



HAL
open science

Impact de la dispersion locale sur la macro dispersion

Anthony Beaudoin

► **To cite this version:**

Anthony Beaudoin. Impact de la dispersion locale sur la macro dispersion. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. hal-03390903

HAL Id: hal-03390903

<https://hal.science/hal-03390903>

Submitted on 21 Oct 2021

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.

Impact de la dispersion locale sur la macro dispersion

A. BEAUDOIN

Laboratoire Ondes et Milieux Complexes (LOMC - FRE CNRS 3102), Université du Havre, 25 rue Philippe Lebon, 76058 Le Havre

Résumé :

Le transport de solutés inertes est fortement influencé par l'hétérogénéité de l'écoulement souterrain. Cette hétérogénéité a pour origine à l'échelle des pores la distribution de la taille des pores et à l'échelle de l'aquifère la nature complexe des formations géologiques. La plupart des précédents travaux ont quantifié l'impact de cette hétérogénéité sur la macro dispersion en ignorant la dispersion locale. Dans ce travail, nous revisitons la méthode de marche aléatoire afin de quantifier l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion.

Abstract :

The migration of inert solutes is strongly influenced by the heterogeneity of the groundwater flow. The origin of this heterogeneity is at the pore scale the distribution of pore size and at the aquifer scale the complex nature of geological formations. Most previous works have quantified the impact of this heterogeneity on the macro dispersion by neglecting the local dispersion. In this work, we revisit the random walk tracking method in order to study the influence of the local dispersion on the macro dispersion.

Mots clefs : Dispersion, Hétérogénéité, Méthode particulière, Méthode Monte carlo

1 Introduction

Dans les formations naturelles, la migration d'un soluté inerte est gouvernée par deux mécanismes. La convection est un processus d'entraînement du soluté par l'écoulement d'eau souterrain. La dispersion est un processus d'étalement du soluté. A l'échelle des pores, l'hétérogénéité de la distribution de la taille des grains provoque des variations de l'écoulement, engendrant un étalement du soluté, appelé dispersion locale [1] [2]. A l'échelle de l'aquifère, l'hétérogénéité des formations géologiques provoque des variations de la perméabilité générant un écoulement hétérogène. Cet écoulement hétérogène induit un étalement du soluté, appelé macro dispersion [3] [4]. La caractérisation de la migration d'un soluté inerte dans un milieu poreux hétérogène reste un thème ouvert [5] [6]. Une manière classique de prendre en compte l'influence de cette hétérogénéité est d'utiliser une approche de type Monte Carlo afin de déterminer les coefficients de dispersion comme des fonctions du temps et de trouver les coefficients asymptotiques de dispersion. Dans cette approche stochastique, les simulations consistent à calculer un champ de vitesse sur de grands domaines et à simuler le transport de solutés sur des grandes échelles de temps [7] [8]. L'utilisation intensive des simulations de Monte Carlo a permis d'étudier sans ambiguïté le comportement asymptotiques de la macro dispersion [9]. Cependant dans ces études, le comportement asymptotique de la macro dispersion est obtenu en négligeant la dispersion locale. Pourtant il a été observé que la magnitude de la macro dispersion due à l'hétérogénéité de la perméabilité est affectée par la présence de la dispersion locale [10]. Pour étudier l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion, nous avons développé un modèle numérique basé sur une approche de type Monte Carlo. Le modèle numérique est totalement parallélisé afin de réaliser un grand nombre de simulations de Monte Carlo sur des grandes grilles de calcul [11] [12]. L'écoulement de l'eau souterrain est résolu sur une grille régulière avec une méthode de volumes finis qui permet de satisfaire localement la masse et les flux sur les éléments. Le transport du soluté est résolu avec la méthode particulière avec marche aléatoire. Cette méthode est basée sur une représentation de la concentration du soluté par un nuage de particules. La résolution du problème de transport consiste alors à simuler l'évolution de la position et du poids des particules. Cette méthode offre un certain nombre d'avantages comme l'absence de diffusion numérique et la bonne performance pour une précision correcte [13] [14]. Cependant la prise en compte de la dispersion locale avec un écoulement d'eau souterrain hétérogène nécessite de prendre certaines précautions lors de son utilisation. Nous revisitons ces précautions pour introduire correctement la dispersion locale afin d'en étudier l'impact sur la macro dispersion [15] [16].

