisée par itérations successives :

- \blacksquare Un jeu de paramètres (a_i) est fixé.
- A chaque itération, un terme correctif est ajouté à (a_i) de telle sorte que : $\chi^2(a_{k+1}) < \chi^2(a_k)$ avec $a_{k+1} = a_k + \delta a_k$.

■ Les itérations sont arrêtées lorsque $|\chi^2(a_{k+1}) - \chi^2(a_k)| < ε$ (critère de convergence).

Pour le calcul des termes correctifs δa_k , la méthode de Marquardt est souvent utilisée. Elle consiste à combiner la méthode de la plus grande pente et celle de Newton :

$$\Delta a_{k} = \left[-\lambda . I + \left(-\nabla^{2} \chi^{2} \right)^{-1} \right] \cdot \frac{\partial \chi^{2}}{\partial a_{k}}$$
(II.21)

avec λ , le pas de descente réel, et I, l'identité.

Cette méthode présente plusieurs avantages. Elle tient compte des erreurs de mesure. Elle est valable quelque soit le signal d'entrée. Elle est peu sensible aux valeurs nulles ou interpolées. Enfin, elle permet une estimation de l'incertitude avec laquelle les paramètres sont déterminés (Bard, 1974).

2.5.4. L'approche stochastique

L'utilisation des théories stochastiques avec les résultats d'expériences de laboratoire implique que le modèle physique respecte les hypothèses de stationnarité et d'ergodicité. Il apparaît pourtant impossible de construire un modèle physique ergodique. Ce problème est soulevé par Silliman et Zheng (2001) d'une part, Zhang et di Frederico (2003) d'autre part. Quant à l'hypothèse de stationnarité et la connaissance de la distribution des perméabilités, comme vu précédemment, il est aujourd'hui possible de construire des milieux poreux aux perméabilités corrélées.

Pour utiliser ou valider ces méthodes, des essais de traçage sont réalisés au laboratoire. Les modèles physiques utilisés sont nombreux et varient en fonction du problème étudié. Ce travail est l'occasion de les recenser.

3. <u>Les modèles physiques de laboratoires</u>

Pour présenter cette synthèse, nous avons choisi de classer les modèles physiques en fonction de leurs dimensions caractéristiques.

3.1. Les expériences 1D

Différents travaux utilisant des modèles physiques mono-dimensionnels ont été recensés. Le Tableau 2.1 présente chronologiquement et par modèle physique les résultats de ces recherches bibliographiques.

Référence	Dimensions (cm)	Milieux poreux	Porosités	Perméabilités (cm/min)	Traceurs	Vitesses (cm/min)	Dispersivités (cm)
Nguyen et al., 1990	$L = 600$ $\Phi = 300$	Milieu naturel reconstitué	0,3	Non Communiqué	Strontium, iodide	q=2,8E ⁻³	De 0 à 50
Khan et Jury, 1990	L = 87 ; 43,5 ; 21,8	Milieu naturel intact ou reconstitué	Non Communiqué	Non Communiqué	CaCl ₂	q=2880 ; 5760 ; 11520	De 0,051 à 26,992
Zhang et al., 1994	125 x 10 x 10	Graviers sables grossiers à fins, argiles	0,33 0,37 0,45	Non Communiqué	NaCl	U= 0,568; 0,646	De 0,1 à 5,0 De 2,8 à 243
Huang et al., 1995						U= 0,58 ; 1,03 0,35	De 0,1 à 0,5 De 3 à 200
Sternberg et Greenkorn, 1994	L = $30,5$; 61; 122 $\Phi = 3,18$ cm	Billes de verre 149 μm ; 250 μm ; 595 μm	Non Communiqué	0,80 ; 1,26 ; 1,48 ; 1,79 ; 2,98 ; 4,91 ; 13,53	KCl	U≈ 0,66 ; 0,96 1,5	De 1,7E ⁻² à 6,1E ⁻²
Sternberg et al., 1996		163 μm 95 μm	0,34	0,49 ; 0,94 ; 0,95 ; 1,02 ; 1,06 ; 1,07 ; 8,89		1,87 ; 2,67 ; 4,27 cm ³ /min	Non Communiqué
Irwin et al., 1996	L = 244 $\Phi = 3,18$	Billes de verre d ∈ [88 ;840µm]	0,33 ; 0,38 ; 0,37	1,14 ; 2,22 1,04	KCl	De 1,87 à 5,33 cm ³ /min	De 5,08 à 10,2
Rashidi et al., 1996	L = 23,5 $\Phi = 4,5$	Billes de verre $\Phi = 0.31$ cm	0,48	Non Communiqué	Microsphères de latex fluo.	U = 0,151	0,12 [0,15 ; 0,30]
Delay et al., 1997	L = 60; 120 $\Phi = 5$	Silice $(d = 2 \text{ mm})$	0,414	72	Uranine	De 16 à 70 cm ³ /min	De 0,7 à 0,13
		Litière pour chat Catsan	0,73 (totale) 0,25 (solide)	90			
Welty et Elsner, 1997	L = 520 $\Phi = 5,08$	Milieux hétérogènes aléatoires. 13 sables.	Non Communiqué	$<\ln(k)>=-13,5$; $l_Y=15$ cm; $\sigma_Y^2=0,24$ $<\ln(k)>=-13,6$; $l_Y=16$ cm; $\sigma_Y^2=0,90$	Pas de transport		
Nelson et al., 2003	$L = 15; \\ \phi = 2,5$	Milieu homogène reconstitué. d<2 mm	0,39	Non Communiqué	³ H ₂ O ; CaBr ₂ ; PFBA ; HPCD ; fluorescéine	U=0,33 ; 1,0 0,42 ; 0,45	1,4
	$L = 7,62; \phi = 5,08$	milieu naturel intact	0,4	Non Communiqué		U = 0,025; 0,25	5,9 ; 8,5 4,8 ; 7,2 ; 21

 Tableau 2.1 : Présentation synthétique des modèles physiques de laboratoire 1D.

3.1.1. Qualités des expériences 1D

Les expériences mono dimensionnelles présentent plusieurs intérêts : leur mise en œuvre est facile, les expériences sont courtes, les mesures précises et disponibles en quantité, l'expérience est contrôlée (Huang et al., 1995). De plus, elles permettent de travailler avec une bonne connaissance du milieu. Un champ de vitesse 1D facilite le traitement des données. Enfin ces expériences sont peu coûteuses. Elles présentent néanmoins l'inconvénient de se placer loin de la réalité.

3.1.2. <u>Matériels et méthodes</u>

Les colonnes utilisées pour les expériences ont, en général, une longueur de l'ordre du mètre et un diamètre inférieur au décimètre. Pour se rapprocher des conditions de terrain, Nguyen et al. (1990) ont utilisé une colonne plus grande (L=6m ; Φ = 3m). De même, Welty et Elsner (1997) ont construit une colonne qui, avec une longueur de 5,20 m, atteint aussi les limites de l'échelle de laboratoire.

Les expériences sont réalisées en régime permanent avec des mesures de débit, de piézométrie et de concentration. L'étude du phénomène de dispersion et de l'effet d'échelle amène les auteurs à créer toutes sortes de milieux poreux. Nous remarquerons les combinaisons linéaires de 3 milieux homogènes de Sternberg et al. (1994 ; 1996), les milieux périodiques de Irwin et al. (1996) et enfin, le milieu à double porosité constitué de litière pour chat de Delay et al. (1997). Welty et Elsner (1997) ont créé des milieux poreux hétérogènes aléatoires ayant des propriétés statistiques identiques à celles observées dans la nature.

3.1.3. <u>Résultats et conclusions</u>

Les observations sont très différentes selon le milieu utilisé. Non seulement le taux d'hétérogénéité a une importance, mais l'utilisation de milieux plus réalistes augmente le phénomène de dispersion. Cela semble du à l'établissement d'écoulements préférentiels.

Tous constatent une augmentation de la dispersion avec la distance mis à part Sternberg et al. (1996) qui observent aussi des cas où la dispersion stagne voire diminue à l'interface entre deux milieux homogènes. Il apparaît alors impossible de modéliser le transport avec l'équation d'advection dispersion classique. D'autres modèles sont proposés et validés par les expériences :

- Nguyen et al. (1990) prouvent que l'on peut envisager le développement de modèles stochastiques basés sur le temps de parcours du traceur. Ils font l'hypothèse que les lignes de courant sont rectilignes, alors qu'elles ne le sont pas dans la réalité, et opèrent une correction sur la vitesse afin d'obtenir le même temps de parcours sur les lignes de courant modélisées et réelles. Le calage est effectué sur le moment d'ordre 1 normé car il est moins sensible que la concentration elle-même. La vitesse moyenne est égale à 14 cm/j et le calage est meilleur pour une variance de la vitesse égale à 1,2. Les résultats obtenus pour la dispersion montrent que la simulation des traçages avec une vitesse variant en fonction des lignes de courant est convenable. Un modèle avec une distribution lognormale des vitesses est adopté.
- Khan et Jury (1990) utilisent le modèle MIM de Van Genuchten et Wierenga (Van Genuchten et Wierenga, 1976, d'après Khan et Jury, 1990) qui prend en compte la phase liquide immobile. Il permet de modéliser le transport dans les milieux artificiels. Mais le calage s'est avéré impossible pour une carotte de milieu naturel.
- Zhang et al. (1994) ajoutent un coefficient de dispersion qui varie linéairement avec la distance à l'équation d'advection dispersion. Les résultats sont concluants en milieu homogène.

Pour mieux comprendre le phénomène de dispersion, les auteurs essaient de corréler la dispersivité aux autres grandeurs mesurées durant l'expérience :

- Khan et Jury (1990) constatent que la dispersion augmente d'autant que la vitesse et le diamètre de la colonne sont grands. Ces conditions maximisent le temps de mélange latéral et minimisent le temps de séjour du traceur.
- Sternberg et Greenkorn (1994) vérifient que la dispersivité totale d'un milieu hétérogène n'est pas une moyenne des dispersivités des milieux homogènes qui le compose. Ils essaient de trouver une combinaison linéaire de U^{1,2} (U étant la vitesse de pores), la perméabilité, le coefficient de diffusion moléculaire, la distance parcourue, la viscosité cinématique et l'ordre des milieux homogènes pour formuler D. L'analyse des coefficients de corrélation montre la forte influence de la distance parcourue et de l'ordre des milieux homogènes. Pourtant, aucune combinaison linéaire de ces paramètres n'a permis de déterminer la dispersion finale. Les auteurs proposent enfin de chercher une formulation sous forme d'un produit de convolution de ces termes.

- Sternberg et al. (1996) constatent que la dispersion varie, comme la vitesse, avant que la zone de mélange n'ait atteint la transition entre deux milieux différents. Elle se stabilise aussi après une longue zone homogène. Cela tendrait à prouver que le coefficient de dispersion serait fonction du profil de vitesse de pore.
- Les expériences en milieu périodique de Irwin et al. (1996) montrent le caractère asymptotique de la dispersion pour ce type de milieu après 20-30 périodes. Ainsi, un milieu périodique peut être caractérisé par la taille de sa période.
- Enfin, Nelson et al. (2003), en utilisant des traceurs avec des coefficients de diffusion différents, montrent que la diffusion moléculaire associée aux phénomènes de diffusion entre des zones de vitesses différentes influence le transport.

Ces études expérimentales confirment donc les conclusions de Molz et al. (1983) : la dispersion ne peut être assimilée à un paramètre constant. Et, même si elle atteint une valeur asymptotique dès que le traceur a parcouru quelques dizaines de longueurs caractéristiques, il n'existe aucune formulation tenant compte des paramètres auxquels elle est fortement corrélée. L'ajout de la deuxième dimension devrait permettre d'étudier, en plus, les phénomènes transversaux du transport.

3.2. Les expériences 2D

Comme pour les expériences 1D, les modèles physiques bidimensionnels recensés dans la littérature sont présentés dans le Tableau 2.2.

Référence	Dimensions (cm)	Milieux poreux	Porosités	Perméabilités (cm/min)	Traceurs	Vitesses (cm/min)	Dispersivités (cm)
Sudicky et al., 1985	100 x 20 x 10	Milieu stratifié : 1 couche (3 cm) peu perméable entre 2 plus perméables	0,33 0,36	0,00036 1,38	NaCl	U = 0,007 0,035	Non Communiqué
Refsgaard, 1986	300 x 180 x 14	1 milieu aléatoire 1 milieu symétrique	Non Communiqué	$\lambda = 4.0 \text{ cm}; \sigma^2 = 0.17$ $\lambda = 2.2 \text{ cm}; \sigma^2 = 0.37$	Indium radioactif	$U \in [1,0;1,4]$	$\alpha\approx\sigma^{_{2}}x\lambda$
Silliman et Simpson, 1987	240 x 107 x 10	Milieux homogène, stratifié, hétérogène- stratifié, uniformément hétérogène. Sables grossier et fin	0,405 (homogène)	210 (homogène)	NaCl	q=0,25 à 5 selon les sables	De 2 à 20
Silliman et al., 1987	30 x 30 x 30	5 milieux : homogène, homogène avec des inclusions imperméables, hétérogène structuré	Non Communiqué	NC(milieu homogène)3,96 / 2,4(milieu tortueux n°1) ;2,7 / 1,02(milieu tortueux n°2) ;NC(milieu stratifié) ;0,492 / 0,78(milieu avec tubes creux)	NaCl	q=2.78; 0.78 / 0.28; 0.19 / 0.35; 0.12 / 0.26; 0.41 / 0.19	0.081 / 0.083 0.170 / 0.25 0.317 / 1.08 1.060 / 0.62 0.200 / 0.38
Silliman et Caswell, 1998	89 x 45 x 106	1 milieu aléatoire 1 milieu structuré (éponge de Sierpinski)	Non Communiqué	$\lambda_x = 6 \text{ cm et } \lambda_y = 3 \text{ cm}$ K = 30,0 cm/min (sable grossier) K = 3,42 cm/min (sable fin)	Pas de transport		
Chao et al., 2000	244 x 122 x 6,35	Milieu aléatoire constitué de 5 sables répartis en 36 x 20 cubes de 6,1 cm de côté	Non Communiqué	0,8 ; 2,2 ; 7,7 ; 25,8 ; 72,0 <ln(k)> = 4,77; $\lambda_x = 10 \text{ cm}$; $\sigma^2 = 2,0$</ln(k)>	KBr	$Q_P = 25; 50;$ 75 cm ³ /min.	12 (uniforme) De 0,065 à 0,953 (radial)
Silliman et Zheng, 2001	– 160 x 67 x 9,4	Milieu hétérogène aléatoire log-normal suivant une loi de covariance exponentielle.	Non Communiqué	10 mélanges de 2 sables : $K \in [0,9; 96,6]$ Milieu global : $K = 6,96$ cm/min ; $\lambda = 2,75$ cm ; $\sigma^2 = 0,5$	NaCl	q = 0,015 0,33	Non Communiqué
Silliman, 2001			Entre 0,285 et 0,335			Non Communiqué	De 0,2 à 1,5

Tableau 2.2 : Présentation synthétique des modèles physiques de laboratoire 2D.

3.2.1. Qualités des expériences 2D

Les expériences dites bidimensionnelles regroupent deux types d'installations expérimentales : les milieux poreux dont l'une des dimensions est négligeable devant les deux autres et les milieux poreux tridimensionnels dont les caractéristiques sont constantes dans une direction.

Comparées aux expériences 1D, elles permettent d'étudier les phénomènes transversaux d'écoulement, de transport et d'anisotropie. Elles présentent les mêmes avantages : la réalité est plus proche mais un certain contrôle des mécanismes est conservé.

3.2.2. <u>Matériels et méthodes</u>

Les cuves expérimentales ont des dimensions de l'ordre du mètre et sont souvent polyvalentes : écoulements uniformes ou radiaux, différents sens d'écoulement, mesure de plusieurs paramètres...

Elles contiennent des milieux poreux hétérogènes de type structurés ou aléatoires. Pour les matériaux, les billes de verre fréquemment utilisées dans les colonnes sont abandonnées au profit des sables calibrés, plus réalistes.

Les milieux structurés, qu'ils soient stratifiés (Sudicky *et al.*, 1985 ; Silliman et Simpson, 1987), périodiques (Silliman et Simpson, 1987), ou fractals (Silliman et Caswell, 1998), servent à étudier ou isoler des phénomènes particuliers tels que la dispersion transversale ou l'anisotropie. Les milieux aléatoires sont utilisés pour valider des théories stochastiques ou des modèles numériques.

3.2.3. <u>Résultats et conclusions</u>

Les premiers modèles bidimensionnels sont nés dans les années 80 avec pour but l'étude de milieux stratifiés. Sudicky et al. (1985) conçoivent un modèle avec une strate très perméable incluse au centre d'un milieu peu perméable. Ils montrent que dans les zones où le contraste entre les vitesses de transport est important, i.e. à l'interface entre les strates, la diffusion moléculaire est un phénomène prépondérant.

Silliman et Simpson (1987) décomposent les résultats du transport dans un milieu stratifié en trois étapes : le transport dans la zone de grande conductivité, puis une zone de

transition et enfin le transport dans la zone de faible conductivité. La zone de transition illustre les phénomènes observés par Sudicky et al. (1985).

La présence de strates est aussi un facteur d'anisotropie. Silliman et al. (1987) étudient l'influence de l'anisotropie sur la dispersion à l'aide d'un modèle physique original : l'écoulement y est possible dans des directions perpendiculaires. Deux types de milieux anisotropes sont distingués : les milieux structurés, stratifiés par exemple, et les milieux dits tortueux. Pour ces derniers, la tortuosité (cf. Chapitre 12.1.3) est augmentée dans une direction en insérant des lentilles imperméables dans le milieu poreux. Le rapport entre la dispersivité longitudinale mesurée d'une part avec un écoulement dans le sens des grandes conductivités et celle mesurée d'autre part dans le sens des faibles conductivités semble un bon moyen de caractériser ces milieux puisque ce rapport est inférieur à 1 pour les milieux tortueux, supérieur à 1 pour les milieux structurés.

Après les strates, l'étude de l'effet des hétérogénéités locales devient un centre d'intérêt. L'inclusion d'hétérogénéités locales dans un milieu homogène fait naître différents types de milieux structurés ou aléatoires. Ces milieux sont alors caractérisés par leurs propriétés statistiques (perméabilité moyenne, longueur de corrélation l_y , variance σ_y^2).

Refsgaard (1986) étudie l'effet d'hétérogénéités incluses dans un milieu homogène. Il crée un milieu où la répartition des hétérogénéités est aléatoire et un milieu où la répartition est régulière. Il constate que, dans les deux cas, la dispersivité atteint une valeur asymptotique proche du produit $\sigma_y^2 \cdot l_y$ à une distance d'environ 75 longueurs de corrélation. Cette valeur correspond aux résultats théoriques de Dagan (1989) mais la convergence est plus lente que dans la théorie. Il souligne aussi la difficulté de modéliser la zone proche de la source de pollution car le transport n'y est pas ergodique et la dispersion n'est pas fickienne.

Ainsi l'effet d'échelle peut être reproduit au laboratoire. Silliman et Simpson (1987) le vérifie aussi sur un milieu homogène contenant des hétérogénéités uniformément réparties : la dispersivité augmente de 5,8 à 12,7 cm sur une longueur de 2,4 m. Les auteurs constatent que cet effet devient négligeable quand l'échelle du transport est grande devant l'échelle des hétérogénéités.

Le développement de l'outil expérimental nous conduit aujourd'hui à remplacer l'inclusion d'hétérogénéités dans un milieu homogène par la création de milieux réellement hétérogènes en adéquation avec les théories stochastiques. La conductivité hydraulique est assimilée a une Fonction Aléatoire Spatiale. Les auteurs génèrent un champ de perméabilité gaussien qu'ils discrétisent de manière à avoir un milieu poreux réalisable physiquement.

Silliman et Zheng (2001) vérifient ainsi que leurs résultats expérimentaux obtenus en écoulement uniforme dans un milieu aléatoire log-normal suivant une loi de covariance exponentielle concordent avec les théories stochastiques. Mais ils remettent en cause le caractère ergodique de leur expérience à cause des limites finies du domaine et la petite taille de la source de traceur. L'ergodicité du transport est satisfaite quand la zone couverte par le traceur est ergodique, i.e. quand ce dernier a parcouru plusieurs échelles intégrales. Zhang et Di Frederico (2003) proposent d'ailleurs une solution non-ergodique qui reproduit mieux ces résultats expérimentaux. Ceci confirme la difficulté de modéliser la zone proche de la source de pollution soulignée par Refsgaard (1986).

Cette étude est poursuivie par Silliman (2001) qui réalise sur le même milieu des expériences en écoulement radial. Il montre l'importance du rapport entre le débit pompé et le débit total. Le degré de dispersion augmente avec ce rapport tant que la distance entre la source et le puits de pompage est inférieur à 45 échelles intégrales. Pour une distance supérieure, il tend vers un comportement asymptotique. De plus, la dispersion estimée avec un pompage est plus grande que celle trouvée pour un écoulement uniforme. L'auteur caractérise ainsi deux échelles importantes dans le phénomène de dispersion dû aux hétérogénéités : la distance entre le puits et la source et la largeur moyenne de la zone de capture.

Les travaux de Chao et al. (2000) sur un milieu aléatoire souligne aussi les différences entre les paramètres déterminés en écoulement uniforme et ceux déterminés en écoulement radial. Les variations de dispersivité pour une même distance entre la source et le pompage (différents puits) laissent à penser qu'il est impossible de déterminer les paramètres du transport avec un seul essai. Les différences observées entre l'écoulement uniforme ($\alpha = 12$ cm) et le pompage ($\alpha < 1$ cm) sont d'abord causées par l'effet d'échelle : 2,5 longueurs de corrélation séparent la source du puits de pompage alors que le milieu poreux complet, qui mesure environ 25 longueurs de corrélation, est utilisé en écoulement uniforme. La petite taille de la source est sans doute une deuxième raison.

Ces résultats, opposés à ceux de Silliman (2001) qui trouve une dispersion plus grande dans le cas du pompage, montrent bien l'importance de la méthode utilisée, en particulier la
distance de traçage, dans la détermination de la dispersion d'un milieu. Même si les coefficients de dispersivité calculés dans ces deux études sont contradictoires, les grandeurs caractéristiques soulignées sont semblables : la longueur de corrélation du milieu doit être négligeable devant la distance entre la source et le point de mesure, et la taille du domaine influençant la mesure. La condition d'ergodicité nécessaire à l'application des théories stochastiques apparaît aussi dans l'approche expérimentale.

Cette condition ne s'applique d'ailleurs pas uniquement au transport. Silliman et Caswell (1998) étudient le moyen de déterminer la perméabilité avec des essais de pompage. Deux milieux poreux sont utilisés : un milieu aléatoire ($l_x = 6$ cm et $l_y = 3$ cm, les longueurs de corrélation) et un milieu structuré, représentant l'éponge de Sierpinski (Mandelbrot, 1983) avec 3 niveaux d'inclusions. Les auteurs étudient l'influence de la distance entre les piézomètres et celle de la distance entre le puits et le centre du segment formé par les deux piézomètres utilisés. Ils montrent que, quelque soit le milieu, la perméabilité varie avec la distance entre le puits et les piézomètres et atteint une valeur asymptotique pour une distance d'environ 10 échelles intégrales. Pour le milieu aléatoire, la perméabilité converge vers la valeur prédite par la théorie de Gelhar et Axness (1983) en écoulement uniforme. Ceci s'explique par le fait que les hauteurs piézométriques loin du puits diffèrent peu entre l'écoulement uniforme et le pompage. La perméabilité du milieu structuré converge vers une valeur comprise entre la moyenne géométrique et la moyenne harmonique des perméabilités. La structure du milieu a une influence sur l'estimation à grande distance de la perméabilité.

4. <u>Conclusions</u>

Dans ce chapitre, nous avons pu voir l'importance de l'aspect expérimental dans la compréhension du transfert de masse en milieu poreux. Les « expériences de laboratoire aux échelles intermédiaires » ont été développées pour étudier de nouvelles problématiques comme les phénomènes transversaux de dispersion et d'anisotropie. L'étude des écoulements non uniformes tels que l'écoulement radial ouvre aussi de nouvelles perspectives dans la détermination des paramètres hydrodynamiques.

