



HAL
open science

Dispersion capillaire - gravitaire d'un polluant en milieu poreux hétérogène et non saturé :

Nadia Jamaledine

► **To cite this version:**

Nadia Jamaledine. Dispersion capillaire - gravitaire d'un polluant en milieu poreux hétérogène et non saturé :. Autre. Institut National Polytechnique de Lorraine, 2006. Français. NNT : 2006INPL004N . tel-01752544

HAL Id: tel-01752544

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01752544>

Submitted on 29 Mar 2018

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

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



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

École Nationale supérieure de géologie de Nancy

Laboratoire Environnement, Géomécanique & Ouvrages

École Doctorale RP2E

THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'I.N.P.L.

Spécialité :

Génie civil – Hydrosystèmes – Géotechnique

Par :

Nadia JAMALEDDINE

Dispersion capillaire - gravitaire d'un polluant en milieu poreux hétérogène et non saturé

Soutenu publiquement le 08 février 2006
devant la Commission d'Examen

Membres du jury :

Président	M. Michel BUÈS
Rapporteurs	M. Jean-Marie CROLET M. Grigori PANASENKO
Examineur	M. Pierre Le THIEZ
Directeur de thèse	M. Mikhail PANFILOV

A la mémoire de mon cher père
A ma mère
A mes sœurs
A mes frères
A toute ma famille et mes amis

AVANT PROPOS

*Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur **M. PANFILOV**, Professeur à l'INPL d'avoir accepté d'être mon directeur de thèse ainsi que pour sa disponibilité.*

*Je tiens également à remercier Madame le professeur **F. HOMAND**, Directrice du Laboratoire Environnement, Géomécanique et Ouvrages de Nancy (site ENSG) de m'avoir accueillie dans son laboratoire.*

*Je remercie particulièrement les personnes, **M. Jean-Marie CROLET** Professeur à l'Université de Sciences et Techniques de Franche-Comté, **M. Grigori PANASENKO** Professeur à l'Université Jean Monnet de St-Etienne, **M. Pierre Le THIEZ** Ingénieur à l'I.F.P et **M. Michel BUÈS** Professeur à l'I.N.P.L pour avoir accepté de juger mon travail en participant au jury.*

Je remercie tout le personnel du Laboratoire environnement, Géomécanique et Ouvrages de Nancy, enseignants, chercheurs, thésards et Permanents du LAEGO pour leur accueil et leur soutien amical durant ces années de travail.

Je ne saurai oublier ma famille pour sa patience et son encouragement tout au long de mes études.

Merci à tous mes amis, qui directement ou indirectement ont su me soutenir dans les moments difficiles.

Qualités et spécialités des membres du jury

Jean-Marie CROLET Professeur à l'Université de Besançon
Rapporteur UFR Sciences et Techniques
 Équipe de mathématiques à Besançon
 6, route de Gray
 25030 Besançon Cedex

Spécialité : mathématiques appliquées

Grigori PANASENKO Professeur à l'Université de St-Etienne
Rapporteur Directeur de l'Équipe d'Analyse Numérique
 Université de Saint-Etienne
 23, rue Paul Michelon
 42023 Saint-Etienne Cedex 02

Spécialité : mathématiques appliquées

Pierre Le THIEZ Ingénieur Chef de Projet à l'Institut Français du Pétrole
Examineur 1-4, Rue de Bois-Préau
 92500 RUEIL-MALMAISON

Spécialité : modélisation du transport en milieu souterrain

Michel BUÈS Professeur à l'INPL-ENSG
Président Laboratoire d'Environnement, Géomécanique et Ouvrages
 Rue du Doyen Marcel Roubault BP 40
 54501 VANDOEUVRE LÈS NANCY

Spécialité : mécanique des fluides, hydrodynamique des milieux poreux

Mikhail PANFILOV Professeur à l'INPL-ENSG
Directeur de thèse Laboratoire d'Environnement, Géomécanique et Ouvrages
 Rue du Doyen Marcel Roubault BP 40
 54501 VANDOEUVRE-LES-NANCY

Spécialité : mécanique des fluides, hydrodynamique des milieux poreux

TABLE DES MATIERES

<i>Introduction générale</i>	1
------------------------------	---

I- PHÉNOMÈNE DE DISPERSION HYDRODYNAMIQUE

1.1. La pollution des aquifères	5
1.1.1. Les polluants immiscibles	5
1.1.2. Les voies de migration d'un polluant	6
1.1.3. Migration d'un LNAPL	7
1.1.4. Migration d'un DNAPL	8
1.1.5. Infiltration d'un NAPL dans la zone non saturée	11
1.1.6. Les modes de transport des NAPLs	13
1.2. Dispersion hydrodynamique des polluants	14
1.2.1. Définition	14
1.2.2. Théorie de la dispersion	15
1.2.3. Dispersion et changement d'échelle	17
1.2.4. Homogénéisation d'ordre élevée et dispersion hydrodynamique	19
1.2.5. Dispersion dans un écoulement diphasique	19
1.2.6. Dispersion et digitation	22

II- ÉTUDE THÉORIQUE DE LA DISPERSION GRAVITAIRE CAPILLAIRE EN MILIEU POREUX HÉTÉROGÈNE

2.1. Formulation du problème	23
2.1.1. Formulation physique	23
2.1.2. Formulation mathématique	24
2.1.2.1. Equations de conservation	24
2.1.2.2. Relations de fermetures	25
2.1.3. Transformation en équation de Richards	27

2.1.4.	Forme adimensionnelle de l'équation de Richards _____	28
2.1.5.	Limitations sur le nombre de Peclet Pe _____	30
2.1.6.	Conditions aux limites et conditions initiales _____	31
2.2.	Homogénéisation _____	31
2.2.1.	Sur la méthode de l'homogénéisation _____	31
2.2.2.	Principe de l'homogénéisation _____	34
2.2.3.	Formulation à double échelle. Séparation de variables _____	35
2.2.4.	Périodicité et condition nécessaire et suffisante de périodicité ____	36
2.2.5.	Développement asymptotique de l'équation (2-24) _____	37
2.2.6.	Existence et unicité de solution des problèmes d'ordre zéro et d'ordre 1 _____	37
2.2.7.	Représentation pour la fonction $s_{10}(x, \tau, y)$. Relation constitutive __	39
2.2.8.	Développement asymptotique de l'équation (2.25)' _____	41
2.2.9.	Déduction de l'équation macroscopique _____	42
2.2.10.	Modèle macroscopique _____	44
2.2.11.	Effet de freinage _____	45
2.2.12.	Effet de mémoire _____	45
2.2.13.	Origine de la mémoire _____	47
2.2.14.	Structure du tenseur de dispersion _____	48
2.2.15.	Asymétrie du tenseur de dispersion _____	48
2.2.16.	Sur la définition positive du tenseur de dispersion _____	51
2.2.17.	Conclusions _____	52

*III- SOLUTION DES PROBLÈMES CELLULAIRES ET
ANALYSE QUALITATIVE DU TENSEUR DE
DISPERSION*

3.1.	Propriétés des solutions du problème cellulaire __	55
3.1.1.	Unicité et existence _____	55
3.1.2.	Non localité du problème cellulaire _____	55
3.1.3.	Invariance de la solution dans le cas sans capillarité _____	56
3.1.4.	Description de la cellule unitaire _____	57
3.2.	Solutions analytiques du problème cellulaire dans le cas sans forces capillaires ($Pe \rightarrow \infty$) : _____	58

3.2.1.	Problème cellulaire dans le cas sans forces capillaires _____	58
3.2.2.	Cas d'un milieu de double porosité _____	59
3.2.3.	Comportement qualitatif de la fonction cellulaire _____	60
3.2.4.	Construction de la solution exacte _____	61
3.2.5.	Exemples de calculs de la fonction cellulaire exacte _____	62
3.3.	Méthode numérique de résolution du problème cellulaire _____	63
3.3.1.	Description du logiciel FEMLAB _____	63
3.3.2.	Étapes de résolution d'un problème physique par FEMLAB _____	64
3.3.3.	Discrétisation du domaine _____	65
3.4.	Solutions numériques du problème cellulaire dans le cas sans capillarité _____	66
3.4.1.	Introduction de la « viscosité artificielle » _____	66
3.4.2.	Traitement de la condition sur la valeur moyenne _____	66
3.4.3.	Résultats de simulations de la fonction cellulaire _____	67
3.4.4.	Comparaison entre la solution numérique et analytique _____	68
3.5.	Solutions numériques du problème cellulaire dans le cas avec capillarité _____	69
3.5.1.	Solution pour le cas de la capillarité prépondérante ($Pe \ll 1$) _____	68
3.5.2.	Solution du problème cellulaire dans le cas général. Fonction χ_1 _____	70
3.5.3.	Solution du problème cellulaire dans le cas général. Fonction χ_3 _____	73
3.6.	Tenseur de dispersion _____	75
3.6.1.	Tenseur de dispersion et dispersivités _____	75
3.6.2.	Calcul du tenseur de dispersivités pour un milieu de double porosité _____	75
3.6.3.	Solution analytique pour la dispersivité gravitaire _____	77
3.6.4.	Influence du rapport de perméabilité sur la dispersivité gravitaire _____	77
3.6.5.	Influence du rapport de porosité sur la dispersivité gravitaire _____	78
3.6.6.	Résultats numériques pour la dispersivité gravitaire _____	78
3.6.7.	Résultats numériques pour la dispersivité capillaire longitudinale _____	79
3.6.8.	Résultats numériques pour la dispersivité capillaire transversale _____	82
3.6.9.	Dispersivité longitudinale totale _____	83
3.6.10.	Influence de la capillarité sur la dispersivité transversale totale _____	86
3.6.11.	Comparaison avec d'autres résultats _____	88
3.6.12.	Conclusions _____	88

IV- ÉTUDE NUMÉRIQUE DU PROCESSUS À L'ÉCHELLE MICROSCOPIQUE

4.1.	Description du domaine	91
4.1.1.	Description du milieu périodique	91
4.1.2.	Description du milieu stochastique	93
4.1.3.	Génération du champ de perméabilité par la méthode du Krigeage	95
4.2.	Paramètres du problème	98
4.2.1.	Pression capillaire	99
4.2.2.	Perméabilité relative	99
4.2.3.	Les autres paramètres	100
4.2.4.	Conditions initiales et conditions aux limites	101
4.3.	Solution numérique	101
4.3.1.	Description de la méthode	101
4.3.2.	Saturation en fonction de porosité	102
4.3.3.	Saturation en fonction de la perméabilité	103
4.3.4.	Saturation en fonction du rapport de viscosités. Milieu périodique	105
4.3.5.	Evolution de la saturation dans un milieu stochastique	107
4.3.6.	Profils de saturation macroscopique. Milieu périodique	107
4.3.7.	Profils de saturation macroscopique. Milieu stochastique	109
4.3.8.	Calcul du coefficient de Dispersion	111
4.3.9.	Coefficient de dispersion en fonction de saturation	113
4.3.10.	Comparaison avec la théorie	114
4.3.11.	Relation entre $D(S)$ et dF/dS	116
4.3.12.	Conclusions	118
CONCLUSION		119
RÉFÉRENCES		123
NOTATIONS		131

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1.1 : LES VOIES DE MIGRATION D'UN NAPL DANS UNE AQUIFÈRE (PANKOW ET CHERRY, 1996)	6
FIGURE 1.2 : MODÈLE CONCEPTUEL DE MIGRATION D'UN LNAPL (EPA, 1999A)	7
FIGURE 1.3 : MODÈLE CONCEPTUEL DE MIGRATION D'UN DNAPL (EPA,1999B)	9
FIGURE 1.4 : CHEMINEMENT DES CONDITIONS DE CAPILLARITÉ ET DE SATURATION LORS DE L'INFILTRATION D'UN NAPL DANS LA ZONE NON SATURÉE	11
FIGURE 1.5 : SATURATION EN NAPL DANS LA ZONE NON SATURÉE SELON LE TYPE DE DÉVERSEMENT : A) INFILTRATION CONTINUE À FORT DÉBIT ET B) FAIBLE DÉBIT ET C) DÉVERSEMENT INSTANTANÉ	12
FIGURE 1.6 : MÉCANISME DE DISPERSION DANS LE SOUS-SOL	14
FIGURE 1.7: INSTABILITÉ DES FRONTS DU DÉPLACEMENT D'UN FLUIDE IMMISCIBLE PAR UN AUTRE PLUS MOBILE	22
FIGURE 2.1 : COURBE DE PRESSION CAPILLAIRE	26
FIGURE 2.2 : COURBES CARACTÉRISTIQUES DE PERMÉABILITÉS RELATIVES POUR UN SYSTÈME DIPHASIQUE	26
FIGURE 2.3 : PROCÉDURE D'HOMOGENÉISATION	34
FIGURE 3.1 : CELLULE UNITAIRE 2D	57
FIGURE 3.2 : COMPORTEMENT QUALITATIF DU PRODUIT $\alpha\chi_3$ (A) ET DE LA FONCTION CELLULAIRE χ_3 (B) SELON L'AXE CENTRAL y_3	60
FIGURE 3.3 : FONCTION CELLULAIRE EXACTE (SOLUTION ANALYTIQUE), CAS SANS CAPILLARITÉ : LA FLUCTUATION DE A) PERMÉABILITÉ ET PLUS FORTE; B) LA FLUCTUATION DE POROSITÉ EST DOMINANTE	63
FIGURE 3.4 : DISCRÉTISATION DE LA CELLULE PÉRIODIQUE	65
FIGURE 3.5 : FONCTION CELLULAIRE χ_3 POUR $\omega=0.1$ ET 0.2	67
FIGURE 3.6 : FONCTION CELLULAIRE χ_3 POUR $\omega=0.4$ ET 0.8	67
FIGURE 3.7 : COMPARAISON ENTRE χ_3 ANALYTIQUE ET χ_3 NUMÉRIQUE POUR $\omega=0.1$ ET $\theta = 0.16$	68
FIGURE 3.8 : FONCTION CELLULAIRE χ_k POUR $\omega=0.1$ ET 0.2	70
FIGURE 3.9 : FONCTION CELLULAIRE χ_k POUR $\omega=0.4$ ET 0.8	70
FIGURE 3.10 : FIGURE 3.10 : FONCTION CELLULAIRE χ_1 POUR $\omega=0.1$ ET DIFFÉRENTES VALEURS DE $Pe_{micr} = 1/\sigma$	71
FIGURE 3.11 : FONCTION CELLULAIRE χ_1 POUR $\omega=0.8$ ET DIFFÉRENTES VALEURS DE $Pe_{micr} = 1/\sigma$	72

FIGURE 3.12 : FIGURE 3.14 : FONCTION CELLULAIRE χ_3 POUR $\omega=0.1$ ET DIFFÉRENTES VALEURS DE $Pe_{micr} = 1/\sigma$	73
FIGURE 3.13 : FIGURE 3.15 : FONCTION CELLULAIRE χ_3 POUR $\omega=0.8$ ET DIFFÉRENTES VALEURS DE $Pe_{micr} = 1/\sigma$	74
FIGURE 3.14 : DISPERSIVITÉ GRAVITAIRE LONGITUDINALE POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE θ	77
FIGURE 3.15 : DISPERSIVITÉ GRAVITAIRE LONGITUDINALE EN FONCTION DE ω POUR 2 VALEURS DE φ_{II} / φ_I	78
FIGURE 3.16 : DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE LONGITUDINALE POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MICR}	82
FIGURE 3.17 : DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE LONGITUDINALE POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MICR}	83
FIGURE 3.18 : DISPERSION LONGITUDINALE $\omega=0.1$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	84
FIGURE 3.19 : DISPERSION LONGITUDINALE $\omega=0.2$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	85
FIGURE 3.20 : DISPERSION LONGITUDINALE $\omega=0.4$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	85
FIGURE 3.21 : DISPERSION LONGITUDINALE $\omega=0.8$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	85
FIGURE 3.22 : DISPERSION TRANSVERSALE $\omega=0.1$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	86
FIGURE 3.23 : DISPERSION TRANSVERSALE $\omega=0.2$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	87
FIGURE 3.24 : DISPERSION TRANSVERSALE $\omega=0.4$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	87
FIGURE 3.25 : DISPERSION TRANSVERSALE $\omega=0.8$ ET POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE Pe_{MACR}	87
FIGURE 4.1 : CELLULE UNITÉ	92
FIGURE 4.2 : STRUCTURE DU MILIEU PÉRIODIQUE	92
FIGURE 4.3 : DISTRIBUTION DE PERMÉABILITÉ (MILLIDARCY)	97
FIGURE 4.4 : DISTRIBUTION DE POROSITÉ	98
FIGURE 4.5 : COURBE DE PRESSION CAPILLAIRE POUR LE COUPLE HUILE – GAZ	99
FIGURE 4.6 : COURBES DE PERMÉABILITÉ RELATIVE POUR LE COUPLE HUILE – GAZ	100
FIGURE 4.8 : PROFILS DE SATURATION EN NAPL POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE LA POROSITÉ MOYENNE	102
FIGURE 4.9 : SATURATION MOYENNE EN PLANS HORIZONTAUX POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE LA POROSITÉ MOYENNE	103
FIGURE 4.10 : PROFILS DE SATURATION EN NAPL POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE PERMÉABILITÉ	104
FIGURE 4.11 : SATURATION MOYENNE EN PLANS HORIZONTAUX POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE LA PERMÉABILITÉ MOYENNE (Z EST VERS LE BAS)	104
FIGURE 4.12 : SATURATION EN NAPL POUR TROIS RAPPORTS DES VISCOSITÉS : $\bar{\mu} = 0,1$ (A), 1 (B), 100 (C) POUR T = 24 H	105
FIGURE 4.13 : SATURATION EN NAPL POUR TROIS RAPPORTS DES VISCOSITÉS : $\bar{\mu} = 0,1$ (A), 1 (B), 100 (C) POUR T = 7J	106
FIGURE 4.14 : PROFILS DE SATURATION EN HUILE DANS LE TEMPS, $\bar{\mu} = 0.1$	107
FIGURE 4.15 : STRUCTURE DU FRONT DE DÉPLACEMENT HUILE-AIR DANS LE TEMPS	107

FIGURE 4.16 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y POUR DIFFERENTS MOMENTS DE TEMPS ; $\bar{\mu}=0.1$	108
FIGURE 4.17 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y POUR DIFFERENTS MOMENTS DE TEMPS, $\bar{\mu}=1$	108
FIGURE 4.18 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y POUR DIFFERENTS MOMENTS DE TEMPS, $\bar{\mu}=100$	109
FIGURE 4.19 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y, $\bar{\mu}=100$, T = 7 JOURS	110
FIGURE 4.20 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y, $\bar{\mu}=1$, T = 30 JOURS	110
FIGURE 4.21 : SATURATION HOMOGENEISEE EN X,Y, $\bar{\mu}=0.1$, T = 30 JOURS	110
FIGURE 4.22 : COEFFICIENT DE DISPERSION EN FONCTION DE LA SATURATION $\bar{\mu}=0.1$, T = 30 JOURS	113
FIGURE 4.23 : COEFFICIENT DE DISPERSION EN FONCTION DE LA SATURATION $\bar{\mu}=1$, T = 30 JOURS	113
FIGURE 4.24 : COEFFICIENT DE DISPERSION EN FONCTION DE LA SATURATION $\bar{\mu}=100$, T = 30 JOURS	115
FIGURE 4.25 : COEFFICIENT DE DISPERSION $\bar{\mu}=0.1$, T = 1 JOUR	115
FIGURE 4.26 : COEFFICIENT DE DISPERSION $\bar{\mu}=1$, T = 1 JOUR	115
FIGURE 4.27 : COEFFICIENT DE DISPERSION $\bar{\mu}=100$, T = 1 JOUR	115
FIGURE 4.28 : COMPARAISON ENTRE D(S) ET LA FONCTION DF/dS POUR $\bar{\mu}=0.1$, T = 1 JOUR	116
FIGURE 4.29 : COMPARAISON ENTRE D(S) ET LA FONCTION DF/dS POUR $\bar{\mu}=1$, T = 1 JOUR	117
FIGURE 4.30 : COMPARAISON ENTRE D(S) ET LA FONCTION DF/dS POUR $\bar{\mu}=100$, T = 1 JOUR	117

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 1.1 : FACTEURS DE PÉNÉTRATION D'UN DNAPL DANS LA ZONE NON SATURÉE ET SATURÉE	10
TABLEAU 3.1 : RÉSULTATS DE SIMULATION DE LA DISPERSIVITÉ GRAVITAIRE	79
TABLEAU 3.2 : COMPARAISON ENTRE LES RÉSULTATS ANALYTIQUES ET DE SIMULATION	79
TABLEAU 3.3 : RÉSULTATS DE SIMULATION DE LA DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE ; CAS $Pe_{micro} = 1$	80
TABLEAU 3.4 : RÉSULTATS DE SIMULATION DE LA DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE ; CAS $Pe_{micr} = 2$	80
TABLEAU 3.5 : RÉSULTATS DE SIMULATION DE LA DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE ; CAS $Pe_{micr} = 10$	81
TABLEAU 3.6 : RÉSULTATS DE SIMULATION DE LA DISPERSIVITÉ CAPILLAIRE ; CAS $Pe_{micr} = 50$	81

INTRODUCTION GÉNÉRALE

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le transport des polluants dans les aquifères est très complexe et met en jeu de multiples mécanismes : transport par diffusion, advection, adsorption, biodégradation, etc. (Abriola & Pinder, 1985a, 1985b; De Marsily, 1988; Powers & al., 1991; Powers & al., 1992; Geller & Hunt, 1993). Il s'agit donc d'un problème complexe qui fait appel à de nombreuses disciplines scientifiques (physique, chimie, mécanique, biologie,..). Dans la thèse présente, nous étudions uniquement les polluants immiscibles avec de l'eau, des NAPLs (Non Aqueous Phase Liquid) à l'état liquide, en supposant également que l'air présent dans les roches ne puisse pas être dissout dans le NAPL. Il s'agit donc d'un système de fluides multiphasiques.

La propagation du polluant vers la nappe à travers la zone non saturée est déterminée par des forces de pesanteur, capillarité et frottement visqueux aux parois des pores, avec une présence de l'air et de l'eau résiduelle qui remplit le milieu poreux en état initial. Il s'agit donc d'étudier un système triphasique de fluides, dont le déplacement de l'air par le NAPL se fait en présence de l'eau à l'état immobile. La direction préférentielle de déplacement suit l'axe vertical étant contrôlée par la force de pesanteur, avec une sorte d'étalement (diffusion) dans toutes les autres directions probables provoquée par des forces capillaires. Le rôle des trois phases fluides n'est pas équivalent. En effet, l'eau résiduelle étant immobile ne joue qu'un rôle passif d'une substance réduisant la porosité. L'air, dont la viscosité et la masse volumique sont supposées être négligeables dans le cadre du concept d'un système non saturé, joue le rôle d'un stabilisateur immédiat du champ de pression : pour tout sous domaine occupé par l'air, la pression sera constante à chaque moment. Ainsi nous allons parler d'un écoulement pseudo triphasique non saturé.

Suite aux hétérogénéités naturelles de tout milieu poreux, la propagation du polluant devient non uniforme même dans la direction préférentielle et s'effectue sous forme de « doigts » déterminant un phénomène connu sous le nom de digitation (*fingering*). En même temps, ces hétérogénéités du milieu intensifient l'étalement transversal du polluant. Ceci dit l'image de pollution dans un milieu hétérogène devient qualitativement différent de celle traditionnellement attendue, en prenant la forme d'un étalement plus ou moins uniforme dans toutes les directions, et avec la création d'une zone de doigts croissante dans le temps. A l'échelle macroscopique d'observation, cette zone de digitation a la forme d'une zone de mélange entre le polluant, l'air et l'eau, avec une évolution monotone de la saturation macroscopique du polluant dans la direction de propagation. Il s'agit donc d'un processus de mélange dynamique en milieux hétérogène appelé « la dispersion hydrodynamique ».

La propagation d'un liquide plus lourd que l'air est un processus gravitationnellement instable, car au moment initial le fluide lourd (le polluant liquide) est situé au-dessus de fluide léger (air). Une telle instabilité physique naturelle a pour conséquence d'intensifier le processus de digitation et de dispersion.

L'objectif de la thèse est d'étudier le phénomène de dispersion hydrodynamique dans le cas de l'écoulement décrit ci-dessus : un écoulement non saturé pseudo-triphasique contrôlé par la gravité et la capillarité. L'identification des paramètres de dispersion a toute son importance en donnant l'outil pour prédire l'évolution du panache zone de pollution des zones non saturées (et saturés) d'une nappe par des polluants immiscibles.

Du point de vue mathématique, ce type d'écoulement est décrit par l'équation de Richards par rapport à la saturation du polluant. Nous allons élargir le spectre des processus physiques étudiés en admettant que dans certains cas même dans la zone saturée des nappes, la propagation du polluant peut être décrite par l'équation de Richards, situation qui correspond au cas où la viscosité du polluant serait largement supérieure à celle de l'eau.

Ainsi le sujet de thèse est consacré à l'analyse de la dispersion hydrodynamique dans le modèle de Richards décrivant l'écoulement dans la zone non saturée des nappes et, dans certains cas, dans la zone saturée.

Le phénomène de dispersion hydrodynamique en milieux hétérogènes est bien connu en écoulement monophasique et dans le transport passif de contaminant miscible. En transport immiscible et en écoulement multiphasique, le processus de dispersion est beaucoup moins étudié, bien que ce phénomène existe bel et bien et intervienne dans de nombreux domaines tels que la récupération du pétrole, le stockage de déchets, la propagation de polluants ou l'hydrogéologie.

Lors d'un écoulement de deux phases immiscibles, la dispersion hydrodynamique se manifeste par la dissipation de l'interface entre les phases et l'apparition d'une zone de mélange entre les deux fluides, ce phénomène a deux échelles différentes de description : une microscopique à laquelle les hétérogénéités sont mises en évidence et une macroscopique à laquelle le mélange semble être homogène. L'existence du comportement macroscopique homogène incite à chercher des modèles efficaces qui permettent la description du phénomène. Mathématiquement, le problème consiste donc à effectuer un changement d'échelle (upscaling) afin de développer un modèle macroscopique du phénomène. Dans le cas diphasique, le problème essentiel de la dispersion réside dans la non-linéarité. Cette particularité complique l'application des méthodes mathématiques de changement d'échelle.

Suite à l'analogie formelle entre le mélange hydrodynamique et la diffusion moléculaire à l'échelle homogénéisée, il est attendu que la description effective de la dispersion hydrodynamique soit un opérateur différentiel de deuxième ordre de type opérateur de diffusion. La structure des coefficients macroscopiques (tenseur de dispersion) reste à déterminer.

La méthode de changement d'échelle qu'on a appliquée est celle de l'homogénéisation par développement asymptotique à double échelle. Le résultat de

cette technique est double : i) une équation différentielle macroscopique d'écoulement (équation de Richards homogénéisée), le tenseur de dispersion hydrodynamique est une fonction non linéaire en saturation, et ii) un problème cellulaire, dont les solutions définissent la structure des paramètres macroscopiques (tenseur de dispersion et tenseur de perméabilité effective), dont la résolution numérique est obtenue.

Les solutions numériques des problèmes cellulaires (obtenues par le simulateur Femlab) ont permis de quantifier le tenseur de dispersion et d'étudier sa structure interne dans différents cas. On a montré que le tenseur de dispersion contient deux termes additifs correspondants aux effets des forces capillaires et gravitaires. Le comportement de chaque composante en fonction de différents paramètres du système a été étudié.

Afin de justifier le modèle macroscopique obtenu, des simulations numériques à l'échelle microscopique (avec le logiciel SIMUSCOPP) ont été faites. Différentes études ont été réalisées. Le milieu poreux simulé est tridimensionnel et l'écoulement diphasique (huile-gaz) préférentiel se fait selon un axe \bar{z} vertical. Les résultats obtenus nous ont permis de définir quelques principes sur l'évolution du tenseur de dispersion hydrodynamique. Trois cas différents sont étudiés pour chaque type de milieu, correspondant aux trois valeurs de viscosités de NAPL.

L'étude théorique ayant été réalisée pour un milieu périodique, il en sera de même pour l'étude numérique menée à l'échelle microscopique. Parallèlement une étude est menée sur un milieu stochastique, afin de mieux comprendre la réalité des milieux poreux et les particularités que le désordre peut apporter dans le phénomène de dispersion.

La structure de la thèse est la suivante :

Dans un premier temps, une étude bibliographique a été réalisée sur les fondements théoriques et les notions de bases nécessaires à la compréhension de ce travail. Multiples informations ont été recueillies sur les aquifères, les NAPL et notamment sur le phénomène de dispersion. Les différentes techniques de changement d'échelle et plus particulièrement l'homogénéisation ont été abordées. A l'issue de ce premier chapitre, une discussion sur les différents travaux déjà menés sur le phénomène de dispersion hydrodynamique et l'approche de l'homogénéisation a été réalisée.

Le deuxième chapitre consiste en une étude théorique. Il s'agit de l'homogénéisation de l'équation microscopique de Richards, l'analyse du modèle macroscopique obtenu et le calcul du tenseur de dispersion associée.

Le troisième chapitre présente les solutions des problèmes cellulaires ainsi qu'une analyse qualitative du tenseur de dispersivité.

Le quatrième chapitre présente l'étude numérique. Il concerne des simulations numériques à l'échelle microscopique pour deux types de milieux différents, l'un est périodique et l'autre est stochastique. Dans le but de se rapprocher le plus possible

des milieux poreux réels, la génération d'un milieu poreux stochastique était nécessaire. Elle a été effectuée en combinant deux méthodes de modélisation, conditionnelle (krigeage) et non conditionnelle (méthode des bandes tournantes). Le chapitre s'achève sur le traitement et l'analyse des résultats des simulations.

Enfin, une conclusion dégage les aspects essentiels des résultats obtenus et les perspectives envisageables pour poursuivre ce travail.

Chapitre 1
PHÉNOMÈNE DE DISPERSION
HYDRODYNAMIQUE

Pour une meilleure compréhension du phénomène de dispersion hydrodynamique, nous présentons dans la première partie de ce chapitre une étude bibliographique sur les notions relatives aux aquifères et aux NAPLs (Non Aqueous Phase Liquid). Nous insistons plus particulièrement sur la migration de ces polluants immiscibles à travers la zone non saturée. Dans la deuxième partie, nous abordons la théorie de la dispersion hydrodynamique et sa dépendance de l'échelle du milieu étudié. Différentes techniques de changement d'échelle sont exposées. Une synthèse des principaux travaux existants sur l'homogénéisation et la dispersion hydrodynamique sera présentée à la fin de ce chapitre.

1.1. La pollution des aquifères

L'aquifère est un ensemble d'unités géologiques, saturé au moins en partie en eau, et constitué de matériaux suffisamment perméables afin de permettre l'écoulement significatif d'une nappe souterraine ainsi que le captage de quantités appréciables d'eau. Les formations considérées comme des aquifères sont caractérisées par une conductivité hydraulique excédant 10^{-7} m/s.

Les nappes libres et les nappes captives représentent les deux grandes classes d'aquifères, les premières occupent généralement les formations aquifères situées près et reliés directement à la surface du sol. Elles sont caractérisées par la présence d'une surface libre et contiennent donc des zones saturées, non saturées et de fluctuations. Leur alimentation se fait principalement par infiltration à partir de la surface sur toute l'étendue de la nappe et elles sont très vulnérables à la contamination à partir de sources situées à la surface du sol.

Les nappes captives se trouvent dans des unités aquifères confinées entre des unités peu perméables. Ces nappes sont complètement saturées en eau.

1.1.1. Les polluants immiscibles

Les polluants immiscibles dans l'eau sont des produits de très faible solubilité. A une certaine concentration, ils forment une phase séparée. Cette phase non aqueuse, couramment appelée NAPL (non Aqueous Phase Liquid) où LI en français (Liquide Immiscible) peut contenir un seul composé pur ou un mélange de composés plus ou moins miscibles dans l'eau mais miscible entre eux. La majorité des produits courants répondant à cette définition sont des produits organiques. Les NAPLs sont subdivisés en deux groupes sur la base de leur densité relativement à celle de l'eau, un DNAPL ou LID (Liquide Immiscible Dense) et un LNAPL ou LIL (Liquide Immiscible Léger).

Selon Mackay *et al.* (1985), une différence de masse volumique de 1% influence les mouvements en surface.

1.1.2. Les voies de migration d'un polluant

La figure (1.1) ci dessous montre les voies possibles de migration des contaminants formant des phases immiscibles légères (LNAPL) ou lourdes (DNAPL).

Les contaminants peuvent migrer sous trois formes : i) phase liquide immiscible (NAPL), ii) de composés en solution dans l'eau d'infiltration ou l'eau souterraine et iii) de composés volatilisés dans la phase gazeuse dans la zone non saturée.

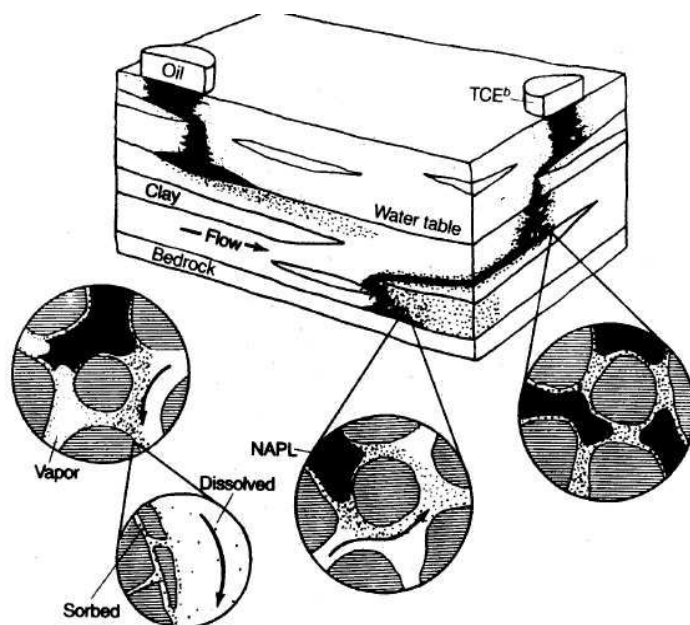


Figure 1.1 : Les voies de migration d'un NAPL dans une aquifère (Pankow et Cherry, 1996)

Dans la zone non saturée, l'infiltration d'un NAPL se fait de la même façon pour un LNAPL ou un DNAPL. Elle est contrôlée en grande partie par la présence de couches de faibles perméabilités qui devient le cheminement du NAPL.

Le comportement d'un LNAPL est différent de celui d'un DNAPL par sa grande capacité de migrer sous le niveau de la surface libre, son infiltration progresse de manière semblable à sa migration dans la zone non saturée. La migration des contaminants immiscibles peut être réduite par leur adsorption sur les solides ou leur dégradation chimique ou biologique. Le fait que les DNAPLS continuent leur migration jusqu'à ce qu'une couche d'un matériel de très faible perméabilité soit rencontrée rend ces liquides susceptibles de migrer dans les milieux fracturés qui peuvent être sous jacents.

La figure (1.1), montre que dans le cas de la migration dans les milieux fracturés, le transport des contaminants peut se faire par écoulement des phases immiscibles et des composés dissous comme pour les matériaux granulaires. Un mécanisme d'atténuation s'ajoute cependant pour les milieux fracturés qui possèdent également une porosité importante, c'est la diffusion des composés présents dans les pores du matériel encaissant sous l'effet du gradient de concentration.

Dans le paragraphe qui suit, on présente deux modèles conceptuels de la migration des LNAPLs et des DNAPLs dans l'aquifère, basés sur différentes informations recueillies sur les nombreux sites contaminés par ces polluants.

1.1.3. Migration d'un LNAPL

La figure (1.2) ci-dessous montre un modèle conceptuel de la migration d'un LNAPL. Il représente un scénario possible de pollution dans un aquifère.

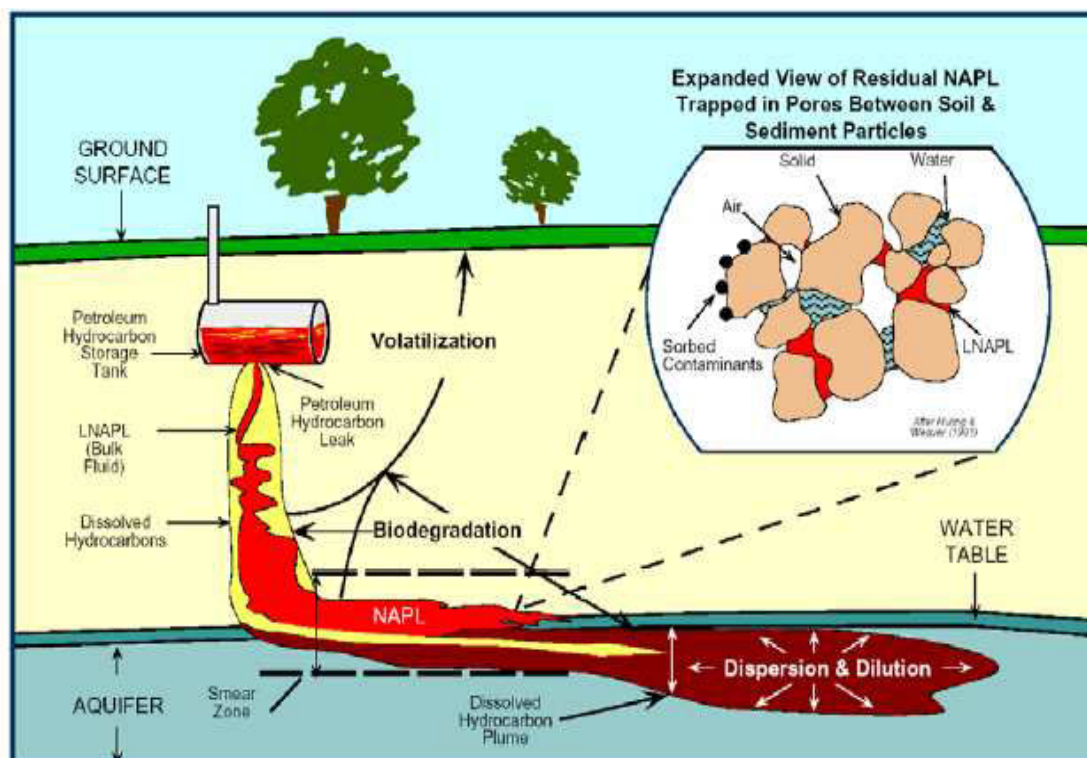


Figure 1.2 : Modèle conceptuel de Migration d'un LNAPL (EPA, 1999a)

La source étant généralement en surface, l'infiltration du LNAPL se fait dans la zone non saturée jusqu'à la surface libre, son passage est repéré par une phase liquide immiscible sous forme résiduelle. Sur la frange capillaire ou la surface libre, une lentille de LNAPL s'accumule selon la quantité qui atteint la nappe. Contrairement à la phase résiduelle, le NAPL dans la lentille est libre de s'écouler et une partie de cette lentille pourrait éventuellement être récupérée par pompage.

En plus du LNAPL résiduel laissé dans le cheminement de l'infiltration à partir de la surface, on retrouve aussi une phase résiduelle en dessous et au-dessus de la lentille de phase libre suite aux fluctuations saisonnières de l'élévation de la nappe. Cet étalement favorise la solubilisation des composés du NAPL par circulation d'eau d'infiltration ou de l'eau souterraine (Fetter, 1993). Dans un tel contexte, plusieurs mécanismes contribuent à la migration des contaminants.

D'abord, l'infiltration d'eau dans la zone non saturée solubilise des composés lors de son passage à travers le NAPL résiduel, ce qui entraîne des contaminants jusqu'à la nappe. Ensuite, certains composés du NAPL se retrouvent dans la phase gazeuse de la zone non saturée, suite à leur volatilisation directement à partir du NAPL (concentration contrôlée par la loi de Raoult) ou par la volatilisation des composés dissous dans l'eau (concentration contrôlée par la loi de Henry). Une fois dans la phase gazeuse, les contaminants peuvent migrer soit par diffusion, sous l'effet de densité si le gaz résultant est plus lourd que l'air, par pompage barométrique lors des changements de pressions atmosphériques, sous l'effet des gradients de températures ou entraînés par le mouvement de masse (advection) de la phase gazeuse s'il est présent. A la surface de la nappe, la circulation d'eau souterraine en contact avec la lentille de phase libre solubilise des composés qu'elle entraîne pour former un panache de contaminants dissous transportés par l'écoulement de l'eau souterraine.

Certains mécanismes contribuent à la réduction de la contamination et permettent une atténuation naturelle du problème. La biodégradation de composés organiques permet une réduction de la masse de contaminants présents dans l'environnement. La dilution et la dispersion des contaminants lors de leur transport ne réduisent pas leur masse totale mais entraînent une diminution de la concentration des contaminants.

1.1.4. Migration d'un DNAPL

La figure (1.3) montre un modèle conceptuel de la migration des DNAPLs. Les mêmes mécanismes que ceux discutés à la section précédente (saturation résiduelle, solubilisation et volatilisation) sont présents dans la zone non saturée pour les DNAPLs.

Le comportement diffère toutefois à partir de la surface libre. Il n'y a pas accumulation du DNAPL au-dessus de la surface libre comme pour le LNAPL mais il y a tout de même un étalement de la phase liquide organique à partir de la surface libre.

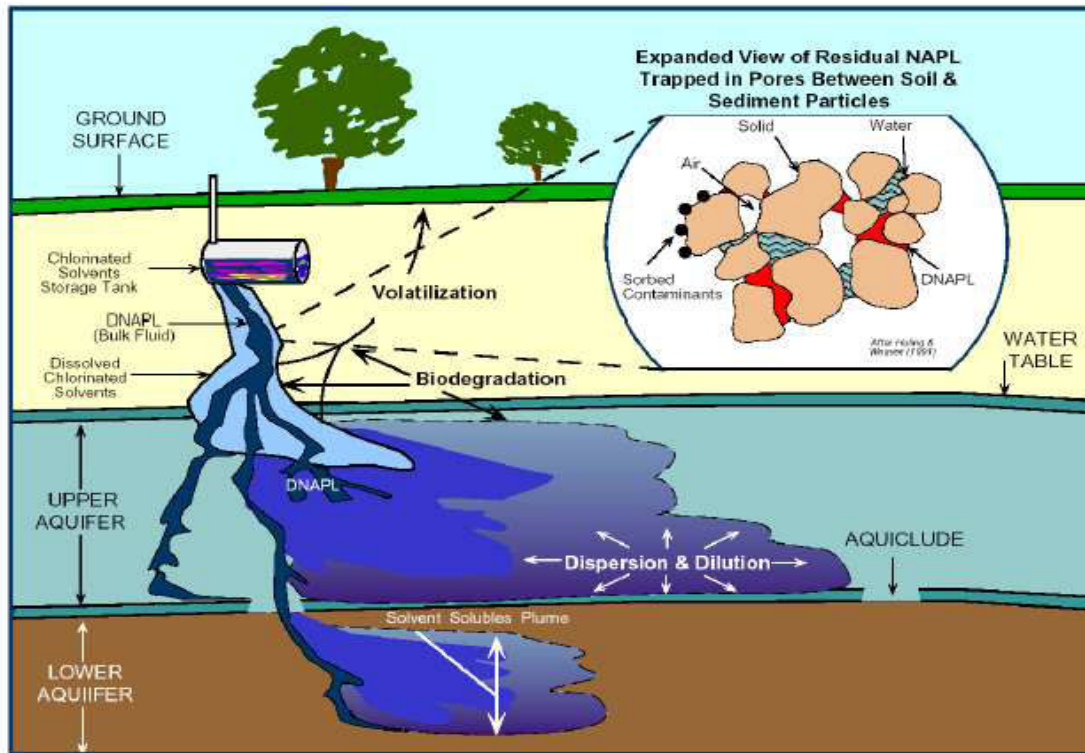


Figure 1.3 : Modèle conceptuel de migration d'un DNAPL (EPA, 1999b)

L'hétérogénéité du milieu contrôle la migration du DNAPL sous la surface libre. Cette migration se poursuit jusqu'à ce que le volume émis soit étalé complètement sous forme de liquide résiduel ou jusqu'à ce qu'une couche continue de faible perméabilité soit rencontrée.

Au-dessus d'une couche de faible perméabilité, la migration de la phase liquide peut se faire dans une direction différente de celle de l'écoulement de l'eau souterraine. C'est en fait la topographie de la surface de la couche de faible perméabilité qui détermine la direction de migration de la phase libre de DNAPL qui s'y accumule. Ce mécanisme peut même mener à la migration du DNAPL en direction opposée à celle de l'eau souterraine.

La contamination de l'eau souterraine par solubilisation des composés du DNAPL peut être beaucoup plus importante que pour un LNAPL pour qu'un grand volume de matériaux puisse contenir des liquides à saturation résiduelle sous la surface libre. Les panaches produits par des zones sources de DNAPL tendent ainsi à être beaucoup plus épais que ceux reliés aux lentilles de LNAPL et à couvrir toute l'épaisseur de l'aquifère. La migration de composés solubilisés suit bien sûr la direction de propagation de l'eau souterraine et subit les mêmes mécanismes d'atténuation naturelle que pour les composés présents dans les LNAPLs.

On trouve dans Pankow et Cherry (1996) une excellente revue du développement des concepts liés aux contaminants immiscibles dans l'eau, particulièrement les DNAPLs. Il est important de réaliser que l'intérêt pour les NAPLs est relativement

nouveau et que les implications de leurs présences dans les sites contaminées n'ont été réalisées que très récemment.

Le tableau (1.1) résume les facteurs facilitant ou inhibant la pénétration des DNAPLs dans la zone non saturée ou saturée.

