

Université du Québec
INRS-Eau

**SIMULATION DU TRANSPORT DE SOLUTÉS DANS DES
AQUIFÈRES HÉTÉROGÈNES À L'AIDE DE RÉSEAUX
PERCOLANTS**

Par

Christine Rivard

Thèse présentée pour l'obtention du grade de Philosophiae doctor (Ph.D.)

Spécialité : Hydrogéologie

Jury d'évaluation

Président du jury et examinateur interne :	M. Alain Rouleau Université du Québec à Chicoutimi
Examineur externe :	M. René Therrien Université Laval
Examineur externe :	M. Alfonso Rivera Commission géologique du Canada
Examineur interne :	M. Frédérick Delay Université de Poitiers
Directeur de thèse :	M. Olivier Banton INRS-Eau
Co-directeur de thèse :	M. Muhammad Sahimi University of Southern California

Décembre 2001

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche M. Olivier Banton pour avoir accepté de diriger ce travail, pour son support financier et ses commentaires scientifiques toujours pertinents. Je tiens également à remercier mon co-directeur M. Muhammad Sahimi, pour m'avoir accueillie au sein de son équipe de recherche à Los Angeles, ainsi que pour ses nombreuses idées originales, son aide considérable pour la rédaction des articles et ses encouragements forts appréciés.

Je voudrais exprimer ma profonde reconnaissance à M. Frédérick Delay pour son importante contribution à cette recherche. J'aimerais le remercier tout particulièrement pour ses commentaires constructifs, son empressement à