



HAL
open science

Changement d'échelle pour la caractérisation et la modélisation

Michel Quintard

► **To cite this version:**

Michel Quintard. Changement d'échelle pour la caractérisation et la modélisation. 3ème Rencontres nationales de la recherche sur les sites et sols pollués, Nov 2014, Paris, France. pp.0. hal-03666262

HAL Id: hal-03666262

<https://hal.science/hal-03666262v1>

Submitted on 12 May 2022

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.



Open Archive TOULOUSE Archive Ouverte (OATAO)

OATAO is an open access repository that collects the work of Toulouse researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in : <http://oatao.univ-toulouse.fr/>
Eprints ID : 12183

To cite this version : Quintard, Michel Changement d'échelle pour la caractérisation et la modélisation. (2014) In: 3ème Rencontres nationales de la recherche sur les sites et sols pollués, 18 November 2014 - 19 November 2014 (Paris, France)

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository administrator: staff-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr



3e Rencontres nationales de la recherche sur les sites et sols pollués

Changement d'échelle pour la caractérisation et la modélisation

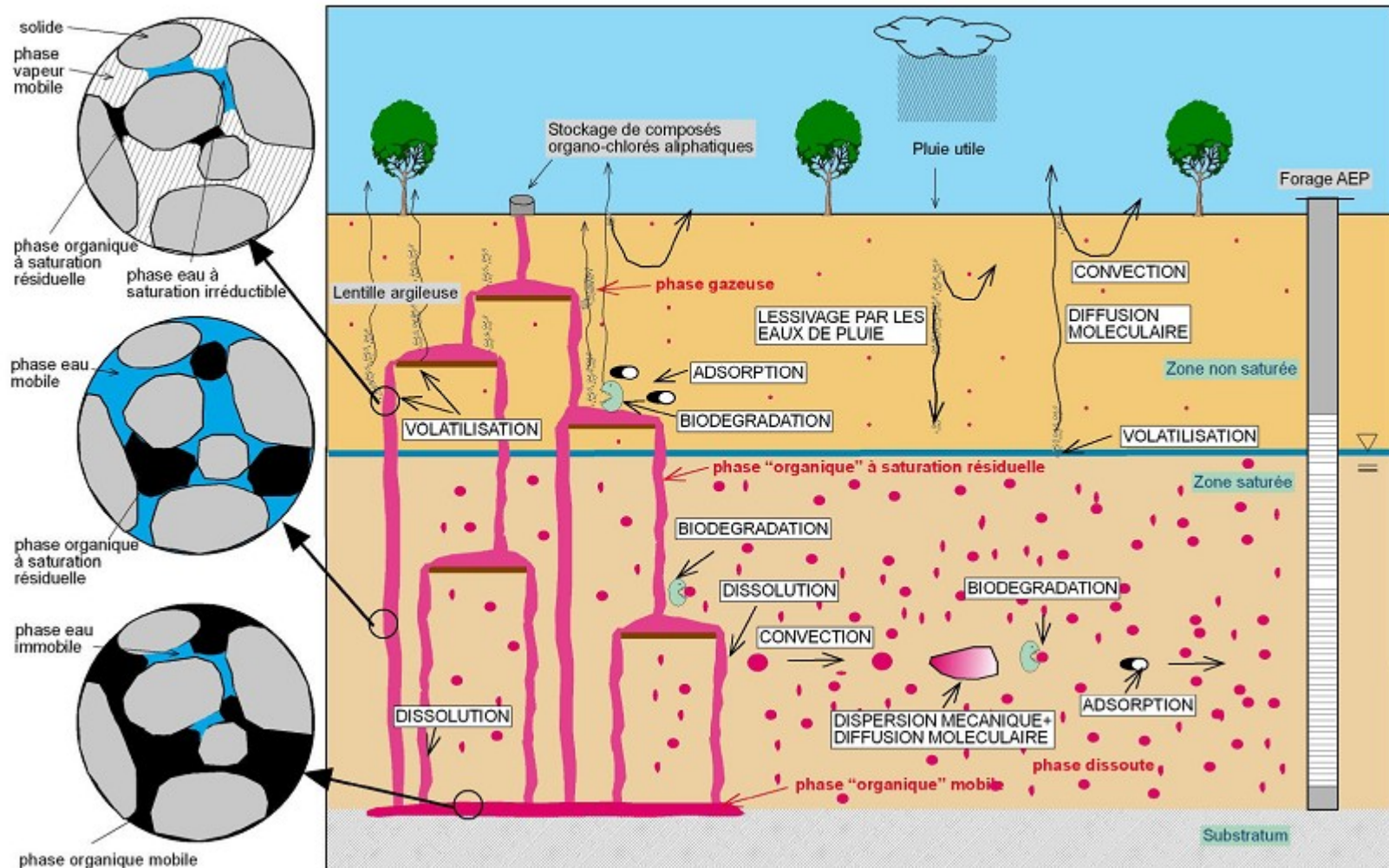
Michel Quintard

¹ Université de Toulouse ; INPT, UPS ; IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse) ; Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France

² CNRS ; IMFT ; F-31400 Toulouse, France

Aspect Multi-Physique

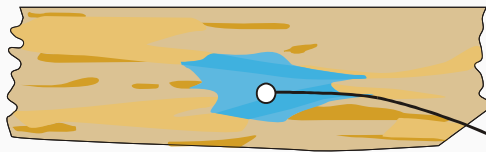
Migration dans le milieu souterrain des composés organo-chlorés aliphatiques



Aspect Multi-Echelle

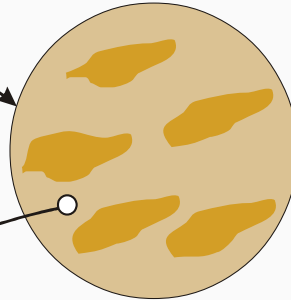
V. Field (Formation) Scale

1 m to 10's of m



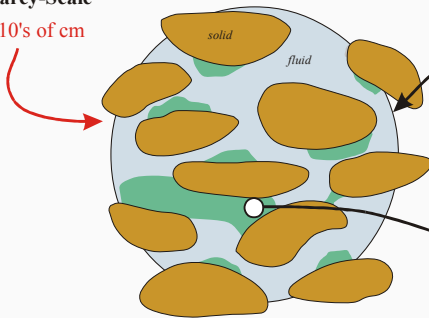
IV. Heterogeneity Scale

1 cm to 1 m



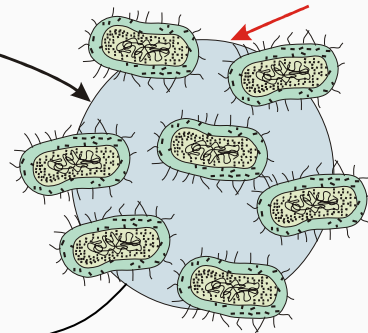
III. Darcy-Scale

1 cm to 10's of cm



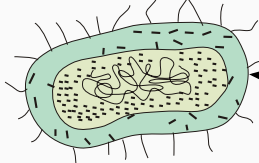
II. Biofilm-Scale

10's of μm to 100's of μm



I. Cell-Scale

1 μm to 10's of μm



QUESTIONS:

- Forme mathématique des équations de transport pour une échelle donnée?

- Estimation des propriétés effectives?

Exemple: taux de réaction

- Monod à l'échelle de la cellule

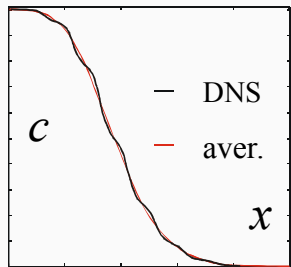
- → couplage réaction / transport

- → plusieurs modèles possibles aux échelles supérieures: Monod jusqu'à "réaction" du 1er ordre

Aspect Multi-Echelle

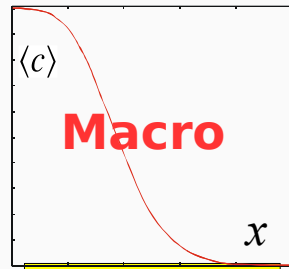
Exemple simple ☺!