L'avancée dans la compréhension des phénomènes et le développement de nouvelles théories sont fortement liés aux progrès de l'outil expérimental : d'un côté la validation des modèles théoriques nécessite le développement de modèles physiques adaptés, de l'autre les avancées techniques et pratiques ont permis ce développement. La création de milieux poreux définis par leurs propriétés statistiques permet l'étude du changement d'échelle nécessaire sur le terrain et la validation de théories stochastiques. Les modèles physiques sont ainsi de plus en plus réalistes même si les modèles tridimensionnels sont encore rares.

Les travaux récents soulignent l'importance de la méthode et lèvent de nouvelles problématiques : l'étude de l'influence du régime d'écoulement, des conditions aux limites et des dimensions caractéristiques sur l'estimation des paramètres mérite d'être approfondie.

Les outils théoriques et numériques présentés dans le Chapitre 1 sont utilisés pour déterminer les paramètres équivalents du milieu poreux à une échelle donnée. Ils nécessitent des données qui peuvent être mesurées à une autre échelle avec les techniques expérimentales présentées dans le Chapitre 2. Mais l'association d'outils numériques ou analytiques adéquats pour créer un outil de détermination de paramètres équivalents reste à faire.

Les conditions stationnaire et ergodique nécessaires à l'application des théories stochastiques existent aussi dans l'approche expérimentale. Malheureusement, les cas concrets, comme la pollution locale d'une nappe phréatique, ne remplissent pas toujours ces conditions. Et l'enjeu est alors d'étudier, comprendre et modéliser le transport à proximité de la source et des conditions aux limites. L'ajout de la troisième dimension à ces travaux est aussi d'actualité dans la compréhension des phénomènes réels.

Ainsi le but de ce travail est de réaliser plusieurs expériences sur un même milieu poreux tridimensionnel dont la distribution aléatoire corrélée des perméabilités est connue a priori. Nous nous intéresserons en particulier à l'importance des dimensions caractéristiques et des conditions aux limites dans la mesure et la modélisation des paramètres du transport puis aux différences entre les paramètres équivalents déterminés pour chaque expérience.

Chapitre 3 : MARCEAUS, un modèle physique tridimensionnel de laboratoire

1. Introduction

Les expériences à échelle intermédiaire en trois dimensions sont rares. L'échelle du laboratoire est peu compatible avec ce type d'expériences. Pourtant Dagan (1986) montre l'importance de la troisième dimension de manière analytique.

Silliman (1996) confirme ceci de manière expérimentale. En effet, l'ajustement d'une solution analytique mono-dimensionnelle à des résultats expérimentaux obtenus dans un milieu hétérogène tridimensionnel de billes de verre $(53 \times 38 \times 20 \text{ cm}^3)$ est possible. Cependant le calage est obtenu avec une vitesse bien supérieure à la vitesse moyenne et une dispersivité aussi élevée. La fin de l'étude montre le caractère tridimensionnel des lignes de courant. Malgré cela, le nombre de modèles physiques tridimensionnels est très petit.

Ruch conçoit, en 1992, le modèle MARCEAUS (Modèle d'Analyse et de Recherche sur la Contamination des EAUx Souterraines – cf. Figure 3-1) qui, avec ses dimensions ($600 \times 100 \times 100 \text{ cm}^3$), est un modèle réellement tridimensionnel. Dans cette étude, il contient un milieu poreux aléatoire et peut accueillir différents régimes d'écoulement.

Nous présenterons d'abord l'installation expérimentale puis les expériences réalisées. Nous étudierons enfin la validité des résultats obtenus.



Figure 3-1 : Vue générale du MARCEAUS.

2. Présentation du MARCEAUS

Le modèle physique MARCEAUS, déjà utilisé dans des études précédentes (Ruch, 1992 ; Renard *et al.*, 2000b ; Carlier, 2002), se divise en trois parties. La cuve expérimentale et son système d'alimentation, que nous présenterons en premier, n'ont pas été modifiés. Ensuite, nous verrons le nouveau milieu poreux mis en place puis la partie instrumentation qui a été développée.

2.1. La cuve expérimentale et le système d'alimentation

2.1.1. <u>Présentation générale</u>

La cuve expérimentale est un chenal d'écoulement parallélépipédique divisé en trois compartiments (cf. Figure 3-2) :

- un bac amont, maintenu à charge constante par un déversoir,
- un compartiment contenant le milieu poreux, de dimensions 560 x 100 x 100 cm³,
- un bac aval, également relié à un déversoir.

Le polypropylène utilisé pour la cuve est renforcé par une armature métallique permettant de résister aux contraintes mécaniques dues à la masse importante (environ 11 tonnes) du milieu poreux et de l'eau qu'il contient.



Figure 3-2 : Vue schématique du MARCEAUS.

Le fond de la cuve est incliné avec une pente de 1% dans le sens de l'écoulement. La différence de charge entre l'amont et l'aval est réglable par l'intermédiaire des déversoirs, elle permet de faire varier la vitesse d'écoulement dans le milieu. Toutefois, la différence de charge est maintenue constante pendant une expérience. Cette configuration permet de travailler à section constante.

Le modèle est installé dans un caisson thermostaté maintenu à basse température $(13^{\circ}C \pm 2^{\circ})$ par un groupe calorifique spécialement adapté. Cette température doit être maintenue constante durant les expériences, elle correspond à des conditions proches de celles existant dans la nappe phréatique (12-13°C). Cela évite d'une part un dégazage de l'eau arrivant du réseau dans le milieu poreux, d'autre part le développement de biofilms et autres bactéries.

2.1.2. L'alimentation en eau et en traceur

Le MARCEAUS est alimenté en permanence par l'eau du réseau. Celle-ci est filtrée pour éviter que des particules du réseau (>3 μ m) obstruent les grilles et le milieu poreux. L'eau arrive dans un réservoir intermédiaire situé au dessus du bac amont. Un déversoir maintient la charge constante et le réservoir alimente ainsi le bac amont par gravité à débit constant.

En plus des bacs amont et aval, 9 puits de 2 cm de diamètre crépinés sur toute la hauteur du milieu poreux (cf. Figure 3-8) permettent de modifier l'écoulement dans le milieu poreux. En injection – pompage, l''injection dans un puits se fait à débit constant via une pompe péristaltique. Pour le pompage, nous utilisons un déversoir en siphon. Il présente l'avantage de compenser les légères variations de la pompe péristaltique : si le débit d'injection augmente (respectivement diminue), la côte de la surface libre augmente (respectivement diminue), la côte de la surface libre augmente (respectivement diminue) jusqu'à obtenir un nouvel équilibre. L'utilisation de deux déversoirs, l'un en injection, l'autre en pompage, a été aussi testée (Danquigny, 2000) : la méthode n'est pas concluante, le régime transitoire dure trop longtemps. Dans le cas du pompage seul, le choix du déversoir est beaucoup plus stable que l'utilisation d'une pompe.

Le traceur retenu est le chlorure de sodium (NaCl) pour ses qualités présentées dans le paragraphe 2.3.2 du Chapitre 2. La solution saline est préparée dans une cuve située à l'intérieur du caisson thermostatée afin d'éviter les gradients de température. Le traceur peut ensuite être injecté soit dans un puits, soit dans le bac amont où il est mélangé avec l'eau provenant de l'alimentation. Dans ce cas, une solution très concentrée est utilisée pour tenir compte de la dilution dans le bac.

2.2. <u>Le milieu poreux</u>

2.2.1. <u>Construction du milieu poreux</u>

Un milieu poreux de dimensions $560 \times 100 \times 90 \text{ cm}^3$ est disposé au centre de la cuve. La communication avec les bacs amont et aval se fait à travers une grille en nylon fixée sur une plaque en PVC. La partie centrale, longue de 500 cm est remplie avec un milieu hétérogène (cf. Figure 3-3). Ce dernier est un milieu aléatoire constitué de 6 sables calibrés (cf. Tableau 3.1) répartis en blocs parallélépipédiques (cf. Figure 3-4) formant 9 couches de 50 x 11 blocs. Pour assurer un écoulement homogène sur toute la section du milieu, les 30 cm de part et d'autre sont remplis avec un sable grossier K10 (cf. Tableau 3.1). La perméabilité de chaque sable a été mesurée avec l'expérience de Darcy.

Sable	1	2	3	4	5	6
Référence	K60	K40	K30	K20	K10	K150
K (cm/min)	1,19	4,19	7,02	8,46	63,0	462,6
Granulométrie (mm)	0,063 - 0,2	0,16 - 0,3	0,3 - 0,5	0,5 - 0,8	1,0 - 1,8	1,6 - 2,5



Tableau 3.1 : Caractéristiques des sables calibrés.

Figure 3-3 : Vue schématique du remplissage du MARCEAUS.



Figure 3-4 : Photos des cubes de sable.

Afin de placer les puits au centre d'un cube de sable et de la cuve, 11 blocs sont définis en largeur (100 cm) : 9 cubes de 10 cm de côté au centre et deux demi-cubes (10 x 5 x 10 cm) situés aux extrémités. Une fine couche (5 cm) de sable fin K40 est ajoutée au dessus du milieu d'une part pour protéger le remplissage, d'autre part pour s'assurer de la saturation de toutes les couches durant les expériences.

2.2.2. Loi de covariance

Chaque couche est construite pour qu'il n'existe aucune corrélation selon l'axe z. et que la logconductivité suive une loi de covariance exponentielle isotrope en x et en y définie par :

$$Cov(h) = \sigma_Y^2 \cdot \exp\left(-\frac{h}{l_Y}\right)$$
 (III.1)

avec h, la distance entre deux points, σ_Y^2 , la variance de ln(K) et l_Y la longueur de corrélation ou échelle intégrale.

Pour chaque couche, la méthode présentée au paragraphe 2.1.2 du Chapitre 2 est utilisée. Cependant, le sable K10 est imposé pour les cubes contenant les puits. Ainsi, les sables fins ne s'infiltrent pas dans les puits et la répartition des flux dans chaque couche est plus homogène. Le calcul du nouveau variogramme (cf. Figure 3-5) montre que ce changement a peu d'influence sur la loi de covariance.



Figure 3-5 : Variogramme des couches du milieu poreux du MARCEAUS.

Pour la réalisation, des grilles en PVC (cf. Figure 2-1) sont remplies, bloc par bloc, selon la carte préétablie (cf. Annexe A). Le milieu ainsi construit est présenté dans la Figure 3-3 et a les caractéristiques suivantes :

$$\begin{cases} \langle Y \rangle = -6,43 \\ \sigma_Y^2 = 1,03 \\ l_Y = 23,1 \ cm \end{cases}$$
(III.2)

avec Y=ln(K), la logconductivité pour K en m·s⁻¹, soit une moyenne géométrique de la conductivité égale à $0,00159 \text{ m·s}^{-1}$.



Figure 3-6 : Vue schématique du milieu poreux hétérogène du MARCEAUS.

2.3. Le dispositif de mesures

Le MARCEAUS est équipé d'appareils de mesure et d'acquisition de données classés en trois domaines : la mesure des débits, des pressions et des concentrations.

2.3.1. Les débits

Les expériences sont réalisées en régime permanent. La mesure de débit est donc utilisée pour régler l'écoulement avant une expérience et pour contrôler sa stabilité pendant celle-ci. L'utilisation de déversoirs à charge constante, plutôt que des pompes, évite les variations et dérives propres aux appareils électriques. Le coût du matériel est aussi moindre.

Les débits à l'entrée et à la sortie de la cuve sont mesurés régulièrement par pesée. Pour mesurer les débits injectés ou pompés dans les puits, deux débitmètres identiques dont le principe de mesure est une turbine de Pelton et une photodiode à infra rouge ont été installés. La précision sur les débits mesurés avec ces appareils varie entre 5% et 10%. La vérification du bilan de masse permet d'attester du régime permanent.

2.3.2. La piézométrie

La cuve a aussi été équipée de 18 piézomètres (cf. Figure 3-8 et Tableau 3.2) placés au fond de celle-ci. Chaque piézomètre peut être relié à l'un des 10 capteurs de pression disponibles au laboratoire.

Ce sont des capteurs piézo-résistifs « Keller 35 S » qui permettent de mesurer la charge avec une précision de l'ordre de 0,5 mm. Chaque capteur est branché à un piézomètre via une prise fabriquée au laboratoire (cf. Figure 3-7). Le choix des piézomètres est fait en fonction de l'expérience réalisée afin de mesurer les variations de la charge autour des puits.



Figure 3-7 : Prise et capteur de pression.

Les capteurs sont reliés au système d'acquisition de données. Il permet de réaliser les 10 mesures de pression toutes les 3 secondes en régime transitoire. En régime permanent, la charge est mesurée une fois par cycle de mesure, i.e. toutes les 24 minutes. Avant chaque

Cellule de conductivité

W1C W₃C 100 • 1 P5B ٩A 50-P2A P3A P4A P5A P6A 🗖 W1A 🗖 ZA 🗖 W3A 0 50 100 200 250 350 450 550 Ò 150 300 400 500 600

campagne de mesures, les capteurs sont réinitialisés : la hauteur piézomètrique réglée au plus haut, sans écoulement, est parfaitement horizontale et constitue le zéro relatif.

Figure 3-8 : Localisation des puits, piézomètres et cellules de conductivité.

Piézomètre

*

Puits

Puits	x (cm)	y (cm)	Piézomètre	x (cm)	y (cm)	Piézomètre	x (cm)	y (cm)
W1A	185	0	PAm	10	–	P4C	305	80
W1B	185	50	P1B	145	50	P5A	345	20
W1C	185	100	P2A	225	20	P5B	345	50
W2A	305	0	P2B	225	50	P5C	345	80
W2B	305	50	P2C	225	80	P6A	385	20
W2C	305	100	P3A	265	20	P6B	385	50
W3A	425	0	P3B	265	50	P6C	385	80
W3B	425	50	P3C	265	80	P7B	425	50
W3C	425	100	P4A	305	20	PAv	590	_

Tableau 3.2 : Coordonnées des puits et piézomètres dans le MARCEAUS.

2.3.3. Les concentrations

La mesure par conductimétrie

La concentration en chlorure de sodium (NaCl) dans le milieu poreux est mesurée par conductimétrie. En effet, pour une petite plage de concentrations et une température constante, la conductivité électrique peut être considérée proportionnelle à la concentration en sel (Richards, 1954). La concentration d'injection est de l'ordre de 2 g/l pour toutes les

expériences. La concentration réduite C/C_0 est une fonction de la conductivité électrique mesurée γ_{mes} , la conductivité électrique de l'eau γ_{eau} et la conductivité de la solution injectée γ_0 [L⁻³.M⁻¹.T³.I²] :

$$\frac{C}{C_0} = \frac{\gamma_{mes} - \gamma_{eau}}{\gamma_0 - \gamma_{eau}}$$
(III.3)

Equipement du MARCEAUS

350 cellules de mesures sont implémentées dans la cuve : 14 plans (selon x) de 5 tiges (selon y) supportant 5 cellules chacune (selon z) forment un maillage régulier (cf. Figure 3-8 et Tableau 3.2). Les tiges (cf. Figure 3-9) ont été développées et construites au laboratoire (Ruch, 1992). Chaque cellule est constituée de deux électrodes cylindriques de 4 mm de diamètre, 23 mm de longueur et distantes l'une de l'autre de 35 mm. Les cellules sont fixées sur une tige en plexiglas et espacées de 17,5 cm. Elles sont ainsi placées aux côtes 14 ; 31,5 ; 49 ; 66,5 et 84 cm, i.e. au milieu des couches 2, 7, 9 et à l'interface entre les couches 3 et 4, 5 et 6. Le volume de mesure d'une cellule est estimée à une sphère de 7 cm de diamètre environ.



Figure 3-9 : Photo et schéma des cellules de conductivités du MARCEAU'S

Après le remplissage de sable, ces cellules sont au cœur du milieu poreux (cf. Figure 3-4). La conductivité mesurée par une cellule pour une même solution dépend de la cellule, du branchement (la fabrication artisanale entraîne des différences entre les cellules) et du milieu environnant. L'étalonnage doit donc être réalisé in situ. Pour ce faire, à chaque expérience, l'injection de traceur est poursuivie si possible jusqu'à ce que la conductivité atteigne un palier qui sera la conductivité de la solution injectée, γ_0 , pour la cellule donnée. Les cellules étant au cœur du milieu poreux, il nous est impossible de les réparer. Sur l'ensemble, moins de 10% des cellules sont inutilisables.

3 cellules supplémentaires à 2 pôles permettent de mesurer la concentration à l'injection (puits ou bac amont selon l'expérience – cellule 352, Schott-Geräte LF513T), à l'aval (cellule 353, Schott-Geräte LF510 NN) et, le cas échéant, à la sortie du puits de pompage (cellule 351 : WTW Tetracon[®] 325). Elles sont aussi étalonnées en conditions expérimentales.

Les cellules sont reliées à un multiplexeur et un conductimètre Knick 703 asservis par un ordinateur. Avec le programme d'acquisition mis au point au laboratoire, chaque mesure de conductivité nécessite environ 4 secondes. L'ensemble des cellules de l'installation, y compris les capteurs de pression, est ainsi parcouru toutes les 24 minutes. L'étude et le remplacement des connectiques a permis d'augmenter considérablement la précision des mesures : l'erreur absolue est de l'ordre de 0,007 mS/cm, soit moins de 1% de l'échelle de mesure.

Détermination des concentrations réduites

Pour une cellule donnée, la conductivité électrique mesurée pour la solution injectée sera différente de celle de la cellule voisine. Il faut donc trouver un moyen de passer de la conductivité mesurée à la concentration réelle, voire la concentration réduite. Trois solutions ont été testées :

La première méthode consiste à calculer la conductivité moyenne du palier de concentration atteint pendant l'essai de traçage et de l'associer à la concentration de la solution injectée, les autres concentrations étant déduites par proportionnalité. Cette méthode est simple mais nécessite l'obtention pour chaque cellule d'un palier net et constant. Cette condition est très difficile à respecter car l'injection n'est pas parfaitement constante. De plus, dans le cas de l'injection – pompage, le palier est atteint pour peu de cellules. Enfin, cette méthode est difficile à automatiser étant donnée la définition arbitraire du palier.

La deuxième méthode utilise le bilan de masse, i.e. le moment d'ordre 0 des conductivités, pour calculer la concentration réduite :

$$\frac{C}{C_0}(t) = \frac{\left(\gamma_{mes}(t) - \gamma_{eau}\right) \cdot T_{inj}}{X_0} \quad \text{avec} \quad X_0 = \int_0^\infty \left(\gamma_{mes}(t) - \gamma_{eau}\right) \cdot dt \tag{III.4}$$

avec $\gamma_{mes}(t)$ la conductivité mesurée au temps t, T_{inj} la durée de l'injection en traceur et X_0 le moment d'ordre 0 de la conductivité électrique. Cette méthode est plus performante que la première car elle tient compte de l'intégralité du signal. De fait, elle est aussi plus facile à automatiser. Mais elle est aussi valable sous l'hypothèse de respecter le bilan de masse sur chaque cellule, ce qui n'est pas le cas pour les expériences d'injection – pompage.

E La troisième méthode consiste à trouver un coefficient de proportionnalité ζ_i entre chaque cellule i et une cellule de référence. Pour cela, les meilleurs décalage en temps et coefficient multiplicateur permettant de réduire la différence par moindres carrés entre les deux courbes de mesures comparées sont déterminés (cf. Figure 3-10). Le coefficient multiplicateur est appliqué aux mesures brutes pour calculer la conductivité qu'aurait mesurée la cellule de référence. Le décalage en temps donne une idée du temps moyen de parcours.

La concentration réduite est ensuite déterminée en appliquant la formule (III.4) à la nouvelle conductivité avec le moment d'ordre 0 calculé pour la cellule de référence. Cette approche implique aussi la conservation du bilan de masse sur toutes les cellules. Dans le cas contraire, le coefficient peut être déterminé avec la mesure de la conductivité de l'eau réalisée au début de chaque expérience, l'inconvénient étant alors l'erreur relative à une mesure de faible conductivité. Le coefficient de proportionnalité est propre à chaque cellule et à la cellule de référence, indépendamment de l'expérience.



Figure 3-10 : Détermination de la concentration relative à une cellule de référence – TT4W1.

Dans la pratique, nous avons utilisé la deuxième méthode pour les expériences en écoulement uniforme et pompage (i.e quand la saturation du milieu en traceur est atteinte) car elle présente l'avantage d'utiliser tout le signal de mesure et le calcul est indépendant pour chaque cellule (il n'y a pas de cellule de référence). Pour les expériences en injection – pompage, le coefficient de proportionnalité déterminé avec la dernière approche, pour les expériences où le milieu est saturé, a été appliqué aux résultats bruts.

L'installation ainsi décrite admet différentes conditions expérimentales. Nous pouvons, par exemple, réaliser des essais de pompage mais aussi des essais de traçage en écoulement uniforme, avec ou sans pompage et des essais en injection – pompage. Les différents puits disponibles augmentent les possibilités.

De plus, elle contient un milieu aléatoire dont les dimensions n'excèdent pas quelques échelles intégrales. C'est donc un outil intéressant pour réaliser l'étude expérimentale suscitée par la synthèse bibliographique.

3. <u>Résultats expérimentaux</u>

3.1. Introduction

L'étude bibliographique nous a montré la nécessité de comprendre l'influence des conditions aux limites et des dimensions caractéristiques de l'essai de traçage pour pouvoir étendre les paramètres déterminés avec un essai au cas général. Nous avons aussi présenté un outil expérimental, le MARCEAUS, avec lequel nous allons accomplir nos essais.

Le but est ici d'effectuer une campagne d'expériences dans un milieu poreux connu et avec différentes conditions aux limites. Nous nous intéresserons au cas de l'écoulement uniforme, au cas du pompage et à celui de l'injection – pompage. Les résultats obtenus pourront être analysés et comparés.

Avant de présenter les 7 expériences réalisées, nous détaillerons le protocole expérimental mis en place. Enfin nous étudierons les résultats obtenus.

3.2. <u>Protocole expérimental</u>

Trois types d'expérience ont été réalisés :

 « L'écoulement uniforme » : un gradient de charge est instauré entre les bacs amont et aval. Le traceur est injecté dans le bac amont.

 « Le pompage » : un pompage à débit constant est ajouté à l'écoulement uniforme. Le traceur est injecté dans le bac amont.

« L'injection – pompage » : deux puits sont utilisés pour former un doublet d'injection – pompage à débit constant. Il n'y a pas d'autres écoulements : le déversoir aval n'est pas connecté. Le traceur est injecté dans le puits d'injection.

Pour chaque expérience, le même protocole expérimental est respecté :

 Les capteurs de pression sont branchés sur les piézomètres choisis pour l'expérience. La hauteur d'eau est maintenue horizontale, sans écoulement, égale à la cote du déversoir amont réglée de manière à ce que tout le milieu soit saturé (le déversoir aval n'est pas connecté). Les capteurs sont remis à zéro et les pressions sont enregistrées pour estimer l'erreur de mesure et les dérives éventuelles. La cote du déversoir amont sert de référence pour la transformation de la pression mesurée en hauteur d'eau dans la cuve.

- Le cas échéant, la cote du déversoir aval est réglée pour avoir le gradient voulu, en général 1% comme le fond de la cuve. La vanne aval est ouverte. L'écoulement atteint un régime uniforme et permanent. Pendant ce régime transitoire, les pressions sont mesurées pour visualiser l'arrivée du régime permanent.
- 3. Le cas échéant, le pompage (et l'injection) dans le(s) puits choisi(s) est démarré. Les pressions sont enregistrées jusqu'à l'arrivée du régime permanent.
- L'acquisition des conductivités électriques est lancée pour estimer l'erreur de mesure, les éventuelles dérives et la conductivité de l'eau du réseau. Les pressions sont relevées à la fin de chaque cycle de mesure de conductivités.
- 5. Le traceur est injecté uniformément soit dans le puit d'injection, soit dans le bac amont, jusqu'à ce que la conductivité atteigne un palier pour chaque cellule, i.e. la distribution du traceur atteint le régime permanent dans toute la cuve. L'acquisition de données continue.
- 6. L'injection du traceur est arrêtée mais le régime d'écoulement est conservé jusqu'à ce que le traceur ait entièrement disparu du milieu poreux. L'acquisition de données continue.
- 7. Le cas échéant, le pompage (et l'injection) est arrêté. Les pressions sont enregistrées jusqu'à l'arrivée du régime permanent.
- 8. La vanne aval est fermée. Pendant ce régime transitoire, les pressions sont mesurées pour visualiser le retour à la situation initiale.