2 Description du problème

Le domaine de calcul est une grille rectangulaire 2D, de dimensions L_x et L_y . La direction de l'écoulement est parallèle à L_x . Le milieu poreux est supposé isotrope et caractérisé par une perméabilité aléatoire K . Cette perméabilité K suit une distribution logarithmique $Y = \ln(K)$, définie par une moyenne m_y et une fonction de covariance C_y :

$$C_y(\mathbf{r}) = \sigma_y^2 \exp(-|\mathbf{r}|^2/\lambda_y) \quad (1)$$

σ_y^2 et λ_y désignent la variance et la longueur de corrélation. La longueur de corrélation λ_y est comprise entre 0,1 m et 100 m ; et la variance σ_y^2 entre 0 et 9. \mathbf{r} est un vecteur de séparation entre deux vecteurs positions \mathbf{X} et \mathbf{X}' . Etant permanent et sans sources ni puits, l'écoulement est décrit en couplant l'équation de conservation de masse avec la loi de Darcy :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad \text{avec} \quad \mathbf{V} = -K\nabla h \quad (2)$$

\mathbf{V} et h désignent la vitesse de Darcy et la charge hydraulique. Pour les conditions aux limites, on impose une condition de Neumann $\partial h/\partial \mathbf{n} = 0$ sur les frontières supérieure et inférieure. Sur les autres frontières, on impose deux conditions de Dirichlet $h = 0$ et L_x m. A l'échelle de Darcy, la migration d'un soluté inerte est décrite par l'équation de convection diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{V}) - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C) = 0 \quad \text{avec} \quad \mathbf{D} = (\alpha_T|\mathbf{V}| + D_m)\mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T)\mathbf{V}\mathbf{V}^t/|\mathbf{V}| \quad (3)$$

où C est la concentration en soluté, $|\mathbf{V}|$ le module de la vitesse de Darcy, \mathbf{D} le tenseur de dispersion, \mathbf{I} le tenseur unité, D_m le coefficient de diffusion, α_L et α_T les dispersivités longitudinale et transversale. Le soluté est injecté ponctuellement dans un milieu poreux initialement propre. Pour les autres conditions aux limites, on impose un flux nul sur les frontières inférieure et supérieure du domaine de calcul. Sur les frontières de gauche et de droite du domaine de calcul, une concentration nulle est imposée. Le rapport entre les effets de la diffusion moléculaire et la convection est mesuré par le nombre de Péclet $Pe = \lambda_y \mathbf{V}/D_m$ dont les valeurs sont comprises entre 100 et l'infini. Infini désigne un régime sans diffusion moléculaire. Les observations sur le terrain montrent que la dispersivité transversale α_T est généralement plus faible que la dispersivité longitudinale α_L . Le rapport des dispersivités est donné par $\epsilon = \alpha_L/\alpha_T$. Sa valeur est comprise entre 10 et 1000. La dispersivité longitudinale α_L est comprise entre 0,01 et 1 m.

3 Modèle numérique

La perméabilité K est générée avec une simulation spectrale FIM (Fourier Integral Method). La transformée de Fourier est évaluée à l'aide de la librairie FFTW. Cette librairie calcule la transformée de Fourier sur un cluster de processeurs. La grille est alors distribuée sur les processeurs selon les colonnes. Les équations d'écoulement sont discrétisées sur une grille régulière en utilisant une méthode de volumes finis, permettant de conserver localement la masse et les flux sur les éléments. Dans les deux directions, la maille de la grille est fixée à $\Delta x = \Delta y = 1$ m. Le système linéaire $Ax = B$ est caractérisé par une matrice creuse A , définie positive et symétrique. La solution x est la charge hydraulique et le second membre B représente les conditions de Dirichlet. Nous résolvons ce système linéaire avec la librairie HYPRE contenant un algorithme parallèle multigrille V-cycle, appelé SMG (Structure Multi-Grid). L'équation de transport est résolue avec une méthode particulière dont les deux avantages sont absence de diffusion numérique et bonne performance pour une précision correcte. Dans la méthode particulière avec marche aléatoire, chaque particule se déplace dans le milieu poreux sous l'action d'un effet convectif représenté par la vitesse moyenne d'écoulement et d'un effet dispersif représenté par un mouvement aléatoire. Ce déplacement est donné par l'équation de Langevin :