Original Micro



$$\nabla \cdot (\mathbf{k}(x) \cdot \nabla c) = 0$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{k}(x) \cdot \nabla (\langle c \rangle + \tilde{c}) \rangle = 0$$



Macro

$$c = \langle c \rangle + \tilde{c}$$



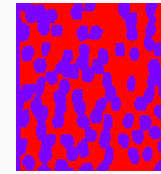
**Déviaton
Micro**

$$\nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla \tilde{c}) = -\nabla \cdot (\tilde{\mathbf{k}} \cdot \nabla \langle c \rangle) + \nabla \cdot \langle \mathbf{k} \cdot \nabla \tilde{c} \rangle$$

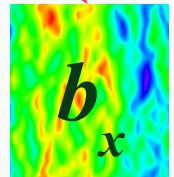
“Fermeture”:

$$\tilde{c} = \mathbf{b} \cdot \nabla \langle c \rangle + O(\ell^2/L^2)$$

Séparation
des échelles



- Tomographie
- Reconstruction
- Géostatistique
- ...



**Propriétés
effectives**

$$\nabla \cdot (\mathbf{K}_{eff} \cdot \nabla \langle c \rangle) = 0$$

**Macro-scale
Equation**

$$\mathbf{K}_{eff} = \langle \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{k} \cdot \nabla \mathbf{b} \rangle$$

Outils mathématiques: homogénéisation, prise de moyenne, ...

Aspect Multi-Echelle: état de l'art... (qqs exemples)



- **Monophasique ($Re \sim 0$):** Darcy à toutes les échelles si séparation des échelles, i.e., $l \ll l_H$ (mais pbs: milieux fracturés, écoulement radial près des puits, effets Knudsen > 1 (e.g., argiles), etc...)

- **Dispersion:**

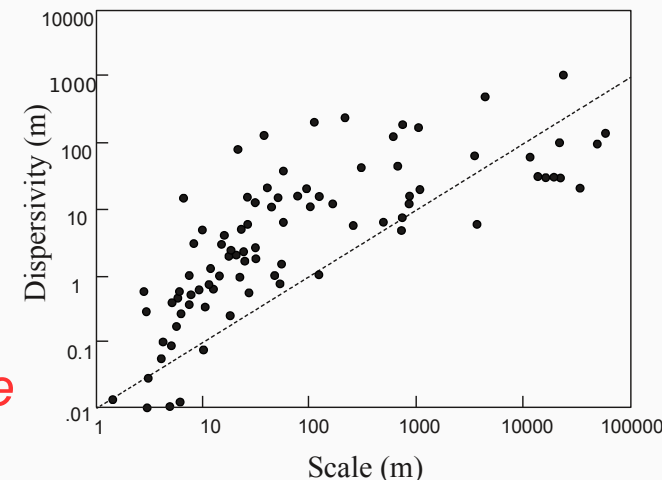
- Potentialité pour dispersion « anormale » (i.e., non-fickienne), effets double-milieux, etc... → *modèles mathématiques différents de l'équation classique de dispersion*

(Gelhar and Axness, 1983)

- Si équation de dispersion classique:

$$\frac{\partial \varepsilon_{\beta} C_{\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}_{\beta} C_{\beta}) = \nabla \cdot (\varepsilon_{\beta} \mathbf{D}_{\beta}^* \cdot \nabla C_{\beta})$$

→ alors la *dispersivité dépend de l'échelle de modélisation* (mais simple palliatif) !