Factors facilitating DNAPL penetration	Typical circumstances
High DNAPL density	Chlorinated solvents BCB Aroclors
Low interfacial tension	Surfactants or miscible co-solvents such as Methanol, methyl ethyl ketone or acetone in the DNAPL. Surfactants and co-solvents in aqueous wastes or groundwater. Complex DNAPL mixtures.
Low viscosity	Chlorinated solvents
Large DNAPL volume release	Disposal of bulk liquid wastes in landfills, lagoons. Catastrophic spills and on-going leakages
Large duration DNAPL release	Disposal of bulk liquid wastes in landfills, lagoons. On-going leakages
High permeability	Sand, sand & gravel, fractured rock
Vertical and sub vertical geological structure	Angled beddings in sandy aquifers. Fractures, fissures, erosional windows in fine-grained aquitards. Fractured rocks
Low DNAPL density	Coal tar/creosote Chlorinated organics at low concentrations in petroleum hydrocarbons.
High interfacial tension	Relatively pure chemical products.
High viscosity	Coal tar/creosote BCB Aroclors DNAPL mixtures with high concentrations of high molecular weight hydrocarbons.
Small DNAPL volume release	Small spills and leaks.
Short duration DNAPL release	Small one-time spills and leaks.
Low permeability	Unfractured silt and clay aquitards Unfractured rock
Horizontal geological structure	Horizontal bedding in sandy aquifers. Horizontal silt and clay aquitards. Horizontal bedding plane partings in sedimentary rock

Tableau 1.1 : Facteurs de pénétration d'un DNAPL dans la zone non saturée et saturée

1.1.5. Infiltration d'un NAPL dans la zone non saturée

Dans cette partie, on aborde la migration des NAPLs dans la zone non saturée dans les aquifères, afin de mieux comprendre les processus influençant cette migration, et permettre par la suite des approches plus rationnelles pour la caractérisation et la surveillance des sites contaminés par des NAPLs.

La discussion sur le processus d'infiltration a porté jusqu'ici sur l'écoulement d'eau dans la zone non saturée. Certaines des conditions qui s'appliquent pour l'infiltration d'eau ne sont pas réalistes dans le cas de l'infiltration d'un NAPL. Ainsi, une source de NAPL est rarement d'une intensité et d'une durée telle qu'il y a ruissellement de NAPL à la surface du sol.

Généralement, on trouve deux types de sources de NAPL. Le premier correspond à une source de NAPL de faible débit mais assez continue dans le temps, reliée le plus souvent à des fuites de réservoirs. Le second présente un taux d'application initial important mais de faible durée correspondant à un déversement accidentel d'un NAPL, par exemple lors de son transport. Ce dernier type de source permet rarement une saturation complète du sol par des NAPLs, pour deux raisons, d'abord parce qu'il y a rarement accumulation d'une charge de NAPL à la surface de façon continue et durable et ensuite parce que le piégeage d'air au front d'infiltration ainsi que la présence d'une saturation résiduelle en eau limitent la saturation en NAPL maximale possible.

Les figures (1.4) et (1.5) représentent respectivement le comportement capillaire et l'évolution des profils de saturation en NAPLs dans les sols lors de l'infiltration d'un NAPL dans la zone non saturée.

Considérons d'abord le comportement capillaire. La figure (1.4) montre des conditions typiques alors que la saturation en eau est à la capacité au champ suite au drainage par gravité du sol de la zone non saturée.

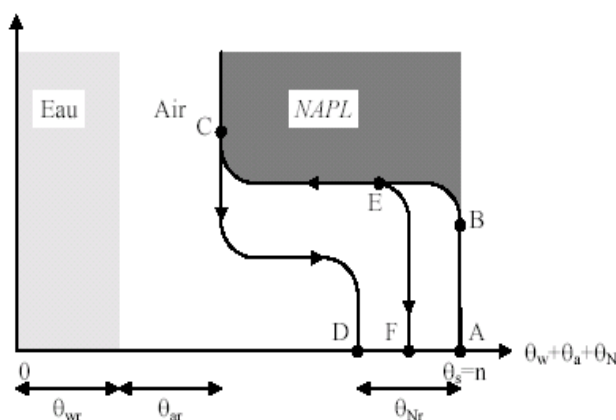


Figure 1.4 : Cheminement des conditions de capillarité et de saturation lors de l'infiltration d'un NAPL dans la zone non saturée

Nous supposons que la saturation en eau est pratiquement égale à la saturation résiduelle en eau. Le sol contient donc initialement de l'eau et de l'air avant

l'infiltration du NAPL, même si la saturation en eau dépasse la saturation résiduelle. Pour que le NAPL puisse s'infiltrer, une épaisseur suffisante de NAPL doit s'accumuler pour que sa pression excède la pression de déplacement. Avec des accumulations plus importantes de NAPL entraînant des pressions capillaires plus fortes, le NAPL pourra sauter une plus grande proportion des pores. Cependant, de l'air est susceptible d'être piégé au front d'infiltration du NAPL de sorte que la saturation maximale en NAPL sera limitée non seulement par la saturation résiduelle en eau S_{wr} , mais également par la saturation résiduelle en air. La perméabilité relative du NAPL s'en trouvera donc d'autant réduite. Certains auteurs utilisent une perméabilité effective maximale égale à 50% de la perméabilité à saturation comme valeur typique durant le processus d'infiltration des NAPLs dans la zone non saturée (Charbeneau & al., 1994).

Certains cheminements différents sont possibles sur les courbes capillaires selon les conditions sous lesquelles se fait l'infiltration des NAPLs. La figure (1.5a) montre les conditions de saturation en NAPL en fonction du temps pour un cas d'infiltration avec une accumulation constante de NAPL à la surface. On suppose dans ce cas que les conditions de saturations suivent le cheminement A-B-C-D sur la figure (1.4).

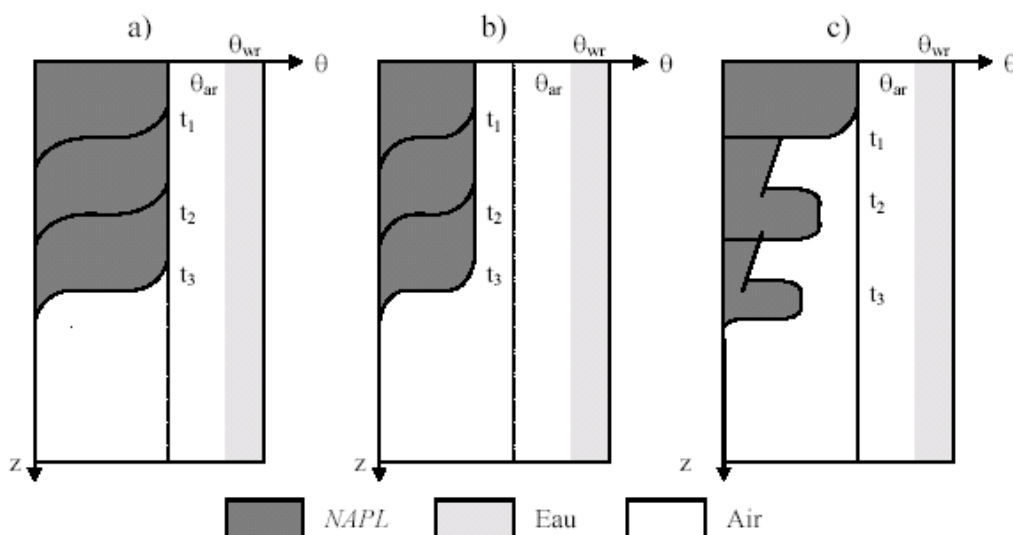


Figure 1.5 : Saturation en NAPL dans la zone non saturée selon le type de déversement : a) infiltration continue à fort débit et b) faible débit et c) déversement instantané

L'accumulation initiale de NAPL a créé une pression capillaire allant du point A au point B par laquelle l'entrée du NAPL dans le sol est possible. Notons que la pression de déplacement requise (point B) peut être très faible et qu'il peut même y avoir une légère succion puisque c'est de l'air qui est déplacé par le NAPL et non de l'eau. La mouillabilité pour le NAPL et l'air d'un système contenant déjà de l'eau est complexe, mais le NAPL est susceptible d'être plus mouillant que l'air. Une augmentation de la pression du NAPL lui permettra de déplacer l'air jusqu'à sa saturation résiduelle. Après le passage du NAPL, le parcours capillaire va du point C au point D et il reste alors une saturation résiduelle de NAPL, de l'air et une saturation résiduelle en eau dans la zone non saturée. Dans ces conditions le front d'infiltration se déplace vers le bas en fonction du temps et une saturation maximale

en NAPL est présente sur l'ensemble de la zone non saturée de la surface jusqu'au front d'infiltration. Après l'infiltration, une saturation résiduelle demeure dans le sol. Les conditions d'infiltration illustrées par la figure (1.5a) sont rares. Lorsque l'infiltration de NAPL se fait à long terme à débit relativement constant, il s'agit le plus souvent de fuites de réservoirs qui provoquent des débits relativement faibles.

La figure (1.5b) montre les conditions de saturation en fonction du temps pour de faibles taux d'infiltration. La saturation maximale en NAPL ne sera alors pas nécessairement atteinte car la perméabilité relative du NAPL requise pour soutenir le taux d'infiltration peut ne pas l'exiger. La figure (1.5b) montre le comportement capillaire qui prévaut alors le cheminement A-B-E-F : après avoir atteint la pression de déplacement, il y a peu d'accumulation supplémentaire de NAPL et la saturation maximale correspond au point E. la saturation résiduelle est susceptible d'être alors inférieur (point F) car il y a un lien entre les saturations en NAPL initiales et finales.

Le dernier cas d'infiltration de NAPL est illustré par la figure (1.5c) où il n'y a plus infiltration continue mais déversement soudain du NAPL. La propagation du NAPL en fonction du temps montre une diminution de la saturation maximale car la source de NAPL diminue à cause des pertes sous forme de saturation résiduelle à l'arrière du front d'infiltration. Le cheminement de la saturation en NAPL sur la figure (1.5) est initialement A-B-C-D près de la surface mais il devient plutôt A-B-E-F en profondeur car le flux de NAPL diminue avec la profondeur. Les situations montrées ne tiennent pas compte de l'instabilité du front d'infiltration, de l'effet de l'hétérogénéité, ni du cheminement préférentiel. Tous ces phénomènes contribuent à diminuer la saturation en NAPL dans la zone non saturée suite à son infiltration car ils provoquent l'évitement de certains volumes de sol par le front d'infiltration. Certains volumes de sol ne contiennent donc pas de NAPL.

1.1.6. Les modes de transport des NAPLs

Lorsqu'un NAPL pénètre dans le sol et atteint la nappe phréatique, il trouve un milieu propice à son déplacement. Sa migration est la résultante de plusieurs mécanismes, le premier est celui de l'**advection**. Il s'agit d'un déplacement du contaminant lié au mouvement du fluide vecteur, c'est-à-dire l'eau dans le sol, sous l'effet d'un gradient hydraulique. Le polluant avance, à la vitesse moyenne de l'eau. Lorsque l'eau n'est pas en mouvement (gradient hydraulique nul ou pores isolés inefficaces pour l'écoulement), on observe un déplacement du contaminant. C'est le phénomène de **diffusion moléculaire** qui en est responsable : il a tendance à équilibrer les concentrations en contaminant dans le sens des gradients décroissants. Alors que nous pouvons nous attendre à un déplacement moyen du contaminant sous l'effet de l'advection, il apparaît qu'une fraction du contaminant va atteindre des zones vierges plus vite que s'il se déplaçait à la vitesse moyenne du fluide. A l'opposé, une autre fraction du contaminant arrivera « en retard » sur la moyenne. Nous sommes en présence du phénomène de **dispersion**. Celui-ci résulte de l'hétérogénéité du champ des vitesses du fluide vecteur qui peut s'expliquer par la granulométrie du sol, à l'échelle microscopique.

On conçoit dès lors que le phénomène de dispersion hydrodynamique, résultant à la fois de la diffusion, de l'advection et de la dispersion, soit dépendante de l'**échelle du problème** considéré, ainsi que de l'**hétérogénéité** sur la portion de terrain choisie.

Il semble donc primordial d'arriver à mieux caractériser ce phénomène de dispersion lors d'un écoulement multiphasique et définir par la suite l'expression du tenseur de dispersion associé pour pouvoir agir correctement.

Le paragraphe qui suit est consacré au phénomène de dispersion et aux méthodes de changements d'échelles, les différents travaux menés sur ce sujet et les résultats obtenus.

1.2. Dispersion hydrodynamique des polluants

1.2.1. Définition

Le phénomène de dispersion est souvent associé au mouvement du fluide en présence du milieu poreux. A un moment donné, Les particules qui constituent les fluides ont tendance à s'éloigner dû à de nombreux mécanismes physiques (advection, diffusion moléculaire,...). Quand ces derniers se produisent en présence d'un gradient de concentration, le mouvement du fluide est identifié par un processus de dispersion.

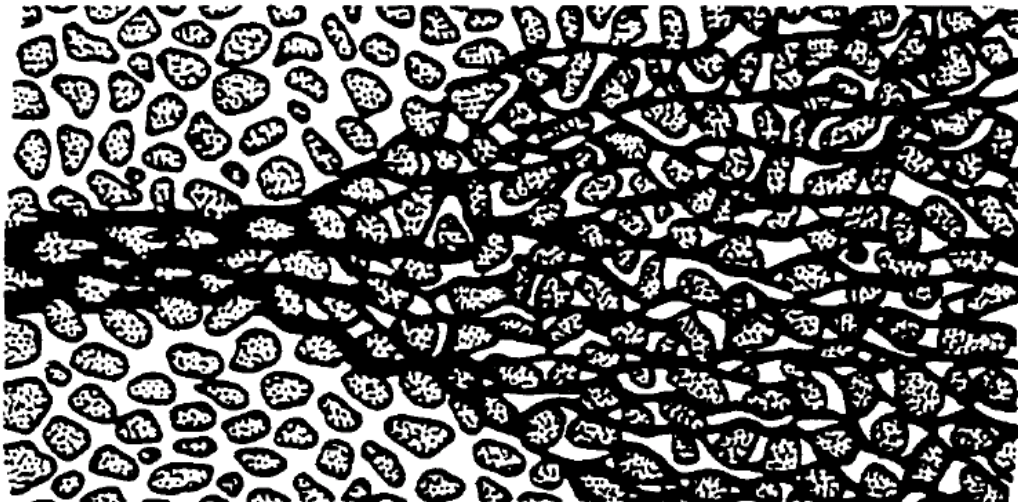


Figure 1.6 : Mécanisme de dispersion dans le sous-sol

La dispersion peut aussi être interprétée par tout changement causé par l'existence de différentes couches, des effets de densité, les variations du flux dans le temps ainsi que l'émission des polluants par des sources inconnues et avec des taux variables.

Statistiquement la dispersion tient compte de la déviation par rapport au mouvement moyen. Plus la distance parcourue par une particule est importante, plus elle a la

chance de rencontrer des hétérogénéités qui augmentent sa déviation par rapport à un système homogène idéalisé.

1.2.2. Théorie du tenseur de dispersion

Le tenseur de dispersion est souvent relié aux caractéristiques de l'aquifère et du fluide. Différentes approches sont utilisées pour quantifier ce coefficient. Les premières tentatives d'utilisation de modèles géométriques dans lesquels le transport à travers des tubes est étudié ont eu lieu dans les années 50 (Taylor 1953, Aris, 1959). Le paramètre de dispersion a été obtenu par homogénéisation de l'écoulement de Stokes à travers la petite section du canal. La généralisation de ces modèles aux milieux poreux naturels étant très difficiles, d'autres méthodes ont été développées en même temps.

Les modèles statistiques permettent d'établir le cadre général de la théorie classique de la dispersion sans définir la relation entre les caractéristiques du milieu et le coefficient de dispersion, l'approche statistique est directement développée à partir du processus physique qui produit de la dispersion. Elle est basée sur les méthodes de la théorie du mouvement Brownien des particules.

Scheiddegger (1954) a développé un modèle statistique dans lequel il a introduit un paramètre appelé la dispersivité du milieu:

$$D = av \quad (1.1)$$

Où D est le coefficient de la dispersion [L^2T^{-1}], a est la dispersivité [L] et v est la vitesse du transport [LT^{-1}]. La dispersion dépend linéairement de la vitesse du transport et d'une caractéristique du milieu poreux appelée la dispersivité. Une conséquence de la méthode aléatoire est que le coefficient de la dispersion de Scheiddegger est scalaire, tandis qu'en réalité, la dispersion est plus prononcée dans la direction longitudinale que celle transversale.

Les expériences in situ et en laboratoire (Josselin de Jong (1958) et Saffman (1960)) suggèrent que la dispersion soit plus importante dans la direction du mouvement que dans la direction transverse. On a ainsi le coefficient de dispersion longitudinale D_L et celui de dispersion transversale D_T , exprimés par:

$$D_L = a_L v, \quad D_T = a_T v \quad (1.2)$$

Où a_L et a_T sont les dispersivités longitudinale et transversale [L].

La théorie générale de la dispersion proposée par Bear (1961) et Scheiddegger (1961) exprime la dispersion par un tenseur d'ordre 2 qui dépend à son tour du tenseur de dispersivité qui est lui un tenseur d'ordre 4.

Pour un milieu isotrope, dans un cas bidimensionnel, le tenseur de dispersion a les composantes suivantes :

$$D_{xx} = a_L \frac{v_x^2}{|v|} + a_T \frac{v_y^2}{|v|}, \quad D_{yy} = a_T \frac{v_x^2}{|v|} + a_L \frac{v_y^2}{|v|} \quad (1.3)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (a_L - a_T) v_x v_y \quad (1.4)$$

avec: $|v| = (v_x, v_y)^{1/2}$. Généralement, la diffusion est prise en compte en ajoutant les coefficients de la diffusion aux termes diagonaux du tenseur. Par rotation du système de coordonnées dans le sens de l'écoulement, les coefficients sont réduits à la dispersion longitudinale et transversale (directions principales de l'écoulement).

Alors, dans un repère lié au mouvement dans lequel la première direction est dirigée suivant le sens de la vitesse, et les deux autres constituent un repère orthonormé avec la première, le flux dispersif s'écrit sous la forme suivante:

$$D = \begin{bmatrix} a_L |v| & 0 & 0 \\ 0 & a_T v & 0 \\ 0 & 0 & a_T |v| \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

Où a_L et a_T sont les dispersivités longitudinale et transversale (L) et $||$ désigne la norme du vecteur.

D'une manière plus générale, lorsque le milieu est anisotrope, la relation entre la dispersion mécanique et la vitesse de convection exige un formalisme plus complexe. On écrit :

$$D_{ij} = \sum_k \sum_m a_{ijkm} \frac{v_k v_m}{|v|} \quad (1.6)$$

Où les a_{ijkm} sont les composantes de dispersivité du milieu, formant un tenseur d'ordre 4.

La linéarité de la fonction $D(v)$ n'a lieu que dans un intervalle fixe de la variation de la vitesse. Pour toute valeur de vitesse, la dispersion n'est pas une fonction linéaire de v_c . Les expressions suivantes sont souvent utilisées :

$$\frac{D_{hL}}{D_m} = c_1 (Pe)^{m_1}, \quad (1.7)$$

$$\frac{D_{hT}}{D_m} = c_2 (Pe)^{m_2} \quad (1.8)$$

$$1 < m_1 \text{ et } m_2 < 1.2, Pe = L \frac{|\vec{v}_c|}{D_m}$$

Le nombre adimensionnel de Peclet est le rapport entre la convection et la diffusion moléculaire.

1.2.3. Dispersion et changement d'échelle

En milieu poreux naturel, les mesures de perméabilité et de porosité varient d'un point à l'autre. Ces variations sont irrégulières spatialement et concernent des distances bien supérieures à l'échelle du laboratoire.

L'une des principales conséquences de l'hétérogénéité est qu'elle peut conduire à des variations significatives des vitesses du fluide sur de courtes distances. Sachant que le gradient hydraulique est le principal moteur du mouvement d'eau souterraine (loi de Darcy) et la vitesse du fluide est directement proportionnelle à la perméabilité, si la valeur de la perméabilité varie d'un ordre de grandeur entre deux endroits très proches, alors, pour un même gradient hydraulique, les vitesses varieront du même ordre de grandeur. Ainsi l'existence d'une variabilité spatiale des conductivités hydrauliques entraîne une variabilité spatiale du champ des vitesses.

Les milieux poreux sont donc caractérisés par une forte hétérogénéité spatiale, en particulier de la perméabilité. Ces hétérogénéités de la perméabilité provoquent à leur tour le phénomène de dispersion.

L'étude du phénomène de dispersion peut se faire à différentes échelles en partant de l'échelle du pore jusqu'aux grandes échelles. En général trois échelles sont considérées, une microscopique associée aux dimensions du pore, l'autre macroscopique liée aux dimensions d'un échantillon de l'aquifère et une dernière intermédiaire dite échelle du volume élémentaire représentatif (VER), le passage d'une échelle à une autre se fait à l'aide d'une technique de changement d'échelle.

La technique de changement d'échelle remonte aux 19^{ème} siècle (Poisson, Faraday, Maxwell, Rayleigh) où un travail très volumineux a été effectué sur ce sujet. Cependant le problème reste ouvert et toujours d'actualité (Barker & Dupouy, 1999 ; Christie, 2001 ; Ataie-Ahtiani & al., 2001). Elle a été traitée pour différents phénomènes tels que l'écoulement monophasique (Whitaker, 1986c), l'écoulement diphasique (Whitaker, 1986b), ou le problème de transport (Eidsath & al., 1983; Quintard & Whitaker, 1993a, 1993b). Ces études ont permis de retrouver, de manière théorique, les équations de conservation de la masse ou de la quantité de mouvement à l'échelle de Darcy écrites intuitivement. Par ailleurs, la prise de moyenne volumique a fourni un lien explicite entre la microstructure d'un milieu poreux et les propriétés locales (perméabilité, tenseur de dispersion, ...).

Dans les premiers travaux visant à modéliser la dispersion macroscopique, une approche de l'équation décrivant l'écoulement a été adoptée (Plumb & Whitaker, 1988a). Cependant, la conservation des termes faisant intervenir des dérivées

secondes temporelles où spatiales rend son application difficile. La simplification éventuelle de ces termes a été discutée dans (Plumb & Whitaker, 1988b).

À partir d'une description à l'échelle microscopique (Quintard & Whitaker, 1994) ont identifié les paramètres effectifs à l'échelle de VER, la méthode de changement utilisée "prise de moyenne" a permis d'obtenir une équation à l'échelle locale cohérente avec les modèles classiques connus, dans le même contexte on cite aussi, (Lee, 1979); (Brenner, 1980); (Carbonell & Whitaker, 1983).

Dans un travail de Chella et al. (1998), les deux chercheurs ont réussi à déterminer directement les propriétés effectives à l'échelle de VER à partir de la micro-géométrie et des propriétés à l'échelle de pore, les grandeurs effectives ont été obtenues par voies numériques en résolvant les problèmes de fermetures sur des cellules unitaires périodiques représentatives du milieu poreux (Quintard & Whitaker, 1994).

A titre d'exemple, plusieurs sujets de recherches sont reliés à la technique de changement d'échelle tels que : le développement théorique de la loi de Darcy établie à partir de l'équation de Stokes à l'échelle microscopique (Raats, 1965; Brenner, 1980; Auriault, 1987, Whitaker, 1986a ; Auriault & Sanchez-Palencia, 1986), ainsi qu'une formulation de type Darcy-Forchheimer obtenue à partir de l'équation de Navier Stokes à l'échelle du pore (Whitaker, 1996).

Dans la littérature, on trouve plusieurs techniques de changement d'échelle telles que les méthodes stochastiques, la méthode de prise de moyenne et la méthode d'homogénéisation. La première technique a été utilisée pour traiter des problèmes de transport de soluté en milieu hétérogène aléatoire (Tompson & Gelhar, 1990; Graham & McLaughlin, 1991; Burr & al., 1994; Bosma & Van der Zee, 1995). Elle a également été utilisée pour étudier l'écoulement diphasique en milieu poreux hétérogène (Montogolou & Gelhar, 1989). Cette approche consiste à considérer les propriétés caractérisant les milieux poreux comme aléatoires. Une grandeur (porosité, perméabilité, vitesse, ...) à l'échelle de Darcy est définie par la somme de sa valeur moyenne et une fluctuation aléatoire fonction de ses moments statistiques (espérance, variance,...), le développement théorique des équations macroscopiques stochastiques est rendu alors possible grâce aux hypothèses sur la statistique des propriétés locales.

La méthode de prise de moyenne permet de déterminer les équations et les propriétés effectives à une échelle donnée par une prise de moyenne volumique à partir de celles décrites à une échelle inférieure. Depuis sa première mise en forme (Slattery, 1967; Whitaker, 1967; Marle, 1967a, 1967b), cette méthode a couvert de nombreuses applications telles que les écoulements monophasiques (Whitaker, 1986c), diphasiques (Whitaker, 1986b), le transport de soluté (Eidsath & al., 1983; Quintard & Whitaker, 1993a, 1993b), ...

1.2.4. Homogénéisation d'ordre élevée et dispersion hydrodynamique

Certaines recherches menées dans le cadre de l'homogénéisation des écoulements diphasiques (Quintard, 1993a, 1993b ; Bourgeat & Hidani, 1995; Bourgeat & Panfilov, 1998 ; Bourgeat & Mikelic, 1998; ...) ont amené aux différents modèles macroscopiques qui étaient pourtant dépendants du phénomène de dispersion. Ce paradoxe a l'explication suivante.

Suivant les travaux basiques de Taylor et Aris, le terme de dispersion à l'ordre de grandeur ε^2 , ε étant le rapport de l'épaisseur du canal sur sa longueur. Ainsi, la dispersion ne peut apparaître que dans des approximations d'ordre supérieur à zéro dans des développements asymptotiques. Cependant la théorie d'homogénéisation classique a pour objectif d'obtenir le terme d'ordre zéro seul. Ainsi pour capturer la dispersion, il faut construire le modèle homogénéisé d'ordre supérieur à zéro.

La technique de l'homogénéisation de ce type est appelée l'homogénéisation d'ordre élevée. Cette technique sera appliquée dans ce travail.

1.2.5. Dispersion dans un écoulement diphasique

Le phénomène de dispersion est bien connu dans les écoulements monophasiques et son importance est prouvée. Cependant, il n'est pas toujours pris en compte en théorie diphasique, ceci est lié particulièrement à la difficulté de son étude du point de vue mathématique.

En effet, le modèle classique de l'écoulement diphasique en milieux poreux sous formes de l'équation de Buckley-Leverett (1.9) ou de Richards (1.10) ne contient que le terme de diffusion apparente provoqué par des forces capillaires :

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + V \frac{\partial F(s)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\Phi(s) \frac{\partial s}{\partial z} \right) \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] \quad (1.10)$$

Dans l'équation (1-9), $F(s)$ est dite fonction de distribution des phases (« fractional flow »), le second membre correspondant à la diffusion capillaire, V est la vitesse de transport et s est la saturation de l'eau. La fonction $\Phi(s)$ est appelée diffusion capillaire. Elle est définie de la façon suivante :

$$\Phi(S) = - \frac{k_i k_{r2}}{\mu_2} F(S) \frac{dP_c}{dS} \quad (1.11)$$

où P_c est la pression capillaire, k_{r_i} est la perméabilité relative de la phase i et μ_i est la viscosité de la phase i , ($i=1,2$).

Dans l'équation (1.10), θ est la teneur en eau volumique, H est la charge hydraulique, K est la conductivité hydraulique et h est la pression relative par rapport à la pression atmosphérique de l'eau exprimée en hauteur d'eau et H , définie par : $H = h(\theta) - z$

L'équation de Richards (1.10) peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right] \quad (1.12)$$

$D(\theta)$ est le coefficient de diffusivité (Childs et Collis-Georges en 1950),

$$D(\theta) = K(\theta) \frac{\partial h}{\partial \theta} \quad (1.13)$$

On parle bien de diffusion puisque ce terme ne dépend pas de la vitesse. On parle de dispersion lorsqu'il existe une dépendance vis-à-vis de la vitesse. Ainsi la dispersion n'est pas présente.

Les premiers résultats concernant la dispersion diphasique reviennent aux deux chercheurs norvégiens Langlo et Espedal (1994). La méthode utilisée pour obtenir le coefficient de dispersion est la méthode de prise de moyenne sur un volume ou « volume averaging ». Elle consiste à intégrer l'équation de transport de saturation sur un VER (volume élémentaire représentatif). Les résultats de ce travail sont peut être à remettre en question. En effet, le point faible de cette méthode est le choix de l'hypothèse de fermeture du modèle. L'hypothèse est assez approximative, ce qui explique la qualité des résultats obtenus. Ainsi, le coefficient de dispersion est proportionnel au carré de la dérivée de la pression capillaire $F'(S)$. Les forces capillaires ont été négligées, i.e. :

$$D \sim (F')^2 \quad (1.14)$$

Cependant dans (Panfilov, 2000, a) et plus tard dans (Buès & Panfilov, 2002), le même paramètre, en milieu périodique est simplement proportionnel à la dérivée de la pression capillaire :

$$D \sim F' \quad (1.15)$$

Dans un article de Glimm et Chen (1996), l'équation de Buckley-Leverett sans forces capillaires a été homogénéisée à l'aide de la méthode de renormalisation appliquée souvent en turbulence et en théorie du point critique. Suite au caractère non-linéaire de l'écoulement diphasique, la technique de renormalisation a été appliquée d'une façon approximative, le résultat s'est manifesté sous forme d'une fonction "fractional flow" renormalisée, sans aucune apparition d'un terme de diffusion.

Des résultats opposés à ceux de (Langlo & Espedal, 1994) sont obtenus dans (Neuweiler & al, 2003) pour un milieu stochastique faiblement hétérogène. En comparaison avec des simulations numériques, leurs résultats, sont aussi approximatifs mais beaucoup plus exacts que ceux obtenus par Langlo et Espedal.

Panfilov et Floriat (2004) utilisent la méthode d'homogénéisation asymptotique, une technique bien rigoureuse. Le résultat obtenu pour le tenseur de dispersion est assez différent de celui trouvé par Langlo et Espedal. Il est proportionnel à la dérivée de la pression capillaire $F'(S)$. Ici l'écoulement diphasique a été examiné en milieu périodique, uniquement en présence des forces gravitaires. Le modèle homogénéisé obtenu par rapport au modèle initial, contient un terme supplémentaire provoqué par l'effet de transport de décélération, du même ordre que celui de dispersion, le tenseur de dispersion est une fonction non linéaire de vitesse de transport et non linéaire non monotone de saturation. Ces résultats théoriques sont validés par des simulations numériques et peuvent être considérés comme une loi universelle indépendante du type de l'hétérogénéité du milieu (faible ou forte). En même temps ces résultats sont confirmés uniquement en négligeant les effets des forces capillaires et gravitaires.

Lenormand (2000) a remarqué, à partir de résultats numériques pour un écoulement sans forces capillaires, que la forme du coefficient de dispersion en fonction de la saturation était la même que celle de la dérivée de la pression capillaire (dP_c/dS). Ce résultat a été obtenu à partir de la largeur de la zone de dispersion. Un modèle de milieu poreux artificiel, composé de couches de tubes capillaires, a été utilisé.

Dans (Noetinger & Artus, 2003), une description complète du couplage entre les hétérogénéités de perméabilités sur les écoulements immiscibles en milieu poreux et les instabilités visqueuses a été mise en place afin de lever la contradiction sur l'approche de dispersion macroscopique en utilisant des considérations de stabilité qui permettent de prévoir l'occurrence de solutions stationnaires. L'hypothèse couramment admise de négliger la non-linéarité due au couplage visqueux est la clé du problème. Dans le cas stable, il est possible de relier les propriétés statistiques du front aux propriétés statistiques du champ de perméabilités sous jacent. Des tests numériques ont confirmé la théorie.

Une approche différente est en développement par (Glimm & al, 1998), où l'écoulement diphasique sans forces capillaires a été examiné. Le travail est basé sur des simulations numériques et les méthodes de renormalisation. La zone de mélange non seulement peut être décrite en terme de dispersion hydrodynamique mais peut également produire des sérieuses modifications au niveau de terme convectif déterminé par la fonction de flux fractionnaire (*fractional flow*). En particulier pour un écoulement avec des digitations (formation de doigts), le modèle homogénéisé est recommandé sans aucune dispersion. La fonction de flux fractionnaire macroscopique a été obtenue par des simulations numériques. En général, cette fonction est différente de celle au niveau microscopique.

À partir de cette synthèse bibliographique, il vient que certains résultats sont actuellement déjà obtenus sur la dispersion diphasique, cependant tous les travaux ont analysé uniquement le cas sans forces capillaires. Ainsi le rôle des forces capillaires dans la dispersion diphasique reste totalement non étudié.

Afin de pouvoir confirmer le rôle de forces capillaires sur la dispersion hydrodynamique, l'étude du modèle de Richards, pour lequel ces forces sont considérées comme les forces motrices de tout l'écoulement, a été imposée.

1.2.6. Dispersion et digitation

Le phénomène de digitation ressemble formellement à la dispersion, mais ayant des origines physiques différentes.

Dans le cadre d'un écoulement du NAPL, l'instabilité peut être causée par deux raisons physiques :

- 1- La masse volumique du polluant est inférieure à celle du fluide sur place (instabilité de Rayleigh-Bénard);
- 2- La mobilité en fluide entrant est inférieure à celle du fluide sur place (instabilité de Saffman-Taylor).

L'analyse de processus instables physiquement s'effectue par des méthodes spéciales et ne peut pas être effectuée dans le cadre de l'approche classique (analyse de solutions irrégulières d'un système de conservation). Ainsi, dans la thèse présente, nous étudierons uniquement les processus stables.

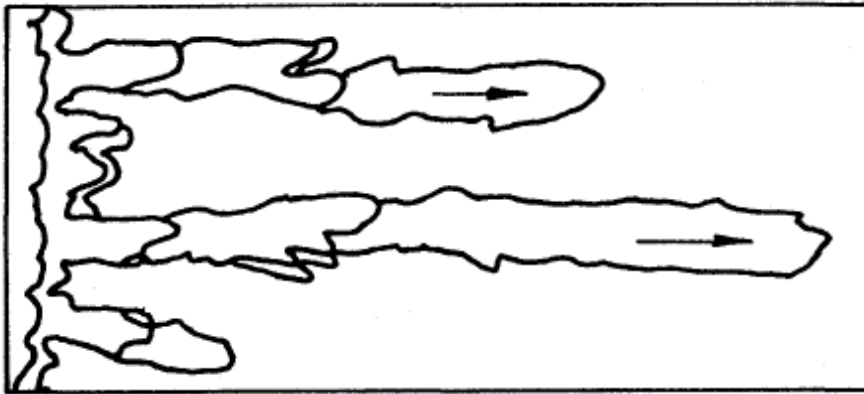


Figure 1.7 : Instabilité des fronts du déplacement d'un fluide immiscible par un autre plus mobile

Chapitre 2
ÉTUDE THÉORIQUE DE LA
DISPERSION GRAVITAIRE
CAPILLAIRE EN MILIEU POREUX
HÉTÉROGÈNE

Le phénomène de dispersion hydrodynamique a une grande importance dans l'étude des écoulements multiphasiques. On s'intéresse plus particulièrement au processus de la formation d'une zone de mélange lors du déplacement d'une phase par une autre dans un milieu poreux hétérogène non saturé.

Dans cette étude la contribution des forces capillaires et de gravité dans la dispersion est prise en compte. Le modèle mathématique dans un tel milieu est examiné par la méthode d'homogénéisation à double échelle. Ainsi le modèle macroscopique d'écoulement obtenu contient un nouveau terme de dispersion, à deux composantes provoquées par les forces gravitaire et capillaire.

Dans un premier temps, on a essayé de développer le modèle homogénéisé de l'écoulement d'un NAPL dans la zone non saturée sous l'effet de la gravité et la capillarité. Le problème cellulaire est résolu numériquement par un logiciel, FEMLAB, destiné à résoudre les équations aux dérivées partielles (EDP) non linéaires.

Pour divers cas, la structure du tenseur de dispersion peut être calculée de façon explicite.

2.1. Formulation du problème

2.1.1. Formulation physique

On considère un écoulement pseudo-triphasique dans un milieu poreux hétérogène dont les trois phases suivantes coexistent :

Phase 1 : liquide (NAPL)

Phase 2 : air

Phase 3 : eau résiduelle (immobile)

On admet que les interactions chimiques entre les phases sont absentes.

Ce système représente la zone non saturée de l'aquifère.

En même temps, ce modèle peut représenter la zone saturée dans certaines situations. Alors dans ce cas, la phase 2 est représentée par l'eau. En effet, supposons que la viscosité de l'eau est beaucoup plus petite que celle du NAPL, donc toute perte de charge est négligeable. Ainsi la pression de l'eau peut être considérée comme constante :

$$P_2 = const \quad (2.1)$$

Pour l'air, cette hypothèse est classique, pour l'eau de la zone saturée cette hypothèse n'est valide que lorsque le polluant est très visqueux.

Nous supposons ensuite que la compressibilité de la phase 1 et du milieu poreux est plus petite que celle de la phase 2, et donc est négligeable.

Si la phase 2 est l'air, cette hypothèse est valable toujours, si la phase 2 est l'eau, cette hypothèse doit être remplacée par celle de l'incompressibilité de tous les fluides. Ainsi, on a :

$$\rho_1 = const, \rho_2 = const, \rho_3 = const \quad (2.2)$$

où ρ_i est la masse volumique de la phase i .

Le milieu poreux est hétérogène par rapport à la perméabilité et à la porosité qui sont des fonctions périodiques spatiales.

Nous introduisons les grandeurs caractéristiques suivantes :

L : grandeur macroscopique, taille linéaire du domaine.

l : grandeur microscopique, période d'hétérogénéité, de façon que $\varepsilon = \frac{l}{L}$ soit un paramètre petit :

$$0 < \varepsilon \ll 1 \quad (2.3)$$

Nous cherchons à passer de l'échelle microscopique (l) à l'échelle macroscopique (L) à l'aide de la technique d'homogénéisation asymptotique permettant de capturer le phénomène de dispersion hydrodynamique.

2.1.2. Formulation mathématique

Lors d'un écoulement multiphasique, chacune des phases est considérée comme un continuum occupant la totalité du milieu, à une saturation dépendant des variables spatio-temporelles.

2.1.2.1. Équations de conservation

Les équations suivantes régissent cet écoulement.

- Bilan de masse et de mouvement du NAPL :

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \vec{v}_l = 0 \\ \vec{v}_l = -\frac{Kk_l}{\mu_l} \text{grad}(P_l - \rho_l gZ) \end{array} \right. \quad (2.4)$$

$$\vec{v}_l = -\frac{Kk_l}{\mu_l} \text{grad}(P_l - \rho_l gZ) \quad (2.5)$$

- Mouvement de la phase 2 :

- Si la phase 2 = air : $\mu_2 = 0, \rho_2 = 0$ alors $\text{grad}P_2 = 0 \Rightarrow P_2 = \text{const}$

- Si la phase 2 = eau beaucoup moins visqueuse que le polluant :
 $\mu_2 \approx 0, \rho_2 = \text{const}$ alors $\text{grad}(P_2 - \rho_2 gZ) = 0 \Rightarrow P_2 - \rho_2 gZ = \text{const}$

Dans le cas général, on a donc :

$$P_2 = \text{const} + \rho_2 gZ \quad (2.6)$$

- Comportement de l'eau résiduelle (phase 3) :

$$s_w = \text{const} \quad (2.7)$$

2- Étude théorique de la dispersion gravitaire capillaire en milieu poreux hétérogène

Soit s la saturation du NAPL, ϕ la porosité, K la perméabilité intrinsèque du milieu, k_l, μ_l, ρ_l, P_l respectivement la perméabilité relative, la viscosité dynamique, la masse volumique et la pression du NAPL, v la vitesse de Darcy; g l'accélération de la pesanteur, Z la coordonnée verticale parallèle à la direction de forces de gravité orientée vers le bas, de façon que le système de coordonnées soit $(X_1, X_2, X_3 = Z)$.

- L'équation de l'équilibre capillaire :

$$P_l = P_2 - P_c(s) \quad (2.8)$$

avec $P_c(s)$ la pression capillaire $[M. L^{-1}.T^{-2}]$.

Nous supposons que la phase NAPL est plus mouillante, ainsi P_c définie à l'aide de l'équation (2.8) est positif.

2.1.2.2. Relations de fermetures

Les quatre conditions suivantes sont supposées :

$$k_l = k_l(s), \quad 0 \leq s \leq 1; \quad k_l(s) \equiv 0, \quad 0 \leq s \leq s_*; \quad dk_l / ds \geq 0, \quad \forall s \quad (2.9)$$

$$P_c = P_c(s), \quad s_* \leq s \leq 1; \quad dP_c / ds \leq 0, \quad \forall s \quad (2.10)$$

$$\mu_l = \text{const} \quad (2.11)$$

$$\rho_l = \text{const} \quad (2.12)$$

La perméabilité relative (figure (2.1)) et la pression capillaire (figure (2.2)) sont supposées être fonctions uniquement de la saturation. Ces deux hypothèses sont critiquées dans la littérature du fait qu'elles représentent une description trop simplifiée des phénomènes capillaires en milieux poreux et ne prennent pas en compte la répartition des phases qui sont considérés comme une seule phase continue sur l'ensemble du milieu poreux. Cependant, cette critique n'a pas encore abouti à un modèle plus avancé des perméabilités relatives.

La pression capillaire en fonction de la saturation dépend du sens d'évolution de la saturation, selon un processus de drainage ou d'imbibition du fluide mouillant. Ce phénomène appelé hystérésis capillaire est lié au piégeage du fluide non mouillant et aux différences de l'angle de contact lorsqu'il s'agit de drainage ou d'imbibition.

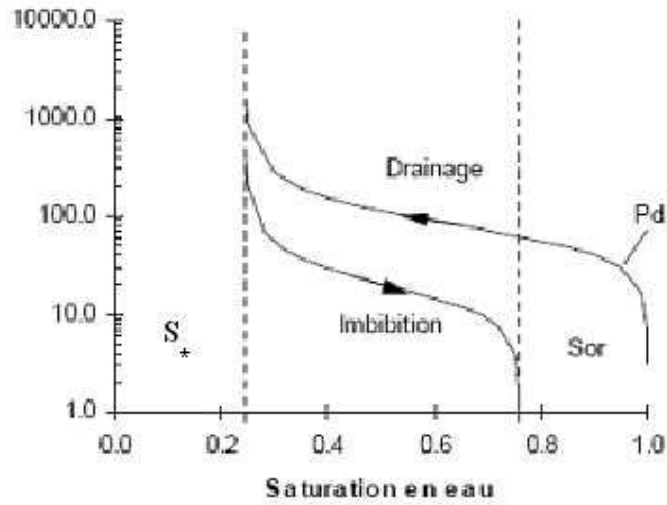


Figure 2.1 : Courbe de pression capillaire

Pendant le drainage, les pores les plus larges se vident rapidement alors que les pores les plus petits sont drainés plus lentement. La rétention capillaire explique pourquoi la pression capillaire correspond à des saturations plus élevées sur la courbe de drainage. Pendant l'imbibition, les pores les plus petits sont remplis en premier temps, alors que les plus larges sont moins susceptibles de se remplir. Ce phénomène conduit à une pression capillaire plus faible en fonction de la saturation (Thomas, 1982).

Les perméabilités relatives ont une forme traditionnelle :

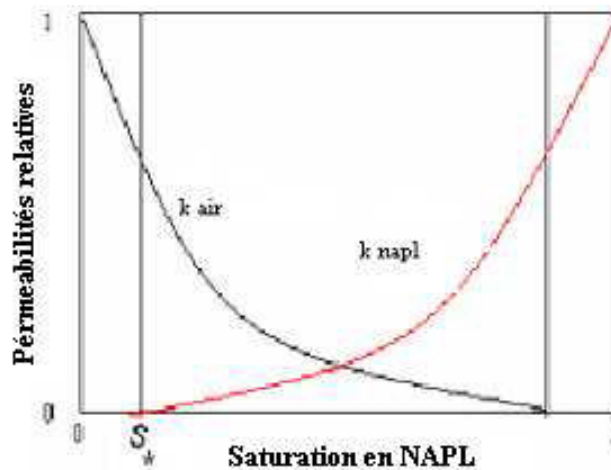


Figure 2.2 : Courbes caractéristiques de perméabilités relatives pour un système diphasique

s_* est la saturation irréductible en NAPL, à laquelle le NAPL devient immobile.

2.1.3. Transformation en équation de Richards

La combinaison de la loi de Darcy (2.5) et de l'équation de continuité (2.4) permet d'obtenir une équation appelée équation de transport de saturation. Cette équation, dans le cas d'un écoulement non saturé est appelée équation de Richards.

A partir de l'équation (2.4) de bilan de masse, on remplace la pression du NAPL P_l par l'équation (2.8) :

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} - \text{div} \left(\frac{Kk_l}{\mu_l} \text{grad}(-P_c + P_2 - \rho_l gZ) \right) = 0 \quad (2.13)$$

On remplace P_2 par l'équation (2-6):

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial s}{\partial t} - \text{div} \left(\frac{Kk_l(s)}{\mu_l} \text{grad}(-P_c(s) + \text{const} + \rho_2 gZ - \rho_l gZ) \right) &= 0 \\ \phi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\Delta \rho g}{\mu_l} \text{div}(Kk_l(s) \text{grad} Z) &= -\text{div} \left(\frac{Kk_l}{\mu_l} \text{grad} P_c(s) \right), \quad \Delta \rho = \rho_l - \rho_2 \\ \phi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\Delta \rho g}{\mu_l} \text{div}(Kk_l \vec{i}_z) &= -\text{div} \left(\frac{Kk_l}{\mu_l} \text{grad} P_c(s) \right) \end{aligned}$$

\vec{i}_z est le vecteur unitaire suivant la direction Z (orientée vers le bas).

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\Delta \rho g}{\mu_l} \frac{\partial}{\partial Z} (Kk_l(s)) = -\text{div} \left(\frac{Kk_l(s)}{\mu_l} \text{grad} P_c(s) \right) \quad (2.14)$$

Cette dernière équation (2.14) représente l'équation de transport de Richards avec une seule variable s , la saturation.