$$d\mathbf{X} = \mathbf{A}dt + \mathbf{B}dW(t) \quad (4)$$

où le terme \mathbf{A} est un déplacement déterministe donné par la vitesse de Darcy et une contribution du tenseur de dispersion \mathbf{D} . Le terme \mathbf{B} représente un processus aléatoire qui incorpore la diffusion moléculaire \mathbf{D}_m et la dispersion locale \mathbf{D} . Le terme $dW(t)$ représente un processus Wiener décrivant un mouvement brownien. Ce terme est un vecteur de nombres aléatoires qui suivent des distributions gaussiennes définies par une moyenne nulle et une variance de 1 :

$$\langle dW \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle dW(t)dW(t) \rangle = \mathbf{I}dt \quad (5)$$

où les crochets représentent la moyenne. Comme il n'y a pas de réaction chimique, le mouvement d'une particule est ainsi statistiquement indépendant des autres. Si un grand nombre de particules est déplacé simultanément, la probabilité de présence P satisfait alors l'équation de Fokker-Plank :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{A}P) - \nabla \nabla : \left(\frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^T p \right) = 0 \quad (6)$$

Cette équation de Fokker-Plank peut être mise sous la forme d'une équation de transport :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\left(\mathbf{A} - \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{B} \bar{\mathbf{B}} \right) P \right] + \nabla \cdot \left[\frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \bar{\mathbf{B}} \nabla P \right] \quad (7)$$

En comparant l'équation de Fokker-Plank modifiée à l'équation de convection dispersion, on identifie les termes suivant :

$$P = \frac{N_a}{N} C \quad , \quad \mathbf{A} = \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{D} \quad \text{et} \quad \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \bar{\mathbf{B}} = \mathbf{D} \quad (8)$$

où N représente le nombre de particules et N_a est le nombre d'Avogadro. Le terme additionnel $\nabla \cdot \mathbf{D}$ est dû à la différence entre l'équation de Fokker-Planck et l'équation de convection dispersion. La signification physique de ce terme est un flux de particules engendré par une variation du tenseur de dispersion provoquée par une variation de vitesse entre deux points. Négliger ce terme provoque une accumulation anormale de particules dans les régions de faible dispersion. La détermination du terme \mathbf{B} est réalisée à l'aide de l'approche basée sur une diagonalisation de la matrice \mathbf{D} . On utilise un simple schéma d'Euler explicite pour l'intégration en temps de l'équation de Langevin :

$$X_i^{n+1} = X_i^n + A_i \Delta t + \sqrt{\Delta t} \sum_j B_{ij} Z_j \quad (9)$$

Pour satisfaire le principe de conservation de la masse, des précautions sont à prendre en compte lorsque des discontinuités du tenseur de dispersion \mathbf{D} sont présentes. Ces précautions sont basées sur la notion de barrière réfléchissante. Lorsqu'une particule traverse une discontinuité un coefficient de réflexion P_u est calculé :

$$P_u = \frac{\sqrt{D_{n1}} - \sqrt{D_{n2}}}{\sqrt{D_{n1}} + \sqrt{D_{n2}}} \quad \text{avec} \quad D_{ni} = D_{Li} \frac{\mathbf{U}_{Li} \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{U}_{Li}|} + D_{Ti} \frac{\mathbf{U}_{Ti} \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{U}_{Ti}|} \quad \text{et} \quad i = 1, 2 \quad (10)$$

avec D_{ni} le coefficient de dispersion de la couche i normal à la frontière, \mathbf{U}_{Li} et \mathbf{U}_{Ti} vecteurs propres associés aux valeurs propres D_{Li} et D_{Ti} du tenseur de dispersion \mathbf{D} . \mathbf{U}_{Li} est égale au vecteur vitesse \mathbf{V} et \mathbf{U}_{Ti} est perpendiculaire à ce même vecteur vitesse \mathbf{V} . Le coefficient de réflexion P_u est comparé à un nombre aléatoire R obtenu à partir d'une distribution uniforme entre 0 et 1. Si R est plus grand que P_u , la particule passe la discontinuité sur un pas de temps $\delta t_2 = \delta t - \delta t_1$ avec δt_1 le pas de temps nécessaire pour atteindre la discontinuité. Dans le cas contraire, elle est réfléchiée. Cette méthode particulière est facilement parallélisable puisque les particules inertes n'interagissent pas entre elles. La difficulté réside dans l'accès à des données distribuées sur les processeurs. Gérant un sous domaine de la grille, chaque processeur calcule la trajectoire de la particule présentant dans son sous domaine. Il communique aux processeurs voisins les particules sortantes de son sous domaine par des opérations, send et recv, non bloquantes et assurées par la librairie MPI.