Aspect Multi-Echelle: état de l'art... (qqs exemples)

• Multiphasique:

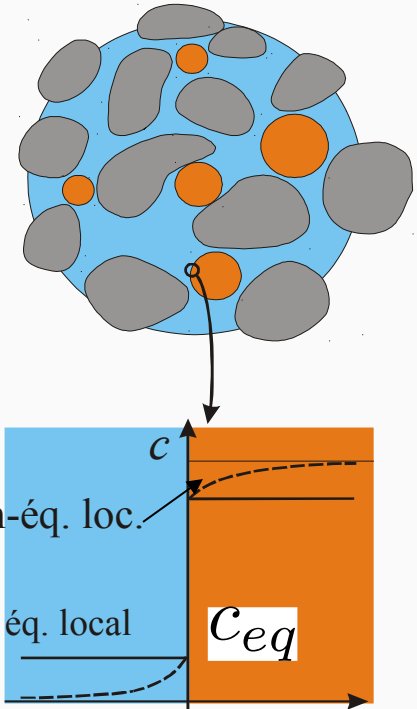
- Modèle classique « Darcy généralisé » est utilisé, ...mais controversé dans de nombreux contextes: milieux très ou très peu perméables, phases discontinues (sparging), hétérogénéités, instabilités, ...

• Dissolution de NAPL:

$$\frac{\partial (\varepsilon_w C_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_w C_w \mathbf{U}_w) = \nabla \cdot (\varepsilon_w \mathbf{D}_w^* \cdot \nabla C_w) - \alpha (C_w - c_{eq})$$