Une expérience réussie dure environ un mois. Certaines d'entre-elles ont dû être réitérées, comme l'expérience en écoulement uniforme ou la première expérience d'injection – pompage à cause de problèmes techniques. Les quelques résultats obtenus en double seront utilisés pour vérifier la reproductibilité des expériences.

3.3. Expériences réalisées

Pour nommer les expériences, nous utiliserons la notation TTiWj, avec TT pour « tracer test », W pour « well » et i, le numéro de l'expérience du type j, i.e. comportant j puits (0 pour l'écoulement uniforme, 1 pour le pompage et 2 pour l'injection – pompage). Par exemple, TT1W2 est le premier essai de traçage en injection – pompage.

L'origine de l'axe des abscisses est placée à l'amont du milieu poreux. Ainsi le milieu est compris entre les coordonnées 0 et 560 cm. L'origine de l'axe vertical est placée au point le plus bas de la cuve : compte tenu de la pente de la cuve, z vaut 0 au fond du bac aval.

3.3.1. <u>L'écoulement uniforme : TT1W0</u>

L'essai de traçage en écoulement uniforme consiste à injecter le traceur dans le bac amont jusqu'à saturation du milieu en traceur (injection échelon) puis d'injecter de l'eau jusqu'à disparition complète du traceur.

La charge appliquée est de 96,0 cm à l'amont et de 90,2 cm à l'aval. Le gradient est donc d'environ 1%, comme la pente du fond de la cuve. La hauteur d'eau dans la cuve est quasi-constante et vaut 90,0 cm (cf. Figure 3-11). Le débit mesuré à la sortie de la cuve est de 1,4 l/min.



Figure 3-11 : Hauteurs d'eau dans la cuve - TT1W0.

L'injection du traceur est démarrée 31 heures après le début de l'expérience et dure 311 heures. En observant les mesures réalisées dans les bacs amont et aval, la totalité du milieu poreux, y compris les zones de sable grossier, sont prises en compte. C'est pourquoi nous utiliserons les résultats des premier et. dernier plans de cellules, situés aux extrémités du milieu aléatoire, comme références lors des injections de traceur dans le bac amont (cf. Figure 3-12).



Figure 3-12 : Concentrations moyennes dans les sections 1 et 14 – TT1W0.

Les données acquises avec les cellules présentes dans le milieu poreux permettent de mieux comprendre l'effet des hétérogénéités sur le déplacement du traceur. La Figure 3-13 présente, par exemple, l'augmentation de la concentration pour 10 cellules dont les coordonnées et le sable environnant sont détaillées dans le Tableau 3.3.

Cellule	X (cm)	Y (cm)	Z (cm)	Sable	Cellule	X (cm)	Y (cm)	Z (cm)	Sable
33	65	30	54,0	K20/K10	156	265	30	17,0	K10
36	65	50	19,0	K40	174	265	90	69,5	K40
126	225	10	17,4	K10	217	345	70	33,7	K30
144	225	70	69,9	K60	279	465	10	67,5	K10
149	225	90	69,9	K60	296	465	90	15,0	K40

Tableau 3.3 : Coordonnées et sable environnant des 10 cellules étudiées en écoulement uniforme.



Figure 3-13 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT1W0.

Notons que les cellules 126, 144 et 149 sont toutes dans la section 6 et présentent des profils tout à fait différents. Le temps $t_{0,5}$ vaut respectivement environ 415, 1090 et 750 minutes (en tenant compte d'un début d'injection à t = 1860 minutes), d'où des vitesses apparentes respectives de l'ordre de 0,54 , 0,21 et 0,30 cm/min en considérant des lignes de courant rectilignes.

De plus, les cellules 144 et 149 sont dans le même sable très peu perméable, ce qui montre bien que l'évolution de la concentration en un point n'est pas la conséquence d'un phénomène local.

L'apparition du traceur pour la cellule 279, située dans la section 12 (x = 465 cm), plus tôt que pour la cellule 217, située dans la section 9 (x = 345 cm), illustre l'établissement d'écoulement préférentiels dans le milieu poreux.

Enfin, le profil de la cellule 156 (située dans un sable très perméable) rappelle les différentes phases du transport évoquées par Silliman et Simpson (1987).

3.3.2. Les pompages

Sur la base de l'écoulement uniforme décrit précédemment, nous avons réalisé quatre expériences avec un pompage. Deux puits, W2B (x = 285 cm; y = 50 cm) et W3B (x = 405 cm; y = 50 cm; cf. Figure 3-8), ont été utilisés avec, pour chacun, deux positions du déversoir de pompage (cf. Tableau 3.4).

Expérience	Puits	Débits (l/min)		Charge	es (cm)	Hauteur du	
		Pompage	Aval	Amont	Aval	déversoir de pompage (cm)	
TT1W1	W2B	0,40	1,0	96,0	90,1	75,0	
TT2W1	W2B	0,85	0,95	96,2	90,2	50,0	
TT3W1	W3B	0,77	0,80	96,2	90,2	50,0	
TT4W1	W3B	0,40	1,1	96,1	90,1	75,0	

Tableau 3.4 : Synthèse des conditions aux limites des expériences de pompage.

Notons que, pour la position élevée du déversoir (75 cm), le débit de pompage est identique dans les deux puits. Les débits élevées varient aussi peu d'un puits à l'autre. Il semble donc que les milieux entourant les puits W2B et W3B sont équivalents.

<u>TT1W1</u>

Le régime permanent est atteint en deux étapes : à t = 15 minutes, la vanne aval est ouverte et à t = 200 minutes, le pompage est démarré. Le régime transitoire est observé avec les mesures de pression (cf. Figure 3-14).



Figure 3-14 : Mesures de pression durant le régime transitoire – TT1W1.

Une fois le régime permanent obtenu, l'essai de traçage peut commencer. L'injection de traceur débute à t = 5 heures et dure 155 heures (cf. Figure 3-15).



Figure 3-15 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de pompage- TT1W1.

Pour comparaison, les cellules in situ étudiées pour TT1W0 sont présentées dans la Figure 3-16. Les observations faites pour l'écoulement uniforme restent valables.



Figure 3-16 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT1W1.

<u>TT2W1</u>

Pour TT2W1, le même puits est utilisé mais avec un débit de pompage plus élevé : il passe de 0,4 à 0,85 l/min. Pour cela, le déversoir de pompage est abaissé de 25 cm, i.e. jusqu'à une cote de 50 cm.

L'injection de traceur débute à t = 41 heures et dure 169 heures (cf. Figure 3-17).



Figure 3-17 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de pompage- TT2W1.

<u>TT3W1</u>

Pour TT3W1, un autre puits plus loin de la source, W3B, est utilisé. Le déversoir de pompage est à la même hauteur que pour TT2W1. Le débit pompé vaut alors 0,771/min et le débit aval, 0,80 1/min.

L'injection du traceur débute 46 heures après le début de l'acquisition de données et dure 187 heures (cf. Figure 3-18).



Figure 3-18 : Concentrations dans les sections 1, 14 et à la sortie du puits de pompage- TT3W1.

L'observation des 10 cellules déjà étudiées (cf. Figure 3-19) illustre encore l'effet des hétérogénéités, l'existence d'écoulements préférentiels et l'augmentation des vitesses causée par le pompage. Remarquons le profil de la cellule 217 qui, comme celui de la cellule 156, présente plusieurs phases.



Figure 3-19 : Observation de l'augmentation de la concentration dans le milieu poreux – TT3W1.

<u>TT4W1</u>

Le puits W3B est encore utilisé mais le déversoir est relevé à une hauteur de 75 cm, comme pour TT1W1. Le débit pompé vaut alors 0,4 l/min et le débit aval, 1,1 l/min. L'injection de traceur commence à t = 30 heures et dure 185 heures (cf. Figure 3-20).



Figure 3-20 : Concentrations dans les sections 1 et 14, et à la sortie du puits de pompage- TT4W1.

Le profil particulier de la décroissance de la concentration est due à une panne de la pompe péristaltique.

Le débit de pompage plus faible que dans TT3W1 entraîne une diminution des vitesses dans le milieu, d'où des profils de concentration moins proches pour les cellules in situ (cf. Figure 3-21).





Ces quatre expériences devraient permettre d'étudier l'influence de la position du puits et du débit sur la zone de capture et les paramètres déterminées.

Comparaison des résultats

D'après les courbes de sortie du puits de pompage (cf. Figure 3-22), le temps de percée est peu fonction du débit de pompage. Ainsi, ce dernier a peu d'influence sur la vitesse moyenne entre la source et le puits. Le gradient de charge entre l'amont et l'aval du milieu, donc la vitesse moyenne en dehors de la zone d'influence du puits, est constant d'une expérience à l'autre. L'invariance du temps de percée semble indiquer que cette zone d'influence est très petite devant la distance parcourue par le traceur.



Figure 3-22 : Concentration à la sortie du puits pour les expériences de pompage.

3.3.3. <u>Les « injection – pompage »</u>

Deux expériences d'injection – pompage sont ensuite réalisées. Pour ce faire, nous supprimons l'écoulement uniforme dans le milieu poreux et instaurons une injection et un pompage à débits égaux. Le but est d'étudier l'influence de la position et de la distance entre les puits.

Comme précédemment, nous nous intéresserons aux profils de concentration de cellules situées dans le milieu poreux. Elle sont présentées dans le Tableau 3.5.

Cellule	X (cm)	Y (cm)	Z (cm)	Sable	Cellule	X (cm)	Y (cm)	Z (cm)	Sable
27	65	10	36,5	K20/K10	201	345	10	16,2	K30
36	65	50	19,0	K40	202	345	10	33,7	K30/K40
51	105	10	18,6	K20	222	345	90	33,7	K60/K20
66	105	70	18,6	K40	296	465	90	15,0	K40
147	225	90	34,9	K20/K20	321	505	90	14,6	K40

Tableau 3.5 : Coordonnées et sable environnant des 10 cellules étudiées pour l'injection – pompage.

<u>TT1W2</u>

Pour cette première expérience, le puits W1B est utilisé en injection et le puits W3B en pompage. Ils sont séparés de 240 cm. Le débit est fixé à 0,50 l/min et la hauteur d'eau dans le bac aval est de 90,3 cm.

L'injection de traceur est lancée 54 heures après le début de l'acquisition de données et arrêtée 76 heures plus tard (cf. Figure 3-23).



Figure 3-23 : Concentrations à l'entrée du puits d'injection et à la sortie du puits de pompage- TT1W2.

La durée de l'expérience est limitée par le volume du réservoir contenant le traceur (2500 l). Il nous est donc impossible de saturer le milieu poreux et d'atteindre le palier de concentration.

Les résultats obtenus pour les cellules in situ sont très différents de ceux obtenus pour les autres expériences (cf. Figure 3-24). Le palier est atteint pour peu de cellules. Celles-ci

sont situées sur les lignes de courant les plus courtes, entre les puits : ici les cellules 147, 201, 202 et 222. Les zones situées aux extrémités du milieu ne reçoivent que tardivement peu de polluant. Les lignes de courant traversant ces zones sont très longues et caractérisées par des vitesses très faibles : les cellules 27, 36 et 321 illustrent ces phénomènes. Enfin le profil de la cellule 66 présente plusieurs maxima locaux, résultats d'une mesure sur un volume plus grand que la taille d'un bloc. Pour rappel, le volume de mesure d'une cellule de conductivité est estimé à une sphère de 7 cm de diamètre environ.



Figure 3-24 : Observation de l'évolution de la concentration dans le milieu poreux – TT1W2.

TT2W2

La deuxième expérience d'injection – pompage est réalisée avec un autre doublet : W1B pour l'injection et W2B pour le pompage. La distance entre les puits est ici de 120 cm. Le débit vaut 0,50 l/min, comme pour TT1W2. La hauteur d'eau dans le bac aval est de 89,6 cm.

Le traceur remplace l'eau à l'injection de t = 67 heures à t = 162,25 heures, soit pendant 95,25 heures.



Figure 3-25 : Concentrations à l'entrée du puits d'injection et à la sortie du puits de pompage- TT2W2.

La comparaison des résultats obtenus pour les cellules in situ durant les deux expériences d'injection – pompage révèle l'influence de la position des puits sur les lignes de courant. La zone saturée en traceur est moins grande dans ce cas : parmi les cellules retenues, seule la cellule 147 présente encore un palier. L'effet du volume de mesure apparaît significativement pour les cellules 201 et 202, qui relèvent le même phénomène avec une intensité et une vitesse différente. Les zones extrêmes sont moins touchées par le traceur que dans TT1W2 : l'observation des cellules 27 et 36 pour l'amont, 296 et 321 pour l'aval montre une arrivée tardive et en petite quantité du traceur.



Figure 3-26 : Observation de l'évolution de la concentration dans le milieu poreux – TT2W2.

Comparaison des résultats

Pour comparer les résultats des expériences d'injection – pompage, nous avons utilisé la formulation du temps adimensionnel proposée par Dagan et Indelman (1999) et présentée au paragraphe 3.3.2 du premier chapitre :

$$t' = \frac{Q t}{\pi \omega l^2 h} \tag{I.19}$$

avec t le temps [T], Q le débit de pompage $[L^3 \cdot T^{-1}]$, ω la porosité [-], l la distance entre la source et le puits [L] et h la hauteur de puits [L].

La comparaison des résultats expérimentaux avec la solution analytique (I.23) de Carlier (2002) n'est pas concluante : les courbes expérimentales sont plus proches de la solution analytique de Dagan et Indelman (1999) obtenue pour un milieu infini (cf. Figure 3-27).



Figure 3-27 : Comparaison des résultats expérimentaux aux solutions analytiques – TT1W2 & TT2W2.

De plus, le temps de percée adimensionnel semble ne pas être fonction de la distance entre la source et le puits de pompage. Ce constat est en désaccord avec la formule explicite (I.24) de Carlier (2002) dans laquelle ce temps de percée n'est fonction que de la configuration des puits et des limites imperméables. Nous sommes en dehors du domaine de validité de ces solutions. Il est vrai qu'ici le coefficient d'anisotropie vaut 0,43 et est supérieur à 0,2. L'hypothèse des lignes de courant horizontales n'est donc pas valable. De plus, la longueur de corrélation verticale (10 cm) n'est pas négligeable devant la hauteur du milieu (90 cm). Surtout, Carlier avait déjà remarqué l'incertitude de cette solution pour des coefficients λ élevés (>2). Pour TT1W2, λ vaut 7,5 et pour TT2W2, 3,8.

Enfin, cette solution ne tient pas compte des limites que constituent les bacs amont et aval du MARCEAUS. Ce résultat semble indiquer que l'effet de celles-ci sur le transport n'est pas négligeable.

3.4. <u>Analyse des résultats</u>

Une première analyse des résultats nous permet de vérifier leur cohérence. Il s'agit d'abord de s'assurer que la masse est conservée. Nous nous intéresserons ensuite au caractère reproductible des expériences.

3.4.1. <u>Vérification de la conservation de la masse</u>

Comme nous l'avons vu précédemment, dans les expériences d'injection – pompage, il nous est impossible de saturer le milieu en traceur et pomper l'intégralité de ce qui a été injecté serait trop long. Pour ce type d'expériences, le bilan de masse ne peut être vérifié.

Pour les autres expériences, le principe de la conservation de la masse est utilisé pour calculer la concentration réduite. Il ne peut donc être vérifié a posteriori en réalisant une simple intégrale. Par contre, il suffit de s'assurer de l'égalité des rapports suivants entre eux et d'une expérience à l'autre :

$$\zeta_{i} = \frac{X_{0}^{i}}{X_{0}^{r\acute{e}f}} = \frac{\gamma_{eau}^{i}}{\gamma_{eau}^{r\acute{e}f}} = \frac{\gamma_{0}^{i}}{\gamma_{0}^{r\acute{e}f}} \qquad i \in [1, 353]$$
(III.5)

avec ζ_i le coefficient de proportionnalité déterminé avec la troisième méthode présentée en 2.3.3, X_0 le moment d'ordre 0 des conductivités électriques, γ_{eau} la conductivité électrique de l'eau et γ_0 celle de la solution injectée, ceci pour la cellule i et la cellule de référence.

3.4.2. <u>Etude de la reproductibilité des expériences</u>

Deux expériences, TT1W0 et TT1W2, ont été réalisées deux fois pour des raisons techniques et afin de vérifier qu'elles étaient reproductibles. La comparaison des courbes de concentration pour une même cellule et des conditions identiques montre que les expériences sont reproductibles (cf. Figure 3-28). L'écart varie entre 0 et 2 % en concentration réduite avec une moyenne et un écart-type égaux à 0,8 et 0,6 %.



Figure 3-28 : Comparaison des concentrations à la sortie du puits de pompage – TT1W2 a & b

Cette comparaison concluante prouve que la précision des appareils de contrôle des conditions aux limites est suffisante et que les légères variations de celles-ci n'ont pas d'influence sur le résultat. En effet, l'expérience TT1W2 a été reconduite à cause de variations du débit de pompage qui, au vu de la comparaison, n'avaient que peu de conséquences. Pourtant le débit variait d'environ 10 % autour de la valeur imposée de 0,5 l/min.

4. <u>Conclusion</u>

Dans ce chapitre, nous avons présenté le MARCEAUS, un outil expérimental intéressant au vu des problèmes posés : ses trois dimensions atteignent les limites actuelles de l'échelle de laboratoire et le milieu poreux mis en place est en accord avec une définition statistique de ses propriétés et l'application de théories stochastiques.

Il dispose d'un système d'acquisition de données relativement précis et complet : l'ajout de débitmètres et de piézomètres au dispositif de mesure des conductivités nous permet maintenant d'avoir une bonne connaissance des phénomènes existants dans le milieu.

L'analyse des résultats montre qu'il est possible de convertir les conductivités électriques mesurées en concentrations réduites utilisables par la suite. Les expériences sont reproductibles. Les conditions expérimentales sont donc maîtrisées et il n'y a pas de phénomène parasite. De plus, les légères variations des conditions aux limites imposées n'influencent pas les résultats.

Les résultats obtenus prouvent que l'ensemble fonctionne correctement. Les données acquises avec différentes conditions expérimentales nous donnent l'occasion d'étudier leur influence sur la détermination de paramètres équivalents et de tester des modèles numériques.

Chapitre 4 : Estimation de paramètres équivalents

1. Introduction

Les résultats théoriques présentés dans le Chapitre 1 sont applicables au milieu poreux installé dans le MARCEAUS. Plusieurs estimations des paramètres équivalents sont ainsi disponibles.

Par ailleurs, nous avons réalisé sept expériences dans des conditions différentes. Chaque jeu de données va donc être utilisé pour déterminer les paramètres équivalents caractérisant l'écoulement et le transport dans un milieu homogène équivalent. Ces paramètres pourront ensuite être comparés entre eux et aux valeurs théoriques.

Nous présenterons d'abord les résultats théoriques appliqués au MARCEAUS ainsi qu'une première estimation des paramètres équivalents. Nous nous intéresserons ensuite au cas de l'écoulement uniforme pour deux milieux poreux différents. Puis nous présenterons les paramètres équivalents déterminés pour les expériences en pompage. Enfin, une étude similaire sera menée pour les expériences en injection – pompage.

2. <u>Calcul des paramètres équivalents</u>

2.1. <u>Résultats théoriques</u>

2.1.1. <u>Perméabilité équivalente du MARCEAUS</u>

Une première estimation de la perméabilité équivalente d'un maillage régulier comme celui étudié est la moyenne géométrique des perméabilités locales K_G.

La perméabilité équivalente appartient à l'intervalle délimité par les bornes de Cardwell et Parsons, $K_{C.P.min}$ et $K_{C.P.max}$, la moyenne géométrique des ces bornes $K_{C.P.}$ étant une autre estimation de la perméabilité équivalente. (cf. Chapitre 13.4.1).

Enfin, d'après les théories stochastiques, il est possible de calculer la perméabilité équivalente K_e à l'aide de l'équation (I.37). Dans notre cas, le coefficient d'anisotropie e vaut

0,43 et D calculé avec l'équation (I.38) est égal à 0,22. Nous disposons ainsi de cinq valeurs de référence pour la suite (cf. Tableau 4.1).

K _{C.P.min}	K _G	K _{C.P.}	Ke	K _{C.P.max}
6,6	9,56	10,85	12,27	17,4

Tableau 4.1 : perméabilités équivalentes théoriques (cm/min).

La perméabilité équivalente est déterminée avec beaucoup d'incertitude. En effet, si les limites de Cardwell et Parsons sont considérées comme des valeurs extrêmes par rapport à la valeur moyenne K_{C.P.}, l'incertitude est d'environ 50%.

2.1.2. <u>Macrodispersivité du MARCEAUS</u>

Les résultats obtenus par Dagan (cf. équation (I.52)) donnent une première estimation de la macrodispersivité asymptotique dans le milieu étudié :

$$\left. \begin{array}{c} \sigma_Y^2 = 1,03 \\ l_Y = 23,1 \ cm \end{array} \right\} \Longrightarrow A_{11} = 23,8 \ cm$$
 (IV.1)

En estimant la dispersivité transversale locale α_T , il est aussi possible d'appliquer les résultats de Gelhar et Axness (1983). Si α_T est faible, l'équation (I.55) s'applique : la macrodispersivité longitudinale A₁₁ est inférieure à 15 cm et les macrodispersivités transversales sont négligeables.

2.2. Premiers résultats expérimentaux

2.2.1. Estimation de la perméabilité équivalente en écoulement uniforme

En supposant le gradient de charge et la hauteur d'eau constants dans tout le milieu poreux, i.e. la pente de la surface libre est supposée égale à celle du fond de la cuve, la perméabilité globale peut être calculée à partir des valeurs mesurées pendant l'expérience TT1W0 et de la loi de Darcy :

$$K_{eq} = -\frac{Q}{S \cdot \frac{dh}{dx}}$$
(IV.2)
avec Q le débit mesuré (1,4 l/min), S la section de milieu poreux (90 x 100 cm²) et $\frac{dh}{dx}$ le gradient de charge (environ 0,01). En utilisant les hauteurs mesurées entre l'amont et l'aval, la perméabilité vaut 15,0 cm/min et correspond au milieu total (milieu aléatoire et zones de sable grossier à l'amont et l'aval). Les charges mesurées avec les piézomètres P1B et P7B donnent une perméabilité de 14,6 cm/min pour une partie du milieu aléatoire. Les valeurs obtenues sont supérieures aux trois valeurs théoriques mais restent dans l'intervalle défini par Cardwell et Parson (cf. Tableau 4.1).

2.2.2. <u>Estimation de la vitesse de pores en écoulement uniforme</u>

Il apparaît que les mesures de pression et de débit sont cohérentes avec les valeurs théoriques. Qu'en est-il pour les mesures de concentration ?

Connaissant la porosité effective du milieu poreux ($\omega = 0,38$), il est possible de calculer une vitesse de pores à partir des résultats précédents :

$$U = \frac{Q}{S \cdot \omega} = 0,41 \text{ cm/min}$$
(IV.3)

La méthode du $t_{0,5}$ appliquée aux courbes de concentration des sections 1 et 14 nous donnent un temps moyen de parcours entre ces deux sections (525 cm) de 1081 minutes, d'où une vitesse de pore estimée à 0,49 cm/min. Cette valeur est du même ordre de grandeur que celle déterminée avec les paramètres hydrodynamiques mais est supérieure d'environ 20%.

2.3. Conclusions

L'application de résultats théoriques à un cas concret comme celui-ci souligne l'incertitude sur les valeurs déterminées. L'existence de formules mathématiques ne signifie pas que le résultat obtenu est la valeur recherchée. Elles fournissent des bornes voire une estimation des grandeurs. Ce constat justifie le développement de techniques expérimentales d'estimation des paramètres équivalents.

Les premières estimations de paramètres équivalents avec les résultats expérimentaux prouvent que ces derniers sont cohérents. La précision obtenue sur les valeurs mesurées permet leur utilisation. Cependant, les valeurs expérimentales sont toutes supérieures aux valeurs théoriques. Mais les développements utilisés sont applicables aux milieux infinis et non au cas particulier du MARCEAUS. L'incertitude sur la perméabilité locale des blocs de sable peut aussi être mise en cause. La technique de remplissage a sans doute une influence sur ces grandeurs.