L'équation (2.14) peut se mettre sous une nouvelle forme :

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\Delta \rho g}{\mu_l} Kk_l(s) \right) = -\text{div} \left(\frac{Kk_l(s)}{\mu_l} \frac{dP_c(s)}{ds} \text{grad} s \right)$$

d'où :

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial F(x, s)}{\partial Z} = \text{div}(D_c(x, s) \text{grad} s) \quad (2.15)$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} F(x, s) = \frac{\Delta\rho g}{\mu_l} K(x)k_l(s) \\ D_c(x, s) = -\frac{K(x)k_l(s)}{\mu_l} \frac{dP_c(s)}{ds} \end{cases}$$

2.1.4. Forme adimensionnelle de l'équation de Richards

On considère les changements suivants :

$$\varepsilon = \frac{l}{L}, \quad \phi = \frac{\phi}{\phi^*}, \quad \delta = \frac{H}{L},$$

$$t = t^* \tau, \quad x_i = \frac{X_i}{L} \quad (i = 1, 2), \quad z \equiv x_3 = \frac{X_3}{H}, \quad p_c = \frac{P_c}{P_c^*}, \quad a(x) = \frac{K(x)}{K^*}$$

Les variables adimensionnées sont : $\tau, x_1, x_2, x_3 \equiv z$

P_c^*, ϕ^*, K^*, t^* sont respectivement les valeurs caractéristiques de pression capillaire, porosité, perméabilité et de temps. Les valeurs P_c^*, ϕ^*, K^* peuvent être prises comme des moyennes arithmétiques. Le temps caractéristique t^* est défini de la façon suivante :

$$t^* = \frac{\phi^* \mu_l H}{\rho_l g K^*} = \frac{\phi^* H}{\left(\frac{\rho_l g K^*}{H \mu_l} \right)} = \left\{ \rho_l g \equiv \Delta P_{gr} \right\} = \frac{\phi^* H}{\left(\frac{\Delta P_{gr} K^*}{H \mu_l} \right)} = \{ \text{la loi de Darcy} \} = \frac{\phi^* H}{V_{gr}^*} = \frac{H}{U_{gr}^*}$$

où $\Delta P_{gr}, V_{gr}^*$ et U_{gr}^* sont respectivement : la différence de pression, la vitesse de Darcy et la vitesse réelle caractéristique de l'écoulement du polluant à travers la longueur H sous action des forces de gravité. Ainsi, t^* est le temps caractéristique de propagation du polluant à la distance H sous action des forces de gravités seules.

On injecte chacune des quantités adimensionnées dans l'équation microscopique de Richards (2.15) et on obtient :

$$\frac{\phi^* \phi}{t^*} \frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{\rho_l g K^*}{\mu_l H} \frac{\partial(k_l a)}{\partial x_3} = -\frac{P_c^* K^*}{\mu_l L^2} \sum_1^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a k_l \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right) - \frac{P_c^* K^*}{\mu_l H^2} \frac{\partial}{\partial x_3} \left(a k_l \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_3} \right)$$

où,

$$\varphi \frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{\rho_l g K^* t^*}{\phi^* \mu_l H} \frac{\partial(k_l a)}{\partial x_3} = - \frac{P_c^* K^* t^*}{\mu_l L^2 \phi^*} \sum_1^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a k_l \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right) - \frac{P_c^* K^* t^*}{\mu_l H^2 \phi^*} \frac{\partial}{\partial x_3} \left(a k_l \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_3} \right)$$

Introduisons le nombre de Peclet macroscopique ou « le nombre capillaire » :

$$Pe = \frac{\rho_l g H}{P_c^*} \quad (2.16)$$

qui est le rapport entre la vitesse caractéristique de convection et celle de diffusion, qui, dans le cas examiné, ont leurs origines dans les forces de gravité et de capillarité respectivement. Ce nombre est « macroscopique », car il est défini à travers une longueur macroscopique H . En même temps, il sera utile d'introduire le nombre de Peclet microscopique à travers la longueur de l'hétérogénéité l :

$$Pe_{micr} \equiv \frac{\rho_l g l}{P_c^*} = \varepsilon \cdot Pe \quad (2.16)'$$

Alors :

$$\frac{P_c^* K^* \phi^* \mu_l H}{\mu_l L^2 \phi^* \rho_l g K^*} = \frac{P_c^* H}{\rho_l g L^2} = \frac{P_c^*}{\rho_l g H} \left(\frac{H}{L} \right)^2 = \frac{\delta^2}{Pe}, \quad \frac{P_c^* K^* \phi^* \mu_l H}{\mu_l H^2 \phi^* \rho_l g K^*} = \frac{P_c^*}{\rho_l g H} = \frac{1}{Pe}$$

L'équation résultante est donnée comme suit :

$$\varphi \frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{\partial(k_l(s)a)}{\partial x_3} = - \frac{\delta^2}{Pe} \sum_1^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_3} \left(a k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_3} \right)$$

Afin de ne pas se concentrer sur des détails non considérables tels que le paramètre δ , on traite uniquement le cas où $\delta = 1$, c'est-à-dire $H = L$. L'équation peut donc s'écrire comme suit :

$$\boxed{\varphi \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) k_l(s) \right) = - \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) k_l(s) \right) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right)} \quad (2.17)$$

où l'écriture $\varphi \left(\frac{x}{\varepsilon} \right), a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right)$ signifie les champs périodiques en $x = \{x_1, x_2, x_3\}$, avec une période ε .

La fonction $k_l(s)$ est monotone croissante sur $[0,1]$, tandis que $p_c(s)$ est monotone décroissante, suivant (2.9) – (2.10).

L'équation (2.17) de Richards représente une équation différentielle parabolique de type diffusion-convection.

À partir de cette équation, on voit que les forces gravitaires déterminent le transport convectif, tandis que la capillarité intervient sous forme d'une force diffusive.

2.1.5. Limitations sur le nombre de Peclet Pe

Le choix du nombre de Peclet est important pour la procédure de l'homogénéisation et les résultats attendus.

Puisque l'objectif de la thèse est d'étudier l'influence de deux types de forces, capillaire et gravitaire, alors Pe ne doit être ni trop grand ni trop petit. Il faut cependant noter que dans le cas de la capillarité très forte, la dispersion sera équivalente à la diffusion capillaire effective. En même temps la dispersion hydrodynamique proprement dite, est provoquée par la convection. Ainsi, pour capturer l'effet de dispersion propre il est nécessaire que le nombre de Peclet soit assez grand.

Il est montré dans (Panfilov, 2000) que le meilleur choix est $Pe \sim \frac{1}{\varepsilon}$, ou même $Pe > \frac{1}{\varepsilon}$, ce qui détermine la technique de développement mathématique la plus efficace, où le phénomène de dispersion apparaît en première approximation des développements asymptotiques. Ainsi, on a étudié le cas :

$$Pe \sim \frac{1}{\varepsilon} \quad (2.18)$$

Le nombre de Peclet microscopique, (2.16)', devient alors d'ordre 1 :

$$Pe_{micr} = \varepsilon \cdot Pe \sim 1 \quad (2.19)$$

Ainsi, on trouve :

$$\varphi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial(k_l(s)a(y))}{\partial x_3} = -\frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right), \quad y = \frac{x}{\varepsilon} \quad (2.20)$$

et il vient :

$$\varphi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial F(y, s)}{\partial x_3} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D(y, s) \frac{\partial s}{\partial x_i} \right) \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} F(y, s) = k_l(s)a(y) \\ D(y, s) = -\frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} a(y)k_l(s) \frac{dp_c(s)}{ds} \end{cases}$$

2.1.6. Conditions aux limites et conditions initiales

L'équation (2.20) sera étudiée dans un domaine $\Omega \subset R^3$, avec des conditions aux limites et initiales imposées sur la saturation du NAPL :

$$s|_{t=0} = s^0 (\approx 0) \quad (2.21)$$

$$s|_{\partial\Omega} = S_*(x, t) \quad (2.22)$$

où la fonction S_* est égale à zéro en bas du domaine et à un à la limite supérieure de Ω .

Au lieu de la condition (2.22), sur une partie de la frontière $\partial\Omega$, on peut imposer les conditions de non-pénétrabilité :

$$\frac{\partial s}{\partial n} = 0 \quad (2.23)$$

essentiellement sur les frontières latérales du domaine Ω .

L'objectif est de construire l'équation homogénéisée pour (2.20), équivalente aux équations originales. Nous nous sommes intéressés à développer un modèle macroscopique qui serait assez universel, c.-à-d., indépendant des fonctions limites et initiales, s^0 et S_* . En d'autres termes, les propriétés de ces fonctions ne devraient pas déranger le comportement macroscopique.

2.2. Homogénéisation

2.2.1. Sur la méthode de l'homogénéisation

Dans ce présent travail, la technique de l'homogénéisation à double échelle a été adoptée afin de déterminer le modèle macroscopique de transport et identifier par la suite le tenseur de dispersion associé.

Dans la technique de l'homogénéisation, un développement mathématique conduit à l'expression de toute grandeur locale sous forme d'un développement asymptotique dont chaque terme est associé à un ordre d'un paramètre de petite magnitude correspondant au rapport des longueurs caractéristiques de deux échelles successives séparées. Ces termes traduisent les variations à des échelles de plus en plus fines. Ce processus d'homogénéisation conduit à un système d'équations différentielles, dont la résolution donne les propriétés homogénéisées. Cette méthode suppose l'existence d'une cellule unitaire et un milieu spatialement périodique.

2- Étude théorique de la dispersion gravitaire capillaire en milieu poreux hétérogène

Dans ce qui suit nous présentons une brève historique sur la théorie mathématique de l'homogénéisation. La littérature mentionnée ici se réfère aux recherches qui ont pu influencer directement ou indirectement les résultats présentés dans cette thèse.

Le terme "homogénéisation" à son sens strict a été employé pour la première fois par E. Sanchez-Palencia dans une note aux Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris en 1972, où il a montré en utilisant des développements asymptotiques que la loi de Darcy n'est qu'une équation homogénéisée des équations de Stokes.

L'origine de cette approche peut aussi être observée dans le travail effectué par De Giorgi et Spagnolo (1973). Ces chercheurs ont démontré le théorème sur le passage à la limite dans les équations aux dérivées partielles linéaires avec des coefficients périodiques de fortes oscillations, quand le paramètre de taille associé à la cellule unité tend vers zéro.

Dans (Tartar, 1974), on trouve une démonstration directe du théorème d'homogénéisation, où une méthode dite d'énergie ou théorème de compacité a été utilisée. L'approche était basée sur un choix spécial de fonctions test dans la formulation variationnelle de l'équation lors du passage à la limite.

Les bases de la méthode ont été largement développées dans (Bakhvalov, 1974), (Bakhvalov, 1975), (Bakhvalov, 1977) et (Bensoussan, A., Lions, J.-L. & Papanicolaou, 1978). L'idée consistait à obtenir un milieu effectif à partir du milieu réel quand l'échelle de l'hétérogénéité ε tend vers 0, ainsi le terme d'ordre zéro dans le développement asymptotique correspond au modèle homogénéisé. Ici, uniquement une convergence faible est assurée.

Le concept de la méthode de développement asymptotique à deux échelles est dû, en fait, à Krylov & Bogoliubov (1947) et à Bogoliubov & Mitropolsky (1961), elle a été employée avec succès pour l'étude de plusieurs problèmes concernant les échelles multiples. L'idée classique consiste à chercher un développement asymptotique de la solution d'un problème donné, avec des coefficients qui séparent l'échelle rapide de celle lente. Des résultats similaires à ceux de Sanchez-Palencia (1974), Bakhvalov (1974) et Bakhvalov (1975) ont été obtenus ultérieurement par Keller (1977) et Bensoussan & al. (1978).

Jusqu'en 1975, des résultats d'homogénéisation avaient été donnés seulement pour des problèmes linéaires. La même année Bakhvalov appliquait son idée originale de développement asymptotique multi-échelle à un cas général non linéaire.

Une dizaine d'années plus tard, une autre méthode a été développée, celle de convergence à "double échelle". Cette technique a été introduite par le travail de Nguetseng (1989) et développée par les travaux d>Allaire (1992) qui a montré de nombreuses applications de cette méthode. L'un des intérêts de celle-ci est la facilité de la compréhension des oscillations dans le cadre du processus d'homogénéisation, par l'introduction d'une notion de convergence des fonctions dépendantes d'une variable "microscopique", qui s'ajoute à la variable "macroscopique". En ce sens, cette méthode en quelque sorte est semblable à la méthode des développements asymptotiques à double échelle.

2- Étude théorique de la dispersion gravitaire capillaire en milieu poreux hétérogène

L'approche de l'homogénéisation a été appliquée dans (Bourgeat, 2000) pour les écoulements en milieux poreux, où le modèle macroscopique a été obtenu comme la limite à double échelle de l'équation originale de l'écoulement quand l'échelle de l'hétérogénéité ε tend vers 0.

Une application de la théorie de l'homogénéisation à la mécanique a été étudiée par (Sanchez-Palencia, 1980) et (Bakhvalov & Panasenko, 1989). Pour un système elliptique contenant des termes principaux d'ordre zéro qui constitue un modèle simplifié du système membranaire des coques minces, le problème d'homogénéisation périodique lui correspondant a été trouvé. Cependant les vibrations de moyenne fréquence n'ont pas pu être décrites par le système homogénéisé.

Les milieux à un contraste de paramètres ont été abordés dans (Panasenko, 1988a, 1988b, 1990), où les équations d'élasticité ainsi que de diffusion-convection stationnaires ont été homogénéisées. Chaque période du milieu a été constituée de deux sous domaines où les paramètres élastiques (ou diffusifs) sont fortement différents. La méthodologie des développements asymptotiques, opérant avec deux petits paramètres : celui de l'hétérogénéité (ε), et le rapport des coefficients élastiques (ω), a été développée, ainsi que la classification de différents modèles homogénéisés en fonctions du rapport ε^2 / ω . Le processus non stationnaire a été également analysé dans le cas particulier d'une quasi-stationnarité à l'échelle d'une cellule.

Les milieux de même types ont été abordés dans (Arbogast & al., 1990) et (Panfilov, 1990) dans le cas fortement non stationnaire. Une équation parabolique dont les coefficients de diffusion sont fortement contrastés a été étudiée. La forte non-stationnarité se manifeste d'une telle façon que le problème cellulaire reste non stationnaire. Ce fait devient crucial dans la technique de l'homogénéisation qui conduit à une transformation de l'équation de diffusion originale en une équation integro-différentielle et donc à l'apparition d'une mémoire longue. Le problème limite avec mémoire, dit de double porosité, décrivant le comportement global, a été trouvé lorsque ε et ω tendent vers zéro, en utilisant l'homogénéisation par développement asymptotique. Dans (Panfilov, 1990), ceci a été fait pour différentes valeurs du contraste, en obtenant comme résultat une série de modèles macroscopiques différents.

Divers phénomènes tels que les écoulements mono et diphasiques (Auriault & Sanchez-Palencia, 1986; Amaziane & Bourgeat, 1988; Bourgeat & al., 1988; Saez & al., 1989; Arbogast & al., 1990 ; Bourgeat, 1996), ainsi que la dispersion (Bensoussan & al., 1978, Brenner, 1980 ; Mei, 1992 ; Auriault & Lewandowska, 1997) ont été traités en utilisant la méthode d'homogénéisation.

Un des développements de la théorie d'homogénéisation est son application aux milieux de structures multi-échelle. La méthode de l'homogénéisation itérative a été élaborée en (Allaire, 1992) pour des systèmes ayant une similarité de structure à chaque échelle. Les structures non auto-similaires caractérisées par plusieurs échelles d'hétérogénéité ont été révélées en (Crolet, 2004) dans les problèmes de la mécanique des os humains. Les problèmes couplés d'élasticité et piézo-électricité ont été homogénéisés pour des milieux constitués de 5 échelles.

La théorie de l'homogénéisation a permis de développer d'autres points basiques, tels que l'existence et l'unicité des problèmes cellulaires, la réduction du problème cellulaire périodique en un problème aux limites, la construction d'un développement asymptotique complet, l'estimation de terme résiduel, l'étude des propriétés du tenseur des coefficients effectifs, et autres.

Plusieurs recherches ont été consacrées à l'homogénéisation d'un écoulement diphasique en milieux poreux comme (Quintard & Whitaker, 1988), (Saez, Otero & Rusinek, 1989), (Bourgeat, 1996), (Panfilov 2000), Bien que le modèle homogénéisé ait été obtenu, le phénomène de dispersion hydrodynamique reste totalement non identifié. Ceci s'explique par le fait que la dispersion hydrodynamique, étant d'ordre ε en milieu poreux, ne peut être capturée que dans le cadre d'un modèle homogénéisé de premier ordre, ce qui inclut les termes $O(\varepsilon)$.

L'application de la théorie de l'homogénéisation au phénomène de dispersion diphasique a été effectuée en (Panfilov & Floriat, 2004) où le modèle homogénéisé de premier ordre a été construit. Les équations macroscopiques ainsi que le tenseur de dispersion ont été donnés explicitement. Seul le cas sans capillarité a été étudié.

2.2.2.Principe de l'homogénéisation

Son principe consiste à obtenir un milieu poreux effectif homogénéisé à partir d'un milieu réel, si on fait tendre l'échelle d'hétérogénéité ε vers 0. Elle peut être décrite comme suit :

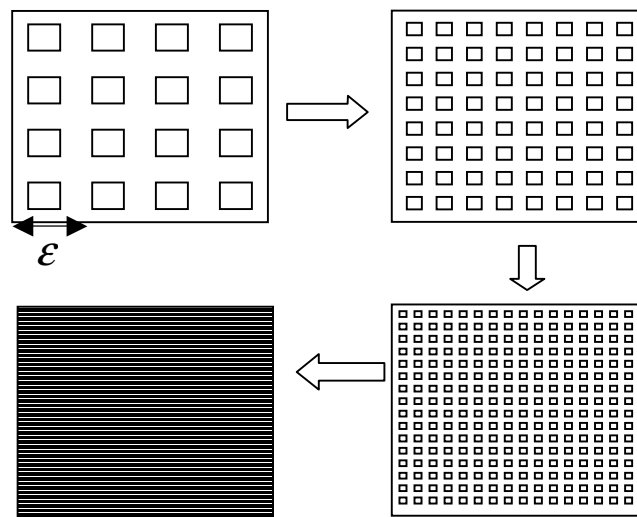


Figure 2.3 : Procédure d'homogénéisation

Plus petit est ε , plus fin est l'hétérogénéité. A la limite, pour $\varepsilon = 0$, on obtient un milieu constitué de points sans structure interne, donc le milieu limite est homogène

(homogénéisé). Ceci implique que la solution du problème peut être recherchée sous la forme d'un développement asymptotique :

$$s = s_0 + \varepsilon s_1 + \varepsilon^2 s_2 + \dots$$

où le terme limite s_0 est la valeur homogénéisée.

Le problème de ce développement asymptotique consiste à ce que l'hétérogénéité soit décrite par des fonctions périodiques $a(x/\varepsilon)$ et $\varphi(x/\varepsilon)$ qui, n'ayant pas de limite lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, ne sont pas régulières par rapport à ε . Ainsi la solution du problème ne peut pas être présentée sous forme d'une série régulière en ε . La résolution du problème est atteinte à l'aide de la séparation de variables.

2.2.3. Formulation à double échelle. Séparation de variables

Nous supposons qu'il soit possible pour toutes les grandeurs intervenant dans la description du problème de séparer la variable spatiale en deux variables adimensionnées x (variable rapide) et y (variable lente) avec :

$$y = \frac{x}{\varepsilon}$$

x et y sont ensuite examinées comme indépendantes l'une de l'autre. La variable y est définie sur une cellule $Y = \{-1/2 < y_i < 1/2, i = 1, 2, 3\}$.

Cette séparation en deux variables d'espace, rendant compte respectivement des variations à l'échelle macroscopique et des variables à l'échelle microscopique des inconnues du problème, est une conséquence de l'hypothèse de séparation des échelles d'espace caractérisée par le nombre ε .

Toute grandeur $E(x)$ du problème est donc remplacée par une fonction à double échelle : $E(x, t) \rightarrow \tilde{E}(x, y, t)$ de telle façon que :

$$E(x, t) = \tilde{E}(x, y, t) \Big|_{y=x/\varepsilon}$$

L'opération de différentiation sera aussi remplacée par une différentiation double :

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} \rightarrow \frac{\partial \tilde{E}}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial y_i}$$

Afin de simplifier les notations, nous omettons le « tilde » au-dessus des variables à deux échelles. Alors la forme à deux échelles de l'équation (2-20) est :

$$\varphi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial(k_l(s)a(y))}{\partial x_3} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial(k_l(s)a(y))}{\partial y_3} = - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} \right) \left(a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial y_i} \right) \quad (2.24)$$

Une fois que les singularités ont été séparées en terme de variable y , la solution du problème peut être recherchée sous forme d'un développement régulier en série de puissances de ε :

$$s(x, y, t) = s_0(x, y, t) + \varepsilon s_1(x, y, t) + O(\varepsilon^2) \quad (2.25)$$

2.2.4. Périodicité et condition nécessaire et suffisante de périodicité

L'augmentation de la dimension de l'espace suite à l'introduction de variables rapides demande de conditions supplémentaires afin d'assurer l'unicité de la solution. Une telle condition supplémentaire est la périodicité en y de toutes fonctions à double échelle. Suivant l'alternative de Fredholm, une condition nécessaire et suffisante d'existence de solution périodique pour une équation : $As=F$, où A est un opérateur elliptique, est la valeur moyenne nulle de la partie droite : $\langle F \rangle = 0$.

Présentons l'équation (2.24) sous forme « elliptique » :

$$\begin{aligned} - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial y_i} \right) &= \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} \right) + \varphi \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial(k_l(s)a(y))}{\partial x_3} + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial(k_l(s)a(y))}{\partial y_3} + \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial y_i} \right) \end{aligned}$$

en considérant la partie droite comme une fonction-source.

Ainsi, la solution périodique existe si et seulement si :

$$\left\langle \varphi \frac{\partial s}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial \langle k_l(s)a(y) \rangle}{\partial x_3} + \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} a(y)k_l(s) \frac{\partial p_c(s)}{\partial y_i} \right\rangle = 0 \quad (2.25)'$$

où le symbole $\langle \cdot \rangle$ signifie l'intégration par rapport à y à travers la période Y .

Lors de la dérivation de cette équation on a pris en considération le fait que l'intégration à travers la période de la dérivée $\partial f / \partial y_i$ soit égale à zéro pour toute fonction $f(y)$ périodique en y et continue.

Il est facile à voir que la relation intégrale (2.25)' peut être obtenue autrement, simplement par intégration de l'équation (2.24). Ainsi (2.25)' représente une équation homogénéisée formelle.

2.2.5. Développement asymptotique de l'équation (2-24)

En reportant le développement dans l'équation (2.24) et en comparant les termes de différents ordres de ε , on obtient les problèmes d'ordre 0 et d'ordre 1 qui seront suffisant afin de capturer l'effet de dispersion :

- Le problème d'ordre zéro correspond aux termes $\sim \varepsilon^{-1}$ dans l'équation (2.24). Il est donné par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher } s_0, \text{ périodique en } y, \text{ tel que :} \\ -\frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) k_{i0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial y_i} \right) = \frac{\partial(a(y)k_{i0})}{\partial y_3}, \quad \dot{p}_{c0} \equiv \frac{dp_c(s)}{ds} \Big|_{s=s_0} \end{array} \right. \quad (2.26)$$

- Le problème d'ordre 1 qui correspond aux termes $\sim \varepsilon^0$ dans l'équation (2.24) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{chercher } s_1, \text{ périodique en } y, \text{ tel que :} \\ -\frac{1}{Pe_{micr}} \left[\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) k_{i1} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial y_i} \right) + \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) k_{i0} \dot{p}_{c1} \frac{\partial s_0}{\partial y_i} \right) + \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) k_{i0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right) + \right. \\ \left. \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) k_{i0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a(y) k_{i0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial y_i} \right) \right] = \\ = \varphi \frac{\partial s_0}{\partial t} + \frac{\partial(a(y)k_{i1})}{\partial y_3} + \frac{\partial(a(y)k_{i0})}{\partial x_3} \end{array} \right. \quad (2.27)$$

où les fonctions non linéaires sont développées en séries de Taylor :

$$\begin{aligned} p_c(s) &= p_c(s_0 + \varepsilon s_1 + \varepsilon^2 \dots) = p_{c0} + \varepsilon p_{c1} + \varepsilon^2 \dots; & p_{c0} &\equiv p_c(s_0), & p_{c1} &= \dot{p}_{c0} s_1 \\ k_l(s) &= k_l(s_0 + \varepsilon s_1 + \varepsilon^2 \dots) = k_{l0} + \varepsilon k_{l1} + \varepsilon^2 \dots; & k_{l0} &\equiv k_l(s_0), & k_{l1} &= \dot{k}_{l0} s_1; \\ \dot{k}_{l0} &\equiv \frac{dk_l(s)}{ds}(s_0) \end{aligned}$$

De la même façon, on développe les conditions initiales et aux limites, (2.21) – (2.23).

2.2.6. Existence et unicité de la solution des problèmes d'ordre zéro et d'ordre 1

Afin de prouver l'existence et l'unicité de la solution, on utilise l'alternative de Fredholm dont l'énoncé est le suivant :

Soit F une fonction de carré intégrable sur Y . On considère le problème aux limites : $AG=F$, G est Y -périodique, A un opérateur elliptique, alors la solution périodique G existe si et seulement si $\langle F \rangle = 0$. De plus si la solution existe, elle est unique.

Puisqu'une fonction indépendante de y est la solution périodique de l'équation (2.26), alors suivant l'alternative de Fredholm toute solution périodique de (2.26) est une fonction indépendante de y , ce qui nous permet de conclure par la suite que s_0 ne dépend que des variables lentes, x et t :

$$s_0 = s_0(x, t). \quad (2.28)$$

Alors le problème (2.27) prend la forme :

$$\varphi \frac{\partial s_0}{\partial t} + \frac{\partial(a(y)k_{11})}{\partial y_3} + \frac{\partial(a(y)k_{10})}{\partial x_3} = -\frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y)k_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right) - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y)k_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right)$$

où :

$$-\frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(ak_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial(as_1)}{\partial y_3} \dot{k}_{10} = \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial a}{\partial y_i} k_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_3} (ak_{10}) + \varphi \frac{\partial s_0}{\partial t} \quad (2.28)'$$

L'existence d'une solution périodique en y demande que la moyenne de la partie droite de l'équation (2.28)' soit égale à zéro, ainsi on obtient :

$$\langle \varphi \rangle \frac{\partial s_0}{\partial t} + \langle a \rangle \frac{\partial k_{10}}{\partial x_3} = 0 \quad (*)$$

Utilisant cette équation, on peut remplacer la dérivée $\frac{\partial s_0}{\partial t}$ en (2.28)' par $\frac{\partial s_0}{\partial x_3}$:

$$-\frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(ak_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial(as_1)}{\partial y_3} \dot{k}_{10} = \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial a}{\partial y_i} k_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_3} (ak_{10}) - \frac{\varphi \langle a \rangle k_{10}}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial s_0}{\partial x_3} \quad (**)$$

d'où la fonction $s_1(x, y, t)$ a la forme :

$$s_1 = \chi_k(y, s_0) \frac{\partial s_0}{\partial x_k} + s_{10}(x, t, y) \quad (2.29)$$

alors Eq. (**) devient :

$$\left(-\frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial(a\chi_k)}{\partial y_3} \dot{k}_{10} - \frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial a}{\partial y_k} - \dot{k}_{10} a \delta_{k3} + \frac{\varphi \langle a \rangle \dot{k}_{10}}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} \right) \frac{\partial s_0}{\partial x_k} - \frac{\partial(as_{10})}{\partial y_3} \dot{k}_{10} - \frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial s_{10}}{\partial y_i} \right) = 0$$

d'où on obtient une équation pour $s_{10}(x, t, y)$:

$$\frac{\partial(as_{10})}{\partial y_3} \dot{k}_{10} + \frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial s_{10}}{\partial y_i} \right) = 0 \quad (2.29)'$$

et trois problèmes cellulaires pour les fonctions χ_k ($k=1,2,3$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) - \dot{k}_{10} \frac{\partial}{\partial y_3} (a\chi_k) = \frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \frac{\partial a}{\partial y_k} + a \dot{k}_{10} \delta_{k3} - \frac{\varphi \langle a \rangle \dot{k}_{10}}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} \\ \chi_k = 1 - \text{périodique en } y \\ \langle \chi_k \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (2.30)$$

La condition $\langle \chi_k \rangle = 0$ peut être toujours imposée à la relation (2.29)', car toute autre valeur de la constante $\langle \chi_k \rangle$ peut être reportée dans le terme s_{10} .

2.2.7. Représentation pour la fonction $s_{10}(x, \tau, y)$. Relation constitutive

Analysons le problème (2.29)' qui détermine la fonction $s_{10}(x, \tau, y)$ dans la représentation (2.29). Présentons le sous la forme suivante :

$$-\beta \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial s_{10}}{\partial y_i} \right) + \frac{\partial(as_{10})}{\partial y_3} = 0, \quad \beta(x, \tau) \equiv -\frac{k_{10}\dot{p}_{c0}}{\dot{k}_{10} Pe_{micr}} \quad (2.31)$$

L'apparition du terme $s_{10}(x, \tau, y)$ qui dépend de la variable rapide dans la décomposition de la première approximation (2.29) est une situation inhabituelle dans la théorie d'homogénéisation. En effet, d'habitude on obtient une fonction de variables lentes seulement.

Notons qu'en mécanique continue la relation (2.29) joue le rôle d'une relation constitutive, celle qui détermine la liaison entre les oscillations (s_1) et la valeur moyennée (s_0). Si la fonction s_{10} ne dépend pas de la variable rapide, la loi constitutive (2.29) dit que les oscillations sont proportionnelles au gradient de la fonction homogénéisée : plus grand est le gradient de la fonction homogénéisée, plus fortes sont les oscillations. Ce comportement des oscillations est habituel et physiquement bien acceptable.

Dans notre cas, où la fonction s_{10} dépend des variables rapides, la loi constitutive devient non traditionnelle : le comportement des oscillations devient plus compliqué qu'une croissance simple avec le gradient de la saturation homogénéisée.

Parfois on néglige le terme s_{10} entièrement, comme dans (Bakhvalov & Panasenko, 1996), tenant compte qu'il est d'ordre ε , ce qui ne serait pas trop rigoureux dans notre cas, car on essaye de construire le modèle homogénéisé qui inclut les termes d'ordre ε .

L'apparition de $s_{10}(x, \tau, y)$ en tant que fonction de y est due à une particularité de l'équation de Richards, plus précisément - de son terme convectif, $\frac{\partial(a \cdot s)}{\partial y_3}$. Cette particularité consiste à un caractère non conservatif de la vitesse formelle de convection, $\vec{V}_c = \{0, 0, a\}$, c'est-à-dire :

$$\text{div}(\vec{V}_c) = \partial a / \partial y_3 \neq 0$$

En effet, il est facile à voir que l'équation (2.31) aurait une solution indépendante de y , si et seulement si la vitesse de convection était conservative.

À cause de cela, la technique de développements mathématiques change, et le résultat d'homogénéisation obtenu est non traditionnel.

Pour la solution générale de l'équation (2.31), on peut obtenir deux résultats constructifs. Premièrement, on note que l'équation (2.31) est invariable par rapport à la multiplication par une fonction « lente » arbitraire, $Z(x, \tau)$, ainsi la solution a une représentation générale suivante :

$$s_{10} = Z(x, \tau) \cdot \psi(x, \tau, y) \quad (2.32a)$$

où la fonction $\psi(x, \tau, y)$ vérifie l'équation :

$$-\beta \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right) + \frac{\partial(a\psi)}{\partial y_3} = 0 \quad (2.32b)$$

Secondement, on peut obtenir une décomposition où les variables lentes et rapides seront séparées entièrement. Prenons en considération le fait que le paramètre β soit petit dans le cadre des limitations imposées sur le nombre de Peclet (voir le

paragraphe 2.1.5). Ainsi on peut obtenir une représentation pour la solution générale sous forme d'une série asymptotique par rapport à β :

$$\Psi = \frac{1}{a(y)} [1 + \beta \zeta_1(y) + \beta^2 \dots] = \frac{1}{a(y)} \sum_{k \geq 0} \beta^k \zeta_k(y) \quad (2.33)$$

donc :

$$s_{10} = \frac{Z(x, \tau)}{a(y)} [1 + \beta \zeta_1(y) + \beta^2 \dots] = \frac{Z(x, \tau)}{a(y)} \sum_{k \geq 0} \beta^k \zeta_k(y)$$

où $\zeta_k(y)$ sont des solutions périodiques des problèmes :

$$\zeta_0 = 1 ; \quad \frac{\partial \zeta_1}{\partial y_3} = -\frac{\partial}{\partial y_i} \frac{\partial \ln a}{\partial y_i} ; \quad \frac{\partial \zeta_k}{\partial y_3} = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\frac{\zeta_{k-1}}{a} \right) \right), \quad (k \geq 2) \quad (2.33b)$$

La fonction $Z(x, \tau)$ ne peut pas être définie à l'aide de l'équation (2.31), elle reste donc à déterminer.

2.2.8. Développement asymptotique de l'équation (2.25)'

En substituant le développement asymptotique (2.24), (2.28) dans l'équation (2.25)' et en comparant les termes de différents ordres de ε , on obtient les problèmes d'ordre 0 et d'ordre 1 :

- Le problème d'ordre zéro qui correspond aux termes ~ 1 dans l'équation (2.25)' :

$$\langle \varphi \rangle \frac{\partial s_0}{\partial t} + \langle a \rangle \frac{\partial k_{10}}{\partial x_3} = 0 \quad (2.34)$$

ce qui coïncide avec l'équation (*).

- Le problème d'ordre 1 correspond aux termes $\sim \varepsilon$ dans l'équation (2.25)' :

$$\left\langle \varphi \frac{\partial s_1}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial \langle k_{11} a \rangle}{\partial x_3} = -\frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle k_{10} \dot{p}_{c0} a \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle a k_{10} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right\rangle$$

Utilisant (2.29) et (2.32), on obtient :

$$\begin{aligned} \left\langle \varphi \frac{\partial (Z\Psi)}{\partial t} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_3} \langle Z \dot{k}_{10} \Psi a \rangle + \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle Z k_{10} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial \Psi}{\partial y_i} \right\rangle = \\ = - \left\langle \varphi \frac{\partial}{\partial t} \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle - \frac{\partial}{\partial x_3} \left\langle \dot{k}_{10} a \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle - \\ - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle k_{10} \dot{p}_{c0} a \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle k_{10} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle \end{aligned}$$

En simplifiant, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (Z \langle \phi \psi \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_3} (Z \dot{k}_{l0} \langle a \psi \rangle) + \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle Z k_{l0} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right\rangle = \\ - \left\langle \phi \frac{\partial}{\partial t} \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle - \frac{\partial}{\partial x_3} \left\langle \dot{k}_{l0} a \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle - \\ - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle k_{l0} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right\rangle - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle k_{l0} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\chi_k \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (2.35)$$

Les deux équations (2.33) et (2.35) déterminent deux fonctions « lentes » : $s_0(x, \tau)$ et $Z(x, \tau)$.

Ainsi, la fonction $s_{l0}(x, \tau, y)$, qui vérifie la présentation (2.32), est définie à l'aide de deux équations différentielles : l'équation (2.31) définit la partie « rapide », ψ , tandis que l'équation (2.35) détermine la partie « lente », $Z(x, \tau)$.

2.2.9. Déduction de l'équation macroscopique

Soit $\langle s \rangle$ la saturation moyenne, s' la fluctuation de la saturation causée par des hétérogénéités de façon que : $s = \langle s \rangle + s'$.

Il est nécessaire de noter que $s_0 \neq \langle s \rangle$, puisque $\langle s \rangle = s_0 + \varepsilon \langle s_1 \rangle + \varepsilon^2 \langle s_2 \rangle + \dots$

Introduisons les fonctions moyennées de premier ordre :

$$S = s_0 + \varepsilon \langle s_1 \rangle = \langle s \rangle + O(\varepsilon^2), \quad \hat{k}_l(S) = k_{l0} + \varepsilon \langle k_{l1} \rangle + O(\varepsilon^2), \quad \hat{p}_c(S) = p_{c0} + \varepsilon \langle p_{c1} \rangle + O(\varepsilon^2)$$

$$k_{l1} = \dot{k}_{s0} s_1, \quad p_{c1} = \dot{p}_{c0} s_1,$$

En additionnant l'équation (2.34) et l'équation (2.35) multipliée par ε , on a :

$$\begin{aligned} \langle \phi \rangle \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{\partial \hat{k}_l(S) \langle a \rangle}{\partial x_3} = \varepsilon \left[\langle \phi \rangle \frac{\partial \langle s_1 \rangle}{\partial \tau} - \left\langle \phi \frac{\partial s_1}{\partial \tau} \right\rangle \right] + \varepsilon \left[\langle a \rangle \frac{\partial}{\partial x_3} \langle k_{l1} \rangle - \frac{\partial \langle a k_{l1} \rangle}{\partial x_3} \right] - \\ - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle a k_{l0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_0}{\partial x_i} \right\rangle - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle a k_{l0} \dot{p}_{c0} \frac{\partial s_1}{\partial y_i} \right\rangle \end{aligned}$$

d'où l'équation résultante :

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{\partial \hat{k}_l(S) \langle a \rangle}{\partial x_3} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_1} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_1 \rangle) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_3} (k_{l_0} [\langle a_{s_1} \rangle - \langle a \rangle \langle s_1 \rangle]) = \\ = - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{l_0} \dot{p}_{c0} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle Z k_{l_0} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.36)$$

Calculons les termes $A \equiv \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_1} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_1 \rangle)$ et $B \equiv \frac{\partial}{\partial x_3} (k_{l_0} [\langle a_{s_1} \rangle - \langle a \rangle \langle s_1 \rangle])$, en utilisant (2.29) :

$$\begin{aligned} A = \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_1} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_1 \rangle) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} - \langle \varphi \rangle \langle \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_{10}} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_{10} \rangle) = \\ = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_{10}} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_{10} \rangle) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial \tau} \right) + \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial \tau} \frac{\partial s_0}{\partial x_k} - \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial x_k} \frac{\partial s_0}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_{10}} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_{10} \rangle) \end{aligned}$$

En utilisant l'équation (2.34), on obtient donc :

$$A = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial k_{l_0}}{\partial x_3} \right) + \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial \tau} \frac{\partial s_0}{\partial x_k} + \frac{\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial x_k} \frac{\partial k_{l_0}}{\partial x_3} + \frac{\partial}{\partial \tau} (Z [\langle \varphi \psi \rangle - \langle \varphi \rangle \langle \psi \rangle])$$

De la même façon, on obtient pour B :

$$B = \frac{\partial}{\partial x_3} (k_{l_0} [\langle a_{s_1} \rangle - \langle a \rangle \langle s_1 \rangle]) = \frac{\partial}{\partial x_3} \left(k_{l_0} \langle a \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} (Z k_{l_0} (\langle a \psi \rangle - \langle a \rangle \langle \psi \rangle))$$

Introduisons aussi les notations suivantes : $\hat{F}(S) = \hat{k}(S) \langle a \rangle$.

En les insérant dans l'équation (2.36), on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{\partial \hat{k}_l(S) \langle a \rangle}{\partial x_3} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau} (\langle \varphi_{s_1} \rangle - \langle \varphi \rangle \langle s_1 \rangle) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_3} (k_{l_0} [\langle a_{s_1} \rangle - \langle a \rangle \langle s_1 \rangle]) = \\ = - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{l_0} \dot{p}_{c0} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle Z k_{l_0} \dot{p}_{c0} a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle \frac{\partial S}{\partial \tau} + \frac{\partial \hat{F}(S)}{\partial x_3} + \varepsilon \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial \tau} \frac{\partial s_0}{\partial x_k} + \varepsilon \dot{k}_{l_0} \frac{\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial x_k} \frac{\partial s_0}{\partial x_3} + \varepsilon \mathfrak{N}(Z(s_0, x, \tau)) = \\ = - \frac{\varepsilon}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{l_0} \dot{p}_{c0} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\dot{k}_{l_0} \langle a \chi_k \rangle \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\dot{k}_{l_0} \frac{\langle \varphi \chi_i \rangle \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial s_0}{\partial x_3} \right) \end{aligned}$$

où :

$$\mathfrak{N}(Z) \equiv \frac{\partial}{\partial \tau} (Z [\langle \varphi \psi \rangle - \langle \varphi \rangle \langle \psi \rangle]) + \frac{\partial}{\partial x_3} (Z \dot{k}_{l_0} [\langle a \psi \rangle - \langle a \rangle \langle \psi \rangle]) + \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(Z k_{l_0} \dot{p}_{c0} \left\langle a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right\rangle \right) \quad (2.37)$$

Autrement dit, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle \frac{\partial S}{\partial t} + \left(\delta_{k3} + \varepsilon \left[\frac{1}{\dot{k}_{l_0} \langle a \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial t} + \frac{1}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_i \rangle}{\partial x_i} \delta_{k3} \right] \right) \frac{\partial \hat{F}(S)}{\partial x_k} + \varepsilon \mathfrak{N}(Z) = \\ = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left[- \dot{k}_{l_0} \langle a \chi_k \rangle \delta_{i3} + \dot{k}_{l_0} \frac{\langle \varphi \chi_i \rangle \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{1}{Pe_{micr}} k_{l_0} \dot{p}_{c0} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \right] \frac{\partial s_0}{\partial x_k} \right) \quad (2.38) \end{aligned}$$

Ainsi se termine le développement du modèle macroscopique.

2.2.10. Modèle macroscopique

En utilisant (2.37), on peut représenter le modèle de transport homogénéisé sous la forme suivante avec une précision $O(\varepsilon^2)$:

$$\langle \varphi \rangle \frac{\partial S}{\partial \tau} + (\delta_{k3} + \Delta_k) \frac{\partial \hat{F}(S)}{\partial x_k} + \varepsilon \mathfrak{N}(Z(S, x, \tau)) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{D}_{ik} \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) \quad (2.39)$$

où :

$$\hat{F}(S) = \langle a \rangle \hat{k}_l(S) \quad (2.40a)$$

$$\Delta_k = \varepsilon \left[\frac{1}{\hat{k}'_0(S) \langle a \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_k \rangle}{\partial \tau} + \frac{1}{\langle \varphi \rangle} \frac{\partial \langle \varphi \chi_i \rangle}{\partial x_i} \delta_{k3} \right] \quad (2.40b)$$

$$\hat{D}_{ik} = \varepsilon \left[\hat{k}'_l(S) \langle a \rangle \left(\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right) - \frac{\hat{k}_l \hat{P}'(S)}{Pe^*} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \right] \quad (2.40c)$$

$$\hat{k}'_l(S) \equiv \frac{d\hat{k}_l(S)}{dS}, \quad \hat{P}'_c(S) \equiv \frac{d\hat{P}_c(S)}{dS}$$

L'opérateur $\mathfrak{X}(Z(S), x, \tau)$ est défini à l'aide de (2.37) à travers la fonction « lente » $Z(x, \tau)$, qui dépend, à son tour, de la saturation macroscopique S et est défini comme la solution de l'équation différentielle (2.34) :

$Z(S, x, \tau) = L^{-1}(S)$, où l'opérateur linéaire L est :

$$L(Z) \equiv \frac{\partial}{\partial \tau} (ZM) + \frac{\partial}{\partial x_3} (ZN) + \frac{\partial}{\partial x_i} (ZW_i) = -\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\hat{k}'_l(S) \langle a \chi_k \rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{k}_{lc}(S) \hat{P}'_c(S) \langle a \rangle \frac{\partial S}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{k}_{lc}(S) \hat{P}'_c(S) \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) \quad (2.40d)$$

$$M(x, \tau) \equiv \langle \varphi \psi \rangle, \quad N(x, \tau) \equiv \hat{k}'_l(S) \langle a \psi \rangle, \quad W_i \equiv \frac{k_{l0} \dot{p}_{c0}}{Pe_{micr}} \left\langle a \frac{\partial \psi}{\partial y_i} \right\rangle$$

Le modèle (2.39) est une équation fermée par rapport à la saturation macroscopique, S . Le type de cette équation est déterminé par l'opérateur \mathfrak{X} qui est différentiel par rapport à la fonction intermédiaire Z , mais qui devient intégral par rapport à la saturation macroscopique, S , comme cela sera démontré dans le paragraphe 2.2.12. Ainsi, le modèle macroscopique (2.39) représente une équation intégral-différentielle, plus générale que l'équation originale de Richards.

2.2.11. Effet de freinage

Simultanément avec le phénomène de dispersion, on a obtenu un vecteur Δ qui corrige la vitesse macroscopique de transport. Physiquement l'apparition de ce terme peut signifier un freinage (ou accélération) de transport suite à la dissipation de l'énergie causée par les hétérogénéités. Pourtant, cette hypothèse ne concorde pas avec la structure de ce terme.

En effet, le vecteur Δ est nul, si les fonctions cellulaires, χ_k , sont locales, i.e., ne dépendent que de y (nous supposons toujours que la porosité dépend uniquement de la variable y). Ainsi, la nature du terme Δ est macroscopique. Il est non nul uniquement dans le cas où la fonction cellulaire n'est pas locale et varie d'une cellule à l'autre, et/ou la fonction est non stationnaire.

2.2.12. Effet de mémoire

Le terme $\varepsilon \mathfrak{X}(Z(S, x, \tau))$ en (2.39) représente un opérateur différentiel linéaire par rapport à la fonction intermédiaire Z , dont la structure est suivante (2.40d) :

$$\mathfrak{X}(Z) \equiv \frac{\partial}{\partial \tau} (Z \cdot Q) + \frac{\partial}{\partial x_3} (Z \cdot R) + \frac{\partial}{\partial x_i} (ZW_i) \quad (2.41)$$

$$Q(x, t) \equiv \langle \varphi \psi \rangle - \langle \varphi \rangle \langle \psi \rangle, \quad R(x) \equiv \dot{k}_{l_0} (\langle a \psi \rangle - \langle a \rangle \langle \psi \rangle)$$

A son tour, la fonction Z est une solution de l'équation différentielle (2.40d) qui la définit comme une fonction de la saturation S .

Il est possible de construire un opérateur formel explicite $\tilde{\mathfrak{K}}(S)$. Pour cela, examinons la solution de l'équation (2.40d) qui peut être écrite sous la forme :

$$L(Z) = -f(S, x, \tau) \quad (2.42a)$$

avec :

$$\begin{aligned} f(S, x, \tau) \equiv & \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{k}_{l_c}(S) \hat{P}'_c(S) \langle a \rangle \frac{\partial S}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{Pe_{micr}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{k}_{l_c}(S) \hat{P}'_c(S) \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\langle \varphi \chi_k \rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\hat{k}'_l(S) \langle a \chi_k \rangle \frac{\partial S}{\partial x_k} \right) \end{aligned} \quad (2.42b)$$

Ajoutons la condition initiale $Z(\tau = 0) = 0$, qui résulte du développement asymptotique de la condition initiale du problème original hydrodynamique, pour la première approximation de la méthode d'homogénéisation.