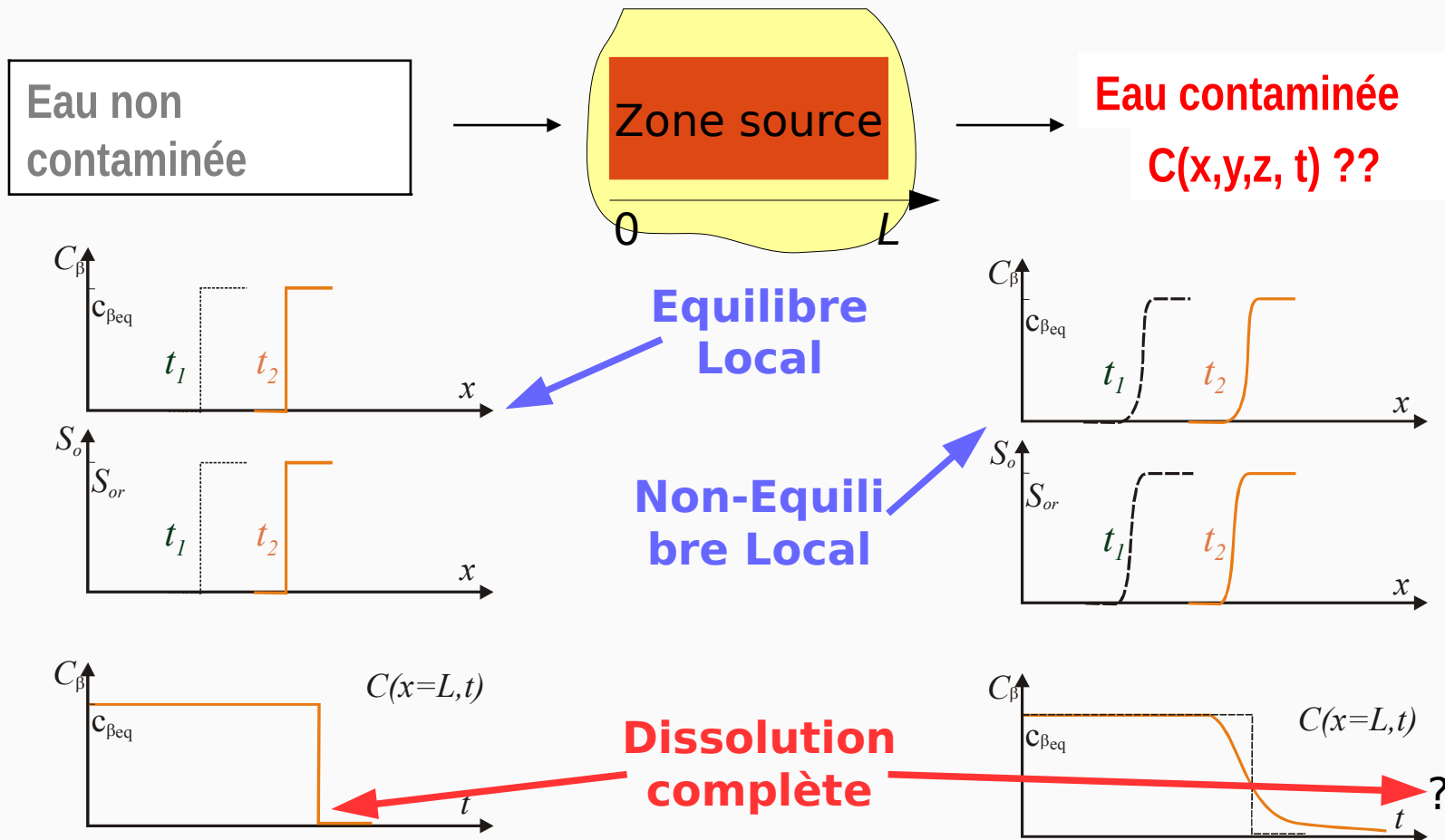
Coefficient d'échange

- $\alpha \gg 1$: Equilibre local $\rightarrow C_w = c_{eq}$
- $\alpha \sim 0$: Non-Equilibre local $\rightarrow C_w < c_{eq}$
- Implications ?



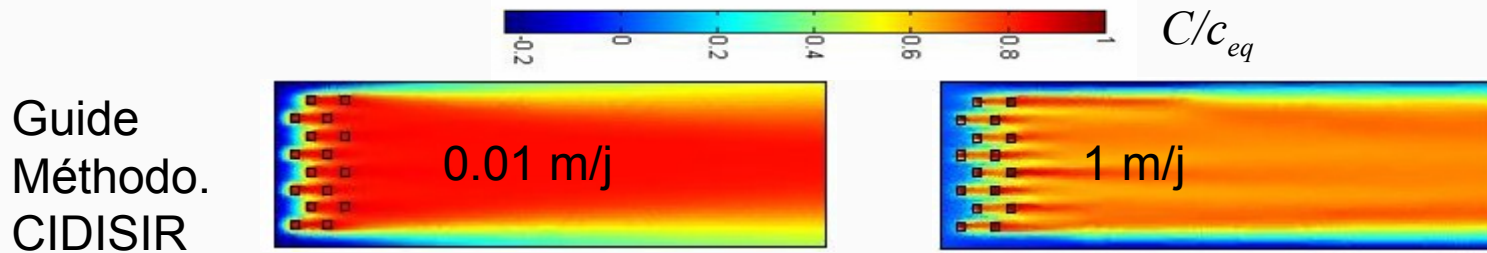
Aspect Multi-Echelle: dissolution de la zone source...

- Enjeux: ERS, étude d'impact, ...



Aspect Multi-Echelle: dissolution de la zone source...suite!

- **Effet des hétérogénéités à échelle de Darcy**
(origine : instabilités hydrodynamiques ou hétérogénéité
(\Rightarrow dissolution différentielle) \rightarrow saturation hétérogène)



\rightarrow même si équilibre local à éch. l , potentiellement non-équilibre local à éch. l_H !