Il s'agit maintenant de trouver une méthode de détermination des paramètres adaptée à chaque type de conditions aux limites, puis de déterminer les valeurs pour les 7 expériences réalisées et de les comparer.

3. Cas de l'écoulement uniforme

Les données de TT1W0 ainsi que les résultats obtenus antérieurement avec un autre milieu installé dans le MARCEAUS sont utilisés pour ajuster les paramètres d'un modèle numérique 1-D. Les vitesses et coefficients de dispersivité obtenus sont confrontés à des résultats théoriques. Cette étude fait l'objet d'une publication acceptée par le "Journal of Hydrology" et reproduite dans ce mémoire.

Laboratory tracer tests on 3D heterogeneous porous media.

C. Danquigny, P. Ackerer, J.P. Carlier
Institut de Mécanique des Fluides et des Solides
UMR 7507 CNRS-ULP Strasbourg
2, rue Boussingault
67000 STRASBOURG
FRANCE

 $Corresponding \ author: ackerer@imfs.u-strasbg.fr$

Submitted to Journal of Hydrology

May 2003

Accepted with minor revisions

November 2003

Abstract

Tracer tests have been performed on a 3D tank of dimensions $560 \times 100 \times 100 \text{ cm}^3$. These experiments at laboratory scale are used to define effective hydraulic conductivity and macrodispersivity. The tracer tests have been performed on two kinds of heterogeneous porous material : a channel structured medium, with channels crossing the whole tank, and a statistically correlated random structure. The statistically correlated field was first established by a sequential type generator with a prescribed exponential covariance. The theoretical random field is then modified according to the available sand hydraulic conductivities. The obtained LnK variance is 1.03 and the integral scale 23.1 cm.

Results obtained concerning the channel structured medium show that it behaves like a stratified media from an hydrodynamical and mass transfer point of view. The effective hydraulic conductivity is equal to the arithmetic mean and the variance of the concentration is proportional to t^2 , t being the mean travel time.

For the correlated random field, the effective hydraulic conductivity is bounded by the geometric and the arithmetic mean. No match with theoretical values have been found because the boundary conditions effects cannot be neglected due to the dimension of the tank compared to the integral scale. Similar conclusions have been obtained for macrodispersivity. The tracer tests could be simulated by a 1-D advection-dispersion equation but with a significant higher macrodispersivity than predicted by stochastic theories for infinite media.

1. Introduction

Groundwater management has to deal with very different temporal and spatial scales, as :

- the scale of the measurements, which can be different for piezometric heads, concentrations, flow parameters like transmissivity, transport parameters like dispersivity;
- the scale of the heterogeneities of the system, which can be described at different levels, depending on the measurement techniques which are used (Ptak et Teutsch, 1994);
- the scale of the management tools, like the size of an element of a numerical model which can be different, depending on the management objectives (forecast of water levels, delimitation of capture zones, pollutant spreading, ...).

Therefore, upscaling or downscaling of variables or parameters to average variables and/or effective parameters at the scale of interest cannot be avoided. Moreover, the change of scales can lead to mathematical models which are different from the one established at another scale, which can lead to some misunderstanding of the physics. For example, dispersion of a solute appears only at the scale of a representative elementary volume (Bear, 1972) but does not exist at the pore scale where the transport mechanisms are convection and molecular diffusion.

A lot of results concerning effective parameter estimation have been provided in the last 20 years (see Renard et de Marsily, 1997, for hydraulic conductivities ; Cushman *et al.*, 2002, for upscaling tools), mostly based on a stochastic description of parameter fields. They mainly concern average uniform flow and mass transfer in a infinite domain (Gehlar et Axness, 1983 ; Dagan, 1989 ; Neuman, 1990 ; Rubin, 1990). A few more recent results have been obtained for radial flow and/or bounded domain (Rubin et Dagan, 1988 ; Rubin et Dagan, 1989 ; Osnes, 1995 ; Paleologos *et al.*, 1996 ; Sanchez-Vila, 1997 ; Indelman et Dagan, 1999).

The assessment of the theoretical tools has been done with numerical experiments (see Thompson et Gehlar, 1990 ; Chin, 1997 ; Fiori, 2000 ; Lintéa, 2001) and they show a good agreement with the theory for heterogeneous domain with a variance of the log conductivities up to 1.00. However, numerical methods have their own approximations due to the space and

time discretizations and to the numerical method itself, approximation which can be of the same order than the theoretical developments. The assessment of these theoretical works can be strengthened by tracer tests performed at the laboratory scale.

Laboratory experiments have always accompanied theoretical developments. They can be considered as intermediate scale experiments (Silliman et al., 1998) and have several advantages over field experiments (Huang et al., 1995) : boundary conditions and the distribution of the porous medium properties are known and can be defined, the experiments can be repeated, they are also cheaper and last less time. In the 60's, many experiments have been done on tracer transport in homogeneous media (Harleman et Rumer, 1963; Pfannkuch, 1963) to support theoretical works of Saffman (1959), Scheidegger (1961), among others. The laboratory experiments are mainly done in one dimension (column type) of different lengths and diameters (Klotz *et al.*, 1980; Khan et Jury, 1990; Huang *et al.*, 1995; Sternberg *et al.*, 1996; Irwin *et al.*, 1996; Rashidi *et al.*, 1996; Watson *et al.*, 2002), some of them in two dimensions (Spitz, 1985; Silliman et Simpson, 1987; Silliman *et al.*, 1987; Schincariol et Schwartz, 1990; Schäfer, 1991; Berkowitz *et al.*, 2000; Silliman et Zheng, 2001) and a few in 3 dimensions (Jellali *et al.*, 2001; Oswald *et al.*, 2002). A very few deals with radial flow in 2D (Chao *et al.*, 2000; Silliman, 2001). A review of some laboratory works is given in Silliman *et al.* (1998).

This paper deals with laboratory experiments done one a 3D setup filled with an heterogeneous porous medium. The objectives are to estimate effective parameters (effective hydraulic conductivity, macrodispersion) obtained by tracer tests. The experimental setup is described in the first part. The second part deals with the methodology used to estimate the effective parameters and their associated uncertainties. The paper ends with the results and discussion.

2. Experimental design

MARCEAUS (Modèle d'Analyse et de Recherche sur la Contamination des EAUx Souterraines) is a 3D laboratory set-up designed for experiments of 3D mass transfer in heterogeneous porous media.

2.1. The experimental setup

The 3D tank is split in three parts: a constant level upstream tank which is connected to an overflow; a central part that holds the porous medium, of dimensions 5.60x1.0x1.0 m³ and a constant level downstream tank which is also connected to an overflow (Figure 4-1). Nylon grids separate the porous medium from the tanks. Cells for *in situ* electrical conductivity measurements have been implemented in MARCEAUS to measure tracer concentrations. The slope of the bottom of the tank is equal to 1%. The x-axis of the coordinate system is parallel to the bottom. The water surface is free. We tried to maintain a constant temperature values within the medium by air conditioning. The selected value is that of the water distribution network (12-13 °C). A constant temperature through the porous medium is necessary because the measuring method of tracer concentrations is based on electrical conductivity which is sensitive to temperature variations. Low temperatures around the system prevent also water temperature elevations and water degassing, but also convection phenomena that could appear with temperature gradients.



Figure 4-1: Schematic presentation of the setup.

The supply system consists in two systems, one system for water supply and one system for tracer supply. The two supply systems are included in the air conditioned box. Water supply is obtained by gravity through a constant level additional tank, situated above of upstream tank which ensures a constant flow rate. The tracer is injected with a peristaltic pump and mixed in the upstream tank.

Concentration measurements inside of the medium are made by an electrical conductivity type measuring method, using conductivity cells developed at the laboratory. A cell is made of two electrodes of length 2 cm and diameter 0.3 cm fixed on a Plexiglas tube. This tube is placed in the porous material. On each tube, five measurement cells are settled. The tubes are placed in sections perpendicular to the mean flow direction (length of the sand box). In each section, we place five tubes (25 measurement cells per cross section). There are 14 sections in the box *i.e.* there are 350 measurement cells in the experimental set-up. Numerous *in situ* calibrations of the electrodes show a linear relationship between electrical conductivity and the tracer concentration (NaCl) for concentration less than 5 g/l. Additional standard conductivity cells are used to measure the conductivity in the upstream and downstream tanks.

All electrodes are connected to one conductivity-meter. They are scanned automatically in a sequential way and the measured values are stored in files. The measurement is done every 4 seconds to ensure the stability of the electronics. The conductivity over time can be plotted on the screen of a PC for user-selected cells which allows the survey of the ongoing experiment.

The developed method has the following advantages:

- it is implemented in the porous media and therefore, sampling is not required;
- it allows on line measurement over a volume consistent with the theory of flow and transport in porous media. This volume has about the same size than the so called representative elementary volume where Darcy's and Fick's laws can be applied.
- \blacksquare the cells are robust and quite easy to manufacture.

The main drawback of the system is its calibration, each cell needs to be calibrated in situ. The absolute error of the electrical conductivity was equal to 0.02 mS/cm. This problem is not very important for high concentrations (relative error is than about 2%) but is difficult to overcome for the interpretation of the tails of the breakthrough curves. The data acquisition system has been improved for the experiments run on the statistical homogeneous porous medium (see below) and the absolute precision error decreases to less than 0.007 mS/cm.

2.2. The porous medium

Tracer tests have been performed on two different heterogeneous porous media made by different quartz sands from the Rhine valley. The grain size distribution is quite narrow $(d_{60}/d_{10} \text{ about } 1.7)$ and the average grain size goes from 0.5 mm for the finest sand type to 2.3 mm for the coarser one. The effective porosity of the different sand types were measured with column type experiments and leads to an estimate of 0.38 for all sand types.

The sand is contained in a domain of dimensions 560 cm in the length, 100 cm in the width and 90 cm in the height. To perform an homogeneous flow rate in the sand, the first and last 40 cm (30 cm for the random correlated structure) of the sand box (after the upstream tank and before the downstream tank) is filled with a sand of high hydraulic conductivity.

The sand packing was done with wetted sand and under water to avoid trapped air and thus ensure saturation. Thin plastic dividers (0.5 mm) were used to separate blocks of different kinds of sand and were removed as the packing proceeded. Similar procedure has been used by Silliman *et al.* (1998). By removing the plastic dividers, the shape of the boundary between two regions may be slightly modified.

The first filling has been done with blocks of 40x10x10 cm³. The first and last 40 cm are filled with an homogeneous sand. Three different sands were used and distributed in a structured way, simulating homogeneous channels from the one end to the other end of the tank. The shape of the channels are slightly changed from one layer to the other (Figure 4-2).



Figure 4-2: Two representative layers of the channel structured porous medium.

The geometric mean of the hydraulic conductivity is 0.0060 m/s. The variance of the Logconductivity is about 1.23. The value of the hydraulic conductivity measured using Darcy's experiments for each sand type is given in Table 1.

	1	2	3
K (m/s)	0.9 10 ⁻³	10.0 10 ⁻³	12.5 10 ⁻³

Table 1: Hydraulic conductivity of the different type of sands (m/s) used for the channel structured porous media.

The second sand filling can be considered statistically homogeneous. To be consistent with the theoretical works made on the stochastic analysis of mass transfer, a volume of 500 x $100 \times 90 \text{ cm}^3$ has been filled using cubic blocks of 10 centimeters. 6 kinds of sand have been used. The hydraulic conductivities are given in Table 2.

	1	2	3	4	5	6
K (m/s)	0.20 10 ⁻³	0.70 10 ⁻³	1.2 10 ⁻³	1.4 10 ⁻³	10 10 ⁻³	77 10 ⁻³

Table 2: Hydraulic conductivity of the different type of sands (m/s) used for the random correlated structured porous media.

Each horizontal plane has been constructed independently, using an exponential covariance distribution of the LogConductivity, LnK, defined by:

$$Cov(h) = \sigma_v^2 \exp(-h/\lambda)$$
 (IV.4)

where σ_Y^2 is the variance of the LnK and λ (L) the correlation length or integral scale.

The generation of the LnK distribution has been made in the following way:

- generation of the LnK value with the prescribed function and parameters using a sequential gaussian field generator;
- \blacksquare the quality of the computed field is checked;
- each value of computed hydraulic conductivity is replaced by the closest hydraulic conductivity of the different sands available;
- \blacksquare the quality of the modified LnK field is checked.

For each layer, the variance of the Log-conductivity is about 1.03, the average geometric K about 0.00159 m/s. The average horizontal correlation length is equal to 23.1 cm. The vertical correlation length is equal to the thickness of the layer, 10 cm.

3. Experimental results and procedures

The flow is steady state during the experiment. Each tracer experiment consists in the following steps:

- Step 1. Electrical conductivities are recorded to estimate the measurement errors and the natural conductivity of the water.
- Step 2. Tracer is injected in the upstream tank. Electrical conductivities are recorded. The flow remains steady state during the tracer test. Tracer is injected until the measured electrical conductivity reaches a constant value for each cells located in the porous medium. The solute distribution in MARCEAUS can be considered steady state at this stage.
- Step 3. Tracer injection is stopped. Electrical conductivity are recorded to check when the tracer has left the porous media.
- Step 4. When the tracer has left the tank, the electrical conductivity is measured to detect any drift of the measurement setup during the experiment.



Figure 4-3 : Typical BTCs for the channel structured porous medium.

Typical breakthrough curves (BTCs) are presented in Figure 4-3 and Figure 4-4 for the channel structured and correlated random structured heterogeneous media.



Figure 4-4: Typical BTCs for the statistical correlated structured porous medium.

The electrical conductivity values are normalized with the average electrical conductivity obtained in steady state and the water electrical conductivity. Due to the linear relationship between electrical conductivity and concentration, this scaled valued represents also the normalized concentration C/C0, given by:

$$\frac{C(t)}{C_0} = \frac{Cond(t) - Cond_w}{Cond_s - Cond_w}$$
(IV.5)

where C(t) is the solute concentration (M/L^3) , C_0 is the solute concentration (M/L^3) at steady state, Cond(t) is the electrical conductivity (mS/cm) of the tracer-water mixture at time t, Cond_w is the electrical conductivity (mS/cm) of the water without tracer and Conds is the electrical conductivity (mS/cm) of the solute-water mixture at steady state.

The effective parameters are obtained using a normalized BTC obtained by averaging the BTCs observed at each cells of one section. It is assumed that the measurement errors of each cell are normally distributed with an average of zero and the same standard deviation. Therefore, for each cross section, the estimated error of the average concentration is given by:

$$\left[\overline{c} - 2\sigma_c / \sqrt{n}; \overline{c} + 2\sigma_c / \sqrt{n}\right]$$
(IV.6)

where \overline{c} (M/L³) is the average concentration computed with the concentration of each cell, σ_c (M/L³) the standard deviation of the concentration and n the number of cells. The number 2 is the Student-t statistic coefficient for a significance level fixed to 95 %.

Two averaging procedures have been tested, arithmetic non weighted (called arithmetic) and flux weighted. Arithmetic averaged BTCs and their associated error estimated by equation (IV.6) are presented in Figure 4-5 for the channel structured medium and in Figure 4-6 for the random correlated media. Local fluxes are not available, they are assumed to be linearly dependant on the hydraulic conductivity of the sand surrounding the measurement cells. This assumption can be considered as valid if the effective conductivity from the injection to each cell is the same and if the local fluctuations of the head gradient within a section can be neglected. Therefore, the concentration are weighted by the hydraulic conductivity of the sand around the cell. The fluxes could also be estimated using the average travel time (e.g. Silliman et Simpson, 1987) obtained for $C/C_0=0.50$. This estimate is questionable : even if the estimated average travel times are the same for two cells, the local velocities (or volumetric fluxes) can be different because the trajectories from injection to the cells are different. The effect of the porosity has not to be taken into account, all kind of sands having the same porosity.



Figure 4-5: Average BTCs for the channel structured porous medium.



Figure 4-6: Average BTCs for the statistical correlated porous medium.

The ability of reproducing the average concentrations by a 1-D transport model based on effective velocity and dispersivity is checked by plotting on a normal probability paper the scaled concentration in function of

$$v = \frac{(x - ut)}{\sqrt{2t}} \tag{IV.7}$$

where x (L) is the distance between the cross section used to describe the input and the cross section where the measurements are made, u (L/T) is the average pore water velocity and t (T) the time. If the observations are consistent with the suggested model, the resulting plot is a straight line. This idea is based on the procedure used by Silliman and Simpson (1987) to determine the dispersivity coefficient. We restrict its application because we do not have a step wise concentration source. The tracer injection in the upstream tank leads to apparent tracer spreading due to mixing in the tank and the boundary condition cannot be described like a step injection (Novakowski, 1992a, b).

The effective parameters are obtained by fitting of a 1-D transport model solved numerically. This procedure has been preferred to more standard ones like moment analysis or line fitting between some dimensionless values of concentration (e.g. Nguyen *et al.*, 1990; Sternberg *et al.*, 1996; Rashidi *et al.*, 1996) because :

■ it allows to take care of measurement errors;

- any type of upstream boundary conditions can be taken into account;
- it is less sensitive to cut-off values or interpolation techniques;
- it provides an estimate of the effective parameters uncertainty.

Assuming that the errors and parameters are normally distributed, we use the maximumlikelihood theoretical framework (Carrera et Neuman, 1986) to estimate the effective parameter by minimizing the objective function defined by:

$$O(p) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(c_{s,i} - \overline{c_i})^2}{w_i^2}$$
(IV.8)

where p is a vector containing the unknown parameters (average pore water velocity and dispersivity), n is the number of observations, \overline{c}_i , w_i are ith average measured concentration (M/L³) with its associated uncertainty defined by $2\sigma_c/\sqrt{n}$ (M/L³) and $c_{s,i}$ (M/L³) is the ith calculated concentration value. The average BTC of the first section is used as input boundary conditions. Because the porous medium is homogeneous between the injection tank and the first section, the 25 local BTCs of the first section are used to check the quality of the tracer injection, especially its homogeneity over width and depth. The first section has been preferred to the upstream tank in which only one electrode was present due to the lack of space because of the mixing system. Therefore, the origin of the x-axis is set at this first section.

The minimization of that non linear objective function is done by the modified Gauss-Newton procedure described in Marquardt (1963). The reliability and correlation of parameter estimates are analyzed by using the variance-covariance matrix, defined by Bard (1974) :

$$F = \frac{1}{n - n_p} O(p) \left(J^T W^{-1} J \right)^{-1}$$
 (IV.9)

where $J(i, j) = \frac{\partial c_{s,i}}{\partial p_j}$ is the jacobian matrix, W is the weight matrix, diagonal in our case where W_{i,i} is the inverse of w_i = $2\sigma_c / \sqrt{n}$, n is the number of measured concentrations and n_p, the number of parameters (2 in our case). The diagonal coefficients of the matrix F are the parameter variances and the off-diagonal coefficients the parameter covariances. Scaled by the parameter variances, the off-diagonal coefficients are equal to the correlation coefficients.

Assuming that the model varies linearly with the parameter in the vicinity of the minimum, the confidence intervals are estimated by (Bard, 1974):

$$p_i \pm t(n - np, 1 - \alpha/2)F_{i,i}$$
 (IV.10)

where t is the Student-t statistic coefficient for $n-n_p$ degrees of freedom and a significance level of α (95 % for our computations) and $F_{i,i}$ the parameter variance defined by equation (IV.9).

About 1000 measured electrical conductivities are available for each cell for each experiment but only the measured values during transient conditions (increasing or decreasing concentration) are relevant for the transport parameter estimation (Knopman et Voss, 1988). Therefore, we only take into account measured values for C/C0 between 5% and 95 % i.e. about 80 to 100 values in average.

The calibration procedure was first used to estimate the average pore water velocity and an effective dispersion coefficient. For all tracer experiments, this approach was abandoned due to the high correlation coefficient (greater than 0.90) between the two calibrated parameters which leads to high uncertainty in the parameter estimation. The calibrations were then performed with dispersivities instead of dispersion and no significant correlation (less than 0.10) has been found between velocity and dispersivity.

Two calibration procedures have been used:

- the calibration of pore water velocity and dispersivity for each section, looking for an estimate of effective parameters over the mean travel distance. These effective parameters can be distance dependant;
- the calibration of the dispersivity only, the pore water velocity being prescribed by its measured value based on the flow rate, the wetted cross section and the effective porosity. In this way, the whole tank is considered as homogeneous for the flow problem.

4. Interpretation

4.1. Channel structured porous medium

Tracer tests were performed with prescribed heads of 88.0 cm upstream and 83.5 cm downstream. The flow rate was 61.6 cm^3 /s. The average hydraulic conductivity is given by:

$$K = \frac{2QL}{l(h_u^2 - h_d^2)}$$
 (IV.11)

where Q is the flow rate (L^3/T), L the length of the porous medium (L), l its width (L), h_u the prescribed upstream head (L) and h_d the prescribed downstream head (L). Recall that the x-axis of the coordinate system is parallel to the bottom of the tank and, therefore, its slope do not appear in equation (IV.11). Equation (IV.11) is the 1-D analytical solution for flow in an homogeneous unconfined aquifer. According to the experimental data, K is equal to 8.94 10^{-3} m/s. Similar results have been obtained with previous experiments (Renard *et al.*, 2000b). This value is of the same order than the arithmetic mean of the hydraulic conductivity 8.80 10^{-3} m/s. This is expected, the mean flow direction being parallel to the channels.

Due to the porous media structure, the concentrations are not normal distributed (see Figure 4-7 for recorded concentrations during injection), especially for large distances. This show the effects of mass exchange between high and low permeable zones.



Figure 4-7: Normal plot for BTCs for the channel structured porous medium.

The velocities are estimated in different ways:

- by fitting the 1-D model to the arithmetic or flux averaged concentrations, using all measured values between 5 and 95 % of the concentration at steady state (C_0),
- by computing the velocity with the analytical solution given by:

$$u = \frac{Q}{h(x)l\omega} = \frac{Q}{\sqrt{h_u^2 - \frac{2Q}{KL}x} l\omega}$$
(IV.12)

where Q is the flow rate (L^3/T), L the length of the porous medium (L), l its width (L), K the effective hydraulic conductivity (L/T), ω the effective porosity (equal to 0.38) and h_u the prescribed upstream head (L).

	Anal.	Arithmetic			Flux		
Distance	u	u	Abs. error	Rel. er. (%)	u	Abs. error	Rel. er. (%)
40	66.7	45.30	1.08	2.38	62.80	1.93	3.07
80	66.9	42.60	0.85	1.99	64.30	0.71	1.10
120	67.2	48.40	0.60	1.24	61.80	0.99	1.61
160	67.4	54.40	0.56	1.03	63.50	0.77	1.22
200	67.7	53.90	0.51	0.94	66.00	0.49	0.74
240	67.9	54.70	0.49	0.89	64.10	0.61	0.95
280	68.2	60.00	0.47	0.78	77.10	0.00	0.00
320	68.4	59.90	0.67	1.12	73.80	0.70	0.95
360	68.7	58.30	0.27	0.47	68.20	0.09	0.13
400	69.0	60.50	0.00	0.00	78.10	0.52	0.67
440	69.2	60.50	0.39	0.65	79.70	0.54	0.67
480	69.5	60.60	0.28	0.46	82.10	0.51	0.62
520	69.7	68.30	0.63	0.92	72.40	0.69	0.95

Table 3: Estimated pore water velocity (cm/h) for the channel structured porous medium.

The velocities obtained by the model fittings and the analytical solution are given in Table 3. The average uncertainty on the velocity obtained by equation (IV.10) is about 0.5 cm/h *i.e.* a relative error of about 1 %. The general trend is an increase with travel distance due to the

decrease of the wetted surface with the head. The velocities show local fluctuations due to local head gradient fluctuations. The velocities obtained by the flux averaged concentration are higher and fluctuate around the values obtained by the analytical solution (Figure 4-8).



Figure 4-8: Fitted velocities (line+symbols) and analytical velocity (line) based on the effective hydraulic conductivity.

The flux-averaging procedure gives less weights to the concentrations measured in the zones of low velocities. Therefore, the BTCs' tails are reduced (see Figure 4-9) and the BTCs are more consistent with a gaussian type model like dispersion-convection, especially for short travel distances. The concentration front is than sharper and the fitted velocities are greater. These velocities are also more consistent with the velocities obtained with the analytical solution computed with the prescribed head gradient and the effective hydraulic conductivity given by equation (IV.11). In fact, both approaches are based on fluxes, which explains their similar results.