4 Résultats et discussion

4.1 Validation

Pour valider le modèle numérique, deux tests sont réalisés. Le premier test permet de vérifier la convergence de la méthode de marche aléatoire. On injecte un nombre N_p variable de particules dans un domaine homogène soumis à un écoulement uniforme $\mathbf{V} = (V_x = 1\text{m/s}, V_y = 0\text{m/s})$. La dispersivité longitudinale α_L est prise égale à 1 m. Cela correspond au cas extrême de la dispersion locale observable sur le terrain. Le ratio ϵ des dispersivités est fixé à 10. On impose également un régime de transport sans la diffusion moléculaire $Pe = \text{infini}$ afin d'observer uniquement l'effet de la dispersion locale. Sur la figure 1, l'évolution temporelle des macro dispersions longitudinale Dl (gauche) et transversale Dt (droite) est représentée en fonction du nombre N_p de particules injectées. On observe qu'il faut un nombre de particules $N_p = 5000$ pour atteindre une convergence sur l'estimation des macro dispersions. Le deuxième test permet de vérifier la validité de la technique de barrière réfléchissante. Dans un milieu bicouche, on injecte sur toute la largeur du domaine de calcul un nombre de particules équivalent dans les deux couches, $N1$ et $N2$. La couche i est caractérisée par un coefficient de dispersion D_i . Le rapport $D1/D2$ varie entre 1 et 20. Si la technique de barrière réfléchissante fonctionne, le ratio $N1/N2$ reste égale à 1. Sur la figure 2, l'évolution du ratio $N1/N2$ en fonction du ratio $D1/D2$ est représentée pour deux pas de temps $\delta t = 0,5$ (gauche) et 0,05 (droite). D'autres méthodes ont été également implémentées pour compléter le test. La technique de barrière réfléchissante utilisée dans le modèle numérique est celle développée par Semra *et al.* (1993). On observe que la technique de barrière réfléchissante permet de conserver un ratio $N1/N2$ proche de 1 pour la gamme de ratios $D1/D2$ testés. La réduction du pas de temps δt permet d'améliorer la précision de la méthode numérique.

4.2 Exploitation

Le modèle numérique est maintenant utilisé par quantifier l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion. Pour atteindre cet objectif, des simulations de Monte Carlo sont réalisées. Une valeur de la macro

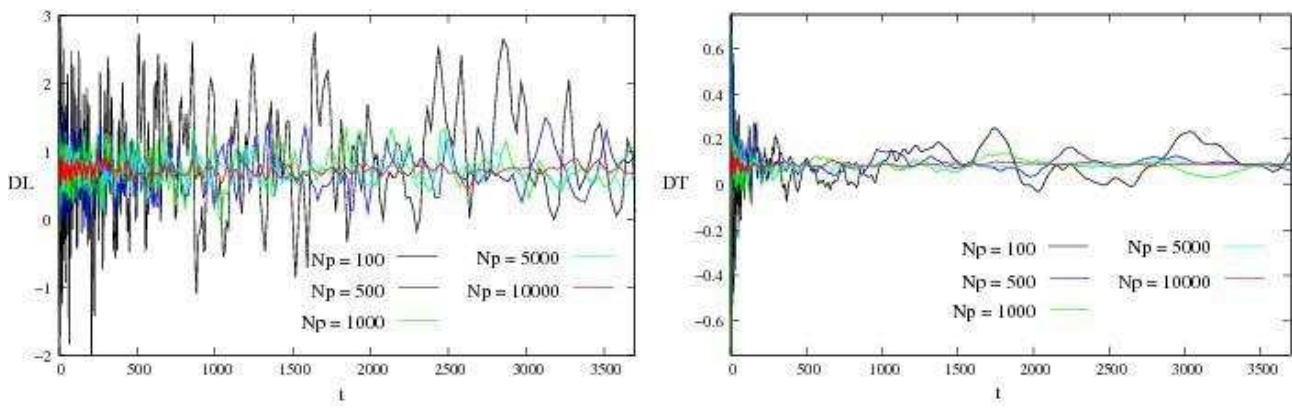


FIG. 1 – Evolution temporelle des macro dispersions longitudinale Dl (gauche) et transversale Dt (droite), obtenue en injectant un nombre N_p variable de particules dans un domaine homogène avec $\alpha_L = 1$ m, $\epsilon = 10$ et $Pe = \text{infini}$.