Soit $\Theta(S, x, \tau)$ le noyau de l'opérateur L , i.e. la solution de l'équation (2.42a) homogène : $L(\Theta) = 0$. Alors la solution du problème initial pour (2.42) est une convolution :

$$Z = - \int_0^\tau f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau') d\tau' \quad (2.43)$$

où on a pris en considération que l'équation (2.42a) est linéaire.

Alors il est facile d'obtenir pour (2.41) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z Q}{\partial \tau} &= -Q f(S, x, \tau) - Q \int_0^\tau f(S, x, \tau') \frac{\partial \Theta(x, \tau - \tau')}{\partial \tau} d\tau' + \dot{Q}_\tau Z \\ \frac{\partial Z R}{\partial x_3} &= -R \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial x_3} (f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau')) d\tau' + \dot{R}_{x_3} Z \\ \frac{\partial Z W_i}{\partial x_i} &= -W_i \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial x_i} (f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau')) d\tau' + \frac{\partial W_i}{\partial x_i} Z \end{aligned}$$

Alors l'opérateur $\tilde{\mathfrak{K}}(S) = \mathfrak{K}(Z(S, x, \tau))$ prend la forme :

$$\tilde{\mathfrak{K}}(S) = \mathfrak{K}(Z(S, x, \tau)) = - \left(\dot{R}_{x_3} + \dot{Q}_\tau + \frac{\partial W_i}{\partial x_i} \right) \int_0^\tau f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau') d\tau' -$$

$$\begin{aligned}
 & - Q \int_0^\tau f(S, x, \tau') \frac{\partial \Theta(x, \tau - \tau')}{\partial \tau} d\tau' - R \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial x_3} (f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau')) d\tau' - \\
 & - W_i \int_0^\tau \frac{\partial}{\partial x_i} (f(S, x, \tau') \Theta(x, \tau - \tau')) d\tau' - Qf(S, x, \tau)
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

On voit que $\tilde{\mathfrak{K}}(S)$ est un opérateur intégro-différentiel qui détermine donc l'apparition d'une longue mémoire dans le comportement du système macroscopique.

2.2.13. Origine de la mémoire

Comme on a montré, la raison formelle de l'apparition du terme intégro-différentiel, $\varepsilon \mathfrak{K}(Z(S, x, \tau))$ en (2.39) est le fait que la fonction s_{10} , qui fait partie de la première approximation, dépend de variables rapides.

Pour expliquer la raison physique de l'effet de mémoire, il suffit d'examiner le comportement limite du système macroscopique. Examinons le cas où les forces capillaires deviennent largement dominantes ($Pe \rightarrow 0$). Dans ce cas, le terme intégro-différentiel est zéro. En effet, le problème (2.31) pour la fonction s_{10} prend la forme :

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial s_{10}}{\partial y_i} \right) = 0$$

qui a comme solution périodique une fonction s_{10} qui ne dépend pas de variables rapides. Alors le terme $\varepsilon \mathfrak{K}(Z(S, x, \tau))$ disparaît en (2.39).

Ainsi, l'effet de mémoire est entièrement provoqué par le terme de convection dans l'équation originale de Richards. Plus précisément, par le fait que la vitesse de convection dans l'équation de Richards n'est pas conservative (voir le paragraphe 2.2.7).

Comme il a été mentionné dans le paragraphe 2.2.7, la présence du terme s_{10} , en tant que fonction de la variable rapide y , signifie que la loi constitutive devient plus compliquée que la loi habituelle, suivant laquelle les oscillations de la saturation auraient dû être proportionnelles au gradient de la saturation homogénéisée. En effet, dans le cas limite, quand les forces capillaires sont nulles ($Pe = 0$), la composante s_{10} définie à l'aide de (2.31), (2.32) et (2.33) prend la forme :

$$s_{10} = \frac{Z(s_0, x, \tau)}{a(y)}$$

Ainsi la loi constitutive (2.29) devient :

$$s_1 = \chi_k(y, s_0) \frac{\partial s_0}{\partial x_k} + \frac{Z(s_0, x, \tau)}{a(y)} \tag{2.45}$$

Ceci signifie que les oscillations de la saturation ont une composante additive traditionnelle qui est proportionnelle au gradient de la saturation homogénéisée, et une autre composante dont le comportement est contrôlé par une fonctionnelle $Z(s_0)$ non locale dans le temps.

2.2.14. Structure du tenseur de dispersion

Le tenseur de dispersion est constitué de deux composantes additives correspondant à la dispersion capillaire et celle gravitaire respectivement :

$$\hat{D}_{ik} = \hat{D}_{ik}^c(S) + \hat{D}_{ik}^g(S) \quad (2.40)$$

où

$$\hat{D}_{ik}^c = -\frac{\varepsilon \hat{k}_l \hat{P}'(S)}{Pe^*} \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle \quad (2.41a)$$

$$\hat{D}_{ik}^g = \varepsilon \hat{k}_l'(S) \langle a \rangle \left[\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right] = \varepsilon \hat{F}'(S) \left[\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right] \quad (2.41b)$$

Les fonctions χ_k ($k=1,2,3$) sont définies comme les solutions des problèmes cellulaires (2.30).

Rappelons que dans le cas étudié, la perméabilité effective et la pression capillaire homogénéisée sont égales à leurs analogues à l'échelle microscopique, examinées comme des fonctions de la saturation macroscopique :

$$\hat{P}_c(S) = p_c(S), \quad \hat{k}_l(S) = k_l(S)$$

Formellement le tenseur de dispersion est d'ordre ε . Cependant en milieux fortement hétérogènes, il est d'ordre 1, comme l'a montré (Panfilov, 2000) pour le transport d'une seule phase.

2.2.15. Asymétrie du tenseur de dispersion

Étudions les propriétés de symétrie du tenseur de dispersion. Pour cela, analysons le problème cellulaire, (2.30), en le présentant sous la forme suivante :

$$A \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) - B \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_k) + A \frac{\partial a}{\partial y_k} - Ba \delta_{k3} + B \frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} = 0 \quad (2.37)$$

où :

$$A \equiv -\frac{k_{l0}\dot{p}_{c0}}{Pe^*} = -\frac{\hat{k}_l(S)\hat{p}'_c(S)}{Pe^*} + O(\varepsilon), \quad B \equiv \dot{k}_{l0} = \hat{k}'_l(S) + O(\varepsilon)$$

Utilisant les mêmes notations, on peut réécrire la définition du tenseur de dispersion sous forme équivalente :

$$\frac{\hat{D}_{ik}}{\varepsilon} = A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right) \right\rangle + B \langle a \rangle \left[\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right] \quad (2.38)$$

Transformons le problème (2.37) en une forme variationnelle, en multipliant par une fonction test $w(y)$, périodique en y , et intégrons à travers la période Y :

$$0 = -A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial w}{\partial y_i} \right\rangle + B \left\langle a \chi_k \frac{\partial w}{\partial y_3} \right\rangle - A \left\langle a \frac{\partial w}{\partial y_k} \right\rangle + B \langle a \rangle \left[\frac{\langle \varphi w \rangle}{\langle \varphi \rangle} - \frac{\langle a w \rangle}{\langle a \rangle} \right] \delta_{k3}$$

où on a utilisé la formule de Gauss-Ostrogradsky et la propriété d'une fonction périodique suivant laquelle l'intégrale de la dérivée à travers la période entière est égale à zéro.

Soit maintenant $w = \chi_i$, alors on obtient une suite de transformations arithmétiques :

$$\begin{aligned} 0 &= A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle - B \left\langle a \chi_k \frac{\partial \chi_m}{\partial y_3} \right\rangle + A \left\langle a \frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} \right\rangle - B \langle a \rangle \left[\frac{\langle \varphi \chi_m \rangle}{\langle \varphi \rangle} - \frac{\langle a \chi_m \rangle}{\langle a \rangle} \right] \delta_{k3} = \\ &= -A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} + \delta_{mk} \right) \right\rangle - B \langle a \rangle \left[\frac{\langle \varphi \chi_m \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{m3} - \frac{\langle a \chi_m \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{k3} + \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{m3} \right] + \\ &+ A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle + A \left\langle a \frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} \right\rangle + A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_m} \right\rangle + A \langle a \rangle \delta_{mk} - B \left\langle a \chi_k \frac{\partial \chi_m}{\partial y_3} \right\rangle = \\ &= -\frac{\hat{D}_{mk}}{\varepsilon} - B \left[\langle a \chi_k \rangle \delta_{m3} - \langle a \chi_m \rangle \delta_{k3} \right] + A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle + A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_m} \right) \right\rangle + \\ &+ A \langle a \rangle \delta_{mk} - B \left\langle a \chi_k \frac{\partial \chi_m}{\partial y_3} \right\rangle; \end{aligned}$$

Ainsi, on obtient pour le tenseur de dispersion :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{D}_{mk}}{\varepsilon} &= A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle + A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_m} \right) \right\rangle + A \langle a \rangle \delta_{mk} - \\ &- B \left[\langle a \chi_k \rangle \delta_{m3} - \langle a \chi_m \rangle \delta_{k3} \right] - B \left\langle a \chi_k \frac{\partial \chi_m}{\partial y_3} \right\rangle \quad (2.39) \end{aligned}$$

Permutons les indices :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{D}_{km}}{\varepsilon} = & A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle + A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_m} \right) \right\rangle + A \langle a \rangle \delta_{mk} + \\ & + B \left[\langle a \chi_k \rangle \delta_{m3} - \langle a \chi_m \rangle \delta_{k3} \right] + B \left\langle \chi_k \frac{\partial a \chi_m}{\partial y_3} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.40)$$

En comparant (2.39) et (2.40), on voit que le tenseur de dispersion est constitué de trois parties :

- une partie diffusive (trois termes multipliés par A), qui est symétrique ;
- la deuxième partie convective anti-symétrique (le premier terme multiplié par B) ;
- et la troisième partie convective presque anti-symétrique.

En définitive, le tenseur de dispersion n'est ni symétrique, ni anti-symétrique.

Nous appelons un opérateur L symétrique si $\forall u, w$:

$$(Lu, w) = (Lw, u)$$

L'opérateur L est anti-symétrique si $\forall u, w$:

$$(Lu, w) = -(Lw, u)$$

Nous appelons l'opérateur L presque anti-symétrique si $\forall u, w$:

$$(Lu, w) = -(Lw, au)$$

où $a(y)$ est le coefficient de perméabilité intrinsèque.

Dans le cas où les forces capillaires sont négligées ($A=0$), le tenseur de dispersion est constitué d'une partie anti-symétrique et de l'autre presque anti-symétrique.

La présence des parties presque anti-symétrique et anti-symétrique dans le tenseur de dispersion est causée par le fait que le phénomène de dispersion est provoqué par la convection, dont l'opérateur est soit anti-symétrique, soit presque anti-symétrique :

$$L = a(y) \frac{\partial}{\partial y_3}, \quad \text{soit} \quad L = \frac{\partial(a \cdot)}{\partial y_3}$$

Ainsi, les résultats obtenus sont conformes à la physique du processus.

2.2.16. Sur la définition positive du tenseur de dispersion

À cause de la non-symétrie du tenseur de dispersion, sa définition positive n'est pas assurée dans le cas général (un opérateur défini positif est nécessairement symétrique, mais pas au contraire). Alors il est possible que dans certaines situations le tenseur de dispersion soit défini négatif, ce qui correspond à un processus physiquement instable. Cela est tout à fait conforme à la physique du système étudié qui, étant placé dans le champ de pesanteur, est caractérisé par l'instabilité de Rayleigh si la masse volumique du polluant est supérieure à celle de l'air.

En même temps, la partie capillaire du tenseur de dispersion est définie positive, ce qui est possible à démontrer. En effet, suite aux relations (2.36) et (2.39), on peut présenter le tenseur de dispersion capillaire sous la forme suivante :

$$\frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon} = A \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right\rangle = A \left\langle a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right\rangle + A \left\langle a \left(\frac{\partial \chi_m}{\partial y_k} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_m} \right) \right\rangle + A \langle a \rangle \delta_{mk}$$

Suite à des transformations algébriques, on obtient :

$$\frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon} = A \left\langle a \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \left(\delta_{mi} + \frac{\partial \chi_m}{\partial y_i} \right) \right\rangle = A \left\langle a \frac{\partial \xi_k}{\partial y_i} \frac{\partial \xi_m}{\partial y_i} \right\rangle = A \langle a u_{ki} u_{mi} \rangle$$

$$\xi_k \equiv \chi_k + y_k, \quad u_{ki} \equiv \frac{\partial \xi_k}{\partial y_i}$$

Supposant que $A > 0$, examinons les convolutions de type :

$$\beta_m \frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon A} \beta_k$$

où β_k sont des nombres réels non nuls. Alors on obtient :

$$\beta_m \frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon A} \beta_k = \langle a (\beta_k u_{ki}) (\beta_m u_{mi}) \rangle = \left\langle a \sum_i \sum_k (\beta_k u_{ki}) \sum_m (\beta_m u_{mi}) \right\rangle = \left\langle a \sum_i \left(\sum_k (\beta_k u_{ki}) \right)^2 \right\rangle$$

Appliquons l'inégalité de Buniakovsky-Schwarz : $\int f^2 \geq \left(\int f \right)^2$, alors on obtient :

$$\beta_m \frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon A} \beta_k = \left\langle a \sum_i \left(\sum_k \beta_k u_{ki} \right)^2 \right\rangle = \sum_i \left\langle \left(\sqrt{a} \sum_k \beta_k u_{ki} \right)^2 \right\rangle \geq \sum_i \left\langle \sqrt{a} \sum_k \beta_k u_{ki} \right\rangle^2 =$$

$$= \sum_i \left\langle \sqrt{a} \sum_k \beta_k \left(\frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right) \right\rangle^2 \geq \sqrt{a_{\min}} \sum_i \left\langle \sum_k \beta_k \left(\frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right) \right\rangle^2 = \sqrt{a_{\min}} \sum_i \sum_k \left(\beta_k \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right\rangle \right)^2$$

Puisque les fonctions χ_k sont périodiques, l'intégrale de la dérivée $\partial \chi_k / \partial y_i$ à travers Y est égale à zéro, alors on obtient :

$$\beta_m \frac{\hat{D}_{mk}^c}{\varepsilon A} \beta_k \geq \sqrt{a_{\min}} \sum_i \sum_k \left(\beta_k \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right\rangle \right)^2 = \sqrt{a_{\min}} \sum_i \sum_k (\beta_k \delta_{ki})^2 = \sqrt{a_{\min}} \sum_i \beta_i^2$$

ce qui est la définition d'un tenseur défini positif.

2.2.17. Conclusions

Cette partie a été consacrée à l'étude de l'influence des forces gravitaires et capillaires sur l'écoulement d'un polluant à travers la zone non saturée d'un milieu poreux hétérogène, décrit par l'équation différentielle de Richards. Des résultats importants sont tirés de cette étude :

1. On a obtenu un modèle macroscopique à l'aide de la méthode d'homogénéisation par développement asymptotique. Par rapport au modèle initial, le modèle macroscopique obtenu inclut un nouvel effet physique de dispersion hydrodynamique non linéaire décrit en terme d'une diffusion tensorielle fonction de la vitesse d'écoulement.
2. Pour le tenseur de dispersion, on a obtenu la description fermée en terme d'une suite de problèmes cellulaires.
3. On a montré que la vitesse de convection dans l'équation originale de Richards n'est pas conservative (paragraphe 2.2.7), ce qui détermine une nouvelle loi constitutive (2.29), non classique. Suivant cette loi, les oscillations de la saturation ont une composante additive traditionnelle qui est proportionnelle au gradient de la saturation homogénéisée, et une autre composante dont le comportement est contrôlé par une fonctionnelle $Z(s_0)$ non locale dans le temps et dépendant de toute l'histoire du processus.

L'apparition de la mémoire est un phénomène assez caractéristique pour des systèmes hyperboliques de type équation de convection de premier ordre.

4. L'équation macroscopique pour le transport de la saturation est une équation intégral-différentielle à cause du terme $\varepsilon \mathfrak{N}(Z(S, x, \tau))$ en (2.39), qui détermine l'effet de mémoire longue à l'échelle macroscopique. Cet effet est provoqué par le terme de convection dans l'équation originale de Richards, plus précisément, par le fait que la vitesse de convection dans l'équation de Richards n'est pas conservative. La mémoire apparaît au niveau de la loi constitutive.

5. Le terme intégro-différentiel disparaît si les forces capillaires sont dominantes ($Pe=0$).

Le terme intégro-différentiel n'influence par le phénomène de dispersion proprement dit, celui décrit par un opérateur différentiel de deuxième ordre. Ainsi, l'analyse de l'influence de ce terme sur le comportement macroscopique de la saturation ne fait pas l'objet de cette thèse. Nous nous limiterons par la mise en évidence de l'existence de ce phénomène non trivial dans les processus étudiés. L'analyse consécutive sera concentrée sur le phénomène de dispersion.

CHAPITRE 3
SOLUTION DES PROBLÈMES
CELLULAIRES ET ANALYSE
QUALITATIVE DU TENSEUR DE
DISPERSION

3.1. Propriétés des solutions du problème cellulaire

3.1.1. Unicité et existence

La technique d'homogénéisation nous fournit deux types de résultats : le premier concerne les équations macroscopiques d'écoulement, le second est le problème cellulaire qui nous permet de connaître différentes informations sur l'hétérogénéité du domaine à travers les fonctions cellulaires, qui définissent la structure des paramètres moyennés. Le problème cellulaire est celui décrit par l'équation (3.1), pour $(k=1,2,3)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma \alpha(x,t) \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_k) = -\sigma \alpha(x,t) \frac{\partial a}{\partial y_k} + a \delta_{k3} - \frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3}, \quad y \in Y \\ \chi_k = 1 - \text{périodique en } y \\ \langle \chi_k \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

où :

$$\alpha(x,t) \equiv -\frac{\hat{k}_l \hat{P}'_c}{\hat{k}'_l}, \quad \sigma \equiv \frac{1}{Pe_{micr}} \quad (3.2)$$

L'existence de la solution du problème cellulaire est assurée par *l'alternative de Fredholm*. La condition $\langle \chi_k \rangle = 0$ est nécessaire pour que la solution du problème soit unique.

3.1.2. Non-localité du problème cellulaire

Dans l'équation (3.1), la fonction $\alpha(x,t)$ détermine la dépendance du problème cellulaire des variables macroscopiques. Ceci signifie que le problème cellulaire n'est pas local, mais change lorsqu'on change la cellule. Habituellement cette propriété est examinée plutôt comme le défaut du modèle macroscopique, car elle demande la résolution du problème cellulaire pour chaque x et t . Une procédure de "localisation" est donc toujours la bienvenue. Nous proposons alors une localisation approximative.

Suite au paragraphe 2.1.5, le nombre de Peclet Pe peut être $\geq \frac{1}{\varepsilon}$, ceci implique que $\sigma \leq 1$. Ainsi σ étant assez petit, le rôle du premier terme à gauche dans l'équation (3-1) est donc secondaire. Alors on peut simplifier le facteur $\alpha(x,t)$, en prenant sa valeur moyenne dans le domaine Ω et ceci à chaque instant.

$$\alpha(x,t) \rightarrow \bar{\alpha} \quad (3.3)$$

Alors le problème cellulaire "localisé" prend la forme pour tout $k=1,2,3$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma \bar{\alpha} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_k) = -\sigma \bar{\alpha} \frac{\partial a}{\partial y_k} + a \delta_{k3} - \frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3}, \quad y \in Y \\ \langle \chi_k \rangle = 0 \\ \chi_k \text{ est 1-périodique} \end{array} \right. \quad (3.4)$$

En accord avec le paragraphe 2.2.10, si le problème cellulaire est local, alors le terme de « freinage » dans l'équation homogénéisée est nul :

$$\Delta_k = 0, \quad \forall k$$

Une telle localisation du problème cellulaire n'est pas nécessaire dans tous les cas possibles. En particulier, on va montrer dans le paragraphe 3.1.3 que le problème cellulaire est strictement local dans le cas sans forces capillaires, sans aucune approximation à introduire dans les coefficients.

3.1.3. Invariance de la solution dans le cas sans capillarité

Une propriété importante des solutions du problème cellulaire sera utilisée dans les simulations numériques.

Notons que dans le cas sans forces capillaires, le problème (3.4) devient :

$$\frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_k) = \left(\frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} - a \right) \delta_{k3}, \quad y \in Y ; \quad \langle \chi_k \rangle = 0, \quad \chi_k = 1\text{-périodique en } y \quad (3.4)'$$

Proposition :

Dans le cas sans forces capillaires ($\sigma = 0$), la fonction

$$u(y) = \chi_k(y) + \frac{C}{a(y)}, \quad C = \text{const} \quad (\#)$$

est la solution (périodique) du problème (3.4), dont la moyenne est égale à

$$\langle u \rangle = C \left\langle \frac{1}{a} \right\rangle \quad (\#\#)$$

En effet, notons que u est périodique par définition, car $\chi_k(y)$ et $a(y)$ sont périodiques. Insérons (#) dans (3.4) :

$$-\frac{\partial}{\partial y_3}(au - C) = \left(a - \frac{\varphi\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \right) \delta_{k3}, \quad \left\langle u - \frac{C}{a} \right\rangle = 0$$

ou

$$-\frac{\partial}{\partial y_3}(au) = \left(a - \frac{\varphi\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \right) \delta_{k3}, \quad \langle u \rangle = C \left\langle \frac{1}{a} \right\rangle$$

Ainsi, u est la solution périodique de l'équation différentielle (3.4), dont la valeur moyenne est non nulle.

Cette propriété montre l'invariance de la solution de (3.4) par rapport à la transformation (#).

3.1.4. Description de la cellule unitaire

Rappelons que $a(y)$ signifie la perméabilité adimensionnelle, tandis que $K(y)$ est la perméabilité avec dimension.

Les calculs sont effectués sur une cellule unitaire $Y = Y^I \cup Y^{II} = [-1/2, 1/2] \cup [-1/2, 1/2] \subset \mathfrak{R}^2$. On attribue deux valeurs constantes à chaque sous domaine Y^i : une de perméabilité et l'autre de porosité, respectivement a_i et φ_i ($i=I, II$). Le sous-ensemble Y^{II} est supposé moins perméable que Y^I :

$$a^I > a^{II}, \quad \varphi^I > \varphi^{II}$$

La structure de la cellule unitaire est présentée par le schéma correspondant à un milieu à double porosité.

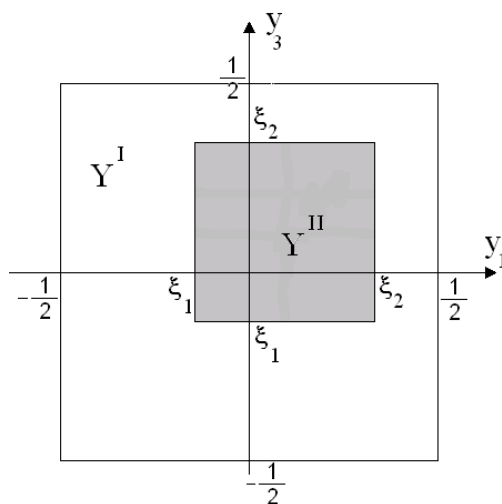


Figure 3.1 : Cellule unitaire 2D

Nous étudions le cas d'une hétérogénéité macroscopiquement anisotrope dans le cas général qui peut être modélisée par un emplacement asymétrique de la zone intérieure Y'' . Le sous-domaine $Y'' \subset \mathfrak{R}^2$ est défini comme : $Y'' = \{\xi_1 < y_1 < \xi_2, \xi_1 < y_3 < \xi_2\}$.

Notons que, le tenseur de dispersion étant toujours ou presque toujours anisotrope, la notion d'isotropie/anisotropie en liaison avec la symétrie/asymétrie de la structure interne de la cellule n'a de sens que par rapport au paramètre de la perméabilité absolue. L'hétérogénéité est donc dite « macroscopiquement isotrope ou anisotrope », si la perméabilité macroscopique du milieu est isotrope ou anisotrope respectivement.

On étudie la variation de la solution en fonction du paramètre $\omega = \frac{K_{II}}{K_I} = \frac{a_{II}}{a_I}$ (rapport de perméabilité), en fixant la valeur $a^I = 1$. Le rapport de porosité $\frac{\varphi_{II}}{\varphi_I}$ reste toujours

fixe : $\varphi_I = 0.2$ et $\varphi_{II} = 0.1$. Les valeurs de ξ_1 et ξ_2 sont variables. Ainsi même si le milieu est homogène par rapport à la perméabilité, il reste hétérogène par rapport à la porosité.

Puisque la fonction a est non différentiable dans Y , $a \in L_2(Y)$, le problème cellulaire doit être examiné par une formulation faible : trouver une fonction périodique $\chi_k(y)$ (pour $k=1,2,3$) qui vérifie le problème :

$$-\sigma \bar{\alpha} \int_Y a \frac{\partial(\chi_k + y_k)}{\partial y_i} \frac{\partial u}{\partial y_i} dy + \int_Y a \chi_k \frac{\partial u}{\partial y_3} dy = \int_Y u \delta_{k3} \left(a - \frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} \right) dy, \quad \forall u(y) \in V$$

où V est l'espace d'Hilbert des fonctions périodiques sur Y .

3.2. Solutions analytiques du problème cellulaire dans le cas sans forces capillaires ($Pe \rightarrow \infty$) :

Dans le cas sans forces capillaires le problème cellulaire a une solution analytique.

3.2.1. Problème cellulaire dans le cas sans forces capillaires

Le problème cellulaire (3.4) revient à résoudre le système suivant pour $k=1,2,3$:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_k) = \left(\frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} - a \right) \delta_{k3}, & y \in Y \\ \chi_k = 1\text{-périodique en } y \\ \langle \chi_k \rangle = 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

on obtient alors :

$$\chi_1 \equiv 0, \quad \chi_2 \equiv 0 \quad (3.6)$$

tandis que la fonction χ_3 est la solution du problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_3}(a\chi_3) = \left(\frac{\varphi\langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle} - a \right), & y \in Y \\ \langle \chi_3 \rangle = 0 \\ \chi_3 \text{ est } y\text{-périodique} \end{cases} \quad (3.7)$$

En d'autres termes, ce problème peut se présenter sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial y_3}(a\chi_3) = -\langle a \rangle \left(\frac{\tilde{a}}{\langle a \rangle} - \frac{\tilde{\varphi}}{\langle \varphi \rangle} \right), \quad \langle \chi_3 \rangle = 0, \quad \chi_3 \text{ est } 1\text{-périodique} \quad (3.8)$$

où $\tilde{a} \equiv a - \langle a \rangle$ et $\tilde{\varphi} \equiv \varphi - \langle \varphi \rangle$ sont des fluctuations de la perméabilité et porosité.

On va donc étudier plus en détail la solution de ce problème, (3.7).

3.2.2. Cas d'un milieu de double porosité

Dans le cas du milieu de double porosité présenté sur la figure (3.1), les fluctuations des paramètres en (3.8) sont :

$$\tilde{a} \equiv \begin{cases} (a_I - a_{II})\theta, & y \in Y^I \\ -(a_I - a_{II})(1 - \theta), & y \in Y^{II} \end{cases}, \quad \tilde{\varphi} \equiv \begin{cases} (\varphi_I - \varphi_{II})\theta, & y \in Y^I \\ -(\varphi_I - \varphi_{II})(1 - \theta), & y \in Y^{II} \end{cases}$$

où $\theta = (\xi_2 - \xi_1)^2$ est la fraction volumique du sous-domaine Y^{II} .

Notons que $\tilde{a} > 0$, $\tilde{\varphi} > 0$ si $y \in Y^I$; et au contraire : $\tilde{a} < 0$, $\tilde{\varphi} < 0$ si $y \in Y^{II}$.

Ainsi le problème cellulaire (3.7) devient :

$$\frac{\partial}{\partial y_3}(a\chi_3) = -\langle a \rangle f(y); \quad f(y) \equiv \begin{cases} \left[\frac{a_I - a_{II}}{\langle a \rangle} - \frac{\varphi_I - \varphi_{II}}{\langle \varphi \rangle} \right] \theta, & y \in Y^I \\ - \left[\frac{a_I - a_{II}}{\langle a \rangle} - \frac{\varphi_I - \varphi_{II}}{\langle \varphi \rangle} \right] (1 - \theta), & y \in Y^{II} \end{cases} \quad (3.9)$$

Introduisons les valeurs :

$$a' \equiv \frac{a_I - a_{II}}{\langle a \rangle} \quad \text{et} \quad \varphi' \equiv \frac{\varphi_I - \varphi_{II}}{\langle \varphi \rangle} \quad (3.10)$$

qui sont des fluctuations relatives de la perméabilité et de la porosité, alors le problème cellulaire correspondant prend la forme :

$$\frac{\partial}{\partial y_3}(a\chi_3) = -\langle a \rangle f(y); \quad f(y) \equiv \begin{cases} [a' - \varphi']\theta, & y \in Y^I \\ -[a' - \varphi'](1 - \theta), & y \in Y^{II} \end{cases} \quad (3.11)$$

3.2.3. Comportement qualitatif de la fonction cellulaire

Suite à (3.11), le produit $a\chi_3$ est continu (mais pas différentiable). Ceci signifie que la fonction χ_3 sera discontinue, à cause de la discontinuité du coefficient a .

A partir de (3.11), on voit que le comportement de la fonction cellulaire est déterminé par le signe de la différence $(a' - \varphi')$. En plus, la fonction cellulaire est linéaire par rapport à y_3 dans chaque sous-domaine du Y , suite à (3.11) où la fonction f dans la partie droite et le coefficient a sont constants par morceaux. Ainsi, dans la coupe selon l'axe y_3 la fonction χ_3 sera constituée de 3 fragments linéaires par rapport à y_3 . Puisque le coefficient a est constant par morceaux, la fonction $a\chi_3$ sera également constituée de trois fragments linéaires par rapport à y_3 .

Si $(a' - \varphi') < 0$ (les fluctuations de la perméabilité sont plus faibles que celles de la porosité), alors $f > 0$ sur Y^I et $f < 0$ sur Y^{II} . Ainsi la dérivée longitudinale de la fonction χ_3 est positive en Y^I et négative en Y^{II} . Ainsi pour la fonction continue $a\chi_3$, on obtient une image qualitative présentée par la courbe « a » à la figure (3.2), pour le cas de la cellule symétrique. La fonction χ_3 sera donc discontinue et aura la forme de la courbe b.

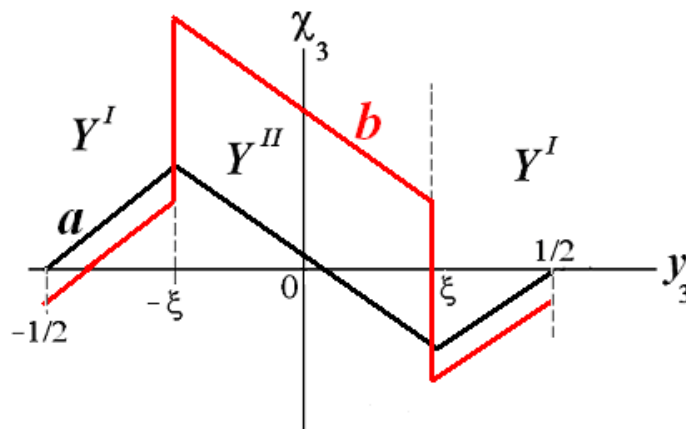


Figure 3.2 : Comportement qualitatif du produit $a\chi_3$ (a) et de la fonction cellulaire χ_3 (b) selon l'axe central y_3

Si $(a' - \varphi') > 0$ (les fluctuations de la perméabilité sont plus fortes que celles de la porosité), alors tout sera antisymétrique.

Notons que dans une cellule symétrique (milieu macro-isotrope), où la perméabilité et porosité sont des fonctions paires de y_3 , le produit $a\chi_3$ sera impair par rapport à y_3 . Ainsi la fonction discontinue χ_3 n'est ni paire, ni impaire.

3.2.4. Construction de la solution exacte

La solution du problème (3.11) est :

$$a(y_1, y_3)\chi_3(y_1, y_3) = -\langle a \rangle \int_{-1/2}^{y_3} f(y_1, \bar{y}_3) d\bar{y}_3 - \Omega C$$

où

$$\Omega \equiv \langle a \rangle (a' - \varphi')$$

avec une constante d'intégration C (qui peut dépendre de y_1).

Plus précisément :

$$-\chi_3(y) = \begin{cases} \frac{\Omega\theta}{a_I} (y_3 + 1/2) + \frac{\Omega C(y_1)}{a_I}, & \text{si } \begin{cases} -1/2 < y_3 \leq \xi_1 \\ \xi_1 < y_1 \leq \xi_2 \end{cases}, \text{ et } \begin{cases} -1/2 < y_3 \leq 1/2 \\ -1/2 < y_1 \leq \xi_1, \xi_2 < y_1 \leq 1/2 \end{cases} \\ \frac{\Omega}{a_{II}} [\theta(\xi_1 + 1/2) - (1 - \theta)(y_3 - \xi_1)] + \frac{\Omega C(y_1)}{a_{II}}, & \text{si } \begin{cases} \xi_1 < y_3 \leq \xi_2 \\ \xi_1 < y_1 \leq \xi_2 \end{cases} \\ \frac{\Omega}{a_I} [\theta(\xi_1 + 1/2) - (1 - \theta)(\xi_2 - \xi_1) + \theta(y_3 - \xi_2)] + \frac{\Omega C(y_1)}{a_I}, & \text{si } \begin{cases} \xi_2 < y_3 \leq 1/2 \\ \xi_1 < y_1 \leq \xi_2 \end{cases} \end{cases} \quad (3.12)$$

ce qui est une fonction linéaire par morceaux. La constante d'intégration C est déterminée à l'aide de la condition $\langle \chi_3 \rangle = 0$.

L'intégration de la solution à travers la cellule entière donne :

$$0 = -\frac{\langle \chi_3 \rangle}{\Omega} = \left(\frac{\theta}{a_I} \left(\frac{y_3^2}{2} + \frac{y_3}{2} \right)_{-1/2}^{1/2} + \frac{C}{a_I} \right) \left(\xi_1 + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{\theta}{a_I} \left(\frac{y_3^2}{2} + \frac{y_3}{2} \right)_{-1/2}^{1/2} + \frac{C}{a_I} \right) \left(\frac{1}{2} - \xi_2 \right) + \\ + \left(\frac{\theta}{a_I} \left(\frac{y_3^2}{2} + \frac{y_3}{2} \right)_{-1/2}^{\xi_1} + \frac{C}{a_I} \left(\xi_1 + \frac{1}{2} \right) \right) (\xi_2 - \xi_1) + \\ + \left[\frac{\theta}{a_I} \left(\xi_1 + \frac{1}{2} \right) - \frac{(1 - \theta)}{a_I} (\xi_2 - \xi_1) \right] (\xi_2 - \xi_1) \left(\frac{1}{2} - \xi_2 \right) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[\frac{\theta}{a_I} \left(\frac{y_3^2}{2} - \xi_2 y_3 \right)_{\xi_2}^{1/2} \right] (\xi_2 - \xi_1) + \frac{C}{a_I} \left(\frac{1}{2} - \xi_2 \right) (\xi_2 - \xi_1) + \\
 & + \left[\frac{\theta}{a_{II}} \left(\xi_2 + \frac{1}{2} \right) (\xi_2 - \xi_1) - \frac{(1-\theta)}{a_{II}} \left(\frac{y_3^2}{2} - \xi_1 y_3 \right)_{\xi_2}^{\xi_1} \right] (\xi_2 - \xi_1) - \\
 & - \left[\frac{(1-\theta)}{a_{II}} \left(\frac{y_3^2}{2} - \frac{y_3}{2} \right)_{\xi_2}^{\xi_1} \right] (\xi_2 - \xi_1) + \frac{C}{a_{II}} (\xi_2 - \xi_1)^2;
 \end{aligned}$$

Ainsi, on obtient la constante C :

$$C = \frac{(1-\theta)\theta^{3/2} - \theta^2(1+2\xi_1) + \omega\theta[(1-\theta)(1-2\xi_2) - \theta^{3/2} + 2\theta - 1]}{2[\theta + \omega(1-\theta)]} \quad (3.13)$$

La solution du problème cellulaire est donc construite, elle est définie par les relations (3.12) et (3.13).

Si la cellule est symétrique ($\xi_2 = -\xi_1$), alors :

$$C = \frac{\omega\theta[\theta - \theta^{1/2}] + \theta^{3/2} - \theta^2}{2[\theta + \omega(1-\theta)]}$$

Notons que comme la fonction χ_3 n'est pas continue, y compris à la frontière de la cellule périodique, la périodicité peut toujours être satisfaite, puisque les conditions nécessaires et suffisantes de la périodicité sont satisfaites a priori.

3.2.5. Exemples de calculs de la fonction cellulaire exacte

La solution obtenue a été calculée pour le cas d'une hétérogénéité macroscopiquement anisotrope ($\xi_1 = -0.05$; $\xi_2 = 0.35$). Les solutions sont présentées sur la figure (3.3). Le cas *a* correspond à une forte hétérogénéité par rapport à la perméabilité, où la fluctuation a' est supérieure à la fluctuation de la porosité, $\varphi' : a_I = 1, a_{II} = 0.1$; $\varphi_I = 0.2, \varphi_{II} = 0.1$. Le cas *b* décrit, au contraire, une fluctuation de porosité plus forte que celle de la perméabilité : $a_I = 1, a_{II} = 0.6$; $\varphi_I = 0.2, \varphi_{II} = 0.1$.

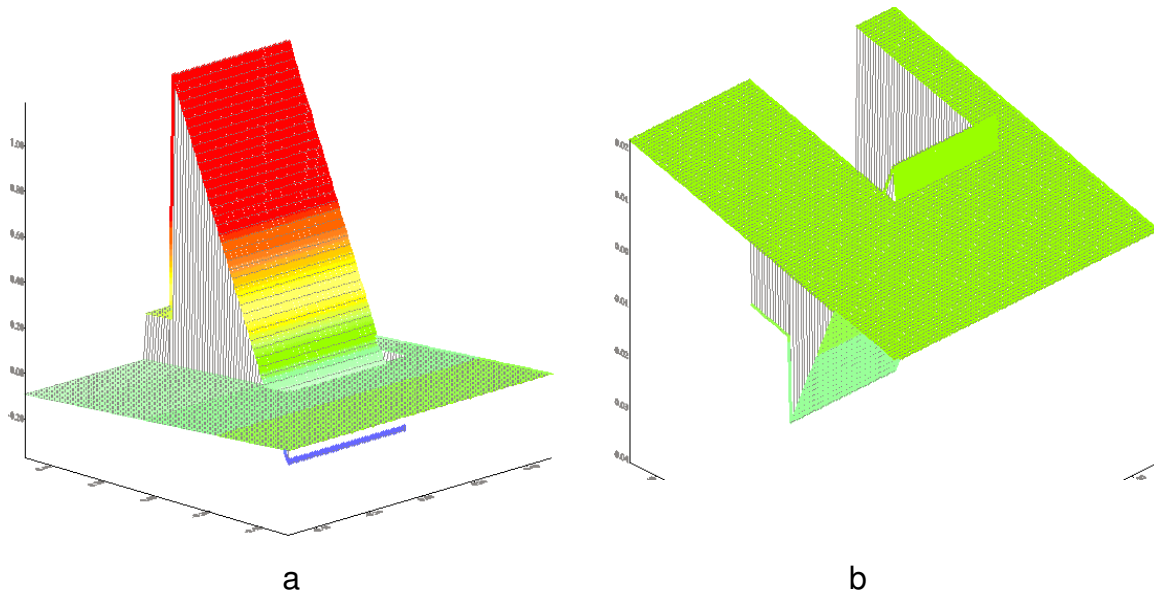


Figure 3.3 : Fonction cellulaire exacte (solution analytique), cas sans capillarité : a) la fluctuation de perméabilité est plus forte; b) la fluctuation de porosité est dominante

On voit que la fonction cellulaire sans gravité est fortement discontinue et donc très difficile à simuler numériquement.

3.3. Méthode numérique de résolution du problème cellulaire

Dans le cas général, le problème cellulaire (3.4) n'a pas de solutions analytiques. Les solutions pour différents cas ont été obtenues par modélisation numérique.

3.3.1. Description du logiciel FEMLAB

FEMLAB est un logiciel destiné à la modélisation et la simulation d'un grand spectre de phénomènes physiques qui peuvent être décrits sous forme d'Équations aux Dérivées Partielles (EDP) de différents types. Il propose des solveurs assez performants qui peuvent résoudre des problèmes de très grande taille avec précision, souplesse et rapidité grâce à des modèles prédéfinis. Il permet de résoudre des systèmes non linéaires couplés d'équations aux dérivées partielles.

La discrétisation de l'espace est basée sur la méthode des éléments finis (voir Annexe 6), avec un maillage automatique de la géométrie en triangles ou en tétraèdres.

FEMLAB inclut un environnement de C.A.O, un mailleur, la définition des équations, une gamme de solveurs adaptés, ainsi que les outils de post traitement. Des

modules sont disponibles pour le génie chimie, la mécanique des solides et des structures, ainsi que pour l'électromagnétisme. Une fonctionnalité originale de FEMLAB, appelée "multiphysics" permet de modéliser et de résoudre des problèmes combinant plusieurs modèles.

L'avantage de FEMLAB est qu'il est plus destiné à la recherche qu'aux applications industrielles, ce qui a déterminé notre choix de ce logiciel. Le traitement de tout problème est proposé par Femlab en termes mathématiques, tandis que d'autres logiciels courants utilisent le langage industriel. D'autre part, les possibilités du préprocesseur géométrique de FEMLAB ne permettent pas de définir facilement des formes aussi complexes que dans les logiciels de C.A.O. classiques (CATIA, Proengineer,...).

FEMLAB est une application dotée d'une interface graphique. Cependant, le modèle créé peut être sauvegardé sous forme de script. Le langage de programmation de FEMLAB est basé sur le langage de programmation de MATLAB. Cela permet d'étendre encore les possibilités du logiciel.

3.3.2. Étapes de résolution d'un problème physique par FEMLAB

La résolution d'un problème par FEMLAB suit une méthode très claire :

- Définition du modèle

Il faut choisir la dimension (1D, 2D, 3D) et la nature du problème soit par le choix d'une équation, soit par le choix d'un modèle physique.

- Mise en place de la géométrie du problème

Il s'agit tout simplement de dessiner, à l'aide des outils de dessins intégrés à FEMLAB, un modèle géométrique du problème. Les outils de dessins de FEMLAB sont limités, par conséquent les objets à géométrie complexe devront être modélisés par des assemblages d'objets à formes simples.

- Définition des conditions aux limites

Les conditions aux limites correspondant au type de problème utilisé peuvent toutes être définies.

- Définition des équations aux dérivées partielles du problème

Les équations différentielles sont généralement définies dès le choix du type de problème. Il faut alors définir les valeurs des constantes qui interviennent.

- Choix d'un maillage

FEMLAB permet de définir automatiquement un maillage. Ce maillage peut être ajusté, pour obtenir une plus grande finesse par exemple.

- Résolution

Les solveurs proposés par Femlab sont basés sur différents principes de solution numérique. Par exemple, pour un problème stationnaire, on peut obtenir la solution numérique en utilisant les méthodes directes (sans itérations) ou indirectes (itératives), ou en introduisant un temps fictif (méthode de relaxation). Pour un problème non linéaire, on peut appliquer la méthode explicite de traitement des non-linéarités (donc sans itérations) ou la méthode implicite (itérative), etc.

- Affichage des résultats

FEMLAB possède une fonction plot qui permet de représenter certaines valeurs en tons de couleurs dans l'espace de travail et de nombreuses autres possibilités (vecteur courant, déformée...). La visualisation choisie par défaut (sur des plans de coupe) n'est pas la meilleure. On lui préférera l'affichage "tetrahedron" .

3.3.3. Discrétisation du domaine

La discrétisation d'une cellule est présentée sur la Figure 3.4 :

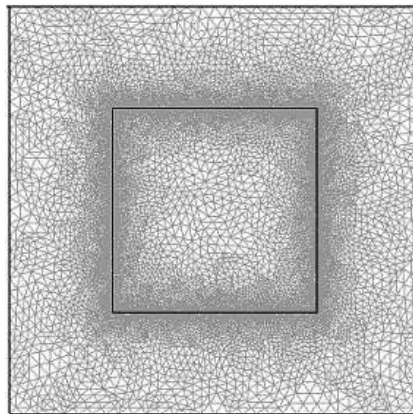


Figure 3.4 Discrétisation de la cellule périodique

Le logiciel FEMLAB assure une discrétisation spatiale basée sur la méthode des éléments finis. Pour notre étude, le coefficient a (perméabilité adimensionnée) est discontinu à la frontière de Y^I , ∂Y^I , d'où la nécessité de raffiner le maillage comme décrit sur la figure (3.4).

On a étudié le cas 2D (x_1, x_3) . Dans ce système de coordonnées, la direction x_3 est celle longitudinale pour un processus naturel de la propagation d'un polluant.

3.4. Solutions numériques du problème cellulaire dans le cas sans capillarité

Afin de tester la méthode numérique, on a construit les solutions pour le cas sans forces capillaires en les comparant avec des solutions analytiques exactes.

Le problème cellulaire (3.7) était étudié en 2D (x_1, x_3) .

3.4.1. Introduction de la « viscosité artificielle »

Le problème (3.7) tel qu'il est posé ne peut pas être résolu par FEMLAB, orienté essentiellement aux équations paraboliques ou elliptiques. L'idée de résolution consiste à utiliser une méthode hydrodynamique connue sous le nom de la viscosité artificielle. Elle consiste à ajouter un opérateur différentiel d'ordre 2 multiplié par un petit facteur δ . En accord avec le problème complet, (3.4), nous introduisons la viscosité artificielle de façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\delta \frac{\partial^2 \chi_3}{\partial y_3^2} + \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_3) = -a + \frac{\varphi \langle a \rangle}{\langle \varphi \rangle}, \quad y \in Y \\ \langle \chi_3 \rangle = 0 \\ \chi_3 \text{ est 1-périodique} \end{array} \right. \quad (3.14)$$

La solution de l'équation originale du problème (3.7) peut être obtenue à partir de l'équation elliptique (3.14) quand δ tend vers 0.