Figure 4-9: Measured (symbols) and computed (lines) average arithmetic and flux BTCs for the channel structured porous medium.

The apparent dispersivities and dispersion coefficient are given in Table 4 and Figure 4-10. As expected, the model fitting on the flux averaged concentrations provides smaller dispersivity and dispersion coefficients than the fitting on the arithmetic averaged concentrations. No significant differences between dispersivity coefficient obtained with a varying velocity or an uniform velocity has been found (Figure 4-10).

	Arithmetic			Flux			
Distance	α	Rel. er. (%)	D	α	Rel. er. (%)	D	
40	11.60	17.33	0.15	2.32	44.83	0.04	
80	30.10	11.63	0.36	5.85	0.00	0.10	
120	32.90	7.39	0.44	15.60	10.96	0.27	
160	22.10	0.32	0.33	13.40	8.96	0.24	
200	25.00	5.80	0.37	10.70	6.17	0.20	
240	43.80	4.93	0.67	26.30	6.54	0.47	
280	40.00	4.83	0.67	9.13	5.62	0.20	
320	40.80	0.00	0.68	24.00	6.83	0.49	
360	63.70	2.92	1.03	54.40	6.69	1.03	
400	74.00	4.66	1.24	15.80	6.08	0.34	
440	74.00	0.10	1.24	20.10	6.02	0.44	
480	75.90	0.00	1.28	21.80	5.09	0.50	
520	89.90	6.06	1.71	57.90	0.96	1.16	

Table 4: Estimated dispersivity α (cm) and dispersion D (cm²/s) for the channel structured porous medium.

The variance of the concentration distribution is assumed to have a power law dependence with time or travel distance:

$$\sigma_s^2 \sim t^\beta \tag{IV.13}$$

where the variance is estimated by $\sigma_s^2 = 2\alpha(t)X$, with X is the travel distance (L) and α the dispersivity (L). For both ways of constructing BTCs (arithmetic and flux weighted), the linear fit of the Ln-Ln plot is very good (Figure 4-11). For the variance estimated by the arithmetic averaged concentrations, $\beta = 2.04 \pm 0.07$. This same value is obtained for perfectly stratified porous media without vertical flow (Matheron et de Marsily, 1980).



Figure 4-10: Dispersivity coefficients obtained by model fitting on arithmetic and flux averaged BTCs.



Figure 4-11: Evolution of concentration distribution variance with time.

The variance estimated by flux averaged concentrations leads to $\beta = 2.48 \pm 0.12$. This value is questionable, the admitted maximum value of β being 2.

4.2. Correlated random structure

The upstream and downstream prescribed heads are equal to respectively 96.0 cm and 90.2 cm. The average flow rate was 23.3 cm³/s. Using equation (IV.11), the effective hydraulic conductivity is equal to 2.42 10^{-3} m/s, which, as predicted by the theory, is greater than the geometric average hydraulic conductivity (1.59 10^{-3} m/s). The experimental set-up

does not fulfill all the assumptions required to apply stochastic theories due to its limited extension compared to the correlation length. Results concerning head covariances (Rubin et Dagan, 1988 ; Rubin et Dagan, 1989 ; Osnes, 1995) or upscaled hydraulic conductivity (Kitadinis, 1990 ; Indelman et Dagan, 1993a ; 1993b ; Paleologos *et al.*, 1996) are obtained in region sufficiently far from the boundary (at least three integral scales).

However, we use the general form of the hydraulic conductivity given by Paleologos *et al.* (1996) for small LnK variance:

$$K_e = K_G \left[1 + \sigma_Y^2 (\frac{1}{2} - D) \right]$$
 (IV.14)

where K_e is the effective hydraulic conductivity [L/T], K_G the geometric mean of the hydraulic conductivity [L/T], σ_y^2 the variance of the LnK field and D a domain integral. The aim is to check if this generic form can be applied for the set-up. According to the experimental data, the value of the domain integral is close to 0 (D= - 6.8 10⁻³).

Taking care of the anisotropy in the correlation lengths, D can be considered to be equal to (Dagan, 1989):

$$D = \frac{\lambda}{2} \quad \text{with} \quad \lambda = \frac{e^2}{1 - e^2} \left[\frac{1}{e\sqrt{1 - e^2}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{1}{e^2} - 1} - 1 \right]$$
(IV.15)

where e is the anisotropy factor. In our case, e is equal to 0.43 and D to 0.22.

The difference with the experimental value is probably due to the boundary effects, formula (IV.14) having been established for a infinite 3D medium.

As required by the theory developed in Neuman and Orr (1993), when the domain size approaches zero, the effective conductivity should tend to the arithmetic mean. The arithmetic mean of the hydraulic conductivity is equal to $3.55 \ 10^{-3}$ m/s. The estimated effective hydraulic conductivity is between the geometric and arithmetic averages. It is affected by the correlated structured porous medium and the boundary conditions.



Figure 4-12: Normal plot for BTCs for the statistically correlated structured porous medium.

The concentration distribution is close to a normal distribution (Figure 4-12) even for short distances. No significant differences exist between both averaging procedures (Figure 4-13). The fitted velocities fluctuate around the average velocity obtained by the analytical solution (Figure 4-14 and Table 5). The relative error on the velocities is higher than the estimated error for the channel structured medium.

	Anal.	Arithmetic			Flux		
Distance	u	u	Abs. error	Rel. Er. (%)	u	Abs. error	Rel. Er. (%)
40	24.6	16.08	0.93	5.75	29.76	2.05	6.90
80	24.7	17.34	0.75	4.34	16.26	0.41	2.55
120	24.9	21.12	0.58	2.73	15.42	0.00	0.02
160	25.0	26.94	0.67	2.49	23.16	0.87	3.74
200	25.1	26.70	1.57	5.89	31.08	0.01	0.04
240	25.2	23.46	0.88	3.74	16.38	0.50	3.03
280	25.3	25.38	0.00	0.00	19.08	0.42	2.23
320	25.4	24.30	0.01	0.02	24.54	0.62	2.51
360	25.5	26.58	0.54	2.05	23.82	0.43	1.82
400	25.7	27.36	0.33	1.19	26.04	0.84	3.23
440	25.8	26.04	0.00	0.01	27.96	0.42	1.52
480	25.9	23.82	0.17	0.71	21.72	0.55	2.55
520	26.0	26.34	0.29	1.08	23.52	0.36	1.54

Table 5: Estimated pore water velocity (cm/h) for the random correlated structured porous medium.



Figure 4-13: Measured (symbols) and computed (lines) average arithmetic and flux BTCs for the statistical correlated structured porous medium.



Figure 4-14: Fitted velocities (line+symbols) and analytical velocity (line) based on the effective hydraulic conductivity.

Dispersivities do not show any significant increase with travel distance (Table 6 and Figure 4-15) and fluctuates around a value about 40 to 50 cm. The transport can be described by a Fickian model for travel distances greater than 160 cm or 8 integral scales. Unfortunately, the dispersivity could not be estimated for shorter distances, the estimated uncertainty being too important.

	Arithmetic			Flux		
Distance	α	Rel. er. (%)	D	α	Rel. er. (%)	D
40	-	-	-	-	-	-
80	-	-	-	-	-	-
120	-	-	-	74.50	26.60	0.32
160	50.30	25.45	0.38	-	-	-
200	79.90	9.39	0.59	34.30	49.91	0.30
240	43.60	22.16	0.28	48.30	14.82	0.22
280	30.70	22.61	0.22	54.10	23.18	0.29
320	33.80	8.70	0.23	36.40	7.36	0.25
360	40.20	8.41	0.30	42.60	8.69	0.28
400	27.30	10.26	0.21	40.50	2.12	0.29
440	36.30	11.74	0.26	55.70	2.20	0.43
480	48.70	5.95	0.32	44.20	3.74	0.27
520	45.20	3.53	0.33	47.50	2.58	0.31

Table 6: Estimated dispersivity α (cm) and dispersion D (cm²/s) for the random correlated structured porous medium.



Figure 4-15: Dispersivity coefficients obtained by model fitting on arithmetic and flux averaged BTCs for the correlated structured medium.

The Fickian behavior of the transport is confirmed by the analysis of the variation of the concentration distribution variance with time (Figure 4-16). The linear fit on the Ln-Ln plot gives $\beta = 1.06 \pm 0.17$, which is a typical value for transport with constant dispersion coefficient. The asymptotic value of the dispersivity (40 - 50 cm) is higher than the theoretical predicted value (e.g. Dagan, 1989) which is 23.8 cm. Again, the effects of the boundary are not taken into account in the theoretical estimation of the dispersivity.



Figure 4-16: Evolution of concentration distribution variance with time.

5. Conclusions

Concerning the hydrodynamics, both studied heterogeneous porous media can be replaced by an uniform one with an effective hydraulic conductivity equal to the arithmetic mean for the channel structured porous media and, for the correlated structured medium, a hydraulic conductivity bounded by the geometric and the arithmetic means. Velocities obtained by these effective hydraulic conductivities and the average head gradients prescribed at the boundaries are close to the experimental velocities, except the velocities based on the arithmetic averaged concentration for the channel structured medium.

Concerning the tracer transport, the concentration distribution variance is proportional to t^{β} , with β =2.0 for the channel structured media and β =1.0 for the correlated structured media. β =2.0 is a typical value for transport in stratified aquifers while β =1.0 is the expected value for Fickian transport. The asymptotic dispersivity values are however greater than the predicted values for unbounded domain.

Concentration distributions could be modeled with an 1-D advection-dispersion model for the correlated structured medium, at least for distances greater or equal to 8 integral scales. The match between computed and experimental concentrations is quite poor for the channel structured model, due to the non-gaussian distribution of the concentration.

The channel structures media behaves like a stratified media with flow direction parallel to the layers. However, the effective parameters depend on the averaging technique *i.e.* the type of measurement method. Moreover, they may also depend on the ratio between the time scale for convection and the time scale for lateral dispersion/diffusion which will affect the mixing of the tracer between layers. Therefore, these effective parameters will also be dependent on the average head gradient. Heterogeneity with integral scales of the same order than the domain scale are not seldom in nature and more theoretical and experimental results are necessary.

Assessment of stochastic theories with our laboratory setup is not possible, due to the boundary effects. To our knowledge, no theoretical estimation for parameter upscaling exists for bounded domain of small size compared to the integral scale. Because (i) the characteristic length of the sand blocks must be at least around 1 dm (REV size), (ii) the number of blocks within a integral scale should be about 5, (iii) the number of integral scales in the domain should be more than 50 (Lintéa, 2001), the characteristic length of an experimental setup

should at least be 2,50 m. This size is difficult to handle at the laboratory scale. However, tracer tests at laboratory scale are not restricted to stochastic theory assessment. They are also useful to improve the understanding of transport processes for other type of heterogeneity (see results for the channel structured medium) and for the verification of numerical models and/or of parameter estimation by inverse methods.

Acknowledgement

This project has been supported by the European Research Project "Stochastic Analysis of Well Head Protection and Risk Assessment" W-SAHaRA Contract No. EVK1-CT-1999-00041. and the Programme National de Recherche en Hydrologie (National Hydrology Research Program) of the Institut National des Sciences de l'Univers.

References

Bard, Y., 1974. Nonlinear Parameter Estimation. Academic Press, N.Y.

- Bear, J., 1972. Dynamics of fluids in porous media. American Elsevier, New York.
- Berkowitz, B., Scher, H., Silliman S.E., 2000. Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media. Water Resources Research 36 (1), 149–158.
- Carrera, J., Neuman, S. P., 1986. Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions, 1, Maximum likelihood method incorporating prior information. Water Resources Research 22 (2), 199-210.
- Chao, H.C., Rajaram, H., Illangasekare, T., 2000. Intermediate-scale experiments and numerical simulations of transport under radial flow in a two-dimensional heterogeneous porous medium. Water Resources Research 36 (10), 2869-2884.
- Chin, D.A., 1997. An assessment of first-order stochastic dispersion theories in porous media. Journal of Hydrology 199, 53-73.
- Cushman, J.H., Bennethum, L.S., Hu B.X., 2002. A primer on upscaling tools for porous media. Advances in Water Resources 25, 1043-1067.
- Dagan., G., 1989. Flow and transport in porous formations. Springer, Berlin, Heidelberg, New-York, 465 p.
- Fiori, A., 2000. The relative dispersion and mixing of passive solutes in transport in geologic media. Transport in Porous Media 42 (1–2), 69–83.
- Gelhar, L.W., Axness, C.L., 1983. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. Water Resources Research 19, 161–180.
- Harleman, D.R., Rumer, R.R., 1963. Longitudinal and lateral dispersion in an isotropic porous medium. Journal of Fluid Mechanics 16, 385–394.
- Huang., K., Toride, N., Van Genuchten, M.TH., 1995. Experimental investigation of solute transport in large, homogeneous and heterogeneous, saturated columns. Transport in Porous Media 18, 283-302.
- Indelman, P., Dagan, G., 1993a. Upscaling of permeability of anisotropic heterogeneous formation, 1, general frame work. Water Resources Research 29(4), 917-923.
- Indelman, P., Dagan, G., 1993b. Upscaling of permeability of anisotropic heterogeneous formation, 2, general structure and small perturbation analysis. Water Resources Research 29(4), 925-933.
- Indelman, P., Dagan, G, 1999. Solute transport in divergent radial flow through heterogeneous porous media. Journal of Fluid Mechanics 384, 159-182.

- Irwin, N.C., Botz, M.M., Greenkorn, R.A., 1996. Experimental investigation of characteristic length scale in periodic heterogeneous porous media. Transport in Porous Media 25, 235-246.
- Jellali, S., Muntzer, P., Razakarisoa, O., Schäfer, G., 2001. Large-scale experiment on Transport of trichloroethylene in a Controlled aquifer. Transport in Porous Media 44, 145-163
- Khan, A., U.-H., Jury, W. A., 1990. A laboratory study of the dispersion scale effect in column outflow experiments. Journal of Contaminant Hydrology 5, 119-131.
- Kitanidis, P.K., 1990. Effective hydraulic conductivity for gradually varying flow. Water Resources Research 26(6), 1197-1208.
- Klotz, D., Seiler, K.P., Moser, J., Neumaier, F., 1980. Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments. Journal of Hydrology 45, 169–184.
- Knopman, D.S., Voss, C.I., 1988. Further Comments on Sensitivities, Parameter Estimation, and Sampling Design in One-Dimensional Analysis of Solute Transport in Porous Media. Water Resources Research 24, 225-238.
- Lintéa, M.D., 2001. Transport de polluant à l'échelle de l'hétérogénéité des milieux poreux aléatoires. Approche stochastique et numérique. Thèse de Doctorat de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 287 p.
- Marquardt, D.W., 1963. An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. SIAM, Journal on Applied mathematics 11 (2), 431-441.
- Matheron, G., de Marsily, G., 1980. Is transport in porous media always diffusive? A counterexample. Water Resources Research 16(5), 901-917.
- Neuman, S.P., 1990. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. Water Resources Research 26, 1749–1758.
- Neuman, S.P., Orr, S. 1993. Prediction of steady state flow in nonuniform geologic media by conditional moments: exact nonlocal formalism, effective conductivities and weak approximation. Water Resources Research 29(2), 341-364.
- Nguyen, V., Dagan, G., Springer, E.P., 1990. Analysis of caisson transport experiment by travel time approach. Field-Scale water and Solute Flux in Soils, Monte Verità, Birkhäuser, Verlag, Basel, 79-93.
- Novakowski, K. S., 1992a. An evaluation of boundary conditions for one-dimensional solute transport, 1, Mathematical development. Water Resources Research 28 (9), 2399-2410.
- Novakowski, K. S., 1992b. An evaluation of boundary conditions for one-dimensional solute transport, 2, Column experiments. Water Resources Research 28 (9), 2411-2423

- Osnes, H., 1995. Stochastic analysis of head spatial variability in bounded rectangular heterogeneous aquifers. Water Resources Research 31, 2981–2990.
- Oswald, S.E., Scheidegger, M.B., Kinzelbach, W., 2002. Time-Dependent Measurement of Strongly Density-Dependent Flow in a Porous Medium via Nuclear Magnetic Resonance Imaging. Transport in Porous Media 47 (2), 169-193.
- Paleologos, E.K., Neuman, S.P., Tartakovsky, D., 1996. Effective hydraulic conductivity of bounded, strongly heterogeneous porous media. Water Resources Research 32 (5), 1333-1341.
- Pfannkuch, H.O., 1963. Contribution a l'étude des déplacements de fluides miscible dans un milieu poreux. Revue de l'Institut Français du Pétrole 18, 215–270.
- Ptak, T., Teutsch, G., 1994. A comparison of investigation methods for the prediction of flow and transport in highly heterogeneous formations. In T. Dracos, F. Stauffer ed., Int. Symp. on Transport and Reactive processes in Aquifers, 11-15 April, Zürich, Balkema, Rotterdam, 157-160.
- Rashidi, M., Peurrung, L., Tompson, A.F.B., Kulp, T.J., 1996. Experimental analysis of porescale flow and transport in porous media. Advances in Water Resources 19, 163–180.
- Renard, P., Ledoux, E., Ackerer, P., 2000. Scale up of hydraulic conductivities : comparison of laboratory experiments and numerical analyses. Computational Methods in Water Resources 13, Bentley et al., Balkema, Rotterdam, 799-804.
- Renard, Ph., de Marsily, G., 1997. Calculating equivalent permeability: a review. Advances in Water Resources 20 (5-6), 253-278.
- Rubin, Y., 1990. Stochastic Modeling of Macrodispersion in Heterogeneous Porous Media. Water Resources Research 26 (1), 133-141.
- Rubin, Y., Dagan, G., 1988. Stochastic analysis of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers ; 1. Constant head boundary. Water Resources Research 24 (10), 1689–1697.
- Rubin, Y., Dagan, G., 1989. Stochastic analysis of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers ; 2. Impervious boundary. Water Resources Research 25 (4), 707–712.
- Saffman, P. G., 1959. A theory of dispersion in a porous medium. Journal of Fluid Mechanics 6, 321-349.
- Sanchez-Vila, X., 1997. Radially convergent flow in heterogeneous porous media. Water Resources Research 33 (7), 1633–1641.

- Schäfer, G., 1991. Einfluss von Schichtenstrukturen und lokalen Einlagerungen auf die Längdispersion in Porengrundwasserleitern. Ph.D. Thesis, Institut f
 ür Wasserbau, Universit
 ät Stuttgart, ISBN 3-921694-72-2.
- Scheidegger, A.E., 1961. General theory of dispersion in porous media. Journal of Geophysical Research 66 (10), 3273-3278.
- Schincariol, R.A., Schwartz, F.W., 1990. An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media. Water Resources Research 26, 2317–2329.
- Silliman, S. E., 2001. Laboratory study of chemical transport to wells within heterogeneous porous media. Water Resources Research 37 (7), 1883–1892.
- Silliman, S. E., Zheng, L., 2001. Comparison of Observations from a Laboratory Model with Stochastic Theory: Initial Analysis of Hydraulic and Tracer Experiments. Transport in Porous Media 42, 85–107.
- Silliman, S.E., Konikow, L.F., Voss, C.I., 1987. Laboratory investigation of longitudinal dispersion in anisotropic media. Water Resources Research 23, 2145–2151.
- Silliman, S.E., Simpson, E.S., 1987. Laboratory evidence of the scale effect in solute transport. Water Resources Research 23, 1667–1673.
- Silliman, S.E., Zheng, L., Conwell, P., 1998. The use of laboratory experiments for the study of conservative solute transport in heterogeneous porous media. Hydrogeology journal 6, 166-177.
- Spitz, K., 1985. Dispersion in porösen Medien : Einfluss von Inhomogenitäten und Dichteunterschieden. Ph.D. Thesis, Institut f
 ür Wasserbau, Universit
 ät Stuttgart, ISBN 3-921694-60-4.
- Sternberg, S.P.K., Cushman, J.H., Greenkorn R.A., 1996. Laboratory observation of non-local dispersion. Transport in Porous Media 23, 135-151.
- Thompson, A.F.B., Gelhar, L.W., 1990. Numerical simulation of solute transport in threedimensionnal, randomly heterogeneous porous media. Water Resources Research 26 (10), 2541 – 2562.
- Watson, S.J., Barry, D.A., Schotting, R.J., Hassanizadeh, S.M., 2002. On the Validity of Darcy's Law for Stable High-Concentration Displacements in Granular Porous Media. Transport in Porous Media 47 (2), 149-167.
4. Cas du pompage

Pour déterminer la perméabilité et la dispersivité d'un milieu homogène équivalent, i.e. soumis aux mêmes conditions aux limites et « restituant » les mêmes valeurs de charge hydraulique et de concentration aux points de mesure, nous avons simulé chaque expérience en pompage sur un tel milieu à l'aide du logiciel MODFLOW. L'ajustement du modèle est réalisé sur la concentration à la sortie du puits de pompage

Avant de présenter les résultats obtenus puis de les analyser, nous présenterons le modèle utilisé.

4.1. <u>Présentation du modèle numérique</u>

Le milieu poreux est représenté par une seule couche en nappe libre. Le maillage est régulier avec 140 x 25 mailles carrées de 4 cm de côté. Il a été validé en comparant les résultats de simulation avec ceux obtenus avec un maillage deux fois plus fin de 280 x 50 mailles de 2 cm de côté (cf. Figure 4-17). L'identité des résultats prouve que le maillage retenu est suffisant.



Figure 4-17 : Validation du maillage 140 x 25 mailles - TT4W1.

La charge est imposée constante à l'amont et l'aval. Le débit de pompage est aussi imposé constant. Nous vérifions après la simulation que le débit à l'aval correspond à celui mesuré pendant l'expérience. Les valeurs de référence sont regroupées dans le Tableau 3.4.

Pour le transport, la moyenne arithmétique des concentrations mesurées dans la section 1 est utilisée comme condition aux limites. Ainsi, le transport est simulé uniquement dans le milieu aléatoire et non dans le milieu grossier situé à l'amont. Les concentrations sont enregistrées toutes les 24 minutes comme pour l'expérience.

D'après Knopman et Voss (1987), seules les phases transitoire du transport sont intéressantes pour ajuster la vitesse et la dispersivité dans la modélisation des essais de traçage. Compte tenu de la précision de nos mesures, nous ne retiendrons que les concentrations comprises entre 5 et 95 % de la concentration de la solution injectée pour notre ajustement. Nous nous intéressons en particulier à la concentration dans le puits de pompage : c'est la seule qui intègre un nombre de lignes de courant significatif pour évaluer des paramètres équivalents.

4.2. <u>Résultats des simulations</u>

Pour chaque expérience de pompage, la perméabilité et la dispersivité ont été ajustées. Deux jeux extrêmes ont aussi été créés en employant les limites de Cardwell et Parson pour la perméabilité, la longueur de corrélation pour la dispersivité minimale et la valeur maximale ajustée pour la dispersivité maximale. Enfin, le cas moyen a été envisagé avec la moyenne géométrique des perméabilités de Cardwell et Parson et la moyenne arithmétique des dispersivités extrêmes envisagées. Nous disposons ainsi de 7 jeux de paramètres (cf. Tableau 4.2) que nous avons utilisés pour simuler les conditions expérimentales de chaque expérience.

	C.P. min	C.P. moy	TT1W1	TT2W1	TT3W1	TT4W1	C.P. max
K _{eq} (cm/min)	6,6	10,8	15,6	13,5	15,0	14,0	17,4
A _L (cm)	23	40	60	50	30	40	60

 Tableau 4.2 : Paramètres équivalents simulés pour chaque pompage avec le logiciel Modflow.

Les résultats obtenus pour chaque expérience sont présentés ci-dessous :



Figure 4-18 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT1W1.



Figure 4-19 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT2W1.



Figure 4-20 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT3W1.



Figure 4-21 : Résultats des simulation réalisées avec Modflow – TT4W1.

4.3. Analyse des résultats

Avant de s'intéresser aux perméabilités et dispersivités équivalentes ajustées avec le modèle, nous allons étudier la sensibilité des paramètres fixés dans le modèle.