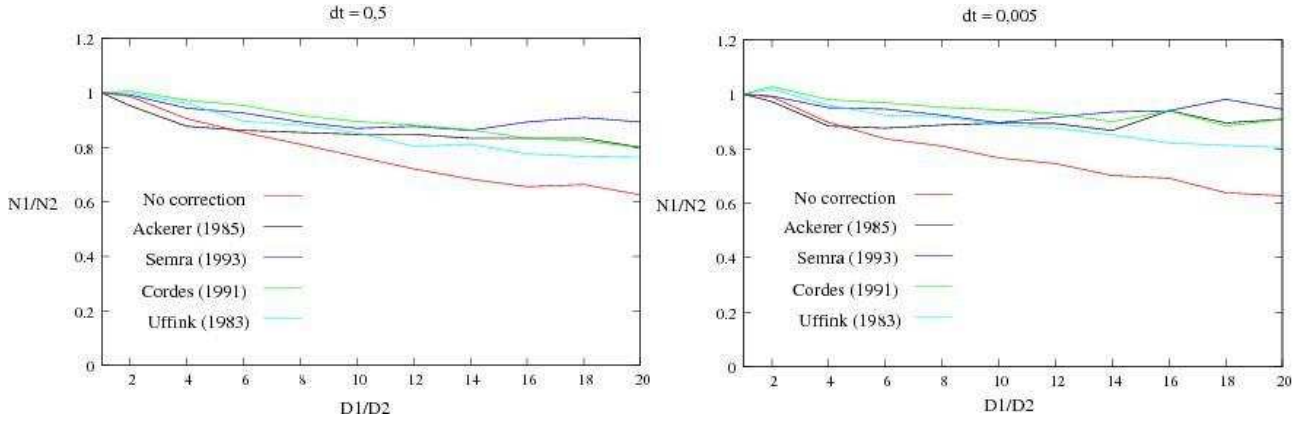


FIG. 2 – Evolution du ratio $N1/N2$ en fonction du ratio $D1/D2$, obtenue pour différentes méthodes de prise en compte de la discontinuité et deux valeurs de pas de temps $\delta t = 0,5$ (gauche) et $0,05$ (droite).

dispersion est obtenue en moyennant 100 simulations de Monte Carlo dans lesquelles 5000 particules sont injectées dans une grille de taille $n_x = n_y = 2048$ avec un pas en espace $\Delta x = \Delta y = 1$ m. La variance σ_y^2 de la perméabilité varie entre 0 et 9. La longueur de corrélation λ_y et la moyenne de la perméabilité m_y sont fixées respectivement à 10 m et 1 m/s. Les valeurs numériques des macro dispersions longitudinale Dl et transversale Dt sont comparées à celles données par les solutions analytiques proposées par Gelhar et Axness [10] :

$$Dl = \sigma_y^2 \lambda_y \quad \text{et} \quad Dt = \frac{\sigma_y^2 \alpha_L}{8} \left(1 + 3 \frac{\alpha_T}{\alpha_L} \right) \quad (11)$$

Dans cette pré - étude, nous négligeons l'effet de la diffusion moléculaire en imposant le nombre de Péclet à $Pe = \text{infini}$. Deux valeurs de la dispersivité longitudinale sont testées $\alpha_L = 0,5$ m et 1 m. Ces valeurs de dispersivité longitudinale α_L ont été choisies de telle manière à se placer à la limite du critère de validation des solutions analytiques de Gelhar et Axness, $\alpha_L / \lambda_y \ll 1$. Cela permet de tester le domaine de validation de ces solutions analytiques. Pour la dispersivité transversale α_T , le rapport des dispersivités est fixé à $\epsilon = 100$. Sur la figure 3, la macro dispersion longitudinale Dl est représentée en fonction de la variance σ_y^2 . La macro dispersion transversale Dt est représentée en fonction de $\sigma_y^2 \alpha_L$ sur la figure 4. On observe que pour des faibles valeurs de la variance σ_y^2 , les valeurs numériques des macro dispersions longitudinale et transversale sont proches de celles données par les solutions analytiques de Gelhar et Axness. Et ces résultats sont valables pour des dispersivités longitudinales fortes qui placent les simulations numériques à la frontière du domaine de validation des solutions analytiques de Gelhar et Axness. Pour $\sigma_y^2 > 1$, une divergence entre les valeurs numériques et analytiques apparaît. Des corrections doivent alors être apportées à ces solutions analytiques. Les solutions analytiques ne semblent plus être des relations linéaires de la variance σ_y^2 mais des lois polynomiales.