La valeur optimale de δ obtenue par des simulations est égale à 0.01.

3.4.2. Traitement de la condition sur la valeur moyenne

Pour le problème périodique, la condition intégrale $\langle \chi_3 \rangle = 0$ ne peut pas être utilisée directement dans les simulations numériques. Une autre condition a été imposée : $\chi_3(0,0) = 0$, qui assure l'unicité. Ce problème amène à une solution $\tilde{\chi}_3$ qui a une moyenne non nulle. Pour construire ensuite la vraie solution χ_3 , on a utilisé la propriété d'invariance formulée dans le paragraphe 3.1.3. Suite à cette propriété, la fonction correcte χ_3 peut être obtenue à partir de la fonction $\tilde{\chi}_3$ par une transformation suivante :

$$\chi_3 = \tilde{\chi}_3 - \frac{C}{a(y)}$$

où la constante $C = \langle \tilde{\chi}_3 \rangle / \langle 1/a \rangle$.

La valeur $\langle \tilde{\chi}_3 \rangle$ a été calculée par l'intégration numérique de la solution $\tilde{\chi}_3$.

3.4.3. Résultats de simulations de la fonction cellulaire

Les graphiques suivants montrent comment χ_3 , la solution du système (3.7), varie en fonction de ω . L'hétérogénéité est macroscopiquement isotrope, avec $\theta = 0.16$, $a_I = 1$, $\varphi_I = 0.2$, $\varphi_{II} = 0.1$.

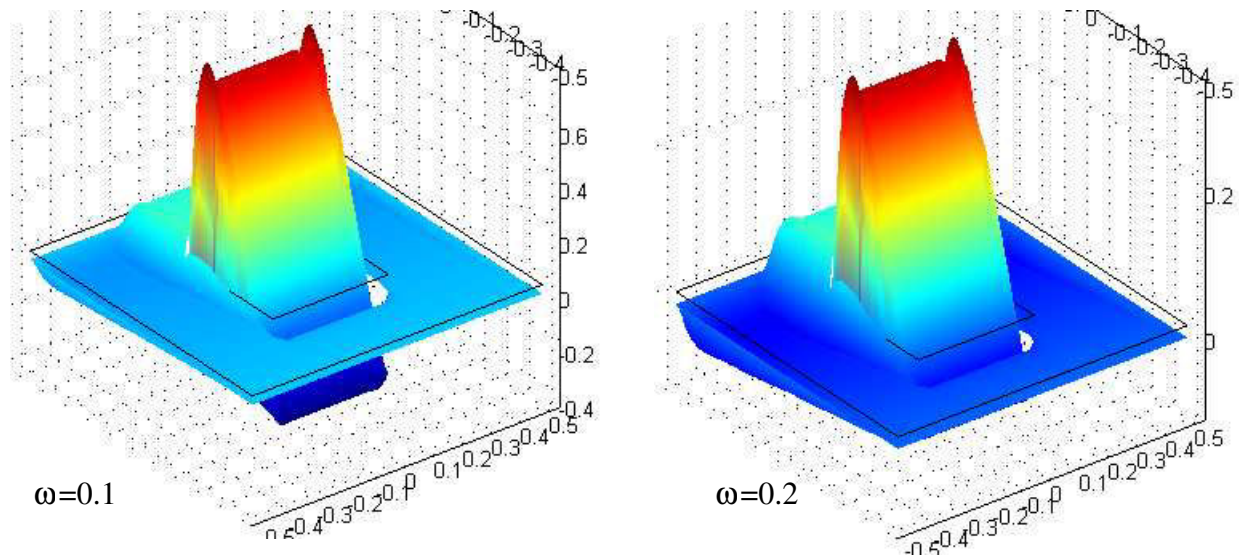


Figure 3.5 : Fonction cellulaire χ_3 pour $\omega=0.1$ et 0.2

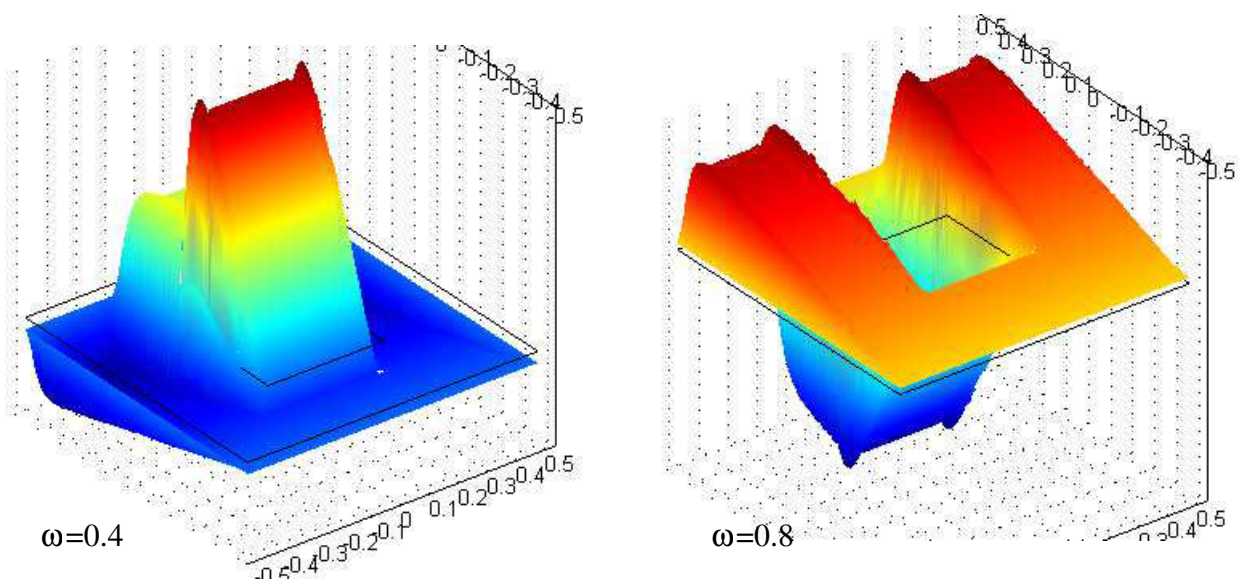


Figure 3.6 : Fonction cellulaire χ_3 pour $\omega=0.4$ et 0.8

3.4.4. Comparaison entre la solution numérique et analytique

Afin de contrôler les simulations, nous avons comparé les résultats numériques obtenus par FEMLAB avec des solutions analytiques exactes pour le cas sans capillarité. La figure (3.7) montre la fonction cellulaire χ_3 obtenue par deux méthodes pour le cas le plus difficile pour des simulations numériques, lorsque le degré d'hétérogénéité est fort : $\omega = 0.1$, $\theta = 0.16$.

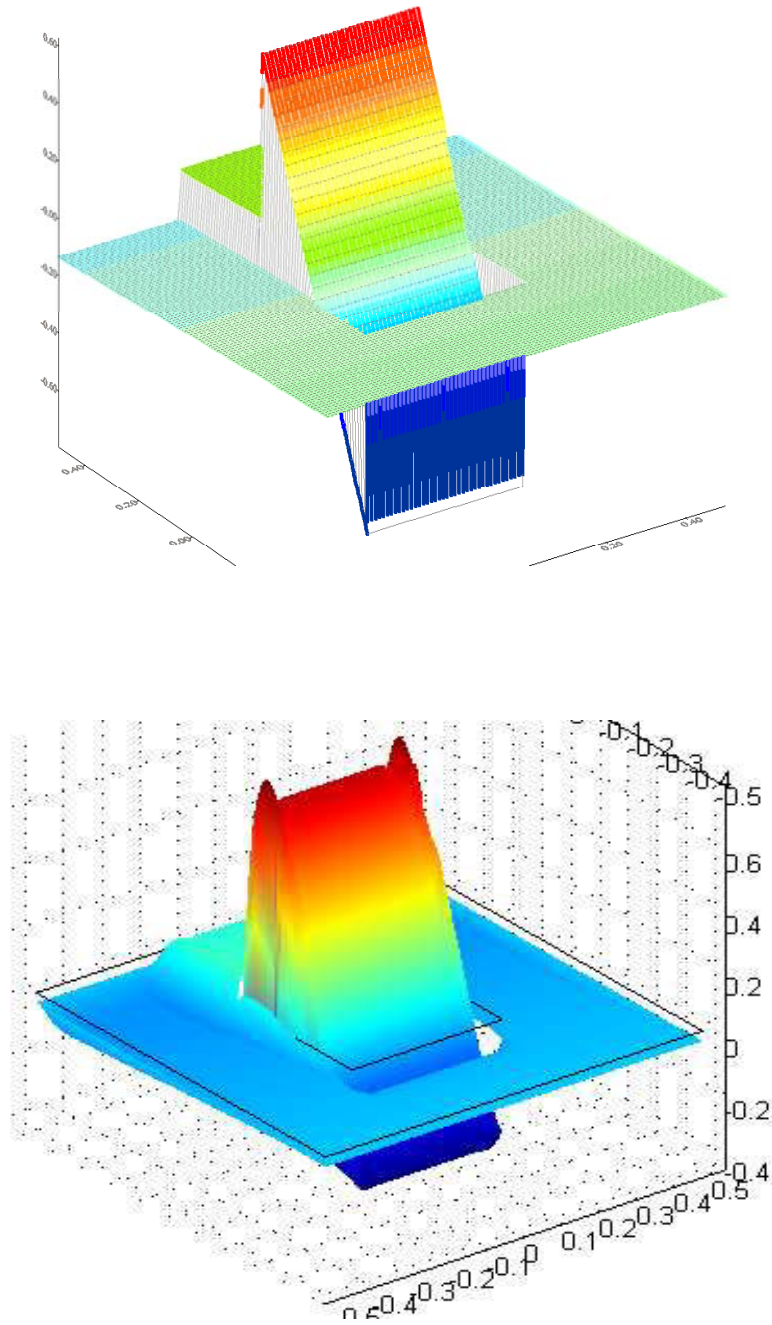


Figure 3.7 : Comparaison entre χ_3 analytique et χ_3 numérique pour $\omega=0.1$ et $\theta = 0.16$

Dans ce cas, les résultats numériques obtenus pour la fonction longitudinale χ_3 correspondent parfaitement à ceux réalisés par voie analytique. La comparaison entre les deux solutions, est donc satisfaisante quantitativement.

3.5. Solutions numériques du problème cellulaire dans le cas avec capillarité

3.5.1. Solution pour le cas de la capillarité prépondérante ($Pe \ll 1$)

Dans le cas où la capillarité est prépondérante ($\sigma \rightarrow \infty$), la fonction longitudinale correspond parfaitement qualitativement comme quantitativement à la fonction transversale. Pour $k=1,2,3$ le problème cellulaire revient à résoudre :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a(y) \left(\delta_{ki} + \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right) \right) = 0, & y \in Y \\ \langle \chi_k \rangle = 0, & \chi_k \text{ est } y\text{-périodique} \end{cases}$$

La résolution de cette équation sur la cellule unitaire n'est pas évidente, car le problème avec des conditions périodiques ne correspond pas aux problèmes aux limites classiques de la théorie des équations différentielles.

Dans (Bakhvalov & Panasenko, 1989), on a montré que pour une hétérogénéité symétrique, le problème périodique peut être réduit à un problème aux limites classiques :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_1} \left(a(y) \frac{\partial X_k}{\partial y_1} \right) + \frac{\partial}{\partial y_3} \left(a(y) \frac{\partial X_k}{\partial y_3} \right) = 0, & X_k \equiv \chi_k + y_k \\ X_k(y_k = 1/2) = -1/2 \\ X_k(y_k = -1/2) = 1/2 \\ \frac{\partial X_k}{\partial y_m} (y_m = \pm 1/2) = 0, & m \neq k \end{cases}$$

Pour la même configuration de la cellule, différentes solutions numériques ont été construites pour ce cas, où les forces gravitaires sont négligeables. Parmi les résultats on présente deux cas d'hétérogénéité forte (figure 3.8) et d'hétérogénéité faible (figure 3.9).

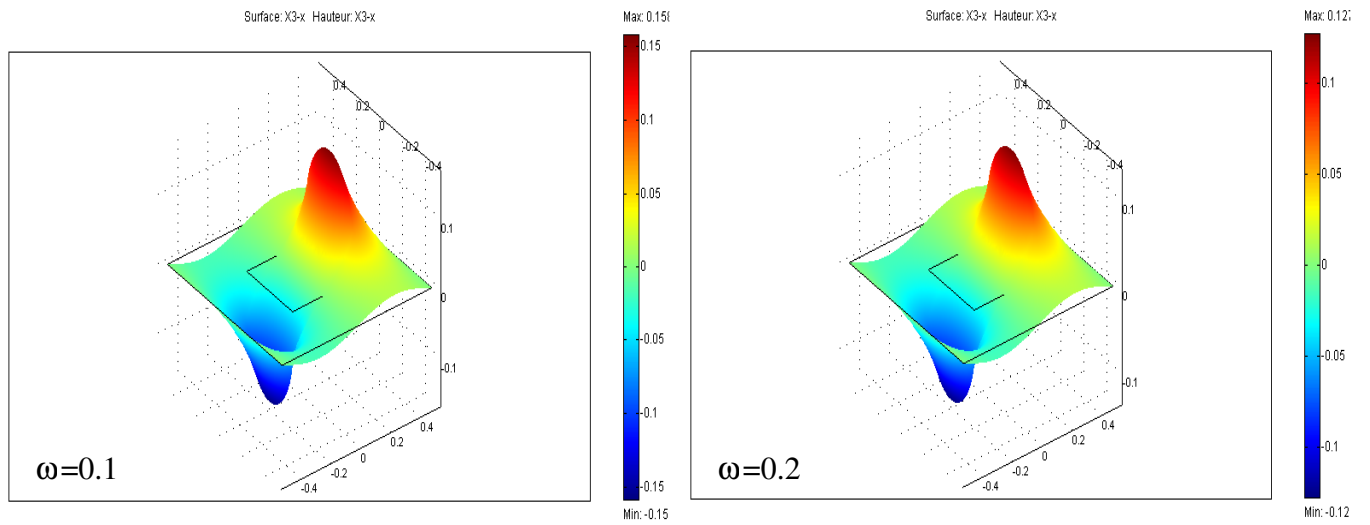


Figure 3.8 : Fonction cellulaire χ_k pour $\omega=0.1$ et 0.2

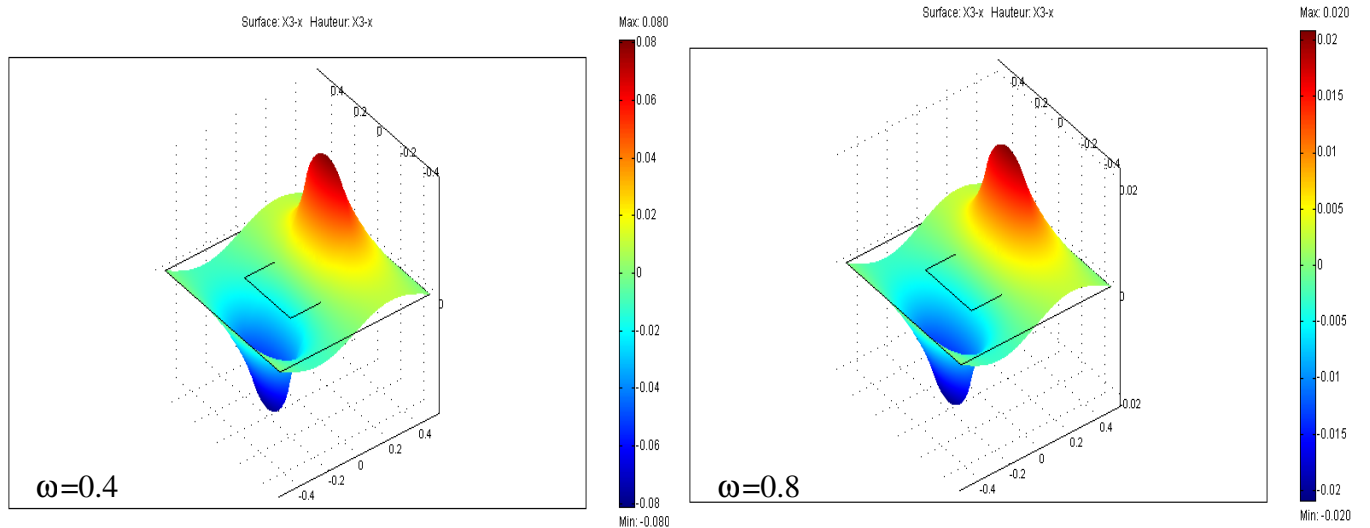


Figure 3.9 : Fonction cellulaire χ_k pour $\omega=0.4$ et 0.8

3.5.2. Solution du problème cellulaire dans le cas général.

Fonction χ_1

On étudie le problème (3.4) en variant le paramètre σ (nombre de Peclet inverse) et le paramètre de l'hétérogénéité ω . La valeur moyenne du facteur α est prise égale à $\bar{\alpha} = 0.5$.

Pour $k=1$, la fonction transversale χ_1 est une solution du problème cellulaire suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma \alpha(x,t) \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial \chi_1}{\partial y_i} \right) - \frac{\partial}{\partial y_3} (a \chi_1) = -\sigma \alpha(x,t) \frac{\partial a}{\partial y_1}, \quad y \in Y \\ \langle \chi_1 \rangle = 0, \quad \chi_1 \text{ est 1-périodique} \end{array} \right.$$

3- Solution des problèmes cellulaires et analyse qualitative du tenseur de dispersion

dont la solution est présentée pour différentes valeurs de ω et $Pe_{micr} = 1/\sigma$ par les figures qui suivent.

Le nombre de Peclet microscopique, Pe_{micr} , est défini comme :

$$Pe_{micr} = \frac{\rho_l g l}{P_c^*} = \frac{\rho_l g H}{P_c^*} \varepsilon = \varepsilon \cdot Pe = \frac{1}{\sigma}$$

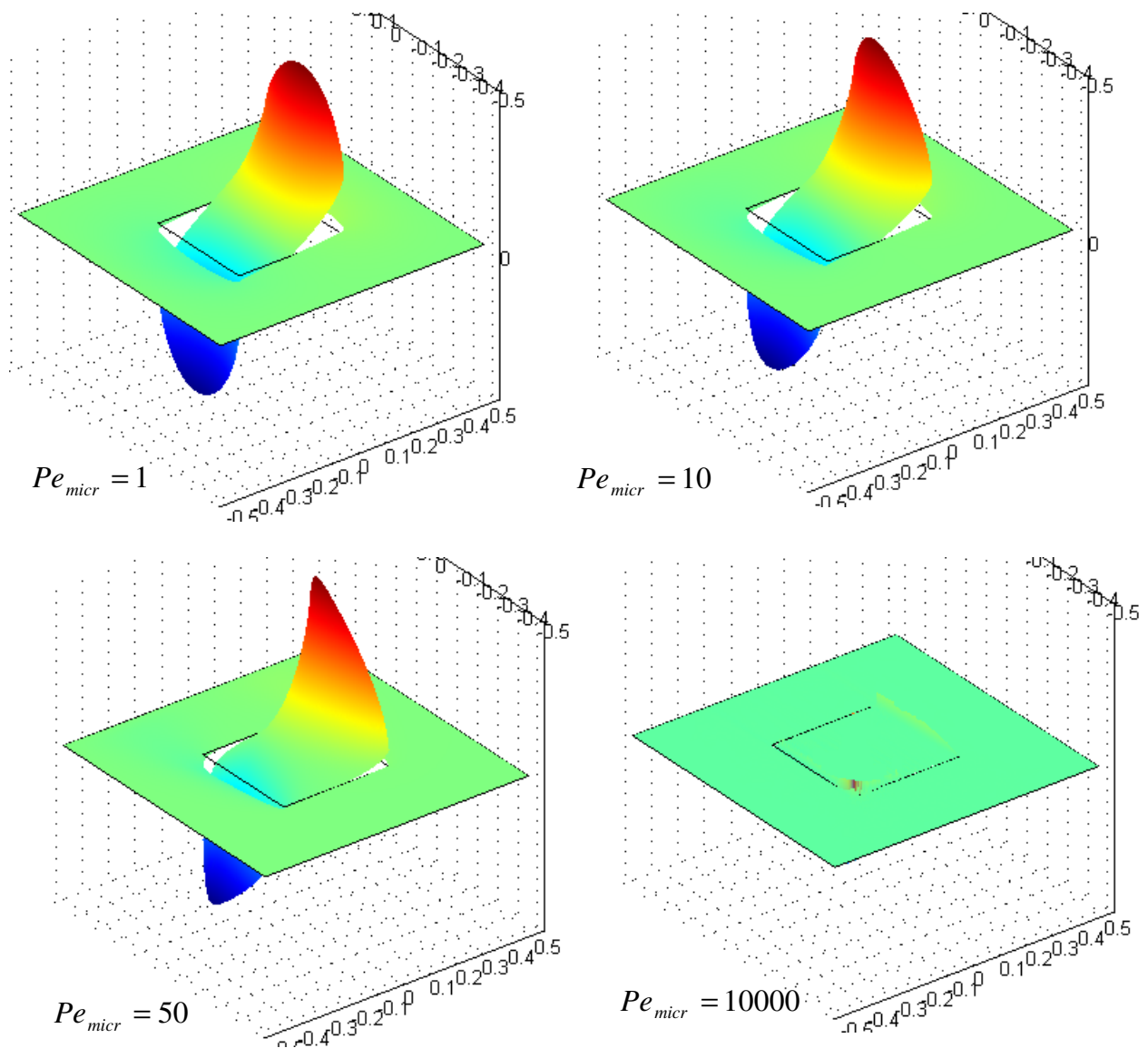


Figure 3.10 : Fonction cellulaire χ_1 pour $\omega=0.1$ et différentes valeurs de $Pe_{micr} = 1/\sigma$

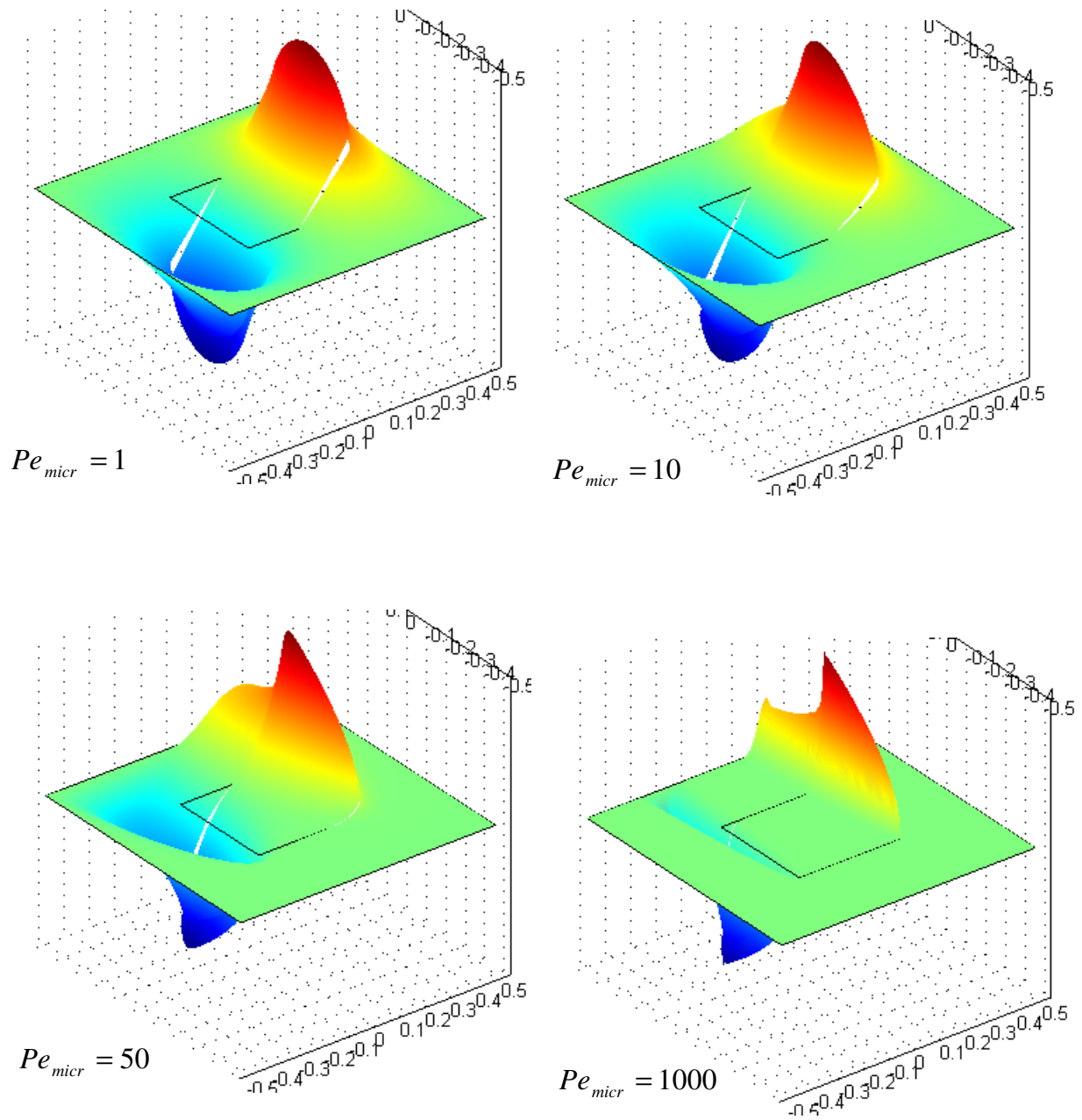


Figure 3.11 : Fonction cellulaire χ_1 pour $\omega=0.8$ et différentes valeurs de $Pe_{micr} = 1/\sigma$

A partir de ces figures, on voit bien que la fonction transversale χ_1 tend vers zéro lorsque $Pe_{micr} \rightarrow \infty$ (figure 3.10), ce qui correspond au résultat exact pour le cas sans forces capillaires (voir figure (3.6) du paragraphe 3.2.1).

En même temps, on remarque que pour une valeur faible de Peclet, la solution s'approche clairement du cas où les forces capillaires sont prépondérantes (voir figure (3.8)).

3.5.3. Solution du problème cellulaire dans le cas général. Fonction χ_3

Pour $k=3$, la solution du problème est présentée par les figures ci-dessous, selon la valeur de ω et la valeur de σ :

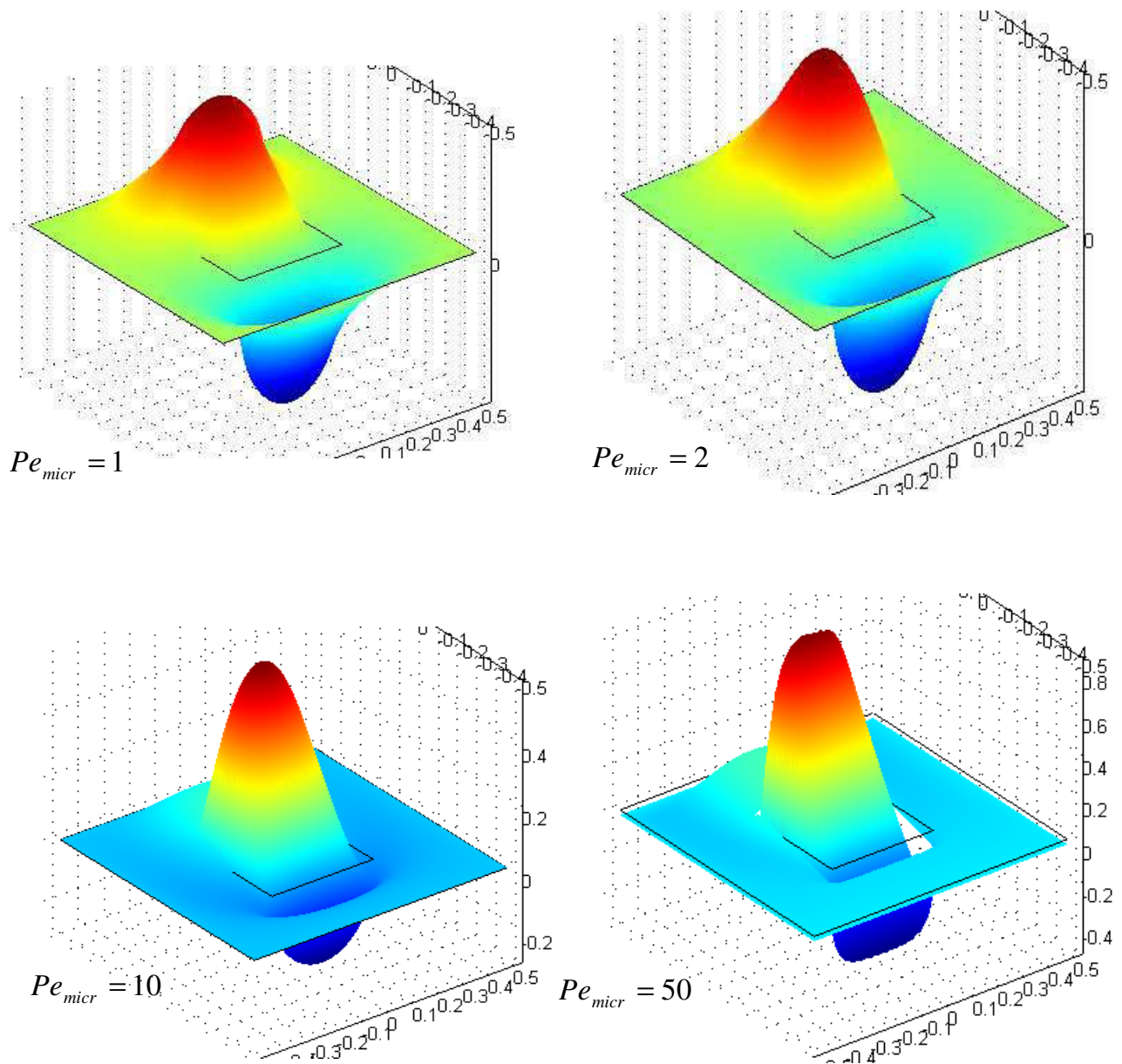


Figure 3.12 : Fonction cellulaire χ_3 pour $\omega=0.1$ et différentes valeurs de $Pe_{micr} = 1/\sigma$

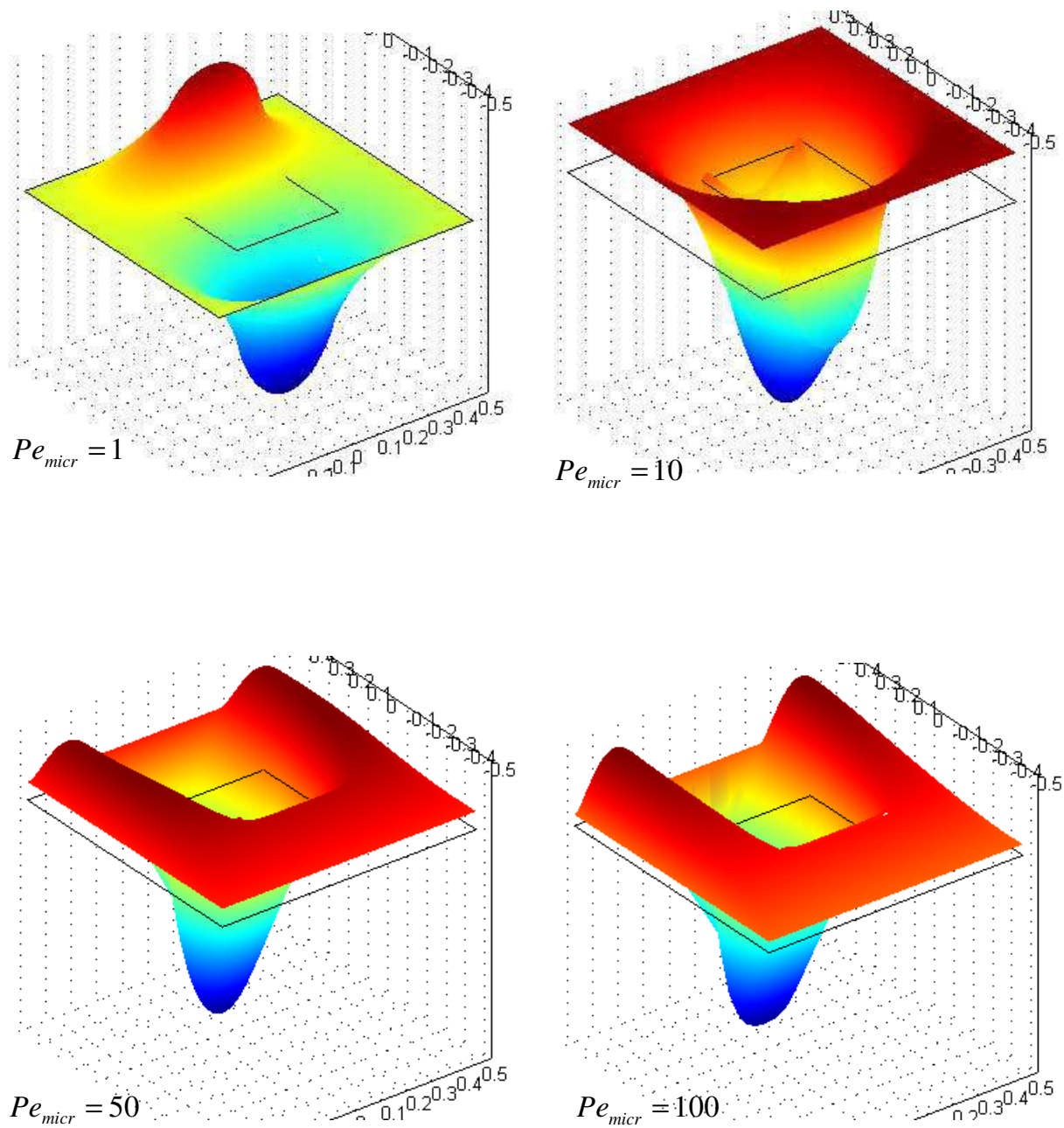


Figure 3.13 : Fonction cellulaire χ_3 pour $\omega=0.8$ et différentes valeurs de $Pe_{micr} = 1/\sigma$

Les figures (3.12) et (3.13) montrent que la fonction longitudinale χ_3 tend vers 0 pour une valeur grande de Peclet et elle s'approche clairement de la solution obtenue dans le cas où les forces capillaires sont faibles.

3.6. Tenseur de dispersion

3.6.1. Tenseur de dispersion et dispersivités

Suivant l'équation (2.36), le tenseur de dispersion peut être représenté sous la forme générale :

$$\hat{D}_{ik} = \alpha_{ik} \hat{F}'(S) - \beta_{ik} \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) \quad (3.15)$$

où α_{ik} et β_{ik} sont des tenseurs de dispersivité gravitaire et capillaire respectivement :

$$\alpha_{ik} = \varepsilon \left[\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right], \quad \beta_{ik} \equiv \frac{\varepsilon}{Pe^*} \left\langle \left(\frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right) a(y) \right\rangle \quad (3.16)$$

En particulier, la dispersivité gravitaire α_{ik} nous donne la matrice suivante dans le cas 2D (x_1, x_3) :

$$\alpha_{ik} = \varepsilon \left[\frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \right] = \varepsilon \begin{Bmatrix} 0 & \frac{\langle \varphi \chi_1 \rangle}{\langle \varphi \rangle} \\ -\frac{\langle a \chi_1 \rangle}{\langle a \rangle} & \left[\frac{\langle \varphi \chi_3 \rangle}{\langle \varphi \rangle} - \frac{\langle a \chi_3 \rangle}{\langle a \rangle} \right] \end{Bmatrix} \quad (3.17)$$

Suite aux solutions obtenues des problèmes cellulaires, on va étudier le comportement du tenseur de dispersion \hat{D}_{ik} en fonction des paramètres σ (inverse du nombre de Peclet) et ω (degré de l'hétérogénéité). Le paramètre ε est pris d'ordre 0.1 pour les présentations numériques.

3.6.2. Calcul du tenseur de dispersivité pour un milieu de double porosité

Dans le cas de l'hétérogénéité présentée sur la figure (3.1), de type « double porosité », avec une perméabilité et une porosité constantes par morceaux, on peut effectuer une intégration partielle de façon analytique dans les relations pour le tenseur de dispersion. En effet, utilisant (3.10), on obtient pour la dispersivité gravitaire :

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_{ik}}{\varepsilon} &= \frac{\langle \varphi \chi_i \rangle}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{\langle a \chi_k \rangle}{\langle a \rangle} \delta_{i3} = \frac{\varphi_I \langle \chi_i \rangle_I + \varphi_{II} \langle \chi_i \rangle_{II}}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{a_I \langle \chi_k \rangle_I + a_{II} \langle \chi_k \rangle_{II}}{\langle a \rangle} \delta_{i3} = \\ &= \frac{(\varphi_{II} - \varphi_I) \langle \chi_i \rangle_{II}}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{(a_{II} - a_I) \langle \chi_k \rangle_{II}}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \end{aligned}$$

où on a pris en considération le fait que :

$$\langle \chi_i \rangle_I = \langle \chi_i \rangle - \langle \chi_i \rangle_{II} = -\langle \chi_i \rangle_{II}, \text{ car } \langle \chi_i \rangle \equiv 0, \quad \forall i.$$

Le symbole $\langle \cdot \rangle_j$ signifie l'intégration à travers le sous-ensemble Y^j ($j = I, II$).

Dans le cas $k=i=3$, on obtient la dispersivité gravitaire longitudinale :

$$\frac{\alpha_{33}}{\varepsilon} = \langle \chi_3 \rangle_{II} \left[\frac{(\varphi_{II} - \varphi_I)}{\langle \varphi \rangle} - \frac{(a_{II} - a_I)}{\langle a \rangle} \right]$$

Pour la dispersivité capillaire, on a également :

$$\frac{\beta_{ik}}{\left(\frac{\varepsilon}{Pe^*} \right)} = \left\langle \left(\frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} + \delta_{ki} \right) a(y) \right\rangle = a_I \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_I + a_{II} \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \delta_{ki} = (a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \delta_{ki}$$

où on a pris en considération le fait que :

$$\left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_I = \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II} = -\left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II}, \text{ car } \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle \equiv 0, \quad \forall i, k \text{ suite à la périodicité.}$$

L'intégrale $\left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II}$ peut être simplifiée. En effet :

$$\left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II} = \int_{Y^{II}} \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} dy_1 dy_2 dy_3 = \int_{-\xi}^{\xi} \int_{-\xi}^{\xi} [\chi_k|_{y_i=-\xi} - \chi_k|_{y_i=\xi}] dy_m dy_n, \quad m \neq n \neq i$$

Finalement, on obtient les formules de travail pour les dispersivités :

$$\frac{\alpha_{ik}}{\varepsilon} = \frac{(\varphi_{II} - \varphi_I) \langle \chi_i \rangle_{II}}{\langle \varphi \rangle} \delta_{k3} - \frac{(a_{II} - a_I) \langle \chi_k \rangle_{II}}{\langle a \rangle} \delta_{i3} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\beta_{ik}}{\left(\frac{\varepsilon}{Pe^*} \right)} &= (a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_k}{\partial y_i} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \delta_{ki} = \\ &= (a_{II} - a_I) \int_{-\xi}^{\xi} \int_{-\xi}^{\xi} [\chi_k|_{y_i=-\xi} - \chi_k|_{y_i=\xi}] dy_m dy_n + \langle a \rangle \delta_{ki} \end{aligned} \quad (3.19)$$

3.6.3. Solution analytique pour la dispersivité gravitaire

Examinons le cas sans forces capillaires. Alors, le problème cellulaire (3.7) peut être converti dans la forme (3.11). Utilisant les mêmes notations, nous pouvons obtenir pour la dispersivité longitudinale :

$$\frac{\alpha_{33}}{\varepsilon} = \langle \chi_3 \rangle_{II} [a' - \varphi'] \quad (3.20)$$

En utilisant la solution analytique du problème cellulaire, (3.12), (3.13), on peut calculer précisément la dispersivité α_{33} . Puisque la valeur $\langle \chi_3 \rangle_{II}$ est :

$$\langle \chi_3 \rangle_{II} = -\frac{\Omega\theta}{2a_{II}} [\theta(1 + 2\xi_1) - (1 - \theta)\theta^{1/2} + 2C]$$

alors la dispersivité α_{33} est :

$$\alpha_{33} = -\frac{\varepsilon\theta\langle a \rangle (a' - \varphi')^2}{2a_{II}} \{ \theta(1 + 2\xi_1) - (1 - \theta)\theta^{1/2} + 2C \} \quad (3.21)$$

3.6.4. Influence du rapport de perméabilité sur la dispersivité gravitaire

Les graphiques (3.14) et (3.15) montrent les exemples de calculs de la dispersivité gravitaire longitudinale en fonction du paramètre ω pour le cas d'une cellule non symétrique suivant différents cas.

Premièrement, on a étudié l'influence de la fraction volumique du bloc central, θ sur l'évolution de la dispersivité gravitaire longitudinale, les valeurs calculées sont adimensionnelles.

La figure (3.14) décrit le comportement de la dispersivité gravitaire longitudinale en fonction de ω , et ceci pour trois valeurs de θ .

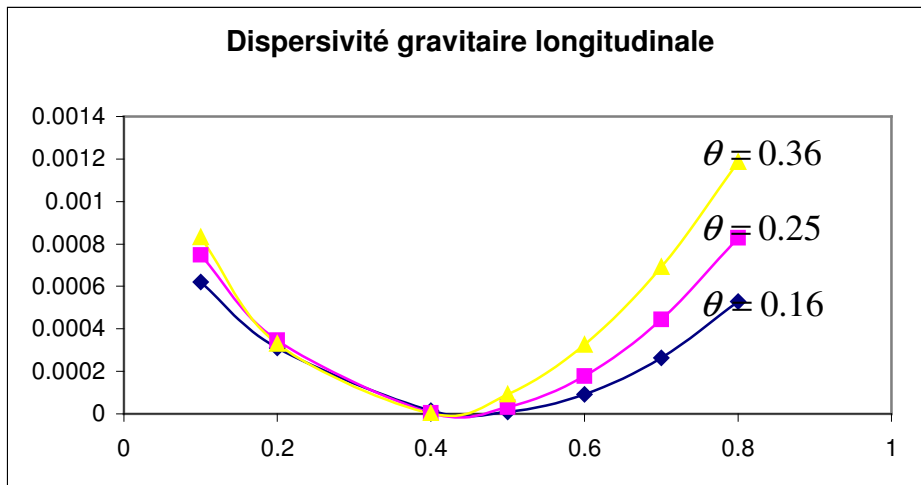


Figure 3.14 : Dispersivité gravitaire longitudinale, pour différentes valeurs de θ

Suite au fait que le milieu est inhomogène par rapport à la porosité ($\varphi_{II} / \varphi_I = 0.5$) pour les 3 valeurs de θ , la dispersivité est non nulle même dans le cas où les perméabilités sont équivalentes ($\omega=1$). Par contre, elle s'annule dans le cas $\omega = 0.5$. Ceci représente un phénomène particulier, appelé 'régime de compensation', qui correspond exactement à la situation où la fluctuation de perméabilité, (3.10), est égale à celle de la porosité. Suivant la formule (3.11) ou (3.12), toute fonction cellulaire χ_3 est égale à zéro par identité dans le cas de fluctuations égales.

3.6.5. Influence du rapport de porosité sur la dispersivité gravitaire

Dans un deuxième temps, on a fait varier le rapport de porosité.

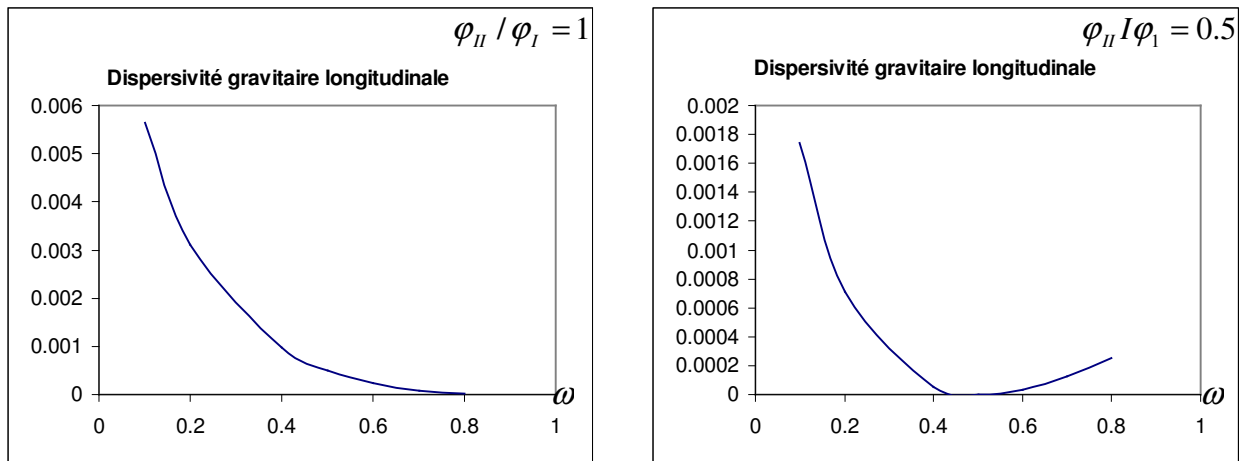


Figure 3.15 : Dispersivité gravitaire longitudinale en fonction de ω pour 2 valeurs de φ_{II} / φ_I

Les figures (3.14) et (3.15) montrent que la dispersion diminue lorsque le degré d'hétérogénéité diminue $\omega \rightarrow 1$, en même temps on observe une perturbation au voisinage de 1. Ceci peut être expliqué par l'effet de l'hétérogénéité causée par la porosité. On voit clairement que ce phénomène, disparaît une fois que l'homogénéité de porosité est assurée. Ces résultats sont qualitativement en accord avec la physique du processus.

3.6.6. Résultats numériques pour la dispersivité gravitaire

Pour le cas symétrique : $\xi_2 = -\xi_1$, $\theta = 0.16$, les simulations avec FEMLAB ont donné les résultats suivants :

ω	$\langle \chi_3 \rangle_{II}$	a'	$a' - \phi'$	$\alpha_{33} / \varepsilon$
0.1	0.03588	1.05140	0.50792	0.01822
0.2	0.02013	0.91743	0.37395	0.00753
0.4	0.00455	0.66372	0.12024	0.00055
0.5		0.54348	0.	0.
0.6	-0.00349	0.42735	-0.11613	0.00041
0.7	-0.00590	0.31513	-0.22835	0.00134
0.8	-0.00857	0.20833	-0.33514	0.00287

Tableau 3.1 : Résultats de simulation de la dispersivité gravitaire

On voit que dans toutes les situations, la dispersivité longitudinale est non négative.