4.3.1. <u>Sensibilité des paramètres fixes du modèles</u>

La porosité a été mesurée pour chaque sable : elle est constante et vaut 0,38. Cette valeur est donc fixée dans nos simulations. Pour vérifier la faible sensibilité de ce paramètre, une expérience a été simulée avec une porosité valant 0,40 (cf. Figure 4-22).



Figure 4-22 : Evaluation de la sensibilité de la porosité - TT1W1.

De même, le rapport entre les dispersivités transversale et longitudinale est fixé égal à 0,1. Sa faible sensibilité est vérifiée en simulant pour chaque expérience le même jeu de paramètres avec une valeur deux fois plus grandes 0,2 et une deux fois plus petites 0,05 (cf. Figure 4-23).



Figure 4-23 : Evaluation de la sensibilité du rapport entre les dispersivités longitudinale et transversale.

4.3.2. <u>Sensibilité des paramètres ajustés</u>

Pour évaluer la sensibilité des paramètres ajustés, les perméabilités limites de Cardwell et Parsons, 6,6 et 17,4 cm/min, associées à deux dispersivités extrêmes, 23 et 60 cm, sont utilisées pour simuler chaque expérience (cf. Figure 4-24).



Figure 4-24 : Etude de la sensibilité de la perméabilité et la dispersivité pour les pompages.

Pour chaque expérience et chaque valeur de paramètre, nous disposons donc de deux séries de données. L'écart entre les concentrations obtenues est calculé dès que l'une des deux concentrations considérées est comprise entre 5 et 95 %. Un coefficient de sensibilité est calculé en prenant la moyenne de ces différences élevées au carré.

	Sensibilité de	la dispersivité	Sensibilité de la perméabilité			
	$K_{eq} = 6,6 \text{ cm/min}$ $K_{eq} = 17,4 \text{ cm/min}$		$A_L = 23 \mathrm{cm}$	$A_L = 60 \text{ cm}$		
TT1W1	91	56	1411	700		
TT2W1	63	105	1059	583		
TT3W1	242	254	2631	2891		
TT4W1	135	69	2821	1670		

Tableau 4.3 : Coefficients de sensibilité de la perméabilité et dispersivité pour les pompages.

D'après le Tableau 4.3, la perméabilité est un paramètre plus sensible que la dispersivité et cette sensibilité augmente avec la distance entre la source et le puits de pompage et quand la dispersivité diminue.

Il s'agit ensuite se savoir si les 4 jeux de paramètres ajustés sont significativement différents. Pour cela, nous avons calculé la somme des écarts relatifs au carré entre la concentration mesurée et la concentration simulée dès lors que la première est comprise entre 5 et 95 %.

K (cm/min) - A_L (cm)	15,6 - 60	13,5 - 50	15,0 - 30	14,0-40
TT1W1	0,1	1,7	3,6	2,7
TT2W1	2,8	0,0	1,0	0,3
TT3W1	15,1	1,6	0,1	0,5
TT4W1	3,9	1,9	0,4	0,7

 Tableau 4.4 : Sommes des écarts relatifs au carré entre les concentrations simulées et mesurées pour les pompages.

Les résultats consignés dans le Tableau 4.4 révèlent que le jeu (15,6 ; 60) ajusté pour TT1W1 est sensiblement différent des trois autres jeux qui donnent des résultats semblables. La zone caractérisée par l'expérience TT1W1 s'avère trop petite pour être représentative du milieu global. Cela est du à la petite distance entre la source et le puits ainsi qu'au faible débit de pompage.

L'ergodicité n'est pas respectée et les propriétés moyennes varient avec le volume de mesure. La largeur de la zone de capture du puits l_{zc} a donc beaucoup d'influence sur la valeur déterminée avec les concentrations mesurées à la sortie du puits. En considérant la vitesse uniforme à l'amont du milieu poreux, cette largeur est directement proportionnelle au débit de pompage :

$$l_{zc} = \frac{Q_P \, l_{mp}}{Q_t} \tag{IV.16}$$

avec l_{mp} la largeur du milieu poreux [L], Q_p le débit pompé [$L^3 \cdot T^{-1}$] et Q_t le débit total injecté dans le milieu [$L^3 \cdot T^{-1}$].

 l_{zc} vaut environ 29 cm pour TT1W1, 47 cm pour TT2W1, 49 cm pour TT3W1 et 27 cm pour TT4W1. Ainsi la plus grande zone caractérisée par la concentration à la sortie du puits est obtenue pour TT3W1 : la perméabilité équivalente vaut alors 15 cm/min, la dispersivité, 30 cm.

4.3.3. <u>Etude de la perméabilité équivalente</u>

Etude des valeurs ajustées avec le modèle

Les valeurs de perméabilités ajustées sont du même ordre de grandeur : l'incertitude relative est de 6,5 % avec une valeur moyenne de perméabilité égale à 14,5 cm/min.

Les valeurs extrêmes (13,5 et 15,6 cm/min) sont obtenues avec le pompage dans le puits W2B, i.e. avec une petite distance entre la source et le puits. En effet, ce dernier est situé à 260 cm de la section 1, soit 11 longueurs de corrélation. Avec le puits W3B, cette distance vaut 380 cm, soit 16 longueurs de corrélation, et les valeurs obtenues (14,0 et 15,0 cm/min) sont plus centrées.

En revanche, la relation entre la valeur de la perméabilité équivalente et le débit de pompage n'est pas évidente puisque dans un cas, la plus grande valeur de perméabilité est trouvée avec le fort débit (15,0 cm/min pour TT3W1), dans l'autre avec le faible (15,6 cm/min avec TT1W1).

Comparaison aux valeurs théoriques

Les quatre valeurs de perméabilité équivalente obtenues (13,5 ; 14,0 ; 15,0 et 15,6 cm/min) sont toutes supérieures aux valeurs théoriques (cf. Tableau 4.1) mais appartiennent à l'intervalle délimité par les bornes de Cardwell et Parsons.

La simulation de ces bornes et d'une valeur théorique $K_{C.P.}$ montre la sensibilité de la perméabilité équivalente et la trop grande incertitude des valeurs théoriques. La valeur de $K_{C.P.}$ constitue d'ailleurs pour les 4 expériences une meilleure borne inférieure que $K_{C.P.min.}$

4.3.4. <u>Etude de la macrodispersivité</u>

Etude des valeurs ajustées avec le modèle

Les valeurs de dispersivité ajustées varient plus que les perméabilités : l'incertitude relative est de 28,7 % pour une valeur moyenne de 45 cm.

Les valeurs les plus élevées (50 et 60 cm) sont obtenues pour le puits de pompage le plus proche de la source. Pour un même puits, la dispersion est plus élevée si le débit de pompage est plus faible. Ceci confirme les observations qualitatives faites au chapitre 3 (paragraphe 3.3.2).

Comparaison aux valeurs théoriques

Les valeurs de macrodispersivité obtenues pour les 4 expériences (de 30 à 60 cm) sont supérieures aux valeurs prédites par la théorie de Dagan (1989) pour un écoulement uniforme (23,8 cm).

Elles contredisent aussi les résultats de Indelman et Dagan (1999) qui trouvent une dispersivité théorique trois fois plus petite, soit environ 8 cm, pour un écoulement radial. Certes, il s'agit ici d'un puits de pompage alors que Indelman et Dagan étudient un puits d'injection. Mais surtout, les théories de Dagan (1989) et Indelman et Dagan (1999) ne tiennent pas compte des limites du domaine.

5. <u>Cas de l'injection – pompage</u>

Comme pour les pompages, les expériences en injection – pompage sont modélisées avec le logiciel MODFLOW. Un maillage est d'abord validé, puis les deux expériences sont simulées avec un jeu de paramètres ajustés et les paramètres trouvés pour les pompages.

5.1. <u>Présentation du modèle numérique</u>

Le maillage utilisé pour les pompages (140 x 25 mailles) apparaît ici être insuffisant. Cela est sans doute dû à une courbure plus importante des lignes de courant en injection – pompage. Un maillage plus fin de 280 x 50 mailles carrées de 2 cm de côté, avec une seule couche en nappe libre, est validé en comparant les résultats obtenus avec ce dernier aux résultats fournis par un maillage deux fois plus fin (560 x 100 mailles) pour un même jeu de paramètres. La Figure 4-25 illustre cette comparaison.



Figure 4-25 : Validation du maillage "280 x 50" pour un même jeu de paramètres - TT1W1.

La charge est imposée à l'aval selon les mesures réalisées : 90,3 cm pour TT1W2 et 87,1 cm pour TT2W2. De même, le débit est imposé dans les puits d'injection et de pompage et vaut 500 cm³/min. La charge à l'amont est calculée et comparée aux valeurs expérimentales.

La porosité et le rapport entre la dispersivité transversale et longitudinale sont fixés et valent respectivement 0,38 et 0,1. Comme pour les pompages, seules les concentrations comprises entre 5 et 95% seront utilisées pour l'ajustement de la perméabilité et la dispersivité.

5.2. <u>Résultats des simulations</u>

Les jeux de paramètres obtenus avec les pompages sont réutilisés et un nouveau jeu est ajusté pour chaque expérience.

	TT1W2	TT2W2	TT1W1	TT2W1	TT3W1	TT4W1
K _{eq} (cm/min)	15,6	15,6	15,6	13,5	15,0	14,0
A_{L} (cm)	23	20	60	50	30	40

Tableau 4.5 : Paramètres équivalents simulés pour chaque injection - pompage avec le logiciel Modflow.

Les résultats sont présentés dans la Figure 4-26 pour TT1W2, la Figure 4-27 pour TT2W2.



Figure 4-26 : Résultats des simulations réalisées avec Modflow – TT1W2.



Figure 4-27 : Résultats des simulations réalisées avec Modflow – TT2W2.

5.3. Analyse des résultats

5.3.1. Etude de la sensibilité des paramètres ajustées

Comme pour les pompages (cf. 4.3.2), nous avons simulé les deux expériences avec 4 jeux de paramètres composés des limites de Cardwell et Parsons pour les perméabilités et de deux valeurs extêmes, 23 et 60 cm, pour les dispersivités (cf. Figure 4-28).



Figure 4-28 : Etude de la sensibilité de la perméabilité et la dispersivité pour les injection – pompage.

	Sensibilité de	la dispersivité	Sensibilité de la perméabilité		
	$K_{eq} = 6,6 \text{ cm/min}$	6 cm/min $K_{eq} = 17,4$ cm/min		$A_L = 60 \text{ cm}$	
TT1W1	45	45	0,10	0,04	
TT2W1	37	37	0,01	0,01	

Le même coefficient de sensibilité est ensuite calculé (cf. Tableau 4.6).

Tableau 4.6 : Coefficients de sensibilité de la perméabilité et dispersivité pour les injection -pompage.

Il en résulte que la perméabilité n'est pas un paramètre sensible de nos simulations à la différence de la macrodispersivité. L'ajustement des paramètres est donc plus difficile dans le cas de l'injection – pompage et les mesures de hauteurs piézométriques sont utiles pour trouver une valeur de perméabilité équivalente.

Comparons ces coefficients avec ceux obtenus pour les pompages : la sensibilité de la dispersivité est quasiment la même alors que celle de la perméabilité est beaucoup plus faible dans le cas de l'injection – pompage.

Ce résultat peut-être justifié par un comportement de notre milieu proche de celui d'une nappe captive, les rabattements dans les puits étant petits devant la hauteur du milieu (environ 5%).

Or, pour une nappe captive, la solution analytique de la hauteur piézométrique dans un doublet d'injection – pompage est proportionnelle à l'inverse de la transmissivité, d'où une vitesse de pores indépendante de la perméabilité :

$$h_{ip}(x) = \frac{Q_{ip}}{2\pi T} f_{ip}(x) + H_0$$
 (IV.17)

$$\overrightarrow{U_{ip}}(x) = -K \overrightarrow{grad}(h_{ip}(x)) = \frac{-Q_{ip}}{2\pi e} \overrightarrow{grad}(f_{ip}(x))$$
(IV.18)

avec h_{ip} la charge hydraulique [L], Q_{ip} le débit d'injection et de pompage [L³·T⁻¹], T la transmissivité [L²·T⁻¹], f_{ip} une fonction des coordonnées trouvée avec la méthode des images (de Marsily, 1981 ; Carlier, 2002), H_0 la charge de référence [L].

Dans le cas des expériences en pompage, l'hydrodynamique est aussi influencée par le gradient de charge entre l'amont et l'aval du milieu. Une composante de la vitesse est donc directement proportionnelle à la perméabilité :

$$\vec{U} = \vec{U_p} + \vec{U_u} = \frac{-Q_p}{2\pi e} \overline{grad} \left(f_p(x) \right) + K \overline{grad} \left(h_u \right)$$
(IV.19)

avec Q_p le débit de pompage $[L^3 \cdot T^{-1}]$, e l'épaisseur du milieu [L], f_p une fonction des coordonnées pour le cas du pompage, K la perméabilité $[L \cdot T^{-1}]$ et h_u la charge hydraulique liée à l'écoulement uniforme [L].

Ainsi, la détermination d'une perméabilité équivalente à l'aide d'essais de traçage en injection – pompage semble compromise. Les ajustements réalisés pour TT1W2 et TT2W2 sont d'ailleurs moins concluants que ceux obtenus pour les pompages.

5.3.2. <u>Analyse des paramètres ajustés</u>

La perméabilité équivalente

La perméabilité étant un paramètre peu sensible de ces simulations, elle a été ajustée avec les mesures de hauteurs piézométriques à l'amont du milieu. Ce calage a été concluant pour TT1W2, impossible pour TT2W2.

Pour la deuxième expérience, les modifications de la perméabilité n'avaient pas d'effet sur la hauteur piézométrique à l'amont du milieu. La distance entre les puits est dans ce cas plus

petite que pour TT1W2 et le puits d'injection est aussi placé plus loin de l'amont du milieu. Le doublet a donc beaucoup moins d'influence sur le point de mesure de la hauteur piézométrique considéré que pour TT1W2.

La valeur obtenue pour la première expérience, 15,6 cm/min a été appliquée aux deux cas. Cette valeur est supérieure aux valeurs théoriques mais appartient à l'intervalle de Cardwell et Parsons.

La macrodispersivité

Les valeurs obtenues, 23 et 20 cm, sont proches et augmentent avec la distance entre les puits. Elles sont quasiment égales à la valeur proposée par Dagan (1989) pour l'écoulement uniforme (23,8 cm) et donc trois fois plus grande que la solution de Indelman et Dagan (1999) pour l'écoulement radial.

6. Effet des conditions aux limites sur les paramètres équivalents

Les paramètres équivalents déterminés pour le même milieu mais des conditions aux limites différentes sont regroupés dans le Tableau 4.7.

Expérience	TT1W0	TT1W1	TT2W1	TT3W1	TT4W1	TT1W2	TT2W2
K _{eq} (cm/min)	14,1 - 15,0	15,6	13,5	15,0	14,0	15,6	15,6
A_{L} (cm)	40 - 50	60	50	30	40	23	20

Tableau 4.7 : Paramètres équivalents déterminés pour chaque expérience.

Les perméabilités sont toutes du même ordre de grandeur. Il est vrai que, pour les pompages, l'ajustement est possible grâce au gradient de charge entre l'amont et l'aval, identique pour l'écoulement uniforme. Les valeurs déterminées en injection – pompage ne sont pas très représentatives étant donnée leur faible sensibilité. Cela peut expliquer les faibles différences entre les valeurs obtenues.

De même, les valeurs de dispersivité ajustées en écoulement uniforme et en pompage sont semblables. En revanche, la dispersivité est plus faible pour les injection – pompage. Elle est jusqu'à trois fois plus petite que celle obtenue pour TT1W1 comme le suggèrent Indelman et Dagan (1999). Surtout, la distance entre la source et le puits est plus petite en injection – pompage (240 et 120 cm, soit 10 et 21 longueurs de corrélations) qu'en pompage (285 et

405 cm, soit 12 et 18 longueurs de corrélation) ou en écoulement uniforme (520 cm, i.e. 23 longueurs de corrélation).

La comparaison des sommes des écarts relatifs au carrés entre la concentration mesurée et la concentration simulée indique que les jeux de paramètres ajustés pour les pompages ne sont pas applicables aux injection – pompage (cf. Tableau 4.8).

K (cm/min) - α_L (cm)	15,6 - 23	15,6 – 20	15,6 - 60	13,5 - 50	15,0 - 30	14,0 – 40
TT1W2	0,40	0,51	29,9	17,9	2,2	8,4
TT2W2	1,0	0,26	16,2	2,9	0,83	3,9

 Tableau 4.8 : Sommes des écarts relatifs au carré entre les concentrations simulées et mesurées pour les injection – pompage.

Les valeurs expérimentales sont aussi toujours supérieures aux valeurs théoriques. Une première explication pourrait être une sous-estimation de certaines perméabilités locales. En effet, ces dernières sont mesurées dans des conditions différentes de celles du MARCEAUS et la technique de remplissage a certainement un impact sur la conductivité du sable. Avec un ou deux sables plus perméables, le variogramme du milieu poreux et les valeurs théoriques seraient modifiés.

L'autre explication envisageable est l'influence des limites du MARCEAUS, non prises en compte dans les développements théoriques aux hypothèses simplificatrices. Les limites proches des phénomènes étudiés ne peuvent être négligées.

7. <u>Conclusion</u>

Les résultats obtenus dans ce chapitre prouvent qu'il est possible de déterminer des paramètres équivalents du milieu poreux à partir de données expérimentales. Une technique numérique adaptée à chaque type de conditions aux limites a été proposée.

Les valeurs expérimentales sont toujours supérieures aux valeurs théoriques. Mais ces dernières sont sans doute sous évaluées et ne tiennent pas compte des conditions aux limites particulières du milieu étudié. Pourtant, cela généralise les résultats de Silliman (1996) qui trouve des vitesses supérieures aux vitesses théoriques en ajustant une solution mono dimensionnelle à un écoulement tridimensionnel.

En ce qui concerne la perméabilité équivalente, il s'avère difficile de la déterminer avec un essai de traçage en injection - pompage et les méthodes utilisées. L'écoulement uniforme apparaît plus adapté, en particulier dans le cas d'une nappe captive. En revanche, les valeurs trouvées pour l'écoulement uniforme semblent utilisables en injection – pompage à proximité du puits.

La macrodispersivité est élevée et varie avec le type de conditions aux limites. Mais il est difficile de parler de valeur asymptotique compte tenu du petit nombre de longueurs de corrélation parcouru. En revanche, la distance de traçage paraît ici aussi être un facteur important dans la valeur de la dispersivité.

La sensibilité des paramètres ajustées révèlent que l'essai de traçage en écoulement uniforme est plus adapté à la détermination de la perméabilité, l'essai de traçage en écoulement radial à celle de la dispersivité. Néanmoins, la perméabilité pourrait aussi être déterminée en écoulement radial avec un essai de pompage et la méthode de Jacob.

Enfin, l'étude de l'évolution des paramètres en fonction des grandeurs caractéristiques telles que les distances et les débits mériterait de nouvelles expériences. L'étude de l'effet de l'homogénéisation des paramètres, réalisée à partir des concentrations en un point de référence, sur la concentration modélisée en d'autres points du système serait aussi intéressante grâce aux valeurs mesurées in situ.

Les résultats de ces mesures peuvent aussi être utilisés pour caler un modèle numérique tridimensionnel. C'est le but du chapitre suivant.

Chapitre 5 : Modélisation tridimensionnelle des expériences

1. Introduction

En complément de ce travail, nous avons essayé de reproduire numériquement les expériences réalisées avec le MARCEAUS. Les nombreuses données disponibles doivent permettre d'ajuster précisément les paramètres. En contrepartie, peu de valeurs sont fixées arbitrairement dans le modèle. Il est donc plus délicat de s'approcher de la solution recherchée.

De plus, le milieu poreux est complexe et les puits s'avèrent difficiles à modéliser. Le logiciel Modflow, utilisé précédemment, a d'ailleurs montré ses limites puisqu'il nous a été impossible d'ajuster les paramètres pour simuler correctement les expériences. Quelque soit la perméabilité, le traceur se déplaçait moins vite que dans la réalité.

Il s'agit maintenant de réaliser une étude préliminaire afin d'estimer les perméabilités locales et les phénomènes en jeu dans la simulation tridimensionnelle des expériences. Un jeu de paramètres est validé avec les données de l'expérience en écoulement uniforme. Ce jeu permet-il de reproduite les autres expériences, en pompage et en injection – pompage ?

Nous présenterons d'abord les résultats obtenus avec les éléments finis mixtes et discontinus. Puis, afin d'étudier l'influence du volume d'estimation de la concentration et réduire les temps de calcul, nous avons utilisé la méthode de la marche au hasard.

2. <u>Modélisation par éléments finis mixtes et discontinus</u>

2.1. Présentation du modèle TRACES

TRACES (Transport RéActif de Contaminant dans les Eaux Souterraines / Transport of Radio Active Elements in Subsurface) est un modèle numérique développé au laboratoire par Hoteit et Ackerer (2003).

Il emploie la méthode des éléments finis mixtes hybrides (Brezzi et Fortin, 1991) et la méthode des éléments finis discontinus (Cockburn *et al.*, 1990 ; Cockburn et Shu, 1998). La

première est utilisée pour résoudre l'hydrodynamique et la partie diffusive du transport, la deuxième, pour résoudre la partie advective du transport. Pour représenter le MARCEAUS, nous avons retenu un maillage cubique de 112 x 20 x 18 mailles de 5 cm de côté.

Seule l'expérience TT1W0, réalisée en écoulement uniforme a pu être simulée avec ce modèle. En effet, les autres expériences, comportant des puits d'injection ou de pompage, nécessitent un trop long temps de calcul : les vitesses à proximité d'un puits sont élevées et impliquent un pas de temps très petit pour respecter la condition CFL.

L'ajustement de la perméabilités des 4950 blocs de sable est impossible. Certes ces blocs ne sont constitués que de 6 types de sable mais comment être sûr que deux blocs du même sable ont exactement la même perméabilité ? La technique de remplissage et le tassement ont sans doute une influence sur la conductivité hydraulique. De plus, une maille du modèle peut contenir plusieurs sables à cause de la forme imparfaite des cubes.

Conscients de ces phénomènes aléatoires, nous avons ajusté une plage de perméabilités plutôt qu'une valeur unique pour chaque type de sable. La perméabilité affectée à une maille du modèle est tirée au sort, selon une répartition uniforme, dans la plage des valeurs de perméabilité du sable considéré.

2.2. <u>Résultats</u>

Pour ajuster les 6 plages de perméabilités, nous avons retenu 50 points de mesures sur les 350 disponibles. Le meilleur compromis est obtenu avec les paramètres présentés dans le Tableau 5.1. Les perméabilités locales obtenues sont du même ordre de grandeur que les perméabilités mesurées sauf celle du sable K20 pour lequel la perméabilité ajustée est environ 3 fois supérieure. En considérant les valeurs mesurées pour les autres sables et une valeur de 25 cm/min pour la perméabilité du sable K20, la moyenne géométrique des perméabilités locales vaut 13,82 cm/min, la variance de la logconducitivité est égale à 1,20.

Sable	K60	K40	K30	K20	K10	K150
Plage de perméabilité (cm/min)	0,7 1,2	3,5 4,2	6,6 7,0	20 30	60 65	400 450
Perméabilité mesurée (cm/min)	1,19	4,19	7,02	8,46	63,0	462,6

Tableau 5.1 : plages de perméabilité ajustées pour simuler TT1W0 avec TRACES.



Figure 5-1 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations simulées avec TRACES (lignes) – TT1W0.

Il a été impossible de trouver un jeu de valeurs permettant de superposer la totalité des concentrations simulées aux concentrations mesurées (cf. Figure 5-1). De plus, le débit obtenu, 1,6 l/min, est supérieur au débit mesuré, 1,4 l/min.

Une explication serait la différence entre les volumes de mesure de la concentration : pour l'expérience, il s'agit d'une sphère entourant la cellule de mesure et dont le rayon est estimé à 3,5 cm tandis qu'avec le modèle numérique, la concentration est calculée sur une maille, i.e. un cube de 5 cm de côté. Or les cellules de conductimétrie ne sont pas toujours au centre d'une maille, ni d'un bloc de sable, les concentrations simulées et mesurées ne représentent donc pas la même grandeur.