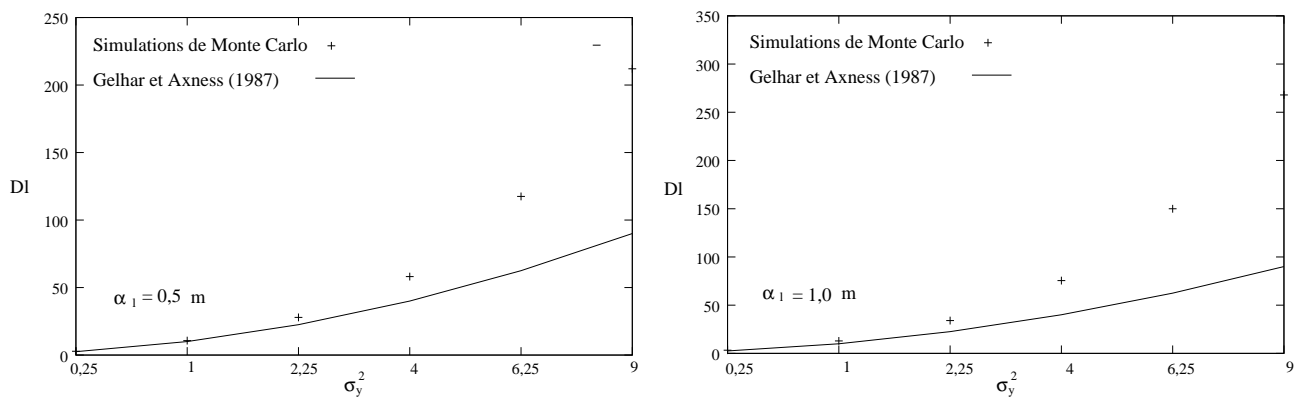


FIG. 3 – Macro dispersion longitudinale Dl en fonction de σ_y^2 , obtenue avec les simulations de Monte Carlo et la solution analytique de Gelhar et Axness pour $\alpha_L = 0,5$ m (gauche) et 1 m (droite), $\epsilon = 100$ et $Pe = \text{infini}$.

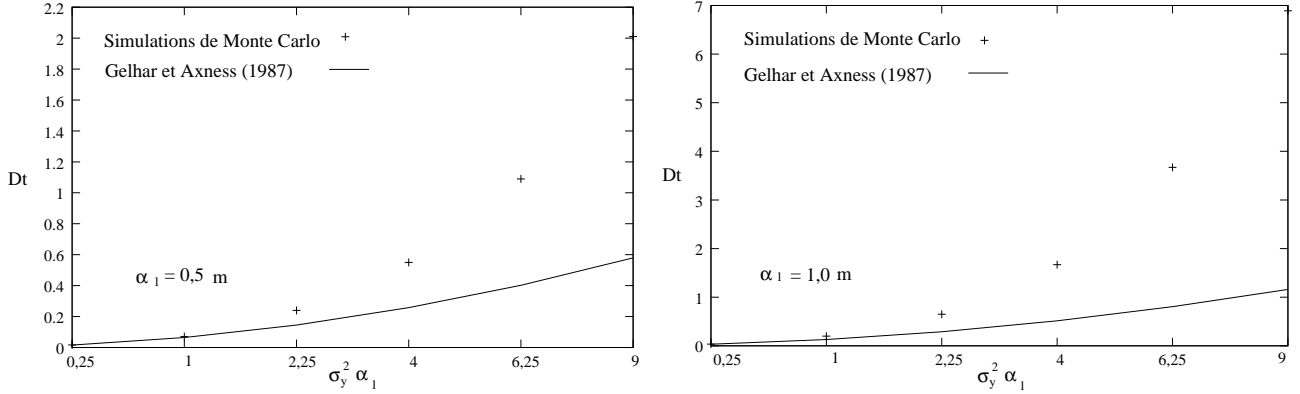


FIG. 4 – Macro dispersion transversale Dt en fonction de $\sigma_y^2 \alpha_L$, obtenue avec les simulations de Monte Carlo et la solution analytique de Gelhar et Axness pour $\alpha_L = 0,5$ m (gauche) et 1 m (droite), $\epsilon = 100$ et $Pe = \text{infini}$.