La dispersivité avec dimension peut être obtenue en multipliant α_{33} par la longueur macroscopique, L . Ainsi, si $L \sim 100$ m, alors la dispersivité est d'ordre 0.01 – 0.1 m.

La comparaison avec les résultats analytiques donne :

ω	$\langle \chi_3 \rangle_{II}$ exacte	$a' - \phi'$	$\alpha_{33} / \varepsilon$ exacte	$\alpha_{33} / \varepsilon$ simulation
0.1	0.03421	0.50792	0.01737	0.01822
0.2	0.01908	0.37395	0.00713	0.00753
0.4	0.00420	0.12024	0.00050	0.00055
0.5		0.	0.	0.
0.6	-0.00314	-0.11613	0.00036	0.00041
0.7	-0.00558	-0.22835	0.00127	0.00134
0.8	-0.00752	-0.33514	0.00253	0.00287

Tableau 3.2 : Comparaison entre les résultats analytiques et de simulation

La comparaison des résultats analytiques et numériques montre une correspondance satisfaisante.

3.6.7. Résultats numériques pour la dispersivité capillaire longitudinale

Les simulations avec FEMLAB pour le cas symétrique : $\xi_2 = -\xi_1$, $\theta = 0.16$, ont donné les résultats suivants :

Pour la dispersivité longitudinale :

3- Solution des problèmes cellulaires et analyse qualitative du tenseur de dispersion

$$\beta_{33} = \frac{\varepsilon}{Pe_{micro}} \left[(a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_3}{\partial y_3} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \right] \quad (3.22)$$

$Pe_{micr} = 1$:

ω	$a_{II} - a_I$	$\langle a \rangle$	$\left\langle \frac{\partial \chi_3}{\partial y_3} \right\rangle_{II}$	$\frac{\beta_{33}}{\varepsilon}$ Pe_{micr}
0.1	-0.9	0.856	0.109628	0.7573348
0.2	-0.8	0.872	0.087774	0.8017808
0.4	-0.6	0.904	0.055045	0.870973
0.5	-0.5	0.92	0.042292	0.898854
0.6	-0.4	0.936	0.031216	0.9235136
0.7	-0.3	0.952	0.021472	0.9455584
0.8	-0.2	0.968	0.012813	0.9654374

Tableau 3.3 : Résultats de simulation de la dispersivité capillaire ; cas $Pe_{micro} = 1$

$Pe_{micr} = 2$

ω	$a_{II} - a_I$	$\langle a \rangle$	$\left\langle \frac{\partial \chi_3}{\partial y_3} \right\rangle_{II}$	$\frac{\beta_{33}}{\varepsilon}$ Pe_{micr}
0.1	-0.9	0.856	0.11813	0.749683
0.2	-0.8	0.872	0.091564	0.7987488
0.4	-0.6	0.904	0.053927	0.8716438
0.5	-0.5	0.92	0.039849	0.9000755
0.6	-0.4	0.936	0.027857	0.9248572
0.7	-0.3	0.952	0.017477	0.9467569
0.8	-0.2	0.968	0.008375	0.966325

Tableau 3.4 : Résultats de simulation de la dispersivité capillaire ; cas $Pe_{micr} = 2$

3- Solution des problèmes cellulaires et analyse qualitative du tenseur de dispersion

$$Pe_{micr} = 10$$

ω	$a_{II} - a_I$	$\langle a \rangle$	$\left\langle \frac{\partial \chi_3}{\partial y_3} \right\rangle_{II}$	$\frac{\beta_{33}}{\varepsilon}$ Pe_{micr}
0.1	-0.9	0.856	0.243198	0.6371218
0.2	-0.8	0.872	0.131934	0.7664528
0.4	-0.6	0.904	0.042178	0.8786932
0.5	-0.5	0.92	0.018746	0.910627
0.6	-0.4	0.936	0.001468	0.9354128
0.7	-0.3	0.952	-0.011907	0.9555721
0.8	-0.2	0.968	-0.022632	0.9725264

Tableau 3.5 : Résultats de simulation de la dispersivité capillaire ; cas $Pe_{micr} = 10$

$$Pe_{micr} = 50$$

ω	$a_{II} - a_I$	$\langle a \rangle$	$\left\langle \frac{\partial \chi_3}{\partial y_3} \right\rangle_{II}$	$\frac{\beta_{33}}{\varepsilon}$ Pe_{micr}
0.1	-0.9	0.856	-0.131608	0.9744472
0.2	-0.8	0.872	0.178889	0.7288888
0.4	-0.6	0.904	0.034581	0.8832514
0.5	-0.5	0.92	0.004178	0.917911
0.6	-0.4	0.936	-0.016602	0.9426408
0.7	-0.3	0.952	-0.031783	0.9615349
0.8	-0.2	0.968	-0.043406	0.9766812

Tableau 3.6 : Résultats de simulation de la dispersivité capillaire ; cas $Pe_{micr} = 50$

Le graphique (3.16) regroupe les résultats obtenus ci-dessus, il montre le comportement de la dispersivité capillaire longitudinale β_{33} par rapport à ω et Pe_{micr} :

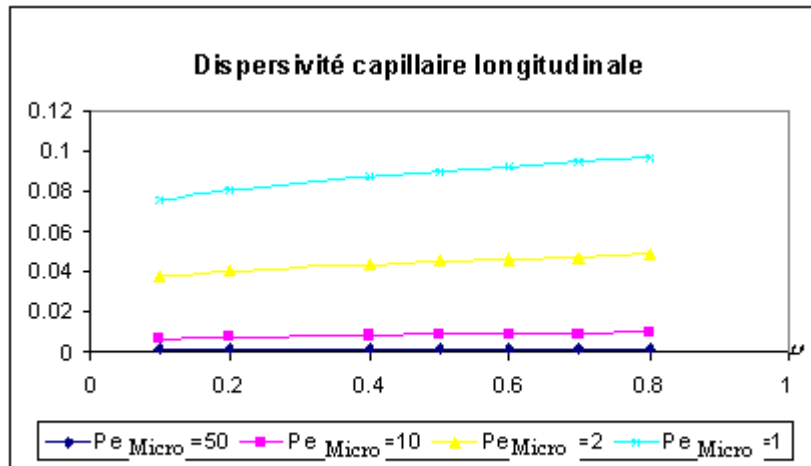


Figure 3.16 : Dispersivité capillaire longitudinale pour différentes valeurs de Pe_{micr}

Lorsque les forces capillaires diminuent, ce qui correspond à l'augmentation du nombre de Peclet, la dispersivité capillaire diminue.

On note que la dispersivité capillaire longitudinale dépend du rapport de perméabilité.

3.6.8. Résultats numériques pour la dispersivité capillaire transversale

Pour la dispersivité transversale :

$$\left(\frac{\beta_{11}}{\varepsilon} \right) \frac{1}{Pe_{micr}} = (a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_1}{\partial y_1} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \quad (3.23)$$

Pour les quatre valeurs prises du nombre de Peclet Pe_{micr} , le terme $\left\langle \frac{\partial \chi_1}{\partial y_1} \right\rangle_{II}$ s'annule.

La figure (3.17) présente les résultats obtenus :

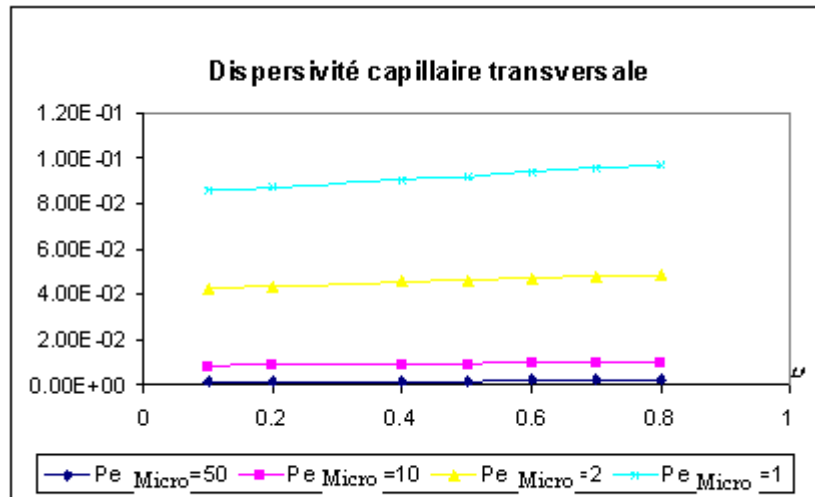


Figure 3.17 : Dispersivité capillaire transversale pour différentes valeurs de Pe_{mic}

A partir de ce qui précède, on remarque des résultats qualitativement similaires au cas de la dispersivité longitudinale :

- Une dispersivité capillaire transversale beaucoup plus faible lorsque Pe augmente.
- Une indépendance de cette dispersivité par rapport à la perméabilité.

3.6.9. Dispersivité longitudinale totale

Dans ce paragraphe, on cherche à déterminer l'influence du nombre de Peclet sur la dispersion hydrodynamique totale. Comme montré précédemment, le tenseur de dispersion adimensionnel s'exprime par :

$$\hat{D}_{ik} = \alpha_{ik} \hat{F}'(S) - \beta_{ik} \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{13} \\ D_{31} & D_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{13} \\ \alpha_{31} & \alpha_{33} \end{bmatrix} \hat{F}'(S) - \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{13} \\ \beta_{31} & \beta_{33} \end{bmatrix} \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) \quad (3.23)$$

Les composantes du tenseur de dispersion peuvent être estimées à partir des derniers résultats obtenus. Elles sont des fonctions de la saturation. Les composantes non diagonales, \hat{D}_{31} et \hat{D}_{13} sont non nulles.

La dispersion longitudinale est exprimée par :

$$\hat{D}_{33} = \alpha_{33} \hat{F}'(S) - \beta_{33} \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) \quad \text{avec } \hat{F}' \equiv \langle a \rangle k'_l \quad (3.24)$$

3- Solution des problèmes cellulaires et analyse qualitative du tenseur de dispersion

où la perméabilité absolue $a(y)$ est une fonction qui décrit l'hétérogénéité du milieu, qui peut être discontinue ; $\hat{k}_l(s)$ et $\hat{P}(s)$ sont respectivement les fonctions de perméabilité relatives et pression capillaire (voir chapitre 4) ; $\hat{F}'(s)$ et $\hat{P}'(s)$ sont des fonctions continues mais non monotones.

Afin d'analyser l'influence du nombre de Peclet sur la dispersion, introduisons une dispersion avec dimension, \hat{D}^{dim} :

$$\hat{D}^{\text{dim}} \equiv \frac{H^2}{t^*} \hat{D} \quad (3.25)$$

et une dispersion \mathfrak{S} adimensionalisée autrement - par division de \hat{D}^{dim} sur une valeur constante de diffusion capillaire caractéristique initiale, $D^0 \equiv \frac{K^* P_c^*}{\phi^* \mu_l}$, indépendante de la vitesse de l'écoulement :

$$\mathfrak{S} \equiv \frac{\hat{D}^{\text{dim}}}{D^0} = \frac{H^2 \mu_l \phi^* \hat{D}}{t^* K^* P_c^*} = \frac{H^2 \phi^* \mu_l \rho_l g K^*}{\phi^* \mu_l H K^* P_c^*} \hat{D} = \frac{H \rho_l g}{P_c^*} \hat{D} = Pe \cdot \hat{D} = \frac{Pe_{\text{micr}}}{\varepsilon} \hat{D} \quad (3.26)$$

Ainsi, on obtient pour le nouveau tenseur de dispersion :

$$\mathfrak{S}_{ik} = Pe \left[\alpha_{ik} \hat{F}'(s) - \beta_{ik} \hat{P}'(s) \hat{k}_l(s) \right] \quad (3.27)$$

Les figures (3.18), (3.19), (3.20) et (3.21) montrent la variation de la dispersion longitudinale, \mathfrak{S}_{33} , en fonction de la saturation pour différentes valeurs de Pe et ω :

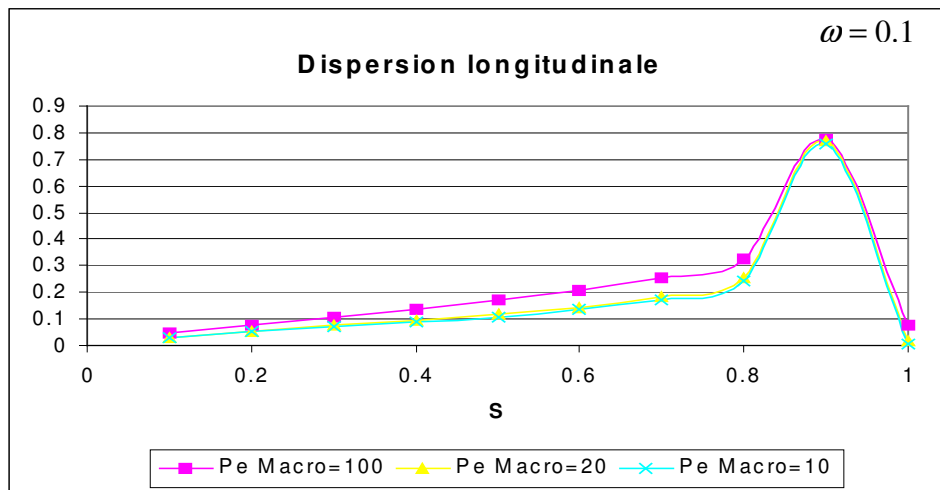


Figure 3.18 : Dispersion longitudinale pour $\omega=0.1$ et pour différentes valeurs de Pe_{macro}

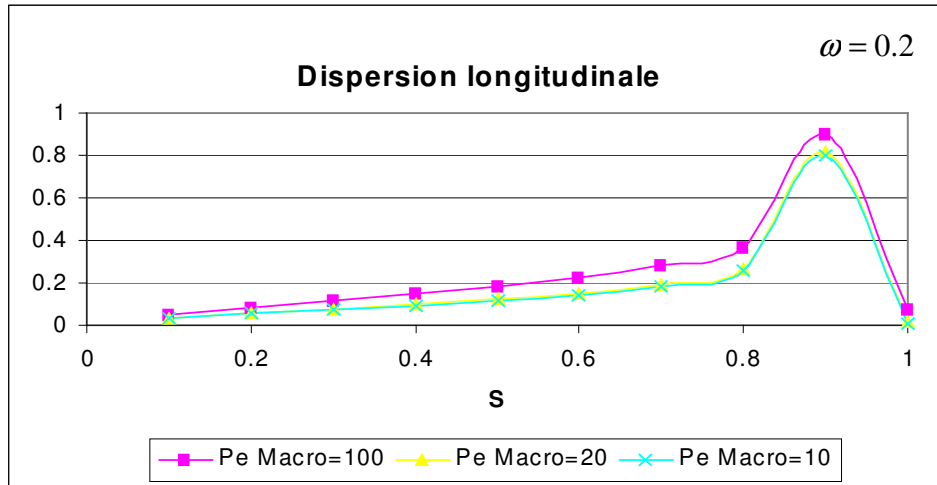


Figure 3.19 : Dispersion longitudinale $\omega=0.2$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

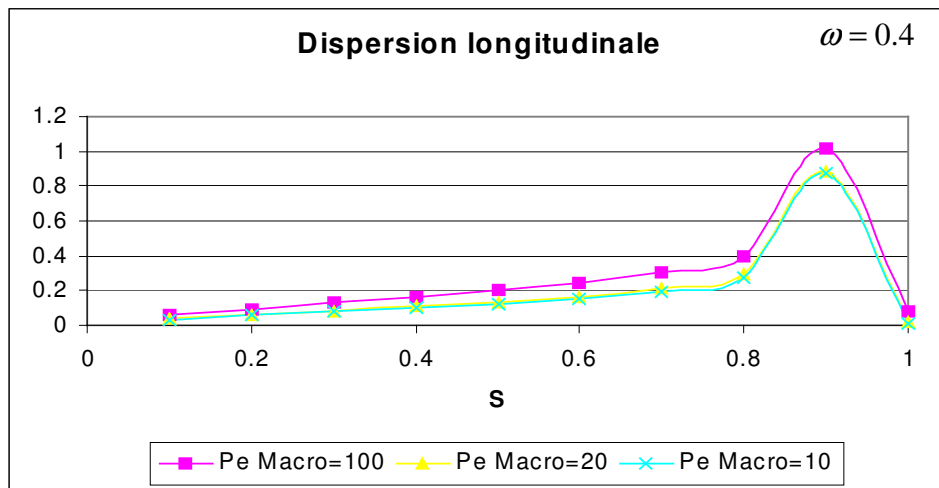


Figure 3.20 : Dispersion longitudinale $\omega=0.4$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

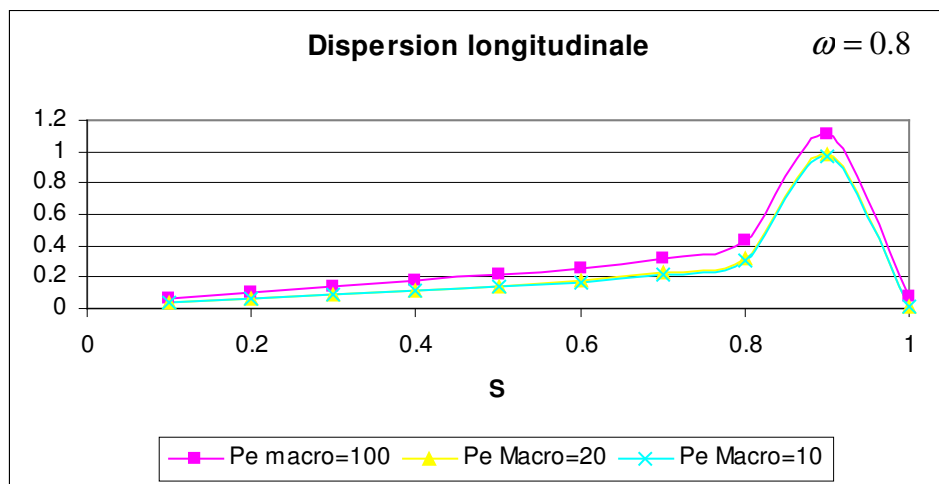


Figure 3.21 : Dispersion longitudinale $\omega=0.8$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

La dispersion longitudinale a été calculée pour dix valeurs de saturation de 0.1 à 1. Les résultats obtenus montrent que la dispersion augmente avec le nombre de Peclet et elle s'annule pour 2 valeurs, $S=0$ et $S=1$, ce qui correspond au cas monophasique où il n'y a pas de dispersion, ceci concorde parfaitement avec la physique du processus.

3.6.10. Influence de la capillarité sur la dispersivité transversale totale

La dispersion transversale adimensionnelle est exprimée par :

$$\hat{D}_{11} = -\beta_{11} \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) = -\varepsilon \sigma \left((a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_1}{\partial y_1} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \right) \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) \quad \text{avec } \hat{F}' \equiv \langle a \rangle k'_l$$

La fonction $P_c(s)$ est la pression capillaire macroscopique et $\hat{P}' \equiv \frac{dP_c}{dS}$.

La nouvelle dispersion transversale, introduite par (3.26), sera :

$$\mathfrak{D}_{11} = Pe \cdot \hat{D}_{11} = - \left((a_{II} - a_I) \left\langle \frac{\partial \chi_1}{\partial y_1} \right\rangle_{II} + \langle a \rangle \right) \hat{P}'(S) \hat{k}_l(S) \quad (3.26)$$

Formellement ceci ne dépend pas du nombre de Peclet, pourtant la fonction cellulaire χ_1 dépend de Pe : elle diminue jusqu'à zéro lorsque $Pe \rightarrow \infty$. Ainsi, la dispersion transversale dépend du nombre de Peclet de façon non linéaire.

Les figures (3.22), (3.23), (3.24) et (3.25) montrent la variation de la dispersion transversale selon Pe et ceci pour différentes valeurs de ω :

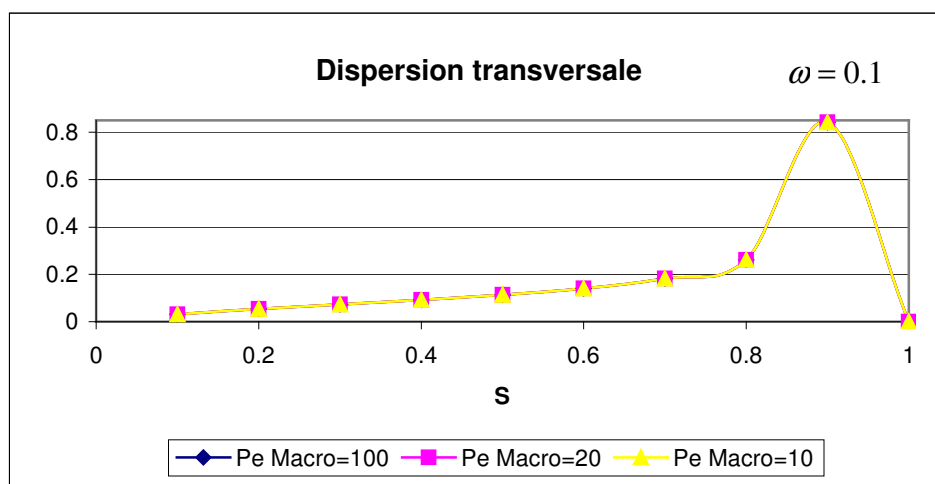


Figure 3.22 : Dispersion transversale pour $\omega=0.1$ et pour différentes valeurs de Pe_{macro}

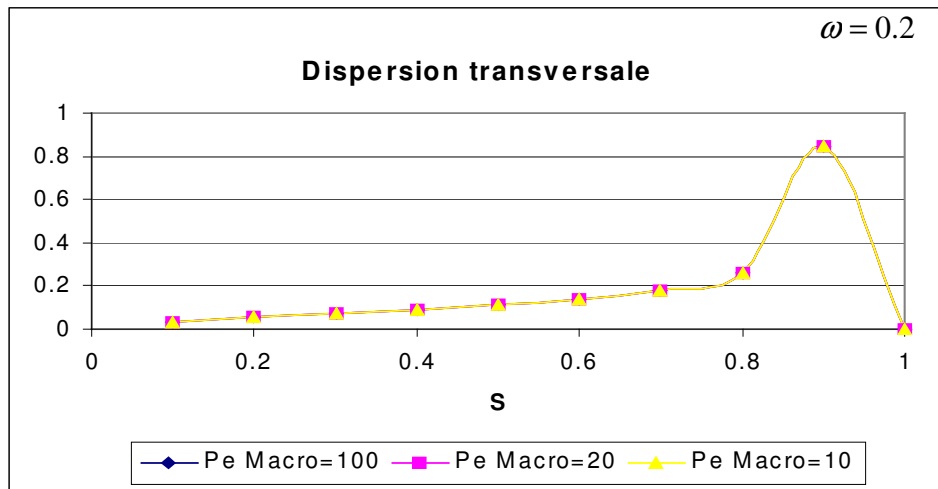


Figure 3.23 : Dispersion transversale pour $\omega=0.2$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

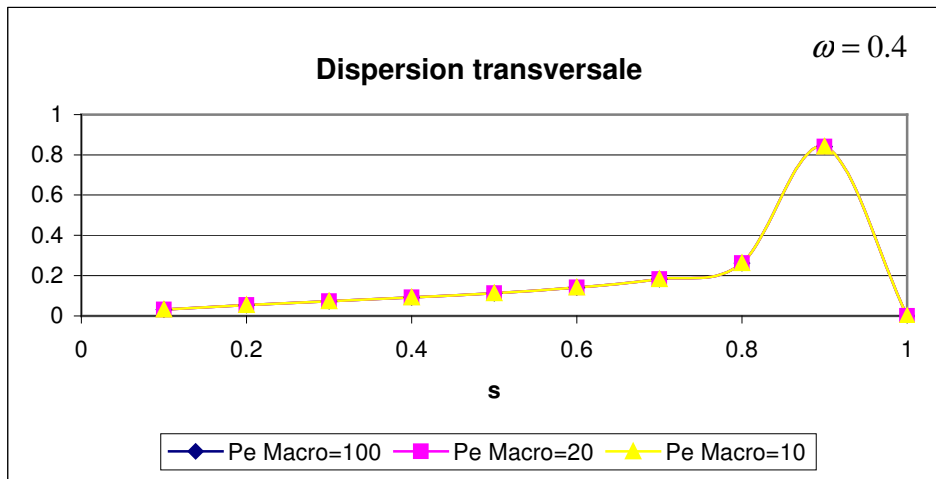


Figure 3.24 : Dispersion transversale pour $\omega=0.4$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

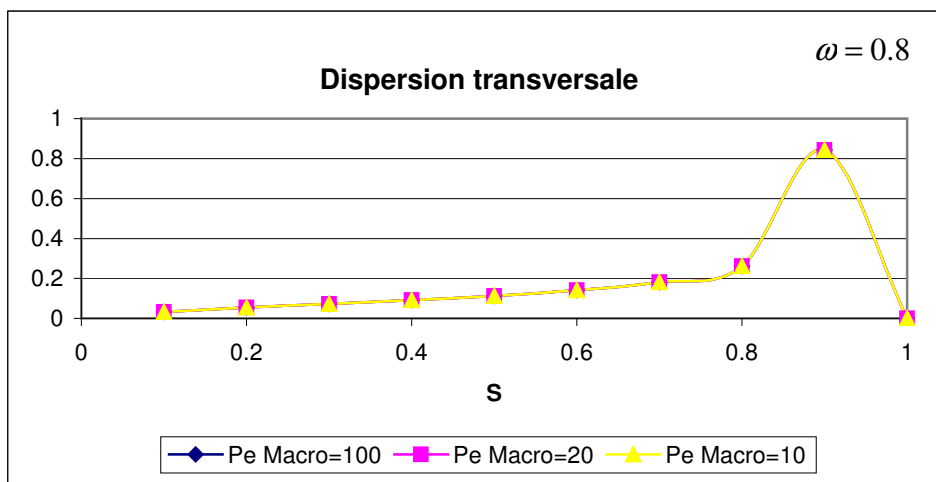


Figure 3.25 : Dispersion transversale pour $\omega=0.8$ et pour différentes valeurs de Pe_{macr}

Les courbes représentant la dispersion transversale coïncident et ceci pour les différentes valeurs prises de Pe , ceci du au fait que le terme $\left\langle \frac{\partial \chi_1}{\partial y_1} \right\rangle_{II}$ s'annule d'après les simulations.

Durant le traitement des résultats, on a remarqué que la dispersion longitudinale et transversale atteignent leur maximums pour une valeur de saturation égale à 0.9 et s'annulent pour une saturation $S=0$ et $S=1$. La dispersion longitudinale augmente avec le nombre de Peclet tandis que la dispersion transversale en dépend d'une façon non linéaire.

3.6.11. Comparaison avec d'autres résultats

Le calcul de la dispersivité gravitationnelle n'a pas été traité dans la littérature. Cependant certaines données sur la dispersivité d'origine non gravitaire sont présentes. N'attendant pas que ces données soient en une correspondance absolue avec nos résultats, nous les avons utilisés comme une base donnant l'ordre de grandeur de valeur de la dispersivité attendue.

Dans (Neuweiler & al., 2003) la dispersivité a été calculée pour un écoulement diphasique. L'hétérogénéité du milieu poreux a été générée par des fluctuations stochastiques du champ des vitesses. L'écoulement est supposé stable et le rapport de viscosité a été pris égal à 0.5 ou à 1.2 pour différents cas. La dispersivité obtenue variait alors entre 0.1m et 0.2m.

Un autre exemple de données concerne le transport monophasique, la dispersion longitudinale obtenue dans ce cas pour un nombre de Peclet ($Pe=100$) dans un milieu isotrope, avec $\varphi_I = 0.6$ et $\varphi_{II} = 0.4$ est d'ordre 0.2 m.

Pour notre étude, les dispersivités obtenues sont entre 0.01m et 0.2m qui est du même ordre de grandeur. Pour un milieu isotrope à double porosité $\varphi_I = 0.2$ et $\varphi_{II} = 0.1$, la dispersion longitudinale calculée dans cette thèse est d'ordre 1.

3.6.12. Conclusions

Pour un écoulement non saturé pseudo-triphasique décrit par l'équation différentielle de Richards en milieu hétérogène, on a obtenu un modèle macroscopique à l'aide de méthodes d'homogénéisation par développement asymptotique. Par rapport au modèle initial, le modèle macroscopique obtenu inclut un nouvel effet physique de dispersion hydrodynamique non linéaire décrit en terme d'une diffusion tensorielle fonction de la vitesse d'écoulement.

Pour le tenseur de dispersion, on a obtenu la description fermée en terme d'une suite de problèmes cellulaires.

3- Solution des problèmes cellulaires et analyse qualitative du tenseur de dispersion

On a montré que pour un écoulement non saturé le tenseur de dispersion est déterminé par deux effets physiques : i) la gravité, qui identifie essentiellement la dispersion longitudinale, et ii) la capillarité qui détermine entièrement la dispersivité transversale et qui contribue à la dispersivité longitudinale.

Le tenseur de dispersion est montré non symétrique. Les simulations ont montré que les composantes longitudinale et transversale sont toujours non négatives.

On a montré que dans le cas général le tenseur de dispersion est non-local, c'est-à-dire il dépend des coordonnées spatiales macroscopiques. Dans le cas sans capillarité il devient totalement localisé. Dans le cas avec capillarité, nous avons proposé une méthode approximative de localisation du tenseur de dispersion, en « gelant » un facteur variable devant le terme diffusif dans le problème cellulaire.

Dans le cas où la capillarité est négligeable, la dispersivité transversale est nulle.

Dans le cas sans capillarité, la dispersivité longitudinale d'un écoulement non saturé dans un milieu à double porosité a été déterminé analytiquement et comparée avec celle numérique. Les deux résultats numérique et analytique se correspondent qualitativement. D'autre part, la dispersivité longitudinale dépend des deux paramètres, la porosité et la perméabilité.

Les solutions des problèmes cellulaires sont obtenues numériquement en utilisant la méthode des éléments finis (simulateur FEMLAB).

La dispersivité capillaire β_{33} augmente avec le rapport de perméabilités ω et ne dépend pas de la porosité, tandis que la dispersivité gravitaire diminue avec ω et s'annule lorsque les fluctuations de la perméabilité sont équivalentes à celles de la porosité.

CHAPITRE 4
ÉTUDE NUMÉRIQUE DU
PROCESSUS À L'ÉCHELLE
MICROSCOPIQUE

L'intérêt des simulations numériques à l'échelle microscopique est de pouvoir fournir des résultats qui peuvent servir pour la comparaison avec des résultats d'homogénéisation. Le logiciel (SIMUSCOPP) est le modèle choisi pour réaliser l'étude numérique, ce code aide à fournir des informations plus précises sur l'écoulement et les différents mécanismes qui y sont associés. Une brève description du code de calcul SIMUSCOPP est abordée dans ce présent chapitre.

4.1. Description du domaine

L'intérêt de cette étude numérique repose sur la simulation d'un écoulement pseudotriphasique à l'aide du modèle numérique SIMUSCOPP en vue d'obtenir une description quantitative et qualitative du phénomène de dispersion hydrodynamique dans un sens universel, et qui sera applicable ensuite à la classe la plus large possible de systèmes polyphasiques et de milieux poreux.

Le domaine contient donc initialement de l'eau et de l'air avant l'infiltration du NAPL. L'étude est réalisée pour deux milieux hétérogènes différents : l'un périodique, l'autre stochastique. Les deux études et leurs résultats sont présentés parallèlement dans ce chapitre.

Nous disposons de trois fluides, un visqueux (NAPL) incompressible à l'état liquide, le deuxième est l'air et le dernier est l'eau résiduelle (immobile) à saturation irréductible. Leurs natures physique et chimique n'ont pas d'importance et la composition interne de chaque phase ne joue aucun rôle dans le cadre de notre étude. De même les échanges de masse entre les phases et leur compressibilité sont ignorés dans la mesure où ces propriétés apportent des corrections de deuxième ordre dans l'étude de la dispersion.

Dans la théorie des écoulements non-miscibles, les pressions capillaires et les perméabilités relatives sont supposées être indépendantes de la nature de chacun des fluides en question. Cependant, il existe différentes corrélations empiriques pour les courbes mentionnées. En particulier, les pressions capillaires et les perméabilités relatives sont obtenues à partir de la littérature pour un écoulement eau-naphtalène et sont utilisées comme courbes de référence pour un système diphasique en milieu poreux.

Ainsi, il s'agit de la simulation numérique d'un écoulement bidimensionnel de deux phases incompressibles dans un milieu poreux hétérogène. La direction globale de la pénétration du NAPL est dans le sens négatif de l'axe vertical OZ . Les forces motrices de l'écoulement sont la gravité et la capillarité.

4.1.1. Description du milieu périodique

Le domaine est vertical, c'est-à-dire situé dans le plan (X,Z) . Sa profondeur est de 10 m et sa longueur est de 1 m. Il y a donc un rapport de 10 entre les 2 dimensions, de sorte que la longueur équivaut à 10 fois la profondeur.

4- Étude numérique du processus à l'échelle microscopique

Le domaine étudié est donc bidimensionnel mais la dominance de la dimension selon l'axe Z signifie que l'écoulement homogénéisé est monodimensionnel. Le maillage choisi pour le représenter est constitué de : 81 mailles en Z, 1 maille en Y et 9 mailles en X et dont la structure peut être représentée par la figure (4.2) : La cellule unité choisie pour représenter la totalité du domaine est présentée par la figure (4.1).

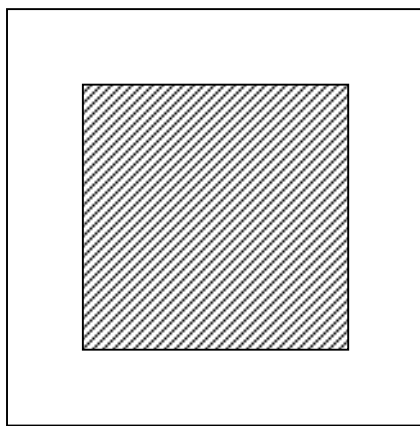


Figure 4.1 : Cellule unité

Légende :

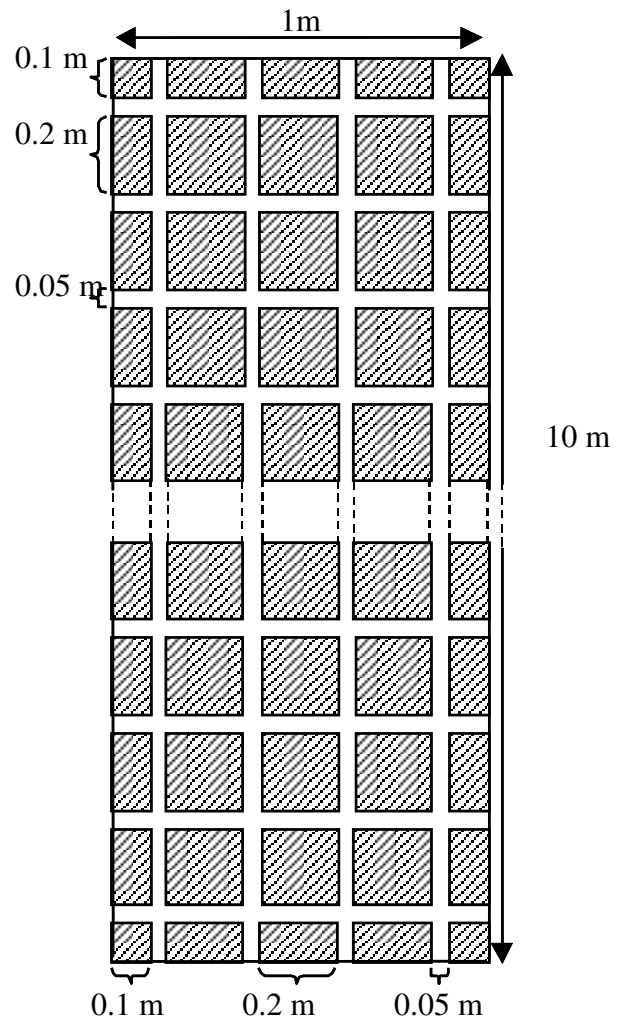
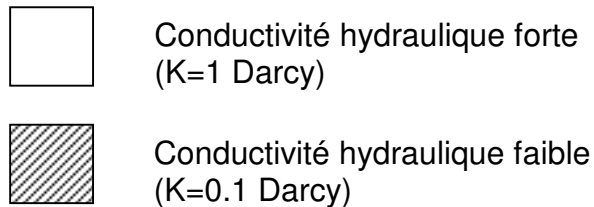


Figure 4.2 : Structure du milieu périodique

En correspondance avec le rapport retenu entre la profondeur et la longueur du domaine, Une cellule a la longueur 0.25 m, la dimension du bloque faiblement perméable est 0.2 m.

Globalement, cette cellule unité est reproduite 40 fois sur la profondeur et 4 fois sur la longueur afin de représenter la totalité du domaine. Ainsi le, paramètre ϵ est $1/40 = 0.025$ selon Z, ce qui garantit une petite échelle d'hétérogénéité du champ de vitesse - le fait indispensable pour appliquer ensuite les méthodes d'homogénéisation.

La porosité moyenne a été fixée à la valeur de 0.20 pour toutes les mailles du domaine. Cette valeur est intermédiaire entre les faibles porosités (d'ordre 0.1) rencontrées dans des nappes captives à grande profondeur, et les valeurs plus courantes (0.35) rencontrées dans les nappes peu profondes.

4.1.2. Description du milieu stochastique

Afin de prévoir l'écoulement d'un fluide de manière déterministe dans un milieu poreux, il est nécessaire de générer ce milieu et donc les deux champs aléatoires : perméabilité et porosité qui fournissent une description quasi-naturelle de l'hétérogénéité du milieu. Alors une distribution complètement stochastique pourrait représenter cette hétérogénéité. Cependant, on observe dans la nature une structure corrélée des différents champs de valeurs avec la distance (Fonseca L., Glimm J. et Lindquist W.B, 1992). D'où la nécessité de fixer quelques paramètres afin de se rapprocher du milieu naturel.

Les méthodes mathématiques probabilistes permettent de générer des milieux stochastiques stationnaires, c'est-à-dire des milieux dont les caractéristiques microscopiques sont distribuées de façon aléatoire, mais dont le comportement macroscopique est homogène.

La modélisation d'un champ aléatoire stationnaire peut être effectuée de deux façons différentes selon les données initiales disponibles :

- la modélisation dite non conditionnelle, la génération d'un champ aléatoire se fait à partir de la fonction de corrélation (covariance) et de la valeur moyenne du champ.

- la modélisation conditionnelle où la génération d'un champ aléatoire est réalisée à partir d'une fonction de corrélation et d'un ensemble de valeurs de ce champ, préalablement connues.

Les fonctions de corrélation utilisées mettent en relation les différentes valeurs du champ aléatoire d'après une distance h entre-elles.

Pour notre étude, la génération du milieu stochastique homogène est effectuée en combinant les deux méthodes.

En milieu poreux hétérogène naturel, on a :

$$\phi = \phi(x), \quad K = K(x), \quad k_o = k_o(s, x), \quad P_c = P_c(s, x) \quad (4.1)$$

avec x un point du domaine.

On considère que la porosité ϕ et la perméabilité intrinsèque K sont variables, tandis que les perméabilités relatives k_o, k_g respectivement du NAPL et de l'air et la pression capillaire P_c sont uniformes dans tous les points du milieu.

4- Étude numérique du processus à l'échelle microscopique

Ainsi, l'hétérogénéité du milieu poreux est caractérisée par deux fonctions : porosité et perméabilité intrinsèque. Chacune de ces deux fonctions est examinée comme stochastique, stationnaire et isotrope.

Le milieu stochastique est décrit par un domaine vertical de longueur 1m, de largeur 1m et de profondeur 10 m, la profondeur représente toujours dix fois plus que la longueur ainsi que la largeur, donc on a une dominance de dimension selon l'axe Z.

Le maillage est constitué de 10 mailles en X, 10 en Y et 100 en Z, Le milieu est partagé en 10000 cases de mêmes dimensions, à savoir 0,1 m en X, 0,1 m en Y et 0,1 m en Z. Le domaine est donc un assemblage de petits cubes auxquels la perméabilité et la porosité sont affectées.

Pour notre étude, la génération du milieu stochastique homogène est effectuée en combinant les deux méthodes citées dans le paragraphe précédent : le krigeage (méthode conditionnelle) et les bandes tournantes (méthode non-conditionnelle).

Les champs de perméabilité et de porosité stochastique sont définis de la façon suivante : soit $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ représentant un point dans un espace de dimension n, et $\xi(\vec{x})$ une variable aléatoire correspondant au point \vec{x} . Nous pouvons alors définir une fonction aléatoire sur R^n comme la série $\{[\vec{x}, \xi(\vec{x})] | \vec{x} \in R^n\}$. Une telle fonction aléatoire est aussi appelée un processus stochastique. La fonction moyenne de ce processus est définie par : $\mu(\vec{x}) = E[\xi(\vec{x})]$, et la fonction de covariance de ce processus entre 2 points \vec{x}_1 et \vec{x}_2 de R^n vaut : $C(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = E[\xi(\vec{x}_1)\xi(\vec{x}_2)] - \mu(\vec{x}_1)\mu(\vec{x}_2)$
On définit un processus stochastique stationnaire de deuxième ordre comme un processus vérifiant les deux conditions suivantes :

$$E[\xi(\vec{x})] = \mu(\vec{x}) = \mu, \quad \forall \vec{x} \in R^n \quad \text{et} \quad C(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = C(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = C(\vec{h}), \quad \forall (\vec{x}_1, \vec{x}_2) \in R^{n \times n}$$

Un processus stationnaire de deuxième ordre est isotrope si la fonction de covariance associée dépend seulement de la longueur du vecteur $|\vec{h}| = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ et non de sa direction : $C(\vec{h}) = C(r)$, avec $r = |\vec{h}|$

Les fonctions de covariances associées à un champ aléatoire doivent être continues, symétriques et non négatives. Dans le cas d'un processus stationnaire isotrope de deuxième ordre, il est possible de définir la fonction de densité spectrale associée à une fonction de covariance donnée, comme sa transformée de Fourier :

$$\psi(k) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(r) e^{ikr} dr$$

n étant la dimension du domaine.

Cette fonction ψ caractérise d'une nouvelle manière une distribution de valeurs corrélées de covariance C.

4.1.3. Génération du champ de perméabilité par la méthode du krigage

Il existe un nombre important de processus numériques de simulation conditionnelle de champs aléatoires. La méthode de krigage reste la plus utilisée et la plus simple à réaliser. La génération d'un champ stochastique stationnaire $Z(x)$ par le krigage nécessite d'avoir l'information suivante initiale :

- un ensemble de valeurs $Z(X_\alpha)$ d'une réalisation concrète de ce champ, assignées aux points X_α avec $\alpha=1, \dots, n$;
- une moyenne statistique (M) du champ Z (M est constant, car le champ Z est stationnaire) ;
- une fonction de covariance spatiale du champ $Z(x)$: $C(r) = Cov\{Z(X), Z(X+r)\}$.

Le krigage consiste à construire une approximation la plus proche possible de la valeur réelle du champ Z à un point X_0 arbitraire du domaine examiné sous forme d'une combinaison linéaire des valeurs observées $\{Z(X_\alpha), \alpha=1, \dots, n\}$. Soit $Z(X_0)$ la valeur exacte du champ Z au point X_0 , tandis que $Z^*(X_0)$ est son approximation recherchée. Alors on cherche $Z^*(X_0)$ sous la forme :

$$Z^*(X_0) = \lambda_0 + \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha Z(X_\alpha)$$

avec λ_i inconnus. Une approximation est dite meilleure, si elle apporte une erreur minimale d'estimation et une variance de l'erreur minimale. Pour une erreur minimale, $Z(X_0) - Z^*(X_0)$, son espérance est nulle :

$$E\{Z(X_0) - Z^*(X_0)\} = 0 = -\lambda_0 + M \left(1 - \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha \right)$$

ce qui est réalisable si et seulement si :

$$\begin{cases} \lambda_0 = 0 \\ \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha = 1 \end{cases}$$

Ainsi on obtient pour l'estimateur $Z^*(X_0)$:

$$Z^*(X_0) = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha Z(X_\alpha), \quad \text{avec} \quad \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha = 1$$

Pour une variance d'erreur :

$$\sigma_{\text{Erreur}}^2 = Var\{Z(X_0) - Z^*(X_0)\} = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \lambda_\alpha \lambda_\beta C(X_\alpha - X_\beta)$$

$$\text{avec} \quad \lambda_\alpha = -\lambda_\alpha, \quad C(X_\alpha - X_\beta) \equiv Cov\{Z(X_\alpha), Z(X_\beta)\}$$

La minimisation aboutit au système algébrique suivant (voir les détails en Korn G. & Korn. T., 1978) :

$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^n \lambda_{\beta} C(X_{\alpha} - X_{\beta}) + \mu = C(X_{\alpha} - X_0), & \alpha = 1, \dots, n \\ \sum_{\beta=1}^n \lambda_{\beta} = 1 \end{cases}$$

où μ est le multiplicateur de Lagrange.

Pour chaque point X_0 , on a obtenu le système de $(n+1)$ équations par rapport aux $(n+1)$ inconnues : $(\lambda_1, \dots, \lambda_n, \mu)$.

La génération du champ aléatoire de perméabilité et de porosité a été réalisée à l'aide de cette méthode. 100 points ont été pris dans lesquels le champ aléatoire était supposé connu. Ces points sont choisis de telles façons qu'ils soient uniformément répartis sur le domaine : la fonction `rand()` intégrée du C++, donnant des nombres entiers conventionnellement aléatoires de 0 à 32767 avec une distribution uniforme, permet d'obtenir une telle répartition, toutes les autres constructions numériques des ensembles de nombres aléatoires se basent sur cette fonction, les valeurs dans le reste du domaine sont réalisées par krigeage à partir de ces points avec la fonction de corrélation $C(r) = e^{-r}$ sur l'ensemble des cellules de maillage.