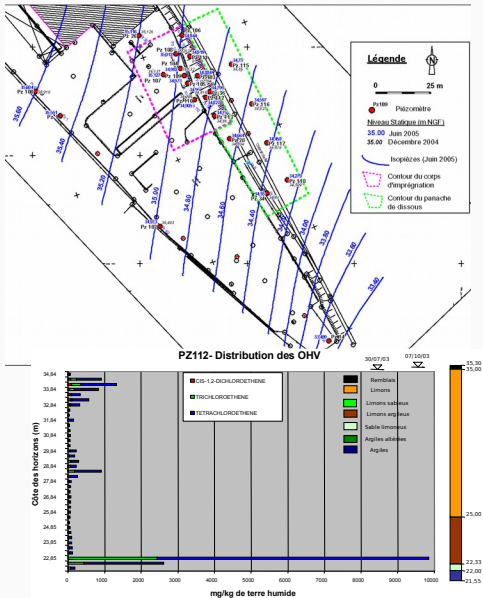
Discussion (cf. CIDISIR): $\alpha \sim 1/l^2$, $l \sim 10^{-3}$ à 1 m soit $\alpha^{-1} \approx 10^{-3}$ à 10^9 s

- Milieu à $S \approx S_{or}$: $l \approx d_p \Rightarrow$ Eq. Local
- $S \ll S_{or}$: $l > d_p \Rightarrow$ Pot. Non Eq. Local
- Effet des hétérogénéités: $l \approx l_H \Rightarrow$ Pot. Non Eq. Local

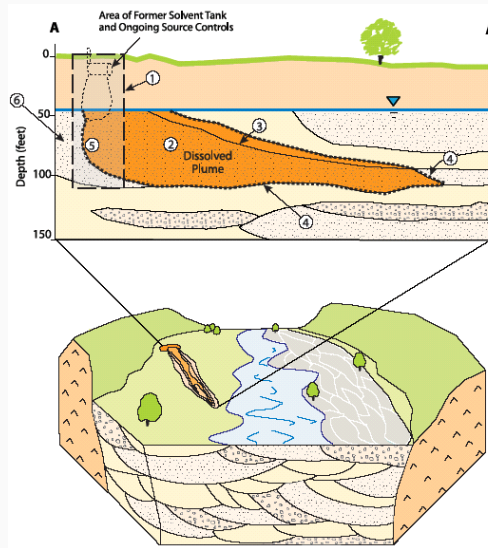
Schéma simplifié (idyllique?) de la modélisation (MACAOH)



