

Impact de la diffusion moléculaire sur les lois de transport dans les milieux poreux 3D très fortement hétérogènes.

A. Dartois^a, A. Beaudoin^a, J.R. de Dreuzy^b, S. Huberson^a

^aInstitut Pprime, Poitiers, 86000

^bGéosciences, Rennes, 35000.

Keywords: molecular diffusion, macro-dispersion, heterogeneous and saturated porous media, tracker method, monte carlo approach

1. Introduction

Le but de cette étude est d'arriver à une meilleure compréhension des phénomènes de transport des polluants dans les sols. Pour cela, nous avons utilisé le code de calcul PARADIS qui permet de modéliser le transport de particules dans des milieux poreux saturés et hétérogènes [1]. Lors d'une étude précédente en 2D [3], l'importance de l'hétérogénéité du milieu poreux et de la diffusion moléculaire a été mise en évidence. Il a également été montré [4] que dans le cas de l'advection pure, l'ajout d'une troisième dimension change le comportement de la macro-dispersion, en particulier dans la direction perpendiculaire à celle de l'écoulement. Dans ce travail, nous montrerons que la diffusion moléculaire joue non seulement un rôle sur la macro-dispersion, mais également que cette influence dépend de la direction d'observation par rapport à celle de l'écoulement. En effet, la manière dont la diffusion agit sur le transport change entre les directions parallèle et perpendiculaire à celle de l'écoulement.

2. Théorie Numérique

Le module PARADIS (PARAllel DISpersion) appartient à la plateforme de logiciel de modélisation hydrogéologique H2OLAB développée au cours des Anr MICAS et H2MNO4 [1], [2] et a spécialement été construite pour réaliser des simulations Monte-Carlo du transport de soluté dans des milieux poreux fortement hétérogènes. Chaque simulation Monte-Carlo est découpée en quatre étapes allant de la génération du milieu jusqu'au calcul de la macro-dispersion. La génération du champ de perméabilité aléatoire se fait par l'intermédiaire d'une distribution log-normale de variance σ^2 . Cette variance nous servira dans la suite à caractériser l'hétérogénéité de notre milieu poreux. Ce modèle de milieu poreux hétérogènes a été utilisé et validé par de nombreuses études [5], [6], [7]. Une fois le champ de perméabilité K obtenu, un écoulement en piston dans le milieu poreux est généré grâce à l'équation de conservation $\nabla(K\nabla h) = 0$. Comme conditions aux limites nous utilisons une charge hydraulique fixe à l'entrée et à la sortie du milieu et des conditions périodiques sur les côtés. L'équation d'écoulement est ensuite discrétisée avec un schéma volumes finis [8]. Après le calcul de l'écoulement, des particules (traceurs inertes) sont injectées puis traquées dans le domaine avec une méthode Random-Walk, permettant de simuler l'effet de la diffusion moléculaire [9]. La position des particules est ensuite utilisée pour calculer les moments d'ordre 2 du panache de particules. En dérivant ces moments d'ordre 2, les macro-dispersions longitudinale et transversale sont obtenues. La moyenne de chaque macro-dispersion est ensuite calculée à partir du nombre totale de simulations faites pour le Monte Carlo [3], [4].

3. Macro-dispersion

Une fois les données des macro-dispersions, longitudinale et transversale, obtenues et normalisées par la vitesse moyenne de l'écoulement U et la longueur de corrélation de la perméabilité λ , elles ont été tracées en fonction de la variance de la perméabilité pour les différentes valeurs de diffusion moléculaire testées sur la figure 1. Pour la direction parallèle à celle de l'écoulement, nous observons un comportement similaire au 2D [3] mais avec une tendance différente. α_L a une tendance exponentielle pour les fortes

variances σ^2 quelle que soit la valeur de Dm alors qu'en 2D cette tendance était quadratique. Pour l'autre direction, la macro-dispersion transversale est maintenant non nulle à la différence du cas 2D [3]. Ce comportement avait été déjà observé dans [4] où une loi quadratique avait été établie. Pour l'effet de la diffusion moléculaire sur les macro-dispersions, nous observons que la diffusion moléculaire cause une diminution de α_L et une augmentation de α_T . Dans le cas de la macro-dispersion longitudinale la relation entre α_L , σ^2 et Dm ressemble à une exponentielle pour les fortes hétérogénéités. Cette fonction exponentielle a été choisie pour se référer au cas de l'advection pure étudié dans [4] :

$$\alpha_L = \exp\left(\sigma^2\left(\frac{1}{1.55} - 0.22 \cdot Dm\right)\right) \quad (1)$$