Les réalisations concrètes des variables $Z(x_{\alpha})$, $\alpha = 0, \dots, n$ sont simulées par la méthode de bandes tournantes avec 16 lignes et avec réalisations des lignes du processus par la méthode spectrale. La fonction de densité spectrale unidimensionnelle pour la corrélation exponentielle est :

$$S_1(w) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\varpi}{(\varpi + \varpi^2)^{3/2}}, & \text{en } \mathbb{R}^2 \\ \frac{2}{\pi} \frac{\varpi^2}{(1 + \varpi^2)^2}, & \text{en } \mathbb{R}^3 \end{cases}$$

On a supposé que la moyenne est de 1 ce qui correspond à la construction du champ de la perméabilité pour le milieu stochastique avec une valeur moyenne de 1 mD. Pour la porosité, la valeur moyenne est de 0.2.

Le système d'équations linéaires dans la méthode de krigeage est résolu par la méthode de Gauss.

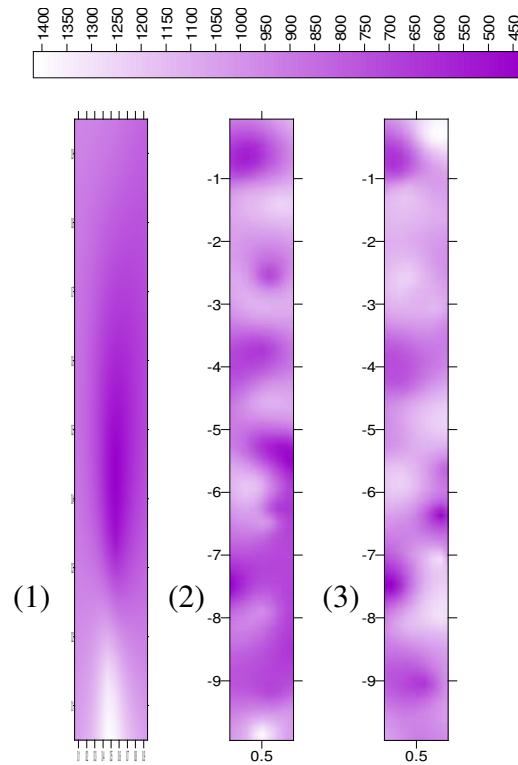


Figure 4.3 : Distribution de perméabilité (millidarcy)

La première image de la figure (4.3) représente la distribution du champ de perméabilité sur le plan XY, la deuxième sur le plan XZ et finalement la troisième sur le plan YZ.

Sur l'ensemble des cellules de maillage, la porosité moyenne a été fixée à une valeur de 0.2. Elle est distribuée de façon aléatoire. Une certaine contrainte relie les deux champs, celui de la perméabilité et de la porosité. Elle consiste à supposer que plus la perméabilité est grande, plus la porosité l'est aussi, donc on introduit la relation suivante : $\phi = \alpha \log K$, le coefficient α est déterminé à partir de la condition :

$$\bar{\phi} = \alpha \log \bar{K} .$$

ϕ est la porosité, $\bar{\phi}$ est sa moyenne, K est la perméabilité, \bar{K} est sa moyenne.

La figure (4.4) montre la répartition des valeurs de porosité suivant une loi Normale centrée en 0.2. L'image a été obtenue par le logiciel Surfer8 comme celle de la perméabilité.

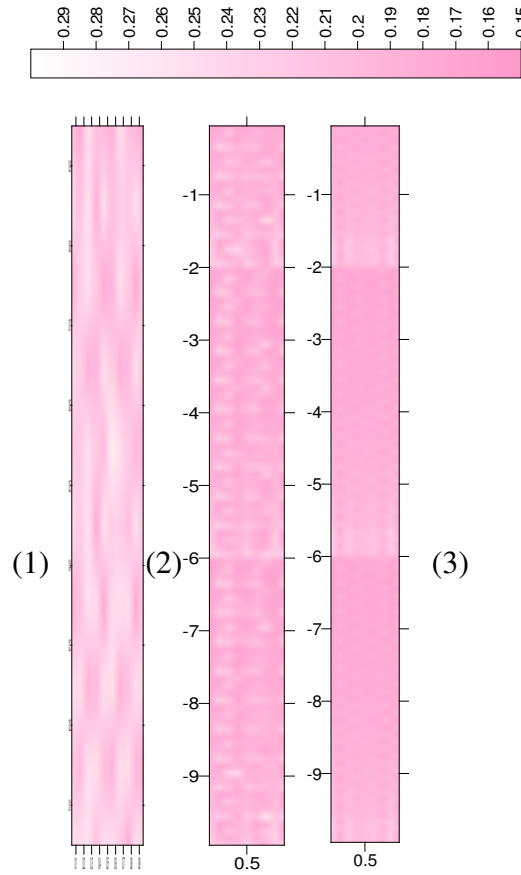


Figure 4.4 : Distribution de porosité

La première image de la figure (4.4) représente la distribution du champ de porosité sur le plan XY, la deuxième sur le plan XZ et finalement la troisième sur le plan YZ.

Une fois les champs de porosité et de perméabilité générés, nous sommes en mesure de réaliser des simulations numériques d'écoulement en introduisant les valeurs stochastiques du milieu généré dans le fichier d'entrée du code de calcul SIMUSCOPP, en plus d'autres paramètres définis dans les paragraphes qui suivent.

4.2. Paramètres du problème

L'écoulement dans le milieu décrit ci-dessus est régi par les équations suivantes :

$$\text{div}(\rho_i \vec{V}_i) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \phi_i S_i) = 0 \quad (4.2)$$

$$V_i = -\frac{K k_{ri}}{\mu_i} \cdot \text{grad} (p_i + \rho_i g z) \quad (4.3)$$

Dans le cadre de la logique de l'homogénéisation, l'étude effectuée dans le présent chapitre correspond à l'échelle microscopique d'observation. Notons cependant que cette échelle dite microscopique est celle de Darcy.

4.2.1. Pression capillaire

La courbe de pression capillaire pour le couple gaz-huile a été prise sous forme d'une équation empirique de Van Genuchten (1980) :

$$Pc(go) = \frac{\sigma_{go}}{\sigma_{gw}} * 0,09807 * \frac{1}{\alpha} * \left[\frac{1}{(S_w^*)^{\frac{1}{m}}} - 1 \right]^{1-m}, \quad S_w^* = \frac{S_w - S_{wi}}{1 - S_{wi}} \quad \text{et} \quad 1 - m = 0,389$$

Les tensions interfaciales pour les couples gaz-huile et air-eau sont respectivement $\sigma_{go} = 0,0312$ N/m et $\sigma_{gw} = 0,072$ N/m (Parker et al, 1987).

Dan cette relation, S_w est la saturation en eau, S_w^* est la saturation dite « effective » en eau, et S_{wi} est la saturation irréductible en eau.

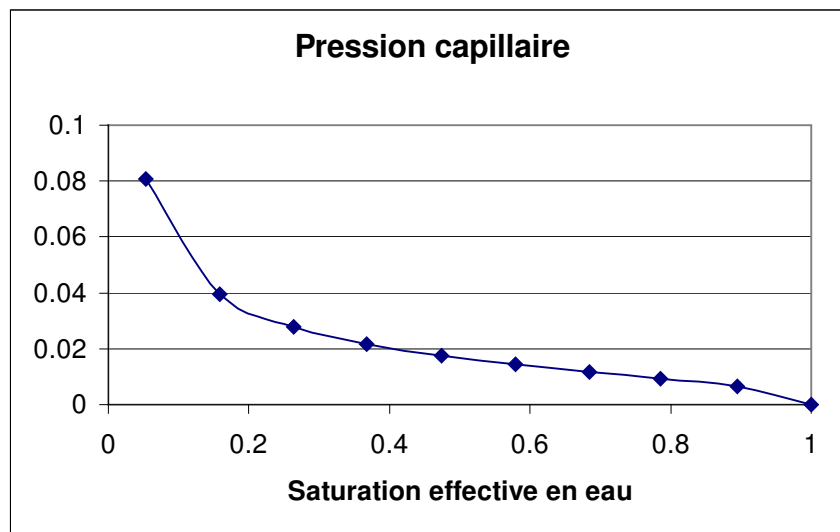


Figure 4.5 : Courbe de pression capillaire pour le couple huile – gaz

4.2.2. Perméabilité relative

Pour les courbes de perméabilité relative respectivement du gaz et de l'huile, les deux équations utilisées sont les suivantes :

$$krg = \sqrt{S_g^*} \left(1 - (S_w^*)^{\frac{\beta}{\beta-1}} \right)^{2\left(1 - \frac{1}{\beta}\right)}$$

avec : $Sg^* = \frac{Sg}{1 - Swi}$ et $\beta = \frac{1}{1 - m} = 2,57$.

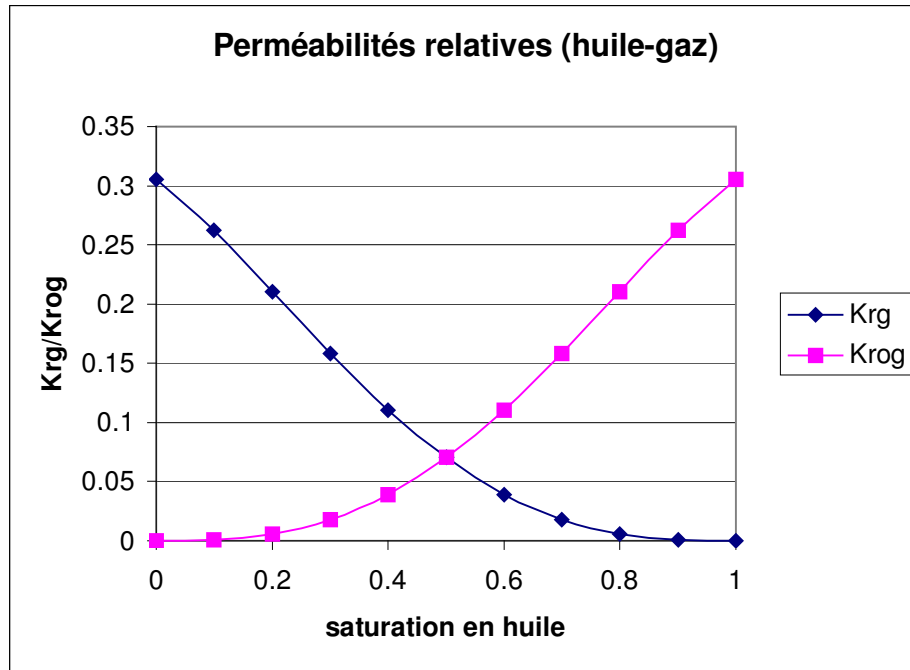


Figure 4.6 : Courbes de perméabilité relative pour le couple huile – gaz

4.2.3. Les autres paramètres

Hormis la perméabilité, la porosité, les pressions capillaires et les perméabilités relatives, d'autres paramètres doivent être fixés avant de simuler l'écoulement :

- La dispersivité à l'échelle microscopique est prise égale à zéro aussi bien longitudinalement que transversalement;
- La saturation irréductible en eau est égale à 0,05;
- La saturation en huile critique est égale à zéro;
- La température est de 20°C pour toutes les simulations;
- La masse volumique de l'huile est égale à 1,145 g/cm³.
- Les viscosités dynamiques : celle de l'huile μ varie d'une simulation à l'autre en prenant les valeurs suivantes : 0,001, 0,01 et 1 cP et celle du deuxième fluide est fixée à 0,01 cP. On a donc 3 valeurs différentes pour le rapport des viscosités $\bar{\mu}$ qui sont 0,1, 1 et 100.

Afin de pouvoir analyser le phénomène de dispersion dans un intervalle très large par rapport aux variations de viscosité, la valeur de 0,001 a été testée, une valeur qui dépasse les situations réalistes, afin de mieux voir les tendances limites.

4.2.4. Conditions initiales et conditions aux limites

Le système d'équations décrivant l'écoulement réclame une condition initiale en saturation, des conditions aux limites en saturation et en pression.

La condition initiale est limitée à une saturation en huile nulle dans toutes les cellules du domaine de sorte que celui-ci ait initialement rempli d'air et d'eau à saturation irréductible égale à 0.05.

Les conditions aux limites à l'entrée sont :

- Une distribution uniforme du débit d'entrée en huile est imposée. Sa valeur intégrale est $0.1 \text{ m}^3/\text{jour}$ pour le milieu périodique et $0,05 \text{ m}^3/\text{jour}$ pour le milieu stochastique;
- Une saturation en gaz constante égale à 0.95.

Les conditions aux limites à la sortie sont :

- la pression a été fixée à 10 bars ;
- la saturation en huile à la sortie est toujours nulle (l'huile n'atteint pas la sortie).

Les conditions aux limites dans les directions X et Y sont :

- la dérivée normale de la pression en huile est nulle (absence d'écoulement convectif à travers la limite latérale);
- la dérivée normale de la saturation en huile est nulle (absence d'écoulement capillaire à travers la limite latérale).

Ainsi les seuls échanges entre le milieu étudié et le milieu extérieur se font selon la direction principale, en Z.

4.3. Solution numérique

4.3.1. Description de la méthode

Le logiciel *SIMUSCOPP* utilisé est un code numérique qui permet d'effectuer des **SIMU**lations de **Sites Contaminés** par des **Produits Pétroliers** et de suivre la migration des polluants à la fois dans les sols et dans les eaux souterraines. Ce logiciel a été conçu à l'Institut Français du Pétrole. Il est issu du logiciel ATHOS adapté pour la migration des hydrocarbures dans des conditions de gisements pétroliers (hautes températures, hautes pressions).

Ce code de calcul est un outil d'aide à la décision en matière d'analyse des risques. Il permet de prédire le comportement d'une pollution au cours du temps et intervient dans le choix de procédés de dépollution et dans l'optimisation de leur mise en œuvre.

La discrétisation des équations est effectuée par la méthode de volumes finis en trois dimensions.

SIMUSCOPP résout un ensemble de couples d'équations de transport contenant les vitesses de fluides, la pression et la concentration des espèces chimiques dans un

écoulement polyphasique. Le nombre d'équations à résoudre peut varier en fonction du cas étudié et des requêtes de l'utilisateur.

On a travaillé en repère cartésien avec l'axe Z orienté vers le haut.

La structure de la grille choisie est régulière.

Le système d'unités employées par SIMUSCOPP est :

- Les débits sont exprimés en m^3/jour ;
- Les pressions en bar ;
- Les masses volumiques en g/cm^3 ;
- Les viscosités en cP ($1 \text{ cP} = 10^{-3} \text{ Pa.s}$) ;
- Les perméabilités en milliDarcy ($1 \text{ Darcy} = 0,987 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$).

4.3.2. Saturation en fonction de porosité

Suivant l'analyse du chapitre précédent, la porosité joue le rôle important dans le phénomène de dispersion du NAPL. Quatre valeurs moyennes de porosité ont été testées : 0.2, 0.3, 0.4 et 0.5.

La figure (4.8) montre l'évolution de la saturation en NAPL. On voit qu'elle est sensible aux faibles variations de porosité (0.2 - 0.3).

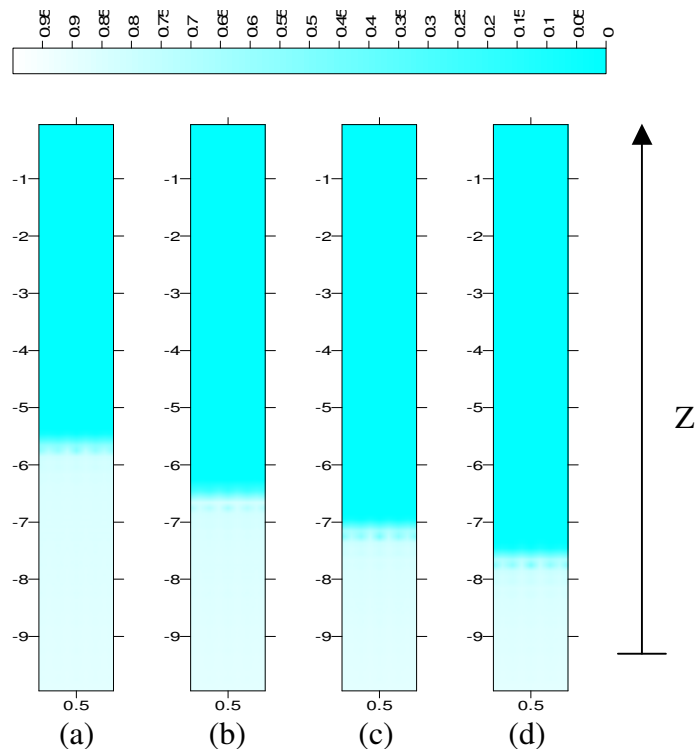


Figure 4.8 : Profils de saturation en NAPL pour différentes valeurs de la porosité moyenne :

(a) 0.2 (b) 0.3 (c) 0.4 (d) 0.5

Ceci peut être représenté par le graphe ci-dessous en terme de la saturation homogénéisée à travers des sections horizontales du milieu (Z est vers le haut) :

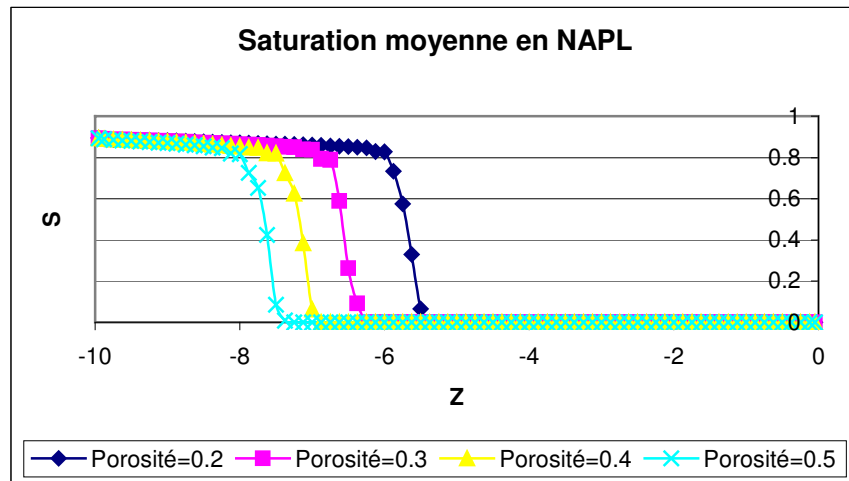


Figure 4.9 : Saturation moyenne en plans horizontaux pour différentes valeurs de la porosité moyenne

On voit que la vitesse de propagation de la saturation augmente avec la diminution de la porosité, ce qui correspond au sens physique du processus.

4.3.3. Saturation en fonction de la perméabilité

Comme dans le cas d'étude de la porosité, quatre essais ont été testés pour la perméabilité ayant comme valeurs moyennes : 5.5 mDarcy, 55 mDarcy, 0.55 Darcy et 5.5 Darcy, - afin d'appréhender la sensibilité du logiciel aux variations de la perméabilité et, par conséquent, son influence sur la migration du polluant.

Comme on pouvait s'y attendre, plus la perméabilité est forte plus la migration du polluant est rapide et, par la suite, la saturation en NAPL est importante, comme le montre les deux figures (4.10) et (4.11).

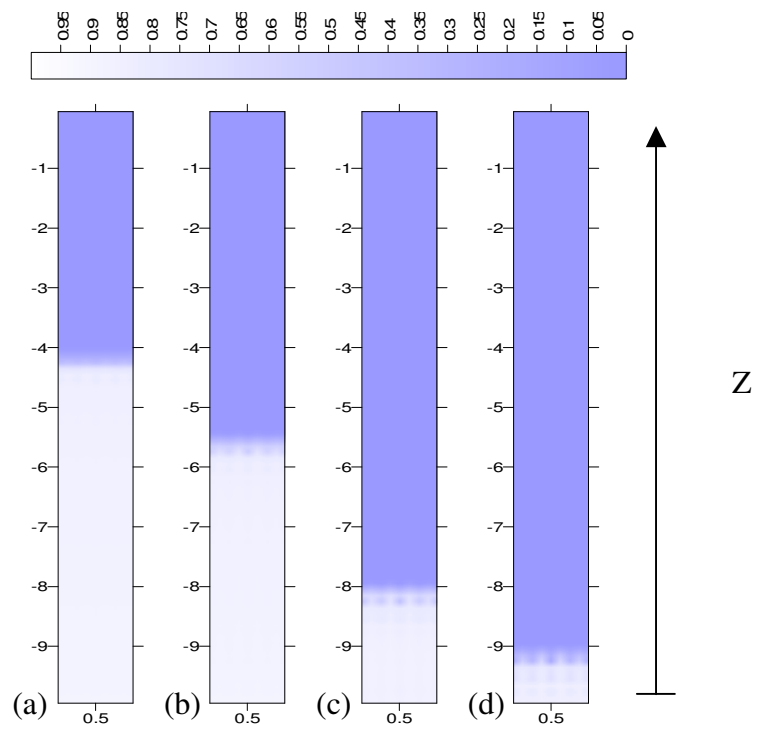


Figure 4.10 : Profils de saturation en NAPL pour différentes valeurs de perméabilité :
 (a) 5.5 Darcy (b) 0.55 Darcy (c) 55 mDarcy (d) 5.5 mDarcy

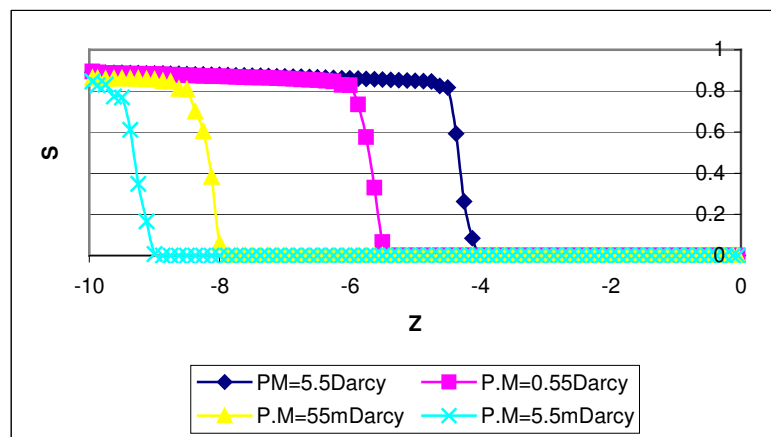


Figure 4.11 : Saturation moyenne en plans horizontaux pour différentes valeurs de la perméabilité moyenne

4.3.4. Saturation en fonction du rapport de viscosités. Milieu périodique

Les résultats des simulations (saturation, pression,...) sont stockées pour chaque bloque et ceci pour tous les pas de temps. Les profils de saturation en NAPL obtenus, $S(z,t)$, sont très différents selon les valeurs des viscosités.

Les graphiques ci-dessous sont tous obtenus avec les mêmes paramètres et les mêmes conditions aux limites; seul le rapport de viscosités dynamiques varie.

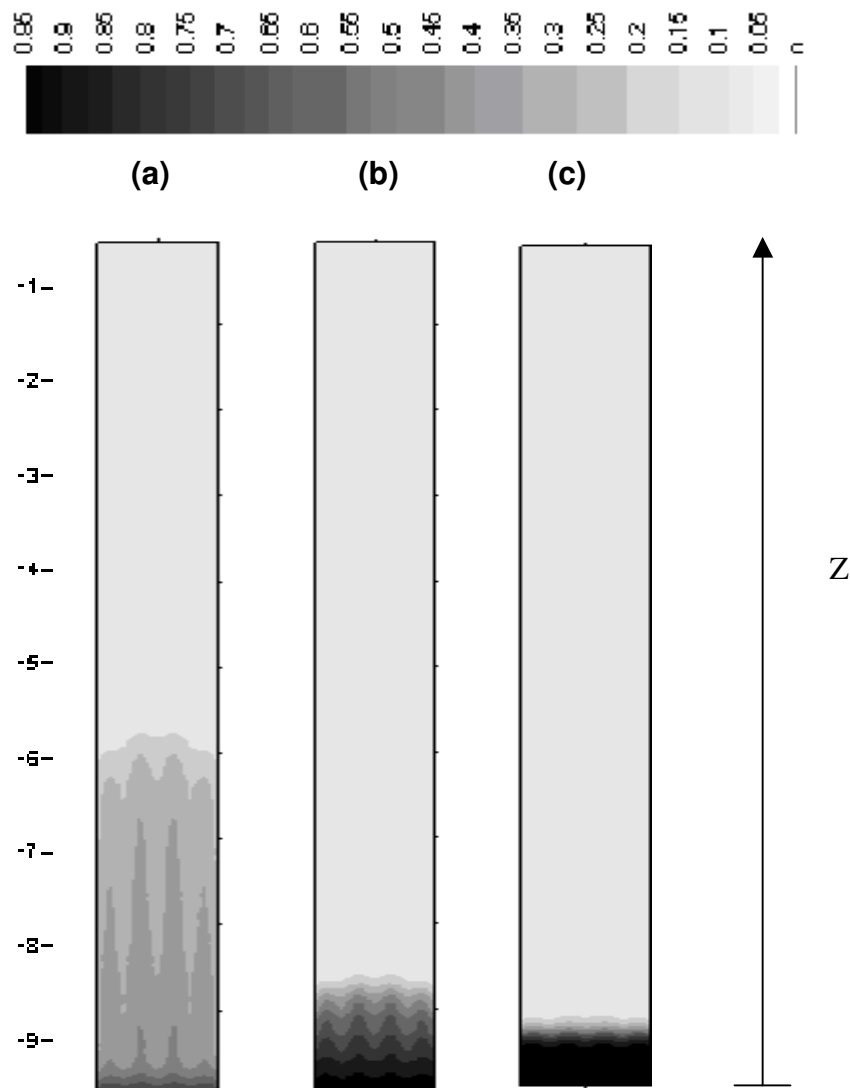


Figure 4.12: : Saturation en NAPL pour trois rapports des viscosités
 $\bar{\mu} = 0,1$ (a), 1 (b), 100 (c) pour $t = 24 H$

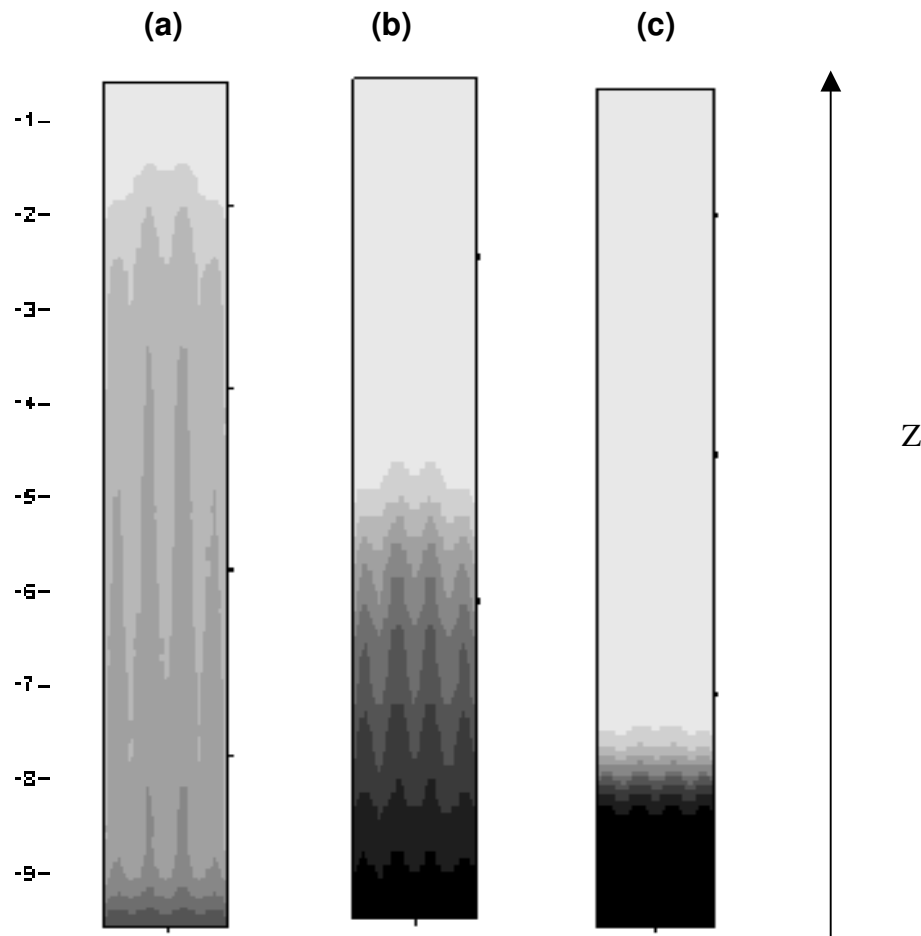


Figure 4.13 : Saturation en NAPL pour trois rapports des viscosités $\bar{\mu} = 0.1$ (a), 1 (b), 100 (c) pour $t = 7 J$

Ces figures représentent les 3 cas étudiés :

- Lorsque $\bar{\mu}=0,1$, le phénomène de digitation est mis en évidence : il existe des zones où l'huile perce l'air comme un doigt.
- Lorsque $\bar{\mu}=100$, le déplacement de l'air par l'huile se rapproche clairement du type piston.
- Enfin, lorsque $\bar{\mu}=1$, une situation intermédiaire est observable. On n'a pas de vraies digitations mais pas non plus une interface abrupte entre les deux fluides.

4.3.5. Evolution de la saturation dans un milieu stochastique

Les simulations avec SIMUSCOPP montrent que les profils de saturation selon le rapport de viscosités ont qualitativement la même allure. On présente ci-dessus l'évolution dans le temps de l'injection du NAPL pour $\bar{\mu} = 0.1$.

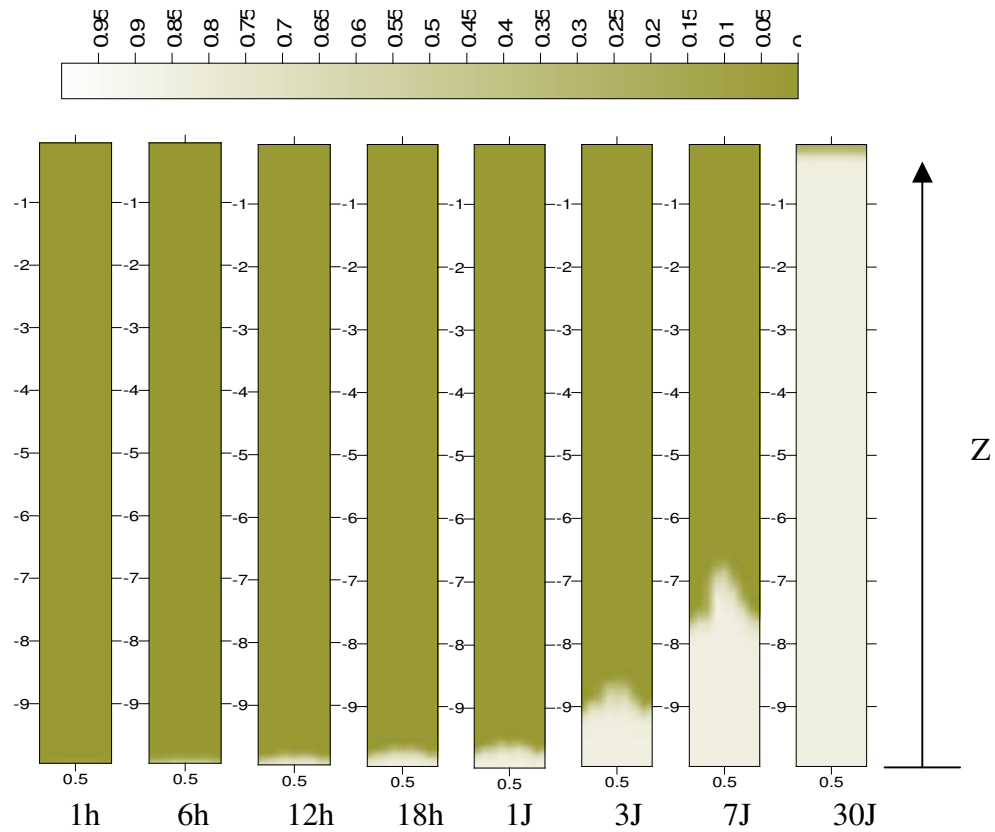


Figure 4.14 : Profils de saturation en huile dans le temps, $\bar{\mu} = 0.1$

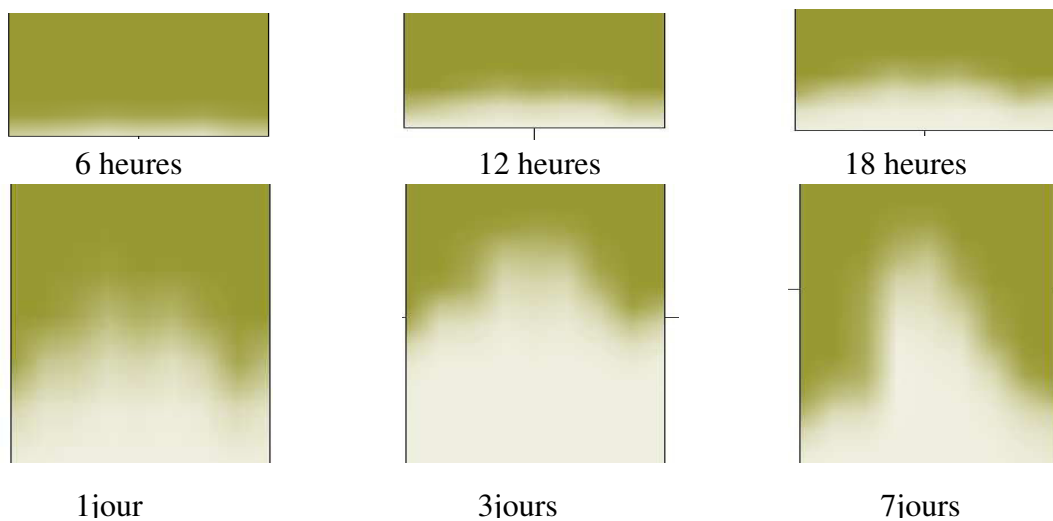


Figure 4.15 : Structure du front de déplacement huile-air dans le temps

4.3.6. Profils de saturation macroscopique. Milieu périodique

En raison de l'alternance entre des cellules à forte et à faible perméabilité en milieu périodique, les résultats numériques sont caractérisés par des « dents de scie » dans la partie située autour du front de déplacement. Par contre, le comportement de la saturation moyenne dans chaque section horizontale est monotone en espace, comme le montrent les figures suivantes obtenues pour différents moments.

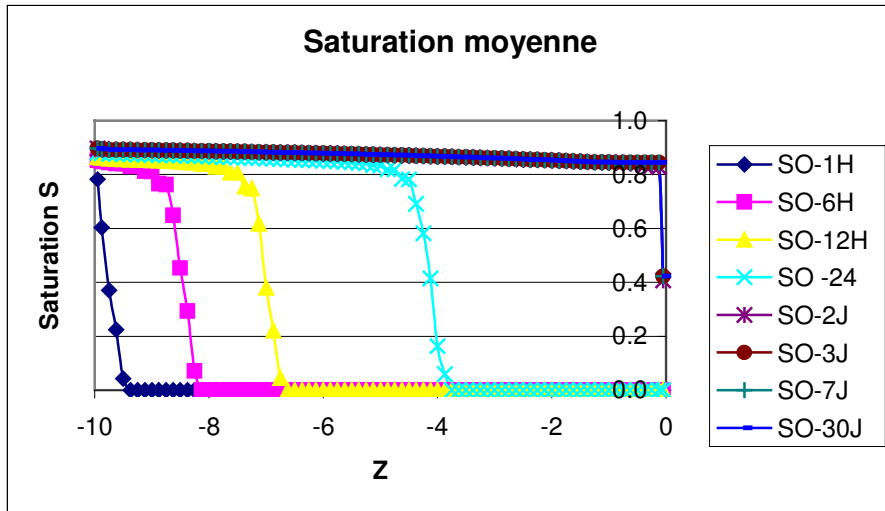


Figure 4.16 : Saturation homogénéisée en X,Y pour différents moments de temps ; $\bar{\mu} = 0.1$

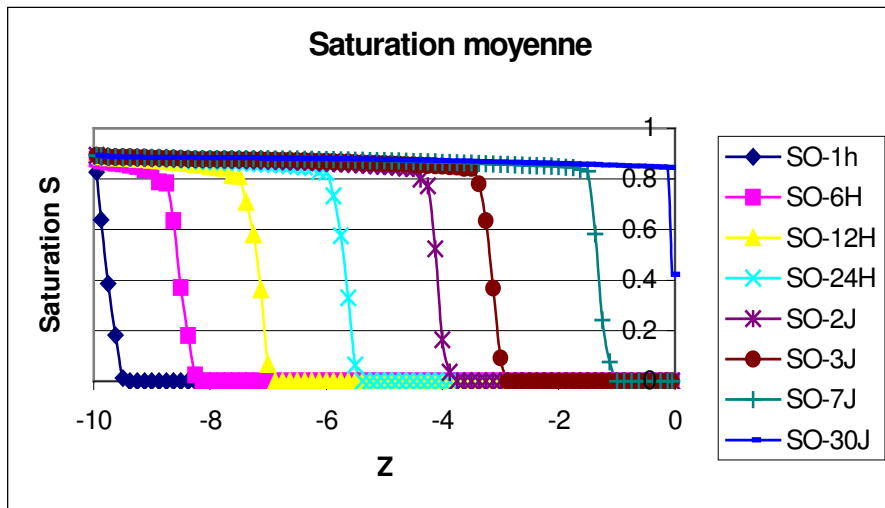


Figure 4.17 : Saturation homogénéisée en X,Y pour différents moments de temps, $\bar{\mu} = 1$

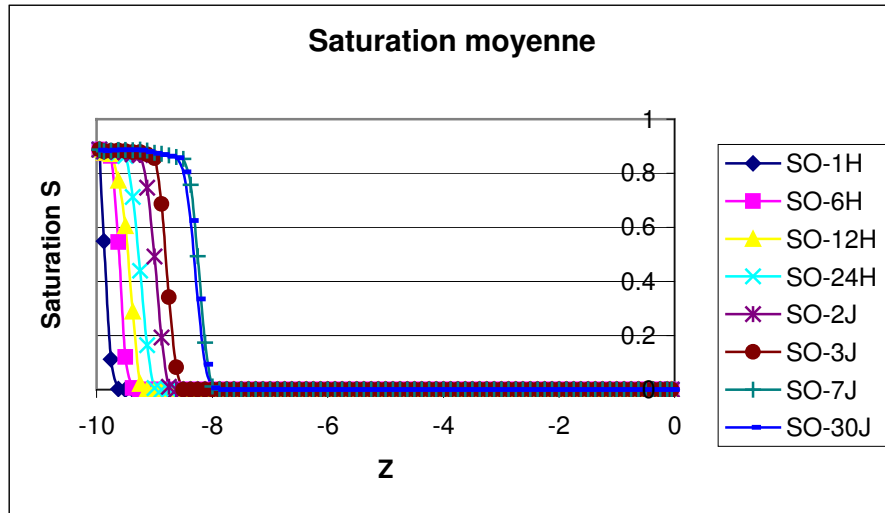


Figure 4.18 : Saturation homogénéisée en X,Y pour différents moments de temps, $\bar{\mu} = 100$

Pour les 3 rapports de viscosités, les profils ont des allures similaires.

La distribution de la saturation selon Z est constituée de trois parties : i) « une rarefaction wave » correspondant à la partie arrière entre les valeurs 0.95 à 0.85 de saturation ; ii) « la zone de front » qui est celle d'une variation brusque au voisinage du front de déplacement et iii) la zone non perturbée devant le front. Une telle structure de solution est typique pour la solution du problème de déplacement de pétrole par l'eau (théorie de Buckley-Leverett). L'absence d'un front discontinu est déterminée par la dispersion hydrodynamique.

Afin d'être sûr que la dispersion observée ne soit pas d'une origine numérique, nous avons effectué un test de sensibilité. Le même problème a été résolu dans le cas d'un milieu homogène, en conservant l'équivalence en termes de tous les autres paramètres. La dispersion observée dans ce cas est d'origine purement numérique. La zone de front obtenu a été étalée sur les trois points voisins, tandis qu'en milieu hétérogène la zone de front s'étale sur les 9-11 points au minimum. Ces résultats nous ont permis de justifier que le schéma numérique appliqué capturerait essentiellement la dispersion physique.

4.3.7. Profils de saturation macroscopique. Milieu stochastique

Dans le cas d'un milieu stochastique, la saturation homogénéisée en X,Y est présentée sur les graphiques (4.19), (4.20) et (4.21), ci-après :

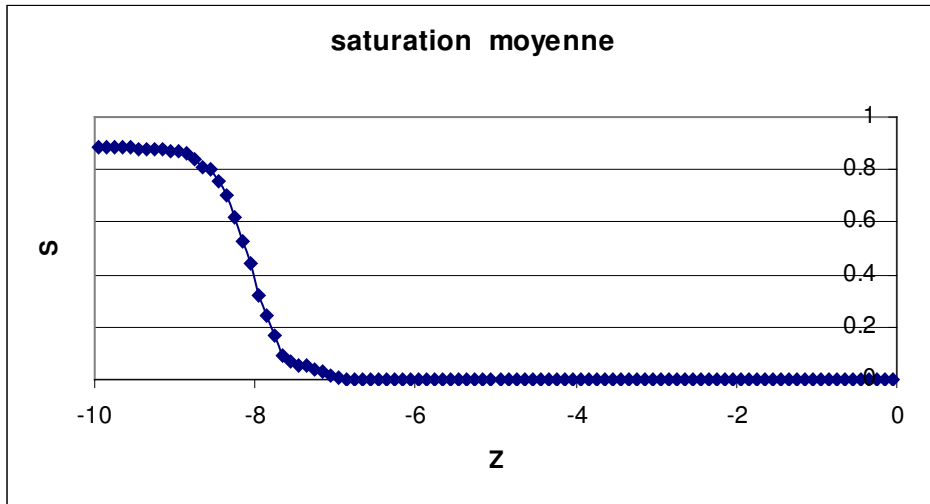


Figure 4.19 : Saturation homogénéisée en X, Y , $\bar{\mu} = 100$, $t = 7$ jours

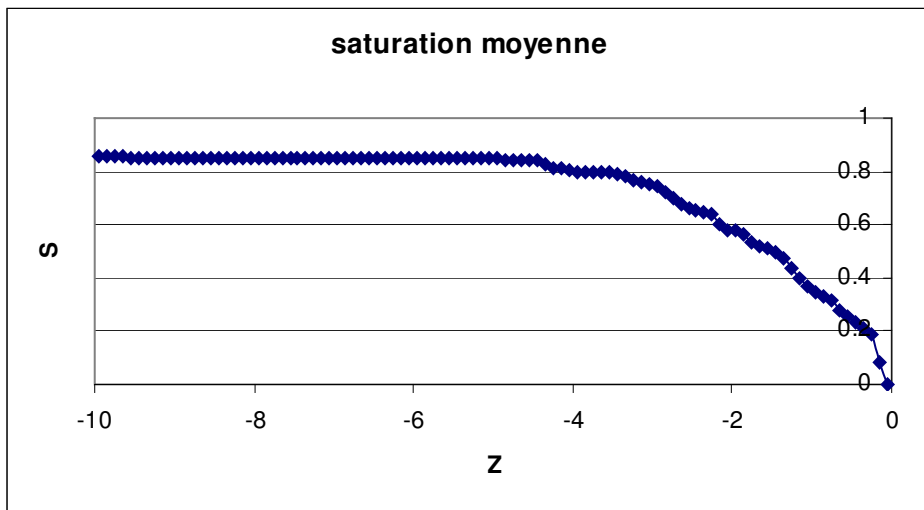


Figure 4.20 : Saturation homogénéisée en X, Y , $\bar{\mu} = 1$, $t = 30$ jours

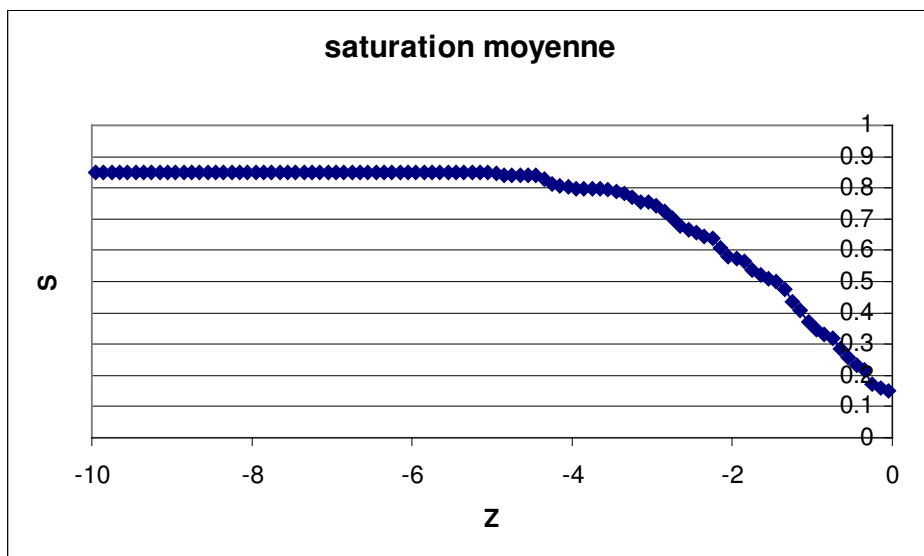


Figure 4.21 : Saturation homogénéisée en X, Y , $\bar{\mu} = 0.1$, $t = 30$ jours

On voit les particularités suivantes du processus :

- la zone de front est très raide pour le cas $\bar{\mu}=100$;
- pour $\bar{\mu}=1$, la zone de front est dissymétrique, le passage derrière le front d'une saturation de 0.95 à 0.7 est beaucoup plus long que celui de 0.7 à 0 devant le front ;
- lorsque le rapport de viscosité $\bar{\mu}$ est égal à 0.1, la zone de front est très étalée.

4.3.8. Calcul du coefficient de dispersion

Pour interpréter les résultats des simulations en terme de dispersion, nous appliquons la méthode proposée dans (Panfilov & Floriat, 2004).