1. Collecte des données

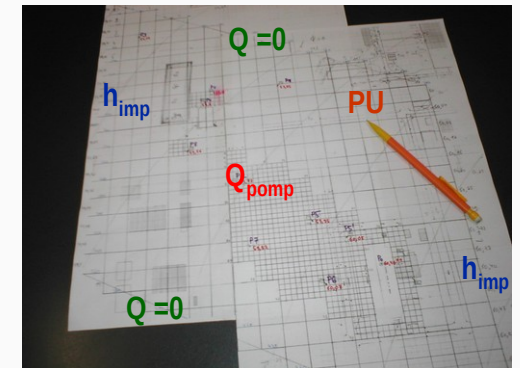


2. Schématisation

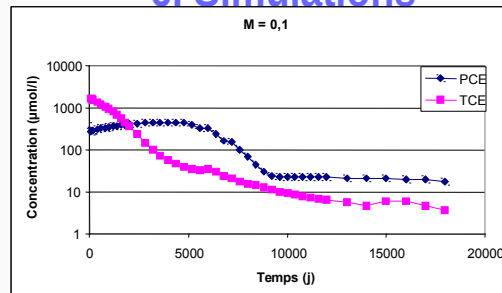


3. Choix d'un outil de calcul

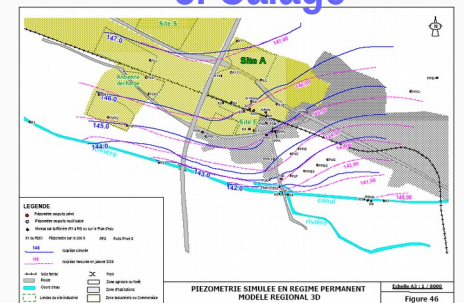
4. Construction du modèle



6. Simulations



5. Calage



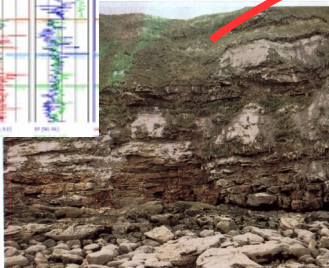
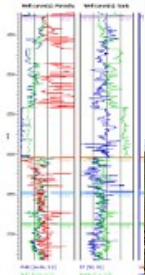
| composé | système | Saturation résiduelle % |
|----------|------------------|-------------------------|
| TCE/PCE* | Zone non saturée | 4 |
| TCE/PCE* | Frang capillaire | 11 |
| TCE/PCE* | Zone saturée | 9 |
| TCE | Zone non saturée | 3,5 |
| TCE | Frang capillaire | 5 |
| PCE | Zone non saturée | 5,5 |
| PCE | Zone saturée | 10 |

18 & 19 NOVEMBRE 2013

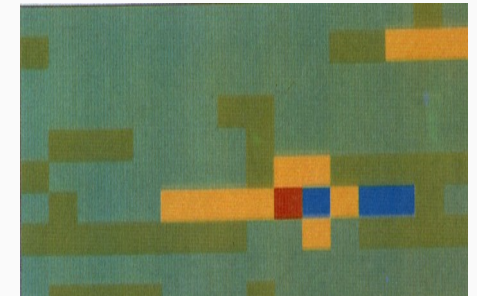
3^e Rencontres nationales
de recherche
sur les
sites & sols
pollués

...mais de nombreux écueils car multi-xx !

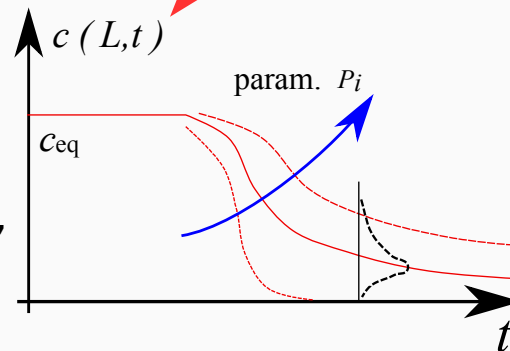
Caractérisation à
≠ échelles
(labo, piézo, ...)



Reconstruction géostatistique
(quelles échelles? quels outils?)



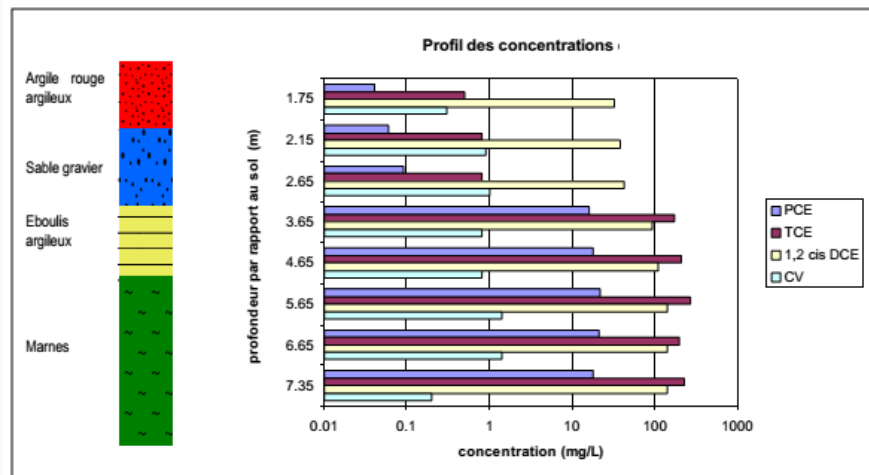
Simulation: outils
d'analyse, étude de
sensibilité, validation,
calage ?