5 Conclusion

Dans ce travail, nous présentons une étude de l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion à l'aide d'une approche de type Monte Carlo. Dans cette approche de type Monte Carlo, le problème de transport est résolu avec une méthode particulière avec marche aléatoire. Pour appliquer la méthode particulière avec marche aléatoire dans le cas d'écoulements hétérogènes, des précautions doivent être prises. La vitesse de déplacement des particules doit être corrigée avec un gradient de tenseur de dispersion pour maintenir l'équivalence entre l'équation de convection dispersion et l'équation de Fokker-Plank. Pour tenir compte des discontinuités du tenseur de dispersion dues à la résolution des équations d'écoulement sur une grille, une technique de barrière réfléchissante est implémentée dans le modèle numérique. Après deux tests de validation, un début d'étude de l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion est amorcé. Cette pré - étude montre que les solutions analytiques de Gelhar et Axness permettent de quantifier l'impact de la dispersion locale sur la macro dispersion pour des faibles valeurs de la variance σ_y^2 de la perméabilité K et des fortes valeurs de la dispersivité longitudinale α_L . Pour $\sigma_y^2 > 1$, des corrections doivent être apportées à ces solutions analytiques. Les solutions analytiques ne semblent plus être des fonctions linéaires de la variance mais des lois polynomiales. Une étude de sensibilité plus complète doit être menée pour déterminer ces lois polynomiales.

Références

- [1] Bear J. Hydraulics of groundwater. 1979.
- [2] De Marsily G. Quantitative hydrogeology : groundwater hydrology for engineers. 1986.
- [3] Dagan G. Flow and Transport in Porous Formation. 1989.
- [4] Gelhar L., Gutjahr A., and Naff R. Stochastic analysis of macro dispersion in a stratified aquifer. Water Resources Research, 15, 1387–1979, 1979.
- [5] Neuman S. and Tartakovsky M. Perspective on theories of non-fickian transport in heterogeneous media. Advances in Water Resources, 2008.
- [6] Frappiat C. and Holeyman A. A comparative review of upscaling methods for solute transport in heterogeneous porous media. Journal of Hydrology, 362, 150–176, 2008.

- [7] Gelhar L. Stochastic Subsurface Hydrology.
- [8] Salandin P. and Fiorotto V. Solute transport in highly heterogeneous aquifers, water resources research. *Water Resources Research*, 39, 1998.
- [9] Dreuzy J., Beaudoin A., and Erhel J. Asymptotic dispersion in 2d heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations. *Water Resources Research*, 43, 2007.
- [10] Gelhar L. and Axness C. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19, 161–180, 1983.
- [11] Beaudoin A., Dreuzy J., and Erhel J. An efficient parallel particle tracker for advection-diffusion simulations in heterogeneous porous media. *Europar 2007*, 2007.
- [12] Beaudoin A., Dreuzy J., and Erhel J. A comparison between a direct and a multigrid sparse linear solvers for highly heterogeneous flux computations. *European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD 2006*, P. Wesseling, E. Onate and J. Périaux (Eds), TU Delft, The Netherlands, 2006, 2006.
- [13] Kinzelbach W. Simulation of pollutant transport in groundwater with the random walk method, groundwater monitoring and management. *Proceedings of the Dres-den Symposium, March 1987, IAHS Publi. N173*, 1990.
- [14] Labolle E., Quastel G., and Gravner J. Diffusion processes in composite porous media and their numerical integration by random walks : Generalized stochastic differential equations with discontinuous coefficients. *Water Resources Research*, 36, 651–662, 2000.
- [15] Hoteit H., Mose R., Younes A., Lehmann F., and Ackerer P. Three-dimensional modeling of mass transfer in porous media using the mixed hybrid finite elements and the random walk methods. *Mathematical Geology*, 34, 2002.
- [16] Semra K., Ackerer P., and Mosé R. *Comput. Mech.*, 1993.