Examinons le modèle homogénéisé obtenu dans le chapitre 2 en négligeant le terme intégral-différentiel. Il est donné par :

$$\langle \phi \rangle \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial F(S)}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial Z} \left(D(S) \frac{\partial S}{\partial Z} \right) \quad (4.4)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} F(S) = k_l(S) a(y) = k_l(S) \frac{\hat{K}}{K^*} \\ D(S) = -\frac{\epsilon}{Pe^*} a(y) k_l(S) \frac{dp_c}{dS} \end{cases} \quad (4.5)$$

$\langle \phi \rangle$ la porosité moyenne arithmétique du milieu, S la saturation homogénéisée, $D(S)$ le coefficient de dispersion [$L^2.T^{-1}$], $F(S)$ une fonction du flux fractionnaire (*fractional flow*) et \hat{K} est la perméabilité effective [m^2].

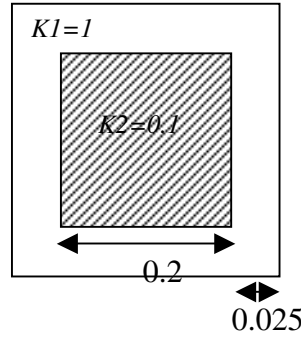
Intégrons selon Z :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_Z^0 S.dZ \right) + [-F(S) + F(S)|_{z=0}] = -D \left(\frac{\partial S}{\partial Z} \right) + D \left(\frac{\partial S}{\partial Z} \right) \Big|_{Z=0}, \quad Z < 0 \quad (4.6)$$

A l'entrée la saturation en huile est 0.95, alors la perméabilité relative en huile est proche de 1, ainsi :

$$F(S)|_{z=0} = \frac{\hat{K}}{\langle K \rangle} = const = \alpha = 0.0028 \quad (4.7)$$

D'autre part, la cellule périodique est représentée par :

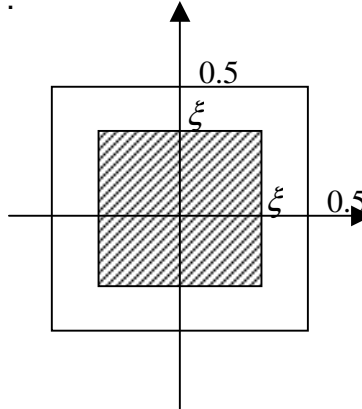


Alors $\langle K \rangle = 26.5$ mD et $\hat{K} = 0.075$

La perméabilité effective est calculée à partir de la formule suivante (Panfilov, 2000):

$$\hat{K} = \frac{2\xi(1-2\xi) + w(1-2\xi + 4\xi^2)}{2\xi + w(1-2\xi)}$$

Sur la cellule représentée par :



Avec : $w = K_2 / K_1$

De plus, dans la section d'entrée, le fluide est monophasique, donc l'effet de pénétration d'une phase dans l'autre n'a pas lieu et le coefficient de dispersion est nul $D(S)|_{z=0} = 0_{z=0}$. Au final, on obtient :

$$\langle \phi \rangle \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_z^0 S.dZ \right) + [\alpha - F(S)] = -D \left(\frac{\partial S}{\partial Z} \right) \quad (4.8)$$

alors le coefficient de dispersion est donné sous forme explicite :

$$D = \frac{-\langle \phi \rangle \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_z^0 S.dZ \right) + F(S) - \alpha}{\frac{\partial S}{\partial Z}} \quad (4.9)$$

Dans le cas monodimensionnel, le paramètre D est un coefficient scalaire représentant la dispersion longitudinale. On peut donc obtenir les valeurs de D pour

les différents points de l'espace : $D=D(Z)$. Dès lors, étant donné l'existence de la fonction $S(Z)$, on peut retrouver la fonction $D(S)$ à partir de $D(Z)$.

Etant donné que les courbes de perméabilités relatives aux fluides entrant et sortant sont connues, la fonction $F(S)$ est également connue. Pour ce qui est des deux autres termes, dépendants tous les deux de S , les profils de saturation moyenne en fonction de Z et les tableaux de valeurs correspondants fournissent les informations nécessaires.

L'intégration et la différentiation des données de calculs ont été effectuées de façon numérique. La dérivée de l'intégrale de S est calculée à partir de deux profils de saturation moyenne pour deux pas de temps consécutifs. La dérivée de S par rapport à Z est simplement la pente du profil de saturation en fonction de l'abscisse au point considéré.

4.3.9. Coefficient de dispersion en fonction de saturation

Pour le milieu stochastique, le traitement des résultats produits par le logiciel SIMUSCOPP nous a permis d'obtenir les profils ci-dessous pour le coefficient de dispersion longitudinal et ceci pour les 3 rapports de viscosités, durant 30 jours de déroulement du processus :

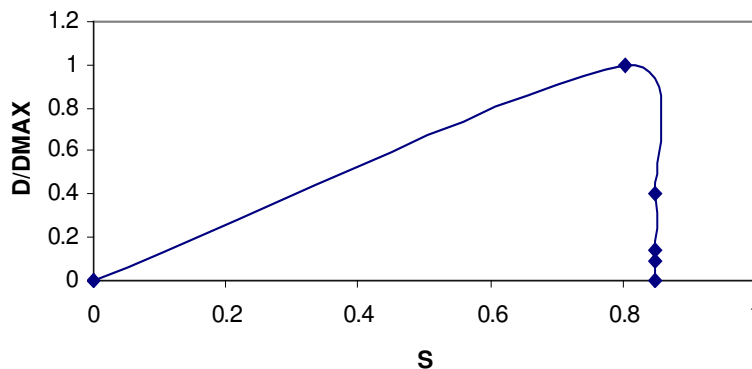


Figure 4.22 : Coefficient de dispersion en fonction de la saturation : $\bar{\mu}=0.1, t=30$ jours

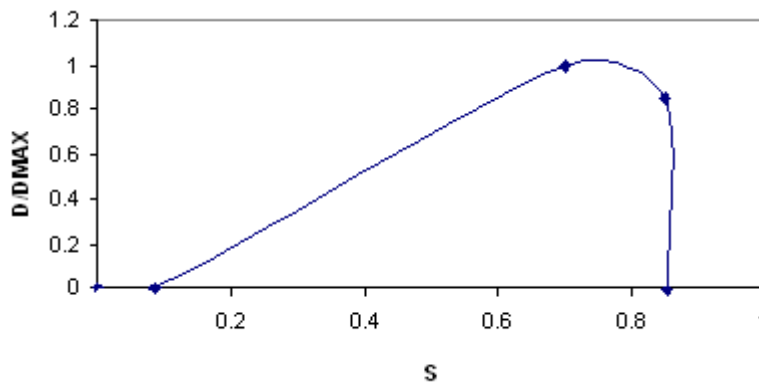


Figure 4.23 : Coefficient de dispersion en fonction de la saturation : $\bar{\mu}=1, t=30$ jours

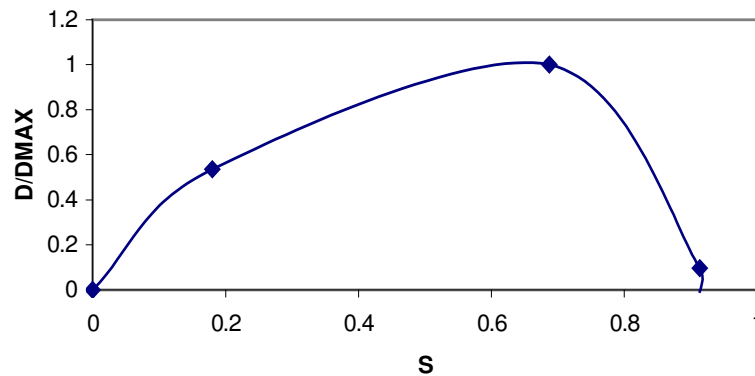


Figure 4.24 : Coefficient de dispersion en fonction de la saturation : $\bar{\mu} = 100$, $t = 30$ jours

Le coefficient de dispersion a été calculé pour différentes valeurs de saturation, les graphiques (4.21), (4.22) et (4.23) présentent les cinq valeurs importantes qui ont permis de dessiner le profil du coefficient de dispersion selon chaque rapport de viscosités.

Durant le traitement des résultats, on a remarqué que pour certaines valeurs de saturation (comprises entre 0 et 0.1), le coefficient de dispersion est négatif, caractéristique du phénomène d'anti-dispersion [Panfilov & Floriat, 2004]. Celui-ci tend à séparer un mélange homogène mais instable de plusieurs composants en plusieurs sous domaines stables dont chacun est constitué d'un seul composant, opération contraire à celle du phénomène de diffusion qui tend à homogénéiser un mélange.

4.3.10. Comparaison avec la théorie

En suivant l'objectif de ce chapitre on a comparé les résultats de simulations avec les résultats analytiques obtenus par homogénéisation de l'équation de Richards.

Après avoir réalisé les simulations numériques et effectué leurs analyses, il est intéressant de comparer ces résultats de simulations avec les résultats analytiques obtenus par l'homogénéisation de l'équation de Richards.

Sur les graphiques suivants les courbes calculées de la dispersion longitudinale sont comparées avec celles obtenues par homogénéisation.

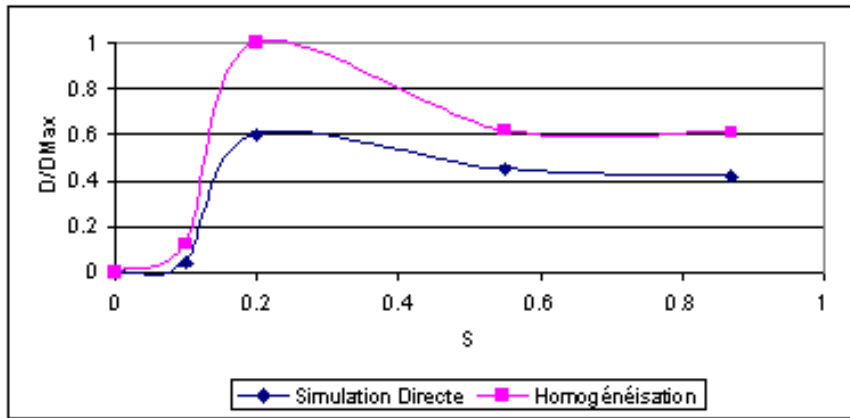


Figure 4.25 : Coefficient de dispersion : $\bar{\mu} = 0.1, t = 1$ jour

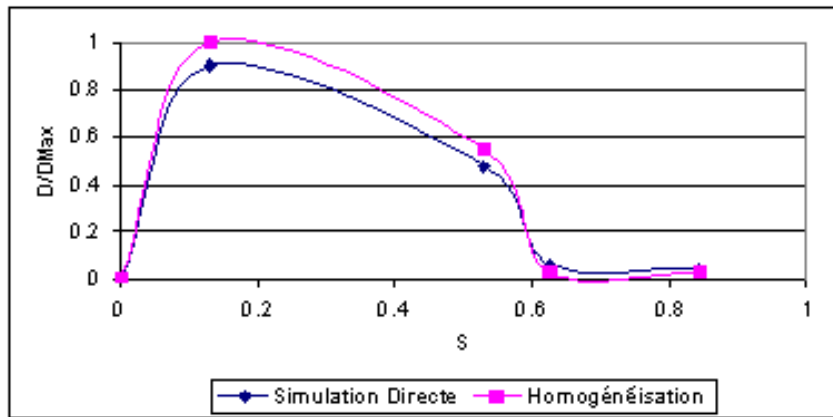


Figure 4.26 : Coefficient de dispersion : $\bar{\mu} = 1, t = 1$ jour

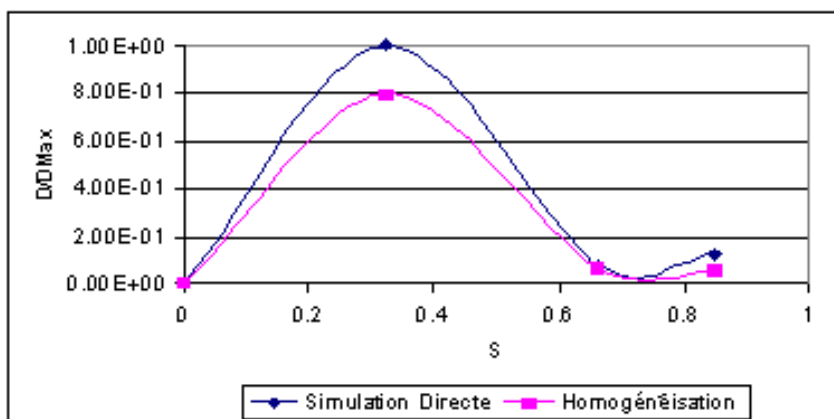


Figure 4.27 : Coefficient de dispersion : $\bar{\mu} = 100, t = 1$ jour

Les profils du coefficient de dispersion donnent les mêmes allures, ceux calculés à partir de l'homogénéisation et ceux obtenus par simulation, alors les simulations numériques confirment notre théorie.

Le phénomène de dispersion est beaucoup plus faible lorsque la valeur de viscosité augmente. C'est ce que nos figures confirment en montrant que le phénomène de dispersion est très faible pour un rapport de viscosité de 100. En effet, ce cas est connu comme très stable hydrodynamiquement, ainsi le front initial de déplacement reste pratiquement non déformé, ce qui explique une très faible dispersion.

Cette étude montre que le coefficient de dispersion diphasique est une fonction non-linéaire de la saturation et du rapport de viscosités.

4.3.11. Relation entre $D(S)$ et dF/dS

Dans le but de confirmer les résultats de l'étude théorique obtenus dans le chapitre 2, on s'intéresse à vérifier pour notre étude la similarité entre l'allure des profils de $D(S)$ et la fonction dF/dS dans le cas où les forces capillaires sont négligeables. On présente ici uniquement le cas périodique. Pour le milieu stochastique, l'allure des courbes obtenues par simulation directe est moins conforme aux attentes issues de la théorie. Les graphiques (4.27), (4.28) et (4.29) exposés dans ce paragraphe présentent à chaque fois une superposition des fonctions $D(S)$ et dF/dS . Ces deux fonctions sont réduites (les valeurs de $D(S)$ et de dF/dS sont divisées par leur valeur maximale respective afin de rentrer dans l'intervalle compris entre 0 et 1 : valeur réduite).

Dans le cas d'un rapport de viscosités de 0.1, on obtient :

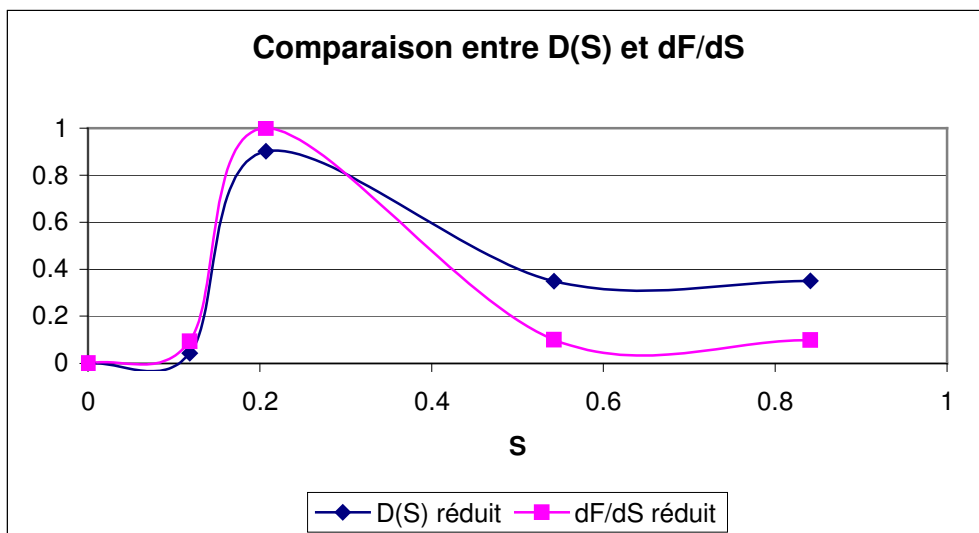


Figure 4.28 : Comparaison entre $D(S)$ et la fonction dF/dS pour $\bar{\mu} = 0.1, t = 1$ jour

Lorsque le rapport de viscosité est égal à 1, le résultat est le suivant :

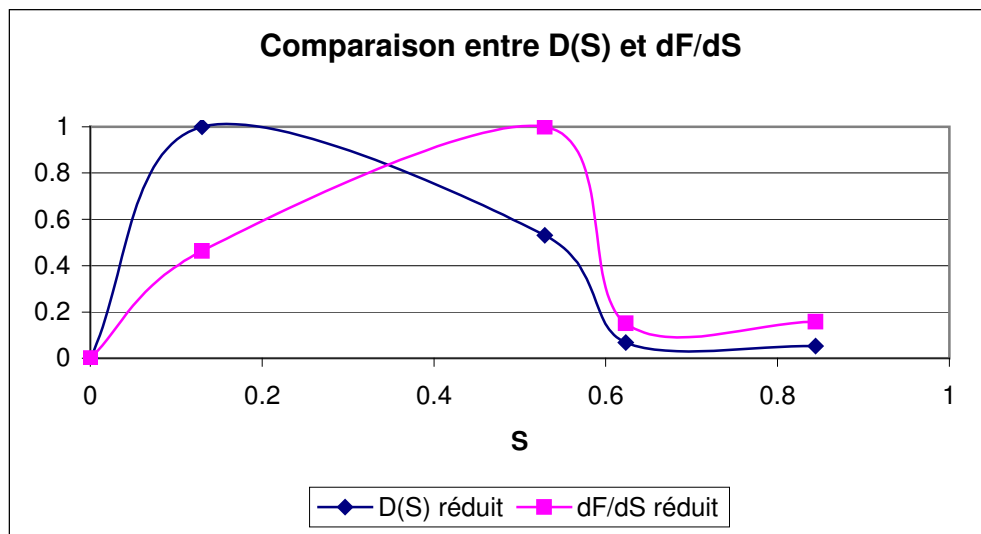


Figure 4.29 : Comparaison entre $D(S)$ et la fonction dF/dS pour $\bar{\mu}=1, t=1$ jour

Quand le rapport de viscosité est égal à 100, on obtient :

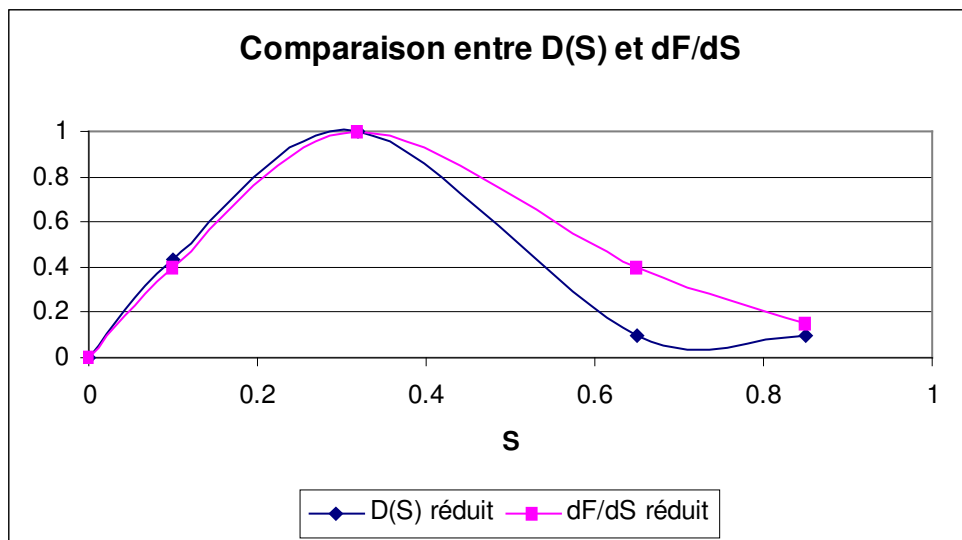


Figure 4.30 : Comparaison entre $D(S)$ et la fonction dF/dS pour $\bar{\mu}=100, t=1$ jour.

Pour les trois rapports de viscosités, les deux fonctions $D(S)$ et dF/dS ont été comparées en calculant leurs valeurs par rapport à la saturation. Cinq valeurs sont présentées, pour $\bar{\mu}=0.1$ (figure 4.27) et $\bar{\mu}=100$ (figure 4.29). Les profils de ces deux

fonctions ont pratiquement les mêmes allures. Pour $\bar{\mu}=1$ (figure 4.28), la comparaison n'est pas trop satisfaisante, la courbe de la fonction dF/dS est décalée par rapport à celle de la fonction $D(S)$.

Ces données numériques confirment le résultat théorique, suivant lequel la dispersion hydrodynamique est proportionnelle à la dérivée dF/dS dans le cas sans forces capillaires.

4.3.12. Conclusions

Dans le but de confirmer les résultats de l'étude théorique obtenus dans le chapitre 2, des simulations numériques à l'échelle microscopique ont été effectuées à l'aide d'une méthode des volumes finis (simulateur SIMUSCOPP) aussi bien pour le milieu périodique que pour le milieu stochastique stationnaire. Les résultats obtenus montrent que :

1. Les simulations ont révélé une correspondance satisfaisante avec les résultats théoriques en termes de comportement du coefficient de la dispersion longitudinal. L'ordre de grandeur et même le caractère qualitatif de la dispersion en fonction de la saturation sont proches de ceux obtenus par simulations numériques.
2. Cette étude montre que le coefficient de dispersion diphasique est une fonction non linéaire de la saturation et du rapport de viscosités.
3. Le phénomène de dispersion est beaucoup plus faible lorsque le rapport de viscosité augmente. En effet, ce cas est connu comme étant très stable hydrodynamiquement. Ainsi le front initial de déplacement reste pratiquement non déformé, donc l'interpénétration entre les deux phases est non observable, ce qui explique la dispersion très faible.
4. Les profils du coefficient de dispersion en fonction de la saturation correspondent assez bien aux attentes basées sur l'étude théorique. Les résultats sont en bon accord qualitatif avec les courbes de la dérivée de la fonction F par rapport à la saturation, issues de la théorie.

CONCLUSION

L'objectif de cette thèse était d'étudier le phénomène de dispersion hydrodynamique sous les effets des forces capillaires et gravitaires et plus précisément d'identifier le tenseur de dispersion pour un écoulement dit non saturé, modélisé par l'équation de Richards qui représente une équation différentielle de convection-diffusion non linéaire. Dans les recherches précédentes, la dispersion dans l'écoulement de Richards n'a pas été étudiée. Cependant dans certains travaux, on a analysé la dispersion d'un écoulement diphasique décrite par un système d'équations de type convection non linéaire (modèle de Buckley-Leverett). Ces travaux ont été consacrés uniquement au processus sans forces capillaires. Ainsi un des objectifs de la thèse présente était d'étudier l'influence de la capillarité sur la dispersion hydrodynamique.

Du point de vue mathématique, il s'agissait d'homogénéiser l'équation de Richards à travers un milieu hétérogène, afin de capturer la dispersion dans les équations macroscopiques de l'écoulement. L'effet de la dispersion hydrodynamique étant généré par les termes convectifs, le choix du nombre de Peclet (ou le nombre capillaire) est important : il doit être assez élevé et en même temps il ne peut pas dépasser une certaine limite, afin de ne pas éliminer toute influence des forces capillaires. Ainsi, on a étudié une équation de diffusion-convection avec une dominance du terme convectif.

L'ordre de grandeur de l'effet de dispersion étant inférieur au terme convectif, alors afin d'identifier la dispersion, il fallait construire un modèle homogénéisé du premier ordre, incluant la première approximation des développements asymptotiques.

Le phénomène de dispersion a été mis en évidence dans tous les cas étudiés, aussi bien pour le milieu périodique que pour le milieu stochastique stationnaire. Les résultats obtenus sont :

- 1) Pour un écoulement non saturé pseudo-triphasique décrit par l'équation différentielle de Richards en milieux hétérogène, on a obtenu le modèle macroscopique à l'aide de la méthode d'homogénéisation par développement asymptotique à deux échelles. Par rapport au modèle initial, le modèle macroscopique obtenu inclut un nouvel effet physique de dispersion hydrodynamique non linéaire décrit en terme d'une diffusion tensorielle, fonction de la vitesse d'écoulement.
- 2) Pour le tenseur de dispersion, on a obtenu la description fermée en termes d'une suite de problèmes cellulaires.
- 3) On a montré que pour un écoulement non saturé, le tenseur de dispersion est déterminé par deux effets physiques : i) la gravité qui détermine essentiellement la dispersion longitudinale, et ii) la capillarité qui à son tour détermine entièrement la dispersivité transversale et qui contribue à la dispersivité longitudinale.
- 4) Le tenseur de dispersion est non symétrique et donc non défini positif.
- 5) On a montré que dans le cas général le tenseur de dispersion est non local en espace, c'est-à-dire, il dépend de coordonnées spatiales macroscopiques. Dans le cas sans capillarité il devient totalement localisé. Dans le cas avec

capillarité, nous avons proposé une méthode de localisation approximative du tenseur de dispersion, en « gelant » un facteur variable devant le terme diffusif dans le problème cellulaire.

- 6) Dans le cas où la capillarité est négligeable, la dispersivité transversale est nulle. Ainsi dans un écoulement non saturé sans capillarité, la force de gravité seule est incapable de créer un étalement latéral du fluide à cause des hétérogénéités.
- 7) Dans le cas sans capillarité, la dispersivité d'un écoulement non saturé dans un milieu à double porosité a été déterminée analytiquement et comparée avec celle numérique à des valeurs différentes de porosité et perméabilité. Une correspondance satisfaisante a été établie.
- 8) Les solutions des problèmes cellulaires sont obtenues numériquement en utilisant la méthode des éléments finis (simulateur FEMLAB).
- 9) Les simulations numériques à l'échelle microscopique ont été effectuées à l'aide d'une méthode de volumes finis (simulateur SIMUSCOPP). Ces simulations ont révélé une correspondance satisfaisante avec les résultats théoriques en termes de comportement du coefficient de la dispersion longitudinal. L'ordre de grandeur et même le caractère qualitatif de la dispersion en fonction de la saturation sont proches de ceux obtenus par simulations numériques.
- 10) La dispersivité d'un écoulement non saturé se manifeste sous forme de la somme de deux termes, l'un d'eux étant déterminé par la gravité (dispersivité gravitaire), l'autre par la capillarité (dispersivité capillaire). La dispersivité capillaire augmente avec le rapport de perméabilités, tandis que la dispersivité gravitaire dépend des deux paramètres; la perméabilité et la porosité.
- 11) Les profils du coefficient de dispersion en fonction de la saturation correspondent assez bien aux attentes basées sur l'étude théorique. Les résultats sont en bon accord qualitatif avec les courbes de la dérivée de la fonction F par rapport à la saturation, issues de la théorie.
- 12) Le phénomène de dispersion hydrodynamique se manifeste non seulement par la dissipation de l'interface entre les phases mais aussi avec une modification dans le terme convectif ce qui coïncide avec les résultats déjà obtenus par (Glimm et al, 1998). Cette modification est exprimée par l'apparition du correcteur Δ_{k3} causé par la non-périodicité et la non-stationnarité du champ de vitesse. Le terme Δ_{k3} s'annule dans le cas monodimensionnel.
- 13) L'homogénéisation de l'équation de Richards a amené à l'apparition d'un terme supplémentaire dans le modèle macroscopique, décrit par un opérateur intégro-différentiel et déterminant un effet de longue mémoire. On a montré que l'apparition de la mémoire est causée uniquement par le terme convectif dans l'équation de Richards, plus précisément - par une particularité spécifique de cette équation. Cette particularité consiste à ce que la vitesse de

convection ne soit pas conservative. Cette propriété conduit à l'apparition de la loi constitutive non traditionnelle, qui devient non locale.

On a montré que le terme integro-différentiel s'annule lorsque les forces capillaires sont dominantes.

RÉFÉRENCES

- Abriola, L. and Pinder, G. F.** : 1985a, A multiphase approach to the modeling of porous media contaminated by organic compounds-1 : Equation development, *Water Resources Res* 21, 11-18.
- Abriola, L. and Pinder, G. F.** : 1985b, A multiphase approach to the modelling of porous media contaminated by organic compounds-2 : Numerical simulation, *Water Resources Res* 21, 19-26.
- Allaire, G.** : 1992, Homogenization and two-scale convergence, *SIAM J. Math. Anal.*, 23, no.6, pp. 1482-1518.
- Amaziane, B. and Bourgeat, A.** : 1988, Effective behavior of two- phase flow in heterogeneous reservoir in : Numerical simulation in oil recovery, *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, Ed. Par M.F. Wheeler, Springer Verlag pp. 1-22.
- Arbogast, T., Douglas, J. and Hornung, U.** : 1990, Derivation of the double porosity model of single phase flow via homogenization theory, *SIAM J. Math. Anal.*, 21, pp. 823-836.
- Aris, R.** : 1959, On the dispersion of a solute by diffusion, convection and exchange between phases, *Proc Roy Soc (London, A)* 252, 538-550.
- Ataie-Ashtiani, B., Hassanizadeh, S., Oostrom, M., and White, M.** : 2001, Effective parameters for two-phase flow in a porous medium with periodic heterogeneities, *Journal of Contaminant Hydrology* 49, 87-109.
- Auriault, J. et Sanchez-Palencia, E.** : 1986, Remarques sur la loi de Darcy pour les écoulements biphasiques en milieu poreux, *J. Méc. Théor. Appli. Special Issue*, 141-156.
- Auriault, J. L.** : 1987, Nonsaturated deformable porous media : quasistatics, *Transport in Porous Media* 2, 45-64.
- Auriault, J. L. et Lewandowska, J.** : 1997, Diffusion non linéaire en milieux poreux, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* 324, 293-298.
- Bakhvalov, N. S.** : 1974, Averaged properties of bodies with periodic structure, *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 218, no. 5, pp. 1046-1048.
- Bakhvalov, N. S.** : 1975, Averaging of partial derivation equation with quickly oscillating coefficients, *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 221, no. 3, pp. 516-519.
- Bakhvalov, N. S.** : 1977, Averaging PDE With Fast Oscillating Coefficients, Nauka, Moscow.
- Bakhvalov, N. S. and Panasenko, G.P.** : 1989, Hommogeneization : Averaging process in Periodic Media. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Barker, J. W. and Dupouy, P.** : 1999, An analysis of dynamic pseudo relative permeability methods, *Petroleum Geosci.* 5, 385-394.

- Bear, J.** :1961, On the tensor from dispersion. Journal of Geophysical Research 66, 1185-1197.
- Bear, J.** : 1972, Dynamics of fluids in porous media. Elsevier, New York, 764 pp.
- Bensoussan, A., Lions, J-L. and Papanicolaou, G.** : 1978, Asymptotic analysis for periodic structures, Amsterdam : North-Holland.
- Bogoliubov, M. and Mitropolskii, Yu.** : 1961, Asymptotic Methods in the Theory of Nonlinear Oscillations, Gordon and Breach, New York, English translation.
- Bosma, W. J. P. and Van der Zee.** : 1995, Dispersion of continuously injected, nonlinearly adsorbing solute in chemically or physically heterogeneous porous formations, Journal of Contaminant Hydrology 18, 181-198.
- Bourgeat, J. F.** : 1978, Numerical experiments of the homogenization method for operators with periodic coefficients, Rapport de recherche IRI, Rocquencourt, no. 277, pp. 212-245.
- Bourgeat, A.** : 1984, Homogenized behavior of two-phase flow in naturally fractured reservoir with uniform fractures distribution, Comp. Meth. Applied Mech. Eng. 47, 205-216.
- Bourgeat, A., Quintard, M. and Whitaker, S.** : 1988, Elements de comparaison entre la méthode d'homogénéisation et la méthode de prise de moyenne avec fermeture, C. R. Acad. Sci. Paris t. 306, Série II, 463-466.
- Bourgeat, A and Hidani, A.** : 1995, Effective Model of Two-Phase Flow in a Porous Media Made of Different Rock Types, Applicable Analysis, 58, n° 1-2, pp. 1-29.
- Bourgeat, A.** : 1996, Two-Phase flow. In Homogenization and Porous Media, Ed.U. Hornung, Springer, 95-128.
- Bourgeat, A and Panfilov, A.** : 1998, Effective Two-Phase Flow through Highly Heterogeneous Porous Media : Capillary Non-Equilibrium Effects, Computational Geosciences, 2, pp. 191-215.
- Bourgeat, A. et Mikelic, A.** : 1998, Modèle de double porosité aléatoire, C. R. Acad. Sci. Paris, Série 1, 327, pp. 99-104.
- Bourgeat, A.** : 2000, Homogenization of high-rate two-phase flow in porous media. In Book of abstracts of the Int. Sympos. Computer Methods in Engineering of Porous Media: Flow and Transport, Besançon, France.
- Brenner, H.** : 1980, Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media, Trans R Soc 297, 81-133
- Buès M. and Panfilov M.** : 2002, Two phase dispersion in porous media. In Poromechanics II, Proc. 2nd Biot Conference on Poromechanics, grenoble, France,

- Burr, D. T ., Sudicky, E. A. and Naff, R. L. :** 1994, Nonreactive and reactive solute transport in three- dimensional heterogeneous porous media : Mean displacement, plume spreading, and uncertainty, *Water Resour Res* 30, 791-815.
- Carbonell, R. G. and Whitaker, S. :** 1983, Dispersion in pulsed systems ii : Theoretical developpements for passive dispersion in porous media , *Chemical Engineering Science* 38, 1795-1802.
- Charbeneau, R.J., Weaver, J.W., and Lien, B.K. :** 1994, The hydrocarbon spill screening model (HSSM) – Volume 2 : Theoretical background and sources codes. U.S EPA report EPA/600/R-94/039b, April 1995, Ada, Oklahoma, 259 p.
- Chella, R., Lasseux, D. and Quintard, M. :** 1988, Multiphase, multicomponent fluid flow in homogeneous and heterogeneous porous media, *Revue Institut Français du pétrole* 53(3), 335-346.
- Chen, Y., J. Glimm, D. Saltz, D. H. Sharp and Q. Zhang. :** 1996, "A Two-Phase Flow Formulation for the Rayleigh-Taylor Mixing Zone and its Renormalization Group Solution", *Proceedings of the 5th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing*, Stony Brook, NY.
- Chen, Y., J. Glimm, D. H. Sharp and Q. Zhang. :** 1996, "A Two Phase Flow Model of the Rayleigh-Taylor Mixing Zone", *Phys. of Fluids*, 8, 816-825.
- Christie, M. :** 2001, Flow in porous media scale up of multiphase flow, *Current Opinion in Collid Interface Science* 6(3), 236-241.
- Crolet J.M. :** 2004, *Problemes de la mécanique des os humains*.
- De Giorgi, E and Spagnolo, S. :** 1973, On the convergence of the operating integrals of the energy for elliptic of according to order. *Boll. One. Mat. Ital.* (4) 8, 391-411.
- De Marsily, G. :** 1988, *Modeling and Applications of Transport Phenomena in Porous Media*, Von Karman Institute for Fluid Dynamics.
- Eidsath, A., Carbonell, R. G., Whitaker, S and Herrmann, L. R. :** 1983, Dispersion in pulsed systems iii : omparaison between theory and experiment for packed beds, *Chemical Engineering Science* 38, 1803-1816.
- EPA. :** 1999a, Monitored natural attenuation of petroleum hydrocarbons. U.S. EPA Remedial technology Fact Sheet, EPA/ 600/F-98/0-21, May 1999, 3p.
- EPA. :** 1999b, Monitored natural attenuation of petroleum hydrocarbons. U.S. EPA Remedial technology Fact Sheet, EPA/ 600/F-98/0-21, May 1999, 3p.
- Fetter, C.W. :** 1993, *Contaminant hydrogeology*. Macmillan Publ. Co., New York.

- Fonseca L., Glimm J. and Lindquist W.B.** : 1992, "An analysis of field data permeability", Report No. SUNYSB-AMS-92-16, State Univ. of New York at Stony Brook.
- Geller, J. T and Hunt, J. R.** : 1993, Mass transfer from nonaqueous phase organic liquids in water-saturated porous media, *Water Resources Res* 29, 833-845.
- Glimm, J., Kim, H., Sharp, D., and Wallstrom, T.** : 1998, A stochastic analysis of the scale up roplem for flow in porous media. *Computational and Applied Mathematics*, 17, 67-79.
- Josselin De Jong, G.** : 1958, Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. - *Trans. Am. Geophys. Un.*, 39: 67-74.
- Graham, W. D. and McLaughlin, D. B.** : 1991, A stochastic model of solute transport in groudwater : Application to the borden, ontario, tracer test, *Water Resources Research* 27, 1345-1359.
- Keller, J.B.** : 1997, Ray and Asymptotic Methods in Underwater Sound Propagation, (with D.S. Ahluwalia), *Lecture Notes on Wave Propagation and Underwater Acoustics*, J.B. Keller and J.S. Papadakis, eds., Springer, New York, 14-85.
- Kohn, J. L. Lions.** : 1978, Homogenization and effective Moduli of Materials and Media., volume 1 of IMA Volumes in Mathematics and its Applications, pages 228-246.
- Korn G. et Korn. T.** : 1978, Guide des mathématiques“, « *Nauka* », Moscou.
- Krylov, N. and Bogoliubov, M.** : 1947, Introduction to Nonlinear Mechanics, English translation: Princeton Univ. Press, Princeton.
- Langlo P and Espedal M.S.** : 1994, Macrodispersion for two-phase, immiscible flow in porous media, *Advances in Water Resources* 17, p 297-316.
- Lee, H. L.** : 1979, Analysis of pseudo-continuum mass transfer in media with spatially periodic boundaries, *Chemical engineering Science* 34, 581-590
- Lenormand R.** : 2000, Homogenization of miscible and immiscible transient displacements in heterogeneous media, Congrès "Flow and transport in porous media" , Besançon, page 61.
- Mackay D. M., Robert P. V. and Cherry J. A.** : 1985, Transport of organic contaminants in groundwater., *Environ. Sci. Technol.*, pp.645-649.
- Marle, C. M., Simandoux, P., Pacsirszky, J. et Gaulier, C.** : 1967a, Etude du déplacement de fluides miscibles en milieu poreux stratifié, *Revue de l'Institut Français du Pétrole* 22, 272-294.

- Marle, C. M., Simandoux, P., Pacsirszky, J. et Gaulier, C.** : 1967b, Etude du déplacement de fluides miscibles en milieu poreux stratifié, *Revue de l'Institut Français du Pétrole* 22, 272-294.
- Mei, C.** : 1992, Method of homogenization applied to dispersion in porous media, *Transport in Porous Media* 29, 261-274.
- Montoglou, A. and Gelhar, L.W.** : 1989, Three-dimensional unsaturated flow in heterogeneous systems and implications on groundwater contamination : A stochastic approach, *Transport in Porous Media* 4, 529-548.
- Neuweiler, I., Attinger, S., Kinzelbach, W., and King, P.** : 2003, Large Scale Mixing for Immiscible Displacement in Heterogeneous Media. *Transport in Porous Media*, 51, 287-314.
- Nguetseng, G.** : 1989, A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization. *SIAM Math; Anal.*, 20, 608-629.
- Noetinger, B., and Artus, V.** : 2003, Macrodispersion approach for upscaling of two-phase, immiscible flow in heterogeneous porous media. In *Proc. ECMOR VII-8th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery*
- Panasenko, G.P.** : 1988a, Homogenization of processes in strongly heterogeneous media, *Doklady AN SSSR*, 298, no. 1, pp. 76--79.
- Panasenko, G.P.** : 1988b, Averaging the carcass constructions with random structures, *Doklady AN SSSR*, 244, no. 2. pp. 335—337.
- Panasenko, G.P.** : 1990, Numerical-Analytical Method of Multicomponent Homogenization for Equations with Contrast Parameters, *J. Vychislitelnoi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki*, 30, no. 2, pp. 243—253.
- Panfilov, M.** : 1990, Mean mode of porous flow in highly inhomogeneous media, *Soviet Physics Doklady*, 35, pp. 225—227.
- Panfilov, M.** : 2000, *Macroscale Models of flow through highly heterogeneous porous media – Theory and applications of transport in porous media*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 363 pages. ISBN 0-7923-6176-8.
- Panfilov M. and Floriat S.** : 2004, Non linear two-Phase Mixing in heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, v 57, pp. 347—375.
- Pankow, J.F. and Cherry, J.A.** : 1996, *Dense chlorinated solvents and other DNAPLs in groundwater*. Waterloo Press. Portland, or. 522.
- Parker J.C., Lenhard R.J. and Kuppusamy T.** : 1987, A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Resources Research*, Vol 23, N^o4, 618-624.

Plumb, O. A. and Whitaker, S. : 1988a, Dispersion in heterogeneous porous media i : Local volume averaging and large scale averaging., *Water Resources Research* 24(7), 913-926.

Plumb, O. A. and Whitaker, S. : 1988a, Dispersion in heterogeneous porous media ii : Predictions for stratified and two-scale averaging., *Water Resources Research* 24, 927-938.

Powers, S. E., Loureiro, C. O., Abriola, L. M and Weber, W. J. :1991, Theoretical study of the significance of nonequilibrium dissolution of nonaqueous phase liquids in subsurface systems, *Water Resources Res* 27, 463-477.

Powers, S. E., Abriola, L. M and Weber, W. J. : 1992, An experimental investigation of nonaqueous phase liquids dissolution in saturated subsurface systems : steady state mass transfer rates, *Water Resources Research* 28(10), 2691-2705.

Quintard, M. and Whitaker, S. : 1988, Two-phaseflow in heterogeneous porous media : The method of large-scale averaging, *Transport in Porous Media* 3, 357-413.

Quintard, M and Whitaker, S. : 1993a, One and two equation model for transient diffusion processus in two-phase systems, *Advances in Heat Transfer*, Academic Press, New York, pp. 369-464.

Quintard, M and Whitaker, S. : 1993b, Transport in ordered and disordered porous media : Volume-averaged equations, closure problems, and comparaison with experiments, *Chemical Engineering Science* 48, 2537-2564.

Quintard, M. and whitaker, S. :1994, convection, dispersion, andinterfacial transport of contaminant : homogeneous porous media, *Advances in Water Resources* 17, 221-239.

Raats, P. : 1965, Developpement of equations describing transport of mass and momentum in porous media, Ph. D. thesis, University of illinois, Champaign-urbana.

Saez, A., Otero, C and Rusinek, I. : 1989, The effective homogeneous behavior of heterogeneous porous media, *Transport in Porous Media* 4, 213-238.

Saffman, P. G. : 1960, Dispersion due to molecular diffusion and macroscopic mixing in flow through a network of capillaries, *Journ. Fluid. Mech.*, vol 7, pp. 194-208.

Sanchez-Palencia, E. : 1972, Equations aux dérivées partielles dans un type de milieux hétérogènes. *C R. Acad. Sci. Paris, Sér. A* 271, 395-398.

Sanchez-Palencia, E. : 1974, Sur certains problèmes physiques d'homogénéisation donnant lieu à des phénomènes de relaxation. *C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. A* 286, 903-906.

- Sanchez-Palencia, E.** : 1980, Méthodes d'homogénéisation pour l'étude des matériaux hétérogènes : phénomène de mémoire. Rend. Sem. Mat. Univ. Plitec. Torino 36, 15-25.
- Scheidegger, A. E.** :1954, Statistical hydrodynamics in porous media. J. Appl. Phys., 25(8): 994-1001.
- Scheidegger, A. E.** : 1961, General theory of dispersion in porous media. - J. Geophys. Res., 66(10): 3273-3278.
- Slattery, J.C.** : 1967, Flow of viscoelastic fluids through porous media, AIChE J.13, 1066-1071.
- Taylor, G. I.** : 1953, Dispersion of solute matter in a solvent flowing slowly through a tube. Proc. Royal Soc., A219, 186-203.
- Tartar, L.** : 1974, Remarks on homogenization. L. Ericksen, D. Kinderlehrer, R. V.
- Thomas G. W.** : 1982, Principles of hydrocarbon reservoir simulation., Int. Human. Resour. Dev. Corp., Boston, Mass., p.207.
- Tompson, A. F. B. and Gelhar, L. W.** : 1990, Numerical simulation of solute transport in three-dimensional randomly heterogeneous porous media, Water Resources Research 26, 2541-2562.
- Whitaker, S.** : 1967, Diffusion and dispersion in porous media, AIChE J.13, 420-427.
- Whitaker, S.** : 1986a, Flow in porous media I : A theoretical derivation of Darcy's law, Transport in Porous Media 1, 3-35.
- Whitaker, S.** : 1986b, Flow in porous media II : the governing equations for immiscible, two-phase flow, Transport in Porous Media 1, 105-125.
- Whitaker, S.** : 1986c, Transport process with heterogeneous reactions, in S. whitaker et A. E. Cassano (eds), Concepts and Design of Chemical Reactors, Gordon and Breach Publishers, New York, pp. 1-94.
- Whitaker, S.** : 1996, The forcheimer equation : A theoretical developpement, Transport in Porous Media 25, 21-27.

Notations

D	Coefficient de dispersion	$[L^2.T^{-1}]$
F	Fonction de distribution des phases (ou « fractional flow »)	[-]
g	Accélération de la pesanteur	$[L.T^{-2}]$
h	Charge hydraulique	[L]
K	Conductivité hydraulique	$[L.T^{-1}]$
k	Perméabilité intrinsèque	$[L^2]$
k_{ri}	Perméabilité relative	[-]
k_i	Perméabilité effective	$[L^2]$
p	Pression	$[M.L^{-1}.T^{-2}]$
P_c	Pression capillaire	$[M.L^{-1}.T^{-2}]$
S	Saturation en fluide du milieu poreux	[-]
U	Vitesse réelle du fluide	$[L.T^{-1}]$
V	Vitesse de Darcy du fluide	$[L.T^{-1}]$
z	Cote du point considéré	[L]
θ	fraction volumique de bloques dans une cellule	[-]
μ	Viscosité dynamique	$[M.L^{-1}.T^{-1}]$
ρ	Masse volumique	$[M.L^{-3}]$
ϕ	Porosité	[-]
$\langle \rangle$	Moyenne	[-]
t	Temps	[T]
τ	Temps adimensionnel	
α_T	Dispersivité transversale	
α_L	Dispersivité longitudinale	
Pe	Nombre de Peclet	
q	Flux	
ε	Echelle d'hétérogénéité	
σ	Inverse d'échelle d'hétérogénéité	
χ_k	Fonction cellulaire	
δ_{ki}	Symbole de Kronecker	
NAPL	Non Aqueous Phase Liquid	
DNAPL	Dense Non Aqueous Phase Liquid	
LNAPL	Light Non Aqueous Phase Liquid	