Pour le transversal, le comportement est quadratique comme dans le cas de l'advection pure étudié dans [4]. À partir de la figure 1 nous observons que la diffusion tend à augmenter la valeur de la macro-dispersion transversale α_T . La formule empirique a l'expression suivante :

$$\alpha_T = Dm + 0.1 \cdot \sigma^4 \quad (2)$$

Ces deux formules, bien qu'empiriques, apportent tout de même des renseignements importants sur l'interaction entre la diffusion moléculaire et l'hétérogénéité du milieu poreux. Pour la macro-dispersion longitudinale, Dm se trouve à l'intérieur de l'exponentielle de l'équation 1. Cela implique une interférence directe entre les deux mécanismes. Son apport étant négatif, son effet réduit la macro-dispersion longitudinale. Pour la macro-dispersion transversale, l'équation 2 résulte d'une simple juxtaposition de deux termes respectivement en Dm et l'autre en σ^4 .

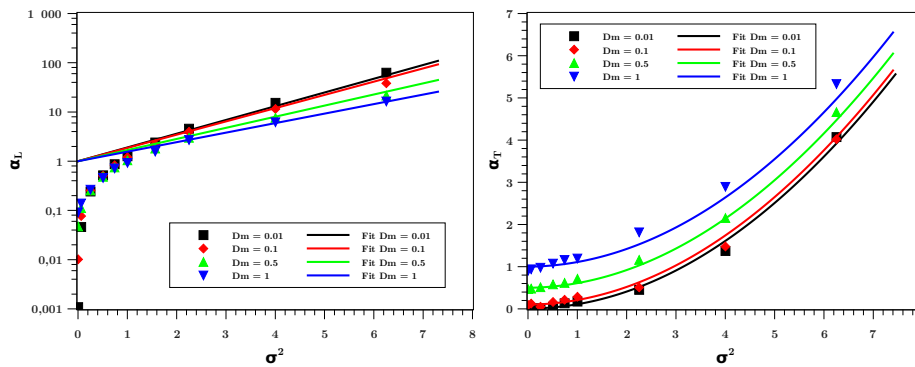


FIGURE 1: Macro-dispersion longitudinale α_L et transversale α_T en fonction de l'hétérogénéité du milieu pour différentes valeurs de diffusion moléculaire Dm . Les courbes en traits plein sont des fits issus des équations 1 et 2

Références

- [1] Erhel J., Modelling and Intensive Computation for Aquifer Simulations, *ANR-07-CIS7-004*, French National Research Agency.
- [2] Erhel J., Hydrogéologie Hétérogène avec un Modèle Numérique Original, Optimisé et Orienté Objets, *ANR-12-MONU-0012*, French National Research Agency.
- [3] Beaudoin A. and J. de Dreuzy, Numerical assessment of 3D macrodispersion in heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, 49, 2013.
- [4] Beaudoin A., J. de Dreuzy and J. Erhel, Numerical monte carlo analysis of the influence of pore-scale dispersion on macrodispersion in 2D heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, 46, 2010.
- [5] Dagan G., Solute transport in heterogeneous porous formations, *Journal of Fluid Mechanics*, 145, 151-177, 1984.
- [6] Freeze R., Stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogenous media, *Water Resources Research*, 11, 725-741, 1975.
- [7] Gelhar L. W. and C. L. Axness, Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers, *Water Resources Research*, 19, 161-180, 1983.
- [8] Chavent G. and J. E. Roberts, A unified physical presentation of mixed, mixed hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determinations of velocities in waterflow problems, *Advances Water Resources*, 14, 329-348, 1991
- [9] Kinzelbach W., The random-walk method in pollutant transport simulation, *paper presented at Groundwater flow and quality modelling*, Springer, New York, 1988.