C'est pourquoi nous nous sommes intéressés aux mailles voisines pour les cellules 187 et 283 : pour chacune d'elle, nous avons tracé la concentration calculée dans les 8 mailles voisines de la même couche, la maille supérieure et la maille inférieure (cf. Figure 5-1). Mais la courbe expérimentale reste différente de l'ensemble de ces résultats. Le volume de mesure ne peut pas être reconstitué avec ces mailles cubiques.

La définition du volume sur lequel est calculée la concentration apparaît être importante dans l'ajustement des paramètres. Les forts gradients de concentration créés par les hétérogénéités justifient ceci. Les résultats de simulation permettent de représenter ces phénomènes (cf. Figure 5-2 et Figure 5-3).



Figure 5-2 : Evolution de la concentration simulée à x = 0, 50, 100, 150, 200, 250, 300, 350, 400 cm et t = 500 min - TT1W0.



Figure 5-3 : Concentrations et champ de vitesses simulés dans 6 plans horizontaux et verticaux à t = 500min- TT1W0.

Les champs de vitesse représentées dans la Figure 5-3 confirment le caractère tridimensionnel des ligne de courant déjà souligné par Silliman (1996). L'allure des concentrations illustre l'existence d'écoulements préférentiels dans le domaine.

Pour simuler les autres expériences, nous avons utilisé la méthode de la marche au hasard. Elle est beaucoup moins coûteuse en temps de calcul, en particulier pour les expériences comportant un puits d'injection ou de pompage. De plus, elle va nous permettre d'approfondir l'étude de l'influence du volume de calcul sur la détermination de la concentration.

3. Modélisation par marche au hasard

3.1. Introduction

La marche au hasard (cf. Annexe B) permet de suivre de manière « naturelle » le déplacement d'un panache de polluant dans un milieu poreux : seules les particules intéressantes sont observées. Les calculs s'appliquent uniquement à l'espace touché par le déplacement et le reste du domaine, avec ses caractéristiques, peut être stocké. Cette approche est intéressante pour l'étude du déplacement de particules dans un milieu complexe. En comparaison, les méthodes eulériennes, telles que les éléments finis, nécessitent un calcul sur tout le domaine pour chaque pas de temps. De plus, la marche au hasard n'entraîne pas les problèmes de diffusion numérique rencontrés avec les éléments finis lorsque l'advection domine.

En revanche, le calcul des déplacements nécessite la génération de nombres aléatoires qui coûte beaucoup de temps de calcul. Différents générateur de nombres aléatoires existent et le temps nécessaire peut varier d'un rapport de 40 en fonction du générateur utilisé (Press *et al.*, 1992).

Dans notre étude, cette méthode présente deux avantages :

- Le temps de calcul est beaucoup plus petit, en particulier lorsque l'expérience simulée comporte un puits.
- Le volume sur lequel est calculée la concentration en un point peut être une sphère et ses dimensions sont définies par l'utilisateur.

Nous nous intéresserons d'abord aux résultats de simulation de l'expérience TT1W0. Ensuite la modélisation des expériences en pompage et injection – pompage avec le même jeu de paramètres sera présentée

3.2. <u>Simulation de l'expérience TT1W0</u>

L'expérience TT1W0 a été simulée dans les mêmes conditions qu'avec le modèle TRACES. Seule la diffusion locale, négligée précédemment, a été augmentée suite aux premiers essais : les courbes de concentration comportaient des paliers trop marqués. Nous avons retenu une valeur de 0,02 cm²/min, ce qui correspond à une dispersivité d'environ 1 cm. 50 000 particules sont injectées à l'amont du milieu.

La concentration est calculée pour toutes les cellules, en considérant d'abord comme volume de mesure une sphère de rayon 3,5 cm centrée sur la cellule de conductimétrie. Les courbes obtenues pour les 50 cellules étudiées auparavant sont présentées dans la Figure 5-4.

Les résultats sont globalement plus proches des valeurs expérimentales. Les courbes sont moins lisses qu'avec les éléments finis mais le nombre de particules est peu élevé. En augmentant cette quantité, le poids de chaque particule sera plus faible, les particules seront mieux réparties dans le domaine et les courbes obtenues seront plus lisses.

Le traceur sort plus tôt et des paliers semblables à ceux observés dans l'expérience (cellule 56) apparaissent dans la simulation (cellule71). Avec ce volume de mesure, plus petit et parfois constitué de différents sables, les concentrations sont moins moyennées et reflètent davantage les phénomènes observés dans le milieu.



Figure 5-4 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3.5$ cm – TT1W0.

La même simulation a été reproduite en modifiant le rayon de la sphère pour le calcul de la concentration : il vaut ici 2,5 cm. Les courbes obtenues sont légèrement différentes (cf. Figure 5-5) : par exemple, le résultat est meilleur pour la cellule 259, moins bon pour la cellule 111. Certains paliers sont plus marqués (cellule 216). Le traceur sort globalement plus tard qu'avec un rayon de 3,5 cm.



Figure 5-5 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 2,5$ cm – TT1W0.

D'après ces observations, il s'avère que le volume sur lequel est calculée la concentration a une influence sur sa valeur, donc sur l'ajustement. Il est difficile de définir précisément le volume de mesure d'une cellule de conductimétrie car il doit varier avec son environnement.

3.3. Influence des puits sur les résultats de simulation

Les expériences de pompage et d'injection – pompage ont été simulé avec les mêmes paramètres que TT1W0. Le but est de savoir si ce jeu est valable quelque soient les conditions aux limites.

Pour comparaison, quelques résultats, obtenus pour l'expérience TT4W1, sont présentés dans la Figure 5-6. Les concentrations simulées sont globalement moins en adéquation avec les valeurs expérimentales. En particulier, le traceur arrive trop tard dans le puits de pompage, malgré un débit aval surestimé : 1,68 l/min au lieu de 1,1 l/min. Les paliers observés sont plus marqués que pour TT1W0.



Figure 5-6 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3,5$ cm – TT4W1.

Les résultats de la simulation de TT1W2 (cf. Figure 5-7) confirment les observations faites pour le pompage : le traceur arrive trop tard aux points de mesure



Figure 5-7 : Comparaison des concentrations mesurées (points) aux concentrations simulées avec la marche au hasard (lignes), $\phi = 3.5$ cm – TT1W2.

Cette arrivée tardive du traceur aux points de mesure, malgré un débit plus élevé dans le cas du pompage, semble indiquer que les lignes de courant sont plus longues dans la

simulation que dans la réalité. La perméabilité verticale est peut-être inférieure à la perméabilité horizontale : cela impliquerait des lignes de courant plus rectilignes.

4. <u>Conclusion</u>

Cette première approche de la modélisation numérique des expériences réalisées dans MARCEAUS nous apporte quelques indications pour la suite. D'abord, les éléments finis ne sont pas adaptés à ce genre de simulation, en particulier pour les pompages et injection – pompage. De plus, le calcul de la concentration avec TRACES ne correspond pas à la mesure effectuée.

En effet, la mesure est réalisée sur un volume indépendant des blocs de sables, approximativement une sphère centrée sur la cellule de conductimétrie. Celle-ci est plus petite qu'une maille du modèle numérique, ce qui pourrait être résolu en raffinant le maillage.

Mais la sphère peut aussi, selon les cellules, faire partie de plusieurs blocs de sables différents. Le raffinement nécessaire pour caractériser le volume de mesure est alors trop important.

Enfin, le rayon de la sphère doit varier avec l'environnement et il paraît impossible de le caractériser pour chaque cellule. Pourtant, seules des concentrations calculées sur un volume semblable permettront de valider correctement le modèle.

Par ailleurs, la dispersion locale semble être non négligeable malgré l'hétérogénéité du domaine. Les simulations réalisées avec la marche au hasard en ne tenant compte que de la diffusion moléculaire sont peu concluantes : la concentration aux points de mesure est discontinue. Il est aussi possible que le nombre de particules injectées soit trop petit. Il faudrait poursuivre l'étude en évaluant la sensibilité de la dispersion locale avec un grand nombre de particules.

De même, le rapport entre la perméabilité verticale et horizontale, égal à 1 dans toutes nos simulations, pourrait être un paramètre important. Quelque soit l'expérience, l'ajustement des paramètres a conduit à des perméabilités locales, donc des débits, plus élevés que les valeurs mesurées et le traceur arrive encore trop tard pour les pompages et injection – pompage. Les lignes de courant doivent donc être plus longues dans la simulation que dans la

réalité. Une perméabilité verticale plus faible entraînerait des lignes de courant plus rectilignes donc un transport plus rapide du traceur.

Les résultats obtenus dans cette étude préliminaire nous encouragent à continuer d'essayer de reproduire numériquement ces expériences. Les paramètres actuels, ajustés pour un type d'écoulement, ne paraissent pas valables pour d'autres conditions aux limites. Une modélisation plus fine, tenant compte des deux paramètres énoncés précédemment, devraient nous permettre de mieux comprendre les différences d'une expérience à l'autre.

Conclusions et Perspectives

La définition des propriétés du milieu poreux est problématique. Le volume élémentaire représentatif, pour lequel sont définies les valeurs locales des paramètres, est arbitraire. Le passage à une échelle supérieure, via les théories du changement d'échelles, nécessite des hypothèses fortes d'homogénéité et d'uniformité du milieu et des écoulements ainsi qu'un grand nombre de mesures locales qui sont rarement disponibles. Pourtant ce changement d'échelle est utile pour modéliser les grands domaines avec des maillages raisonnables.

La condition ergodique nécessaire à l'obtention de paramètres effectifs et de valeurs asymptotiques n'est pas vérifiée à proximité de conditions aux limites telles qu'un puits d'injection ou de pompage voire une source de pollution. C'est pourquoi nous avons proposé un outil expérimental permettant l'étude de l'hydrodynamique et du transport non loin de ces conditions.

Il était ici question de caractériser le milieu poreux en obtenant directement les paramètres équivalents de l'hydrodynamique et du transport à partir de résultats expérimentaux. Les essais de traçage présentés dans ce mémoire fournissent les données escomptées.

Le premier travail a été la mise au point du MARCEAUS : un milieu poreux de grandes dimensions caractérisé par ses propriétés statistiques, un système d'alimentation en eau capable de fournir un régime permanent d'écoulement uniforme ou radial et un dispositif de mesure et d'acquisition de la concentration et de la piézométrie. Un long développement a conduit au modèle actuel. L'ensemble fournit aujourd'hui des données diversifiées et cohérentes. Les résultats expérimentaux obtenus contribuent à la création d'une base de données utile pour la compréhension des phénomènes, la validation de développements théoriques et de modèles numériques.

Les premiers résultats soulignent l'importance de l'approche expérimentale et des méthodes de mesure retenues. La taille de la zone de capture d'un puits de pompage, la

distance moyenne parcourue par le traceur ainsi que le volume de mesure de la concentration ont une influence directe sur les paramètres déterminés et ce qu'ils représentent.

La détermination des paramètres équivalents nécessitent l'utilisation d'un outil numérique ou analytique adapté aux essais de traçage réalisés. Pour chaque type de conditions aux limites, nous avons proposé un modèle adéquat. Les paramètres obtenus sont cohérents et amènent les résultats suivants :

- L'essai de traçage en écoulement uniforme paraît plus adapté à la détermination de la perméabilité équivalente, l'injection pompage à celle de la dispersivité.
- La valeur de perméabilité équivalente obtenue dans le premier cas semble valable dans le deuxième.
- Dans les conditions expérimentales étudiées, la perméabilité équivalente est du même ordre de grandeur quelque soit le type d'écoulement. Les différences observées sont sans doute dues à l'étude de zones différentes dans des conditions non ergodiques.
- En revanche, la dispersivité est inférieure en injection pompage conformément aux résultats de Indelman et Dagan (1999). La plus petite distance de traçage pour ce type d'expérience pourrait aussi être une explication.
- Les valeurs de macrodispersivité et de perméabilité équivalente obtenues sont supérieures aux valeurs théoriques. Mais les développements utilisés ne tiennent pas compte des limites finies du domaine. Cela rappelle aussi les résultats de Silliman (1996) et justifie a posteriori le choix d'un modèle physique à trois dimensions.

Enfin, la simulation tridimensionnelle des expériences révèle que le caractère tridimensionnel des écoulements dans le MARCEAUS semble être surestimé par une modélisation avec une perméabilité isotrope. L'écoulement longitudinale doit être prépondérant. D'ailleurs l'ajustement du modèle numérique s'avère complexe et soulève d'autres questions telles que l'influence de la dispersion locale ou celle du mélange possible des sables à l'interface entre deux blocs.

Au vu de la qualité des données déjà obtenues, nous prévoyons de réaliser de nouvelles expériences en faisant varier les débits d'injection, de pompage, le gradient de charge, la distance de traçage, la source de traceur ou la position des puits. Nous pourrons ainsi caractériser l'effet de chaque grandeur sur les paramètres déterminés.

Le milieu homogène équivalent reproduit le même signal de sortie que le milieu réel. Qu'en est-il pour les valeurs à l'intérieur du domaine ? L'étude pourrait être approfondie en comparant les valeurs de concentration et de charge mesurées en d'autres points que celui utilisé pour l'ajustement avec les valeurs calculées en considérant un milieu homogène ayant les propriétés équivalentes.

Enfin, la modélisation fine des expériences et l'ajustement des paramètres locaux est une autre perspective de ce travail.
Références bibliographiques

Ababou, R., 1995.

Random porous media flow on large 3-d grids: numerics, performance and application to homogenization. In: Wheeler, M.F. (Editor), Environmental studies: mathematical, computational and statistical analysis. *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*. Springer-verlag, New-York, p. 1-25.

Ackerer, P., 1985.

Propagation d'un fluide en aquifère poreux saturé en eau. Prise en compte et localisation des hétérogénéités par des outils théoriques et expérimentaux. *Thèse de Docteur-Ingénieur*, Institut de Mécanique des Fluides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 102 p.

Adler, P.M., 1996.

Transports in fractal porous media. *Journal of Hydrology*, Vol. 187 (1-2), p. 195-213.

Bard, Y., 1974.

Nonlinear parameter estimation. Academic Press, New York.

Barth, G.R., Illangasekare, T.H., Hill, M.C., et Rajaram, H., 2001. A nex tracer-density criterion for heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 37 (1), p. 21-31.

Bear, J., 1972.

Dynamics of fluids in porous media. American Elsevier, New York, 764 p.

Berkowitz, B., Scher, H., et Silliman, S.E., 2000.

Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 36 (1), p. 149-158.

Blanc, G., 1967.

Contribution à l'étude des déplacements miscibles : Dispersion transversale. *Thèse de doctorat*, Faculté des sciences, Toulouse.

Brezzi, F. et Fortin, M., 1991.

Mixed and hybrid finite element methods. *Springer series in computational mathematics*, 15, Springer-Verlag, New-York, 350 p.

Cardwell, W.T. et Parsons, R.L., 1945.

Average permeabilities of heterogeneous oil sands. *Transactions American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, Vol. 169, p. 34-42.

Carlier, J.P., 2002.

Modélisation du transfert de masse en milieu poreux par approche stochastique. *Thèse de Doctorat*, Institut de Mécanique des Fluides et des Solides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 188 p.

Carlier, J.P. et Ackerer, P., 2003.

Solution analytique pour le transfert de masse entre puits en milieu poreux heterogene: Analytical solution for mass transfer between wells in heterogeneous porous media. *Comptes Rendus Mecanique*, Vol. 331 (10), p. 693-698.

Carrera, J. et Neuman, S.P., 1986.

Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 1. Maximum likelihood incorporating prior information. *Water Resources Research*, Vol. 22 (2), p. 199-210.

Chao, H.-C., Rajaram, H., et Illangasekare, T., 2000.

Intermediate-scale experiments and numerical simulations of transport under radial flow in a two-dimensional heterogeneous porous medium. *Water Resources Research*, Vol. 36 (10), p. 2869-2884.

Cherblanc, F., 1999.

Etude du transport miscible en milieux poreux hétérogènes : prise en compte du non-équilibre. *Thèse de Doctorat*, Université de Bordeaux I, Bordeaux, France, 144 p.

Chin, D.A., 1997.

An assessment of first-order stochastic dispersion theories in porous media. *Journal of Hydrology*, Vol. 199 (1-2), p. 53-73.

Cockburn, B., Hou, S., et Shu, C.-W., 1990.

The Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws 4: the multidimensional case. *Mathematics of Computation*, Vol. 54 (190), p. 545-581.

Cockburn, B. et Shu, C.-W., 1998.

The Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws 5: Multidimensional systems. *Journal of Computational Physics*, Vol. 141, p. 199-224.

Conwell, P.M., Silliman, S.E., et Zheng, L., 1997.

Design of a piezometer network for the estimation of the sample variogram of the hydraulic gradient: the role of the instrument. *Water Resources Research*, Vol. 33 (11), p. 2489-2494.

Cushman, J.H., Bennethum, L.S., et Hu, B.X., 2002. A primer on upscaling tools for porous media. *Advances in Water Resources*, Vol. 25 (8-12), p. 1043-1067. Dagan, G., 1986.

Statistical theory of groundwater flow and transpot: pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale. *Water Resources Research*, Vol. 22 (9), p. 120S-134S.

Dagan, G., 1989.

Flow and transport in porous formations. Springer-Verlag, Berlin, 465 p.

Dagan, G. et Indelman, P., 1999.

Reactive solute transport in flow between a recharching and a pumping well in a heterogeneous aquifer. *Water Resources Research*, Vol. 35 (12), p. 3639-3647.

Danquigny, C., 2000.

Etude expérimentale du transfert de masse en écoulement radial. *D.E.A P.A.E.3.S. et Ingénieur E.N.G.E.E.S.*, Institut de Mécanique des Fluides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 79 p.

de Marsily, G., 1981.

Hydrogéologie quantitative. Masson, Paris, 215 p.

Delay, F., Porel, G., et de Marsily, G., 1997.

Predicting solute transport in heterogeneous media from results obtained in homogeneous ones: an experimental approach. *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 25 (1-2), p. 63-84.

Desbarats, A.J., 1992.

Spatial averaging of transmissivity in heterogeneous fields with flow toward a well. *Water Resources Research*, Vol. 28 (3), p. 757-767.

Desbarats, A.J., 1993.

Geostatistical analysis of interwell transmissivity in heterogeneous aquifers. *Water Resources Research*, Vol. 29 (4), p. 1239-1246.

Fiori, A., 2000.

The relative dispersion and mixing of passive solutes in transport in geologic media. *Transport in Porous Media*, Vol. 42 (1-2), p. 69-83.

Fried, J.J. et Combarnous, M.A., 1971.

Dispersion in porous media. In: Chow, V.T. (Editor), Advances in hydroscience, p. 169-282.

Gautier, Y. et Noetinger, B., 1997.

Preferential Flow-Paths Detection for Heterogeneous Reservoirs Using a New Renormalization Technique. *Transport in Porous Media*, Vol. 26 (1), p. 1-23.

Gehlar, L.W. et Axness, C.L., 1983.

Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, Vol. 19 (1), p. 161-180.

Genereux, D. et Guardiario, J.Jr., 2001.

A borehole flowmeter investigation of small-scale hydraulic conductivity variation in the Biscayne aquifer, Florida. *Water Resources Research*, Vol. 37 (5), p. 1511-1517.

 Gutierrez, M.G., Guimera, J., Yllera de Llano, A., Benitez, A.H., Humm, J., et Saltink, M., 1997.
 Tracer test at El Berrocal site. *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 26 (1-4), p. 179-188.

Gutjahr, A.L., Gelhar, L.W., Bakr, A.A., et McMillan, J.R., 1978. Stochastic analysis of spatial vriability in subsurface flow. 2:Evaluation and application. *Water Resources Research*, Vol. 14, p. 953-959.

Harleman, D.R. et Rumer, R.R., 1963.

Longitudinal and lateral dispersion in an isotropic porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 16, p. 385-394.

Hoteit, H. et Ackerer, P. 2003. TRACE'S User's Guide. Université Louis Pasteur, Strasbourg, France. *IMFS Report*.

Huang, K., Toride, N., et Van Genuchten, M.Th., 1995.

Experimental investigation of solute transport in large, homogeneous and heterogeneous, saturated columns. *Transport in Porous Media*, Vol. 18, p. 283-302.

Indelman, P. et Dagan, G., 1993a.

Upscaling of permeability of anisotropic heterogeneous formation, 1, general frame work. *Water Resources Research*, Vol. 29 (4), p. 917-923.

Indelman, P. et Dagan, G., 1993b.

Upscaling of permeability of anisotropic heterogeneous formation, 2, general structure and small perturbation analysis. *Water Resources Research*, Vol. 29 (4), p. 925-933.

Indelman, P. et Dagan, G., 1999.

Solute transport in divergent radial flow through heterogeneous porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 384, p. 159-182.

Indelman, P., Fiori, A., et Dagan, G., 1996.

Steady flow toward wells in heterogeneous formations: Mean head and equivalent conductivity. *Water Resources Research*, Vol. 32 (7), p. 1975-1983.

Irwin, N.C., Botz, M.M., et Greenkorn, R.A., 1996.

Experimental investigation of characteristic length scale in periodic heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, Vol. 25, p. 235-246.

Jellali, S., Muntzer, P., Razakarisoa, O., et Schäfer, G., 2001. Large-scale experiment on transport of trichloroethylene in a controlled aquifer. *Transport in Porous Media*, Vol. 44, p. 145-163.

Käss, W., 1998.

Tracer technique in geohydrology.

Khan, A.U.-H. et Jury, W.A., 1990.

A laboratory study of the dispersion scale effect in column outflow experiments. *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 5 (2), p. 119-131.

Kitadinis, P.K., 1990.

Effective hydraulic conductivity for gradually varying flow. *Water Resources Research*, Vol. 26 (6), p. 1197-1208.

Klotz, D., Seiler, K.-P., Moser, H., et Neumaier, F., 1980.

Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments. *Journal of Hydrology*, Vol. 45 (3-4), p. 169-184.

Knopman, D.S. et Voss, C.I., 1988.

Further comments on sensitivities, prameter estimation and sampling design in one-dimensional analysis of soulte transport in porous media. *Water Resources Research*, Vol. 24, p. 225-238.

Knopman, D.S. et Voss, C.I., 1987.

Behavior of sensitivities in the one-dimensional advection-dispersion equation: implications for parameter estimation and sampling design. *Water Resources Research*, Vol. 23 (2), p. 253-272.

Lintéa, M.D., 2001.

Transport de polluant à l'échelle de l'hétérogénéité des milieux poreux aléatoires. Approche stochastique et numérique. *Thèse de Doctorat*, Institut de Mécanique des Fluides et des Solides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 287 p.

Mandelbrot, B.B., 1983.

The fractal geometry of nature. Freeman, W. H., New-York, 468 p.

Marquardt, D.W., 1963.

An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. *Journal on Applied Mathematics*, Vol. 11 (2), p. 431-441.

Matheron, G., 1967.

Eléments pour une théorie des milieux poreux. Masson, Paris.

Matheron, G. et de Marsily, G., 1980.

Is transport in porous media always diffusive? A counterexample. *Water Resources Research*, Vol. 16 (5), p. 901-917.

Maugis, P., Mouche, E., et Dewiere, L., 2002.

Analysis of displacement variances in stochastic nonuniform flows by means of a first order analytical model and comparison with Monte Carlo simulations. *Transport in Porous Media*, Vol. 47, p. 1-27.

Molz, F.J., Güven, O., et Melville, J.G., 1983.

An examination of scale-dependent dispersion coefficients. *Groundwater*, Vol. 21 (6), p. 715-725.

Naff, R.L., 1991.

Radial flow in heterogeneous porous media: an analysis od specific discharge. *Water Resources Research*, Vol. 27 (3), p. 307-316.

Nelson, N.T., Hu, Q., et Brusseau, M.L., 2003.

Characterizing the contribution of diffusive mass transfer to solute transport in sedimentary aquifer systems at laboratory and field scales. *Journal of Hydrology*, Vol. 276 (1-4), p. 275-286.

Neuman, S.P., 1990.

Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. *Water Resources Research*, Vol. 26, p. 1749-1758.

Neuman, S.P. et Orr, S., 1993.

Prediction of steady state flow in nonuniform geologic media by conditional moments: exact nonlocal formalism, effective conductivities, and weak approximation. *Water Resources Research*, Vol. 29 (2), p. 341-364.

Nguyen, V., Dagan, G., et Springer E.P., 1990.