Modèle numérique: quel
maillage, quelles
équations ? "upscaling"
(ou agrégation) des
données
géostatistiques ?

Discussion : caractérisation

- *Prémices*: N_p (nb de variables physiques) très grand, variabilité spatiale forte
→ N_s paramètres géostatistiques
- **Caractérisation**:
 - Données de la "littérature" (thermo, ...)
 - Logs, labo, autres techniques (géoradar, ...) : échelles disparates, probablement pas adaptées à la future description numérique
 - Moyens Métrologiques (Ex. : mesure de concentration dans les piézos) ?
 - Méthodes inverses ? Souvent identifiabilité faible...



(Utilisation du
préleveur DMLS
source BURGEAP)

Discussion: Reconstruction géostatistique, Etude de sensibilité

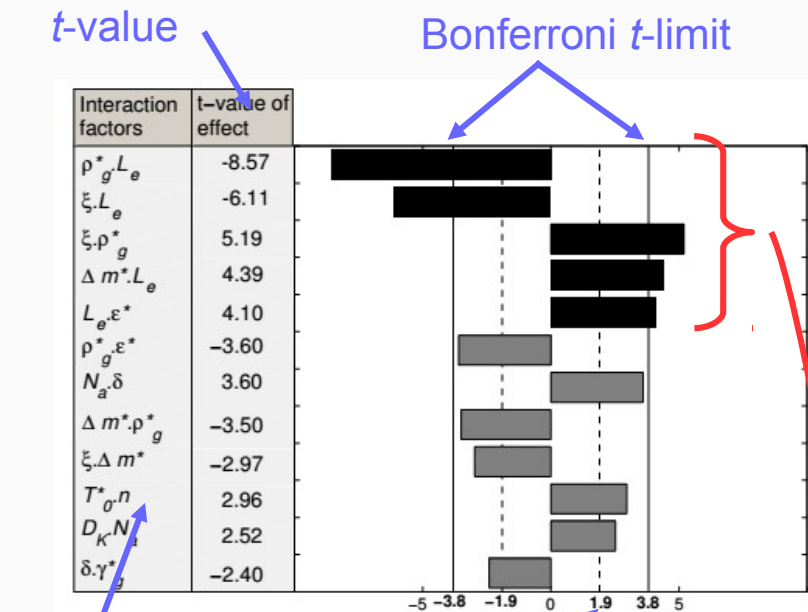
- **Reconstruction:**

- Outils existants : génie pétrolier (Cougar, Schl. Petrel E&P...), adaptés hydrogéologie environnementale (Gocad, ...)
- ~ Maîtrisée pour hydrogéologie classique (porosité, perméabilité, etc..), à développer pour biodégradation, dissolution, etc. ?

- **Etude de sensibilité:**

- $N = N_p \times N_s$ très (trop!) grand \rightarrow si peu non-linéaire et étude min-max $\rightarrow 2^N$ calculs 3D pour un problème donné (i.e., Cond. Limites + Cond. Initiales) + étude de sensibilité aux paramètres numériques !
- Méthode: plan d'expérience (« experimental design »)? Monte-Carlo ? Couplage des deux ?

Etude de sensibilité par
“experimental design”



parameters

Lenth's margin of error

Paramètres sensibles

Conclusions

- Aspects multi-échelle et multi-physique → de nombreuses questions en suspens en ce qui concerne:
 - La nature mathématique des modèles à utiliser!
 - Le « workflow » caractérisation → modélisation → étude de sensibilité (→ décisions)
- R&D nécessaire!
 - sur la physique multi-échelle: les techniques que l'on peut mettre en œuvre, surtout sur des aspects spécifiques aux SSP
 - des outils disponibles: interprétation des données, OREOS,...; géostat: Gocad, ...; modélisation: CubicM, ... ; probablement à étendre
 - à développer ? approche et outils intégrés caractérisation/géostat/modélisation/sensibilité/risques !