Analysis of caisson transport experiment by travel time approach. In: Roth, K., Jury,W.A., Flüher,H., and Parker,J.C. (Editors), Field-Scale Water and Solute Flux in Soils. Birkhäuser Verlag, Basel, p. 79-93.

Noetinger, B., 1994.

The effective permeability of a heterogeneous porous medium. *Transport in Porous Media*, Vol. 15, p. 99-127.

Novakowski, S.P., 1992.

An evalution of boundary conditions for one-dimensional solute transport, 1, Mathematical development. *Water Resources Research*, Vol. 28 (9), p. 2399-2410.

Novakowski, S.P., 1992.

An evalution of boundary conditions for one-dimensional solute transport, 2, Column experiments. *Water Resources Research*, Vol. 28 (9), p. 2411-2423.

Ogata, A. et Banks, R.B. 1961.

A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. U.S.Geol.Survey, 411-A.

Oostrom, M., Hayworth, J.S., Dane, J.H., et Güven, O., 1992.

Behavior of dense aqueous phase leachate plumes in homogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 28 (8), p. 2123-2134.

Osnes, H., 1995.

Stochastic analysis of head spatial variability in bounded rectangular heterogeneous aquifers. *Water Resources Research*, Vol. 31, p. 2981-2990.

Oswald, S.E., Scheidegger, M.B., et Kinzelbach, W.K.H., 2002.

Time-dependent measurement of strongly density-dependent flow in a porous medium via nuclear magnetic resonance imaging. *Transport in Porous Media*, Vol. 47 (2), p. 169-193.

Paleologos, E.K., Neuman, S.P., et Tartakovsky, D., 1996.

Effective hydraulic conductivity of bounded, strongly heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 32 (5), p. 1333-1341.

Pawula, R.F., 1967.

Approximation of the linear Boltzmann equation by the Fokker-Planck equation. *Physical Review*, Vol. 162 (1), p. 186-188.

Pfannkuch, H.O., 1963.

Contribution à l'étude des déplacements miscibles dans un milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, Vol. 18, p. 215-270.

Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., et Flannery, B.P., 1992. Numerical recipes in Fortran, The art of scientific computing. Cambridge University Press, New-York.

Ptak, T. et Schmid, G., 1996.

Dual-tracer transport experiments in a physically and chemically heterogeneous porous aquifer: effective transport parameters and spatial variability. *Journal of Hydrology*, Vol. 183 (1-2), p. 117-138.

Ptak, T. et Teutsch, G. 1994.

A comparison of investigation methods for the prediction of flow and transport in highly heterogeneous formations. *International symposium on transport and reactive processes in aquifers*, 11/4/1994, p. 157-160.

Rashidi, M., Tompson, A.F.B., Peurrung, L., et Kulp, T.J., 1996.

Experimental analysis of pore-scale flow and transport in porous media. *Advances in Water Resources*, Vol. 19 (3), p. 163-180.

Refsgaard, A., 1986.

Laboratory experiments on solute transport in non homogeneous porous media. *Nordic Hydrology*, Vol. 17, p. 305-314.

Renard, P., 1996.

Modélisation des écoulements en milieux poreux hétérogènes. Calcul des perméabilités équivalentes. *Thèse de Doctorat*, Ecole des Mines, Paris, France, 250 p.

Renard, P. et de Marsily, G., 1997.

Calculating equivalent permeability: a review. *Advances in Water Resources*, Vol. 20 (5-6), p. 253-278.

Renard, P., Genty, A., et Stauffer, F., 2001.

Laboratory determination of the full permeability tensor. *Jopurnal of Geophysical Research*, Vol. 106 (B11), 26.443-26.452 p.

Renard, P. et Le Loch, G., 1996.

Une nouvelle technique de calcul de la perméabilité équivalente des milieux poreux : la renormalisation simplifiée. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences - Series IIA - Earth and Planetary Science*, Vol. 323, p. 859-864.

Renard, P., Le Loch, G., Ledoux, E., de Marsily, G., et Mackay, R., 2000a.
 A fast algorithm for the estimation of the equivalent hydraulic conductivity of heterogeneous media. *Water Resources Research*, Vol. 36 (12), p. 3567-3580.

Renard, P., Ledoux, Emmanuel, et Ackerer, Philippe. 2000b. Scale up of hydraulic conductivities: comparison of laboratory experiments and numerical analyses. XIII international conference on computational methods in water resources, 25/6/2000b, p. 799-804.

Richards, L.A., 1954.

Determination of the properties of saline and alkali soils. In: Richards, L.A. (Editor), Diagnosis and improvment of saline and alkali soils. *Agriculture Handbook*, p. 7-33.

Risken, H., 1989.

The Fokker-Planck equation. Methods of solution and applications. Springer-Verlag, Berlin, 472 p.

Riva, M., Guadagnini, A., Neuman, S.P., et Franzetti, S., 2001. Radial flow in a bounded randomly heterogeneous aquifer. *Transport in Porous Media*, Vol. 45, p. 139-193. Rubin, Y., 1990.

Stochastic modeling of macrodispersion in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 26 (1), p. 133-141.

Rubin, Y. et Dagan, G., 1988.

Stochastic analysis of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers ; 1. Constant head boundary. *Water Resources Research*, Vol. 24 (10), p. 1689-1697.

Rubin, Y. et Dagan, G., 1989.

Stochastic analysis of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers ; 1. Impervious boundary. *Water Resources Research*, Vol. 25 (4), p. 707-712.

Ruch, M., 1992.

Transfert d'un polluant non réactif en milieu poreux saturé : étude sur modèles physiques tridimensionnels et simulations. *Thèse de Doctorat*, Institut de Mécanique des Fluides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 162 p.

Sabatini, D.A. et Al Austin, T., 1991.

Characteristics of rhodamine WT and fluorescein as adsorbing ground-water tracers. *Groundwater*, Vol. 29 (3), p. 341-349.

Saffman, P.G., 1959.

A theory of dispersion in a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 6, p. 321-349.

Sanchez-Vila, X., 1997.

Radially convergent flow in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 33 (7), p. 1633-1641.

Sauty, J.-P., 1977.

Contribution à l'identification de paramètres de dispersion dans les aquifères par interprétation des expériences de traçage. *Thèse de Docteur-Ingénieur*, Institut National polytechnique de Grenoble, Grenoble, france, 157 p.

Schäfer, G., 1991.

Einfluss von schichtenstrukturen und lokalen einlagerungen auf die längdispersion in porengrundwasserleitern. *Ph.D. Thesis*, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.

Scheidegger, A.E., 1961.

General theory of dispersion in porous media. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 66 (10), p. 3273-3278.

Schincariol, R.A. et Schwartz, F.W., 1990.

An experimental investigation of varaiable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media. *Water Resources Research*, Vol. 26, p. 2317-2329.

Semra, K., 1994.

Modélisation tridimensionnelle du transport d'un traceur en milieu poreux saturé hétérogène. Evaluation des théories stochastiques. *Thèse de doctorat*, Institut de Mécanique des Fluides, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 125 p.

Sharp, R.R., Cunningham, A.B., Komlos, J., et Billmayer, J., 1999.

Observation of thick biofilm accumulation and structure in porous media and corresponding hydrodynamic and mass transfert effects. *Water Science and Technology*, Vol. 39 (7), p. 195-201.

Silliman, S.E., 2001.

Laboratory study of chemical transport to wells within heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 37 (7), p. 1883-1892.

Silliman, S.E. et Caswell, S., 1998.

Observations of measured hydraulic conductivity in two artificial, confined aquifers with boundaries. *Water Resources Research*, Vol. 34 (9), p. 2203-2213.

Silliman, S.E., Konikow, L.F., et Voss, C.I., 1987.

Laboratory investigation of longitudinal dispersion in anisotropic porous media. *Water Resources Research*, Vol. 23 (11), p. 2145-2151.

Silliman, S.E. et Simpson, E.S., 1987.

Laboratory evidence of the scale effect dispersion of solutes in porous media. *Water Resources Research*, Vol. 23 (8), p. 1667-1673.

Silliman, S.E. et Zheng, L., 2001.

Comparison of observations from a laboratory model with stochastic theory: initial analysis of hydraulic and tracer experiments. *Transport in Porous Media*, Vol. 42, p. 85-107.

Silliman, S.E., Zheng, L., et Conwell, P., 1998.

The use of laboratory experiments for the study of conservative solute transport in heterogeneous porous media. *Hydrogeology Journal*, Vol. 6, p. 166-177.

Silliman, S.E., 1996.

The importance of the third dimension on transport through saturated porous media: case study based on transport of particles. *Journal of Hydrology*, Vol. 179 (1-4), p. 181-195.

Smart, P.L. et Laidlaw, I.M.S., 1977.

An evaluation of some fluorescent dyes for water tracing. *Water Resources Research*, Vol. 13 (1), p. 15-33.

Spitz, K., 1985.

Dispersion in porösen medien : Einfluss von inhomogenitäten und dichteunterschieden. *Ph.D. Thesis*, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.

Sternberg, S.P.K., Cushman, J.H., et Greenkorn, R.A., 1996.

Laboratory observation of non-local dispersion. *Transport in Porous Media*, Vol. 23, p. 135-151.

Sternberg, S.P.K. et Greenkorn, R.A., 1994.

An experimental investigation of dispersion in layered porous media. *Transport in Porous Media*, Vol. 15, p. 15-30.

Sudicky, E.A., Gillham, R.W., et Frind, E.O., 1985. Experimental investigation of solute transport in stratified porous media. 1. The nonreactive case. *Water Resources Research*, Vol. 21 (7), p. 1035-1041.

Tartakovsky, D.M., Guadagnini, A., et Guadagnini, L. 1999a.

Stochastic averaging and estimate of effective (upscaled) conductivity and transmissivity. 5th Annual conference of the International Association for Mathematical Geology, Trondheim, Norway, 6/8/1999a. Vol. 2, p. 755-760.

Tartakovsky, D.M., Guadagnini, A., et Riva, M. 1999b.

Stochastic of effective conductivity for bounded, randomly heterogeneous aquifers. 5th Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology, Trondheim, Norway, 6/8/1999b. Vol. 2, p. 760-766.

Tartakovsky, D.M. et Guadagnini, A., 2003.

Effective properties of random composites. *SIAM Journal of Scientific Computing*, (under review).

Thompson, A.F.B. et Gehlar, L.W., 1990.

Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, Vol. 26 (10), p. 2541-2562.

Uffink, G.J.M., 1990.

Analysis of dispersion by the random walk method. *Ph.D. thesis*, Delft University of Technology, Delft, Netherlands, 150 p.

Van Genuchten, M.Th. et Wierenga, P.J., 1976. Mass transfer studies in sorbing porous media. 1. Analytical solutions. *Soil Science Society of America Journal*, Vol. 40, p. 473-480. Watson, S.J., Barry, D.A., Schotting, R.J., et Hassanizadeh, S.M., 2002. On the validity of Darcy's law for stable high-concentration displacements in granular porous media. *Transport in Porous Media*, Vol. 47 (2), p. 149-167.

Welty, C. et Elsner, M.M., 1997.

Constructing correlated random fields in the laboratory for observations of fluid flow and mass transport. *Journal of Hydrology*, Vol. 202 (1-4), p. 192-211.

Wen, X.H. et Gomez-Hernandez, J.J., 1996.

Upscaling hydraulic conductivities in heterogeneous media: An overview. *Journal of Hydrology*, Vol. 183 (1-2), ix-xxxii p.

Zhan, H. et Wheatcraft, W., 1996.

Macrodispersivity tensor for nonreactive solute transport in isotropic and anisotropic fractal porous media: analytical solutions. *Water Resources Research*, Vol. 32 (12), p. 3461-3474.

Zhang, D., Zhang, R., Chen, S., et Soll, W.E., 2000.

Pore scale study of flow in porous media: Scale dependency, REV, and statistical REV. *Geophysical Research Letters*, Vol. 27 (8), p. 1195-1198.

Zhang, R., Huang, K., et Xiang, J., 1994.

Solute movement through homogeneous and heterogeneous soil columns. *Advances in Water Resources*, Vol. 17 (5), p. 317-324.

Zhang, Y.-K. et Di Federico, V., 2003.

Comments on Comparison of observations from a laboratory model with stochastic theory: initial analysis of hydraulic and tracer experiments. *Transport in Porous Media*, Vol. 52, p. 111-115.

Annexe A : Cartes du remplissage du MARCEAUS

Les figures ci-dessous représentent l'agencement des 6 sables dans le MARCEAUS. Chaque couche est composée de 550 blocs répartis comme suit selon y :

- 50 demi cubes,
- 50 x 9 cubes de 10 cm de côté au centre,
- 50 demi-cubes de part et d'autre du milieu.

Sur les figures, les demi-cubes latéraux sont représentés par des carrés entiers.

 \blacksquare Couche 1 : $z \in [0, 10]$







Type de sable	
	K150
	K10
	K20
	K30
	K40
	K60

 \blacksquare Couche 3 : $z \in [20, 30]$



 $[\]blacksquare$ Couche 4 : $z \in [30, 40]$

 \blacksquare Couche 5 : $z \in [40, 50]$





$$100$$

$$> 50$$



 \blacksquare Couche 6 : $z \in [50, 60]$

 \blacksquare Couche 7 : $z \in [60, 70]$



```
\blacksquare Couche 8 : z \in [70, 80]
```



 $[\]blacksquare$ Couche 9 : $z \in [80, 90]$



Annexe B : La marche au hasard, approche théorique

B.1. Introduction

La modélisation du transport de solutés en milieux poreux se fait souvent à l'aide de méthodes comme les différences finies ou les éléments finis. Une alternative à ce type de modèles est la méthode de la marche au hasard.

Issue de la physique stochastique et de l'analyse des processus de diffusion-dispersion et du mouvement brownien, la marche au hasard est généralement définie comme le mouvement d'une particule qui à un instant donné subit un déplacement qui dépend en partie du hasard (Semra, 1994). La composante aléatoire du déplacement se rapporte à l'irrégularité du milieu poreux. La description précise de la matrice poreuse est irréalisable, seules ses caractéristiques statistiques peuvent être connues. Ainsi, il est impossible de décrire le mouvement de manière déterministe et l'approche considérant tous les mouvements possibles reste la meilleure.

En revanche, pour que les résultats de cette approche aléatoire aient des propriétés statistiques proches de la réalité, il est nécessaire d'utiliser un grand nombre de particules dont la trajectoire est composée d'un grand nombre de déplacements. Le théorème central limite est ainsi applicable et la distribution finale des particules est gaussienne, conformément aux observations expérimentales.

En affectant à chaque particule une masse de soluté à l'échelle du pore, le modèle peut reproduire l'évolution qualitative et quantitative d'un panache de polluant. Chaque particule subit un déplacement déterministe, la convection, et un déplacement aléatoire, la diffusion, par pas de temps.

B.2. Théorie de la marche au hasard en milieux poreux

B.2.1. Le déplacement aléatoire d'une particule selon Markov

Définition du processus Markovien : l'amnésie d'une particule

Considérons une particule qui se déplace de manière aléatoire et soit $X(t_n)$ sa position au temps t_n . Cette position est le résultat d'une succession de déplacements élémentaires, $S(t_i)$, subits par la particule aux temps t_i . Ainsi, la trajectoire de la particule est entièrement déterminée par la somme des déplacements élémentaires :

$$X(t_n) = X(t_0) + \sum_{i=1}^{n} S(t_i)$$
(B.1)

Supposons que les déplacements soient indépendants les uns des autres. Ce processus est dit Markovien : l'état présent étant connu, le futur est indépendant du passé. En termes de position, $X(t_{i+1})$ est indépendant de $X(t_{i-1})$ quand $X(t_i)$ est connu.

Description du processus Markovien : l'équation de Chapman-Kolmogorov

La probabilité de trouver une particule dans un intervalle $[X - \frac{dX}{2}, X + \frac{dX}{2}]$ s'écrit :

$$P\left[X - \frac{dX}{2} \le X(t) \le X + \frac{dX}{2}\right]$$
(B.2)

La densité de probabilité G(X,t) de la variable X(t) est alors définie par :

$$G(X,t) \cdot dX = P\left[X - \frac{dX}{2} \le X(t) \le X + \frac{dX}{2}\right]$$
(B.3)

De même, la probabilité pour une particule de faire un saut de longueur $S_i \pm \frac{dS_i}{2}$ à l'instant t_i vaut :

$$P(S_i - \frac{dS_i}{2} \le S_i \le S_i + \frac{dS_i}{2}, t_i) = g(S_i, t_i) \cdot dS_i$$
(B.4)

avec g(S_i,t_i), la densité de probabilité de la variable S_i.

Le processus Markovien est alors décrit par l'équation suivante qui définit la densité G(X,t_{i+1}) :

$$G(X(t_{i+1}), t_{i+1}) = G(X(t_i), t_i) \cdot g(S_i, t_i)$$
(B.5)

Dans un espace continu, on obtient l'équation de Chapman-Kolmogorov :

$$G(X, t_{i+1}) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi, t_i) \cdot g(X - \xi, t_{i+1}) \cdot d\xi$$
(B.6)

B.2.2. Le transport en milieu poreux, un processus Markovien ?

De l'équation de Chapman-Kolmogorov à l'équation de Fokker-Planck

Pour savoir si le déplacement d'un traceur en milieu poreux peut-être assimilé à un processus Markovien, il faut comparer l'équation de Chapman-Kolmogorov avec l'équation d'advection-dispersion. Dans ce but, commençons par écrire l'équation (B.6) sous forme d'équation aux dérivées partielles. Le résultat est plus connu sous le nom de développement de Kramers-Moyal (Uffink, 1990) :

$$\frac{\partial G(X,t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial X}\right)^n \left[a^{(n)}(X,t) \cdot G(X,t)\right]$$
(B.7)

avec a⁽ⁿ⁾, la variation du moment d'ordre n de la densité de pas g(S,t) par unité de temps :

$$a^{(n)} = \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} S^n \cdot g_{\tau}(S, X, t) \cdot dS$$

$$= \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \langle S^n \rangle$$
 (B.8)

L'équation (B.7) n'est qu'une transformation de l'équation de Chapman-Kolmogorov qui décrit toujours le processus Markovien mais implique que les densités de probabilité G et g soient infiniment dérivables. Pour la rapporter à un phénomène physique tel que l'advection-dispersion, il faudrait lui associer une infinité de conditions aux limites puisqu'elle contient une infinité de termes. Cela étant impossible, nous devons faire une approximation et arrêter le développement à un nombre fini de termes.

D'après le théorème de Pawula (1967), si le troisième terme du développement est nul alors les termes suivant le sont aussi. Réciproquement, si le troisième terme est non nul, le développement comportera une infinité de termes.

Il est toujours possible d'arrêter le développement à un terme d'ordre supérieur à 2. Seulement, la densité de probabilité G(X,t), qui est par définition une fonction positive, prendra alors des valeurs négatives. Il faut donc arrêter le développement de Kramers-Moyal au deuxième terme ou garder une infinité de termes.

Il s'agit alors de trouver une fonction S(X,t) telle que les densités de probabilités G et g soient infiniment dérivables et que le moment d'ordre 3 de S soit nul. Pour cette fonction S, l'équation (B.7) devient l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left(A_i G \right) + \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left(B_{ij} G \right)$$
(B.9)

avec $A_i = a^{(1)} = \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{\tau} \langle S_i \rangle$, le vecteur dérive,

et
$$B_{ij} = a^{(2)} = \lim_{\tau \to 0} \frac{1}{2\tau} \langle S_i S_j \rangle$$
, le coefficient de diffusion.

De l'équation Fokker-Planck à l'équation d'advection-dispersion

Le transport d'un traceur en milieu poreux est régi par l'équation d'advection dispersion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X} \left(UC \right) + \frac{\partial}{\partial X} \left(D \frac{\partial C}{\partial X} \right)$$
(B.10)

avec C(X,t) la concentration en soluté à la position X et au temps t,

U la vitesse de déplacement convectif,

et D le coefficient de dispersion.

Pour savoir si le transport en milieu poreux peut-être considéré comme un processus Markovien, il faut vérifier que l'équation (B.10) est bien une écriture particulière de l'équation (B.9) et que, dans ce cas, la fonction S(X,t) remplit les conditions énoncées précédemment.

Pour un nombre de particules assez grand, la densité de probabilité G est assimilable à la concentration C. Dans le cas où B est constant dans l'espace, l'équivalence entre les deux équations est obtenue facilement pour A=U et B=D.

Si B n'est pas constant, il faut d'abord modifier l'écriture de l'équation (B.9) de la façon suivante :

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left(\left(A_i - \frac{\partial}{\partial X_j} B_{ij} \right) \cdot G \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(B_{ij} \cdot \frac{\partial G}{\partial X_j} \right)$$
(B.11)

Ainsi, l'équivalence entre les deux équations est retrouvée en posant :

$$B_{ij} = D_{ij} \tag{B.12}$$

$$A_i = U_i + \frac{\partial}{\partial X_i} D_{ij} \tag{B.13}$$

Le résultat obtenu est surprenant car nous pouvions nous attendre à trouver un moment d'ordre un du saut S égal au déplacement convectif U. La différence entre les deux termes est donné par Uffink (1990) : A représente l'estimation du déplacement moyen par unité de temps alors que U correspond à l'estimation du nombre moyen de particules traversant une unité de surface par unité de temps.

La fonction S(X,t) solution ?

Il existe une fonction S qui valide les hypothèses précédentes :

$$S = U^* \cdot \Delta t + z \cdot \sqrt{2D \cdot \Delta t} \tag{B.14}$$

avec $U^* = U + \frac{\partial D}{\partial X}$,

et z, un nombre aléatoire suivant une loi normale de moyenne 0 et d'écart-type 1.

Pour cette solution, le transport d'un traceur en milieu poreux est assimilable à un processus Markovien. Mais lorsque la dispersion est discontinue dans le milieu, elle n'est pas dérivable en tout point, ce qui rend impossible le calcul du flux U^* (cf. équation (B.14)) lors de la traversée d'une discontinuité. Ces déplacements nécessitent un traitement particulier pour lesquels plusieurs méthodes existent : les principes de réflexion, la décomposition du saut et les schémas d'interpolation sont les principales.

B.2.3. <u>La force de Langevin</u>

<u>Théorie</u>

Langevin propose une autre approche du déplacement aléatoire d'une particule en introduisant une force aléatoire, regroupant l'effet de toutes les particules voisines, dans le bilan des forces subies par la particule étudiée (Risken, 1989). Le déplacement de la particule est alors régi par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt}(X_i) = K_i(X) + F_{ij} \cdot n_j(t)$$
(B.15)

avec K la composante convective du déplacement, F la force de Langevin,

et n le bruit blanc associé à F.

Uffink (1990) montre qu'il est possible d'associer respectivement K et F à la vitesse U et à la dispersion D. Le déplacement élémentaire d'une particule se décompose alors facilement en un terme convectif et un terme dispersif.

Deux méthodes d'intégration : Itô et Stratonovich

Le calcul d'un déplacement élémentaire pose la question de savoir si F dépend de la position de la particule avant ou après le déplacement, voire d'une position moyenne de celleci.

Itô propose un calcul explicite du déplacement élémentaire en considérant que F dépend de la position X avant le saut. L'équation de Fokker-Planck selon Itô s'écrit donc :

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left(K_i G \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left(F_{ik} F_{jk} G \right)$$
(B.16)

C'est l'approche que nous avons utilisée jusqu'ici. D'ailleurs, l'équation (B.9) est retrouvée en posant $A_i = K_i$ et $B_{ij} = \frac{1}{2} F_{ik} F_{jk}$. Une théorie plus implicite est proposée par Stratonovich : il s'agit de prendre la valeur de F en fonction de la position X calculée pour un demi pas de temps. L'équation de Fokker-Planck devient alors :

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left(\left(K_i + \frac{F_{jk}}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial X_j} F_{ik} \right) \cdot G \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left(F_{ik} F_{jk} G \right)$$
(B.17)

Et l'expression d'un saut S s'écrit :

$$S(X,t) = U^* \cdot \Delta t + z \cdot \sqrt{2D\left(X + \frac{S(X,t)}{2}\right) \cdot \Delta t}$$
(B.18)

Pour déterminer la trajectoire d'une particule, il faudra donc utiliser un algorithme itératif. C'est pourquoi la théorie d'Itô est préférée à celle de Stratonovich (Uffink, 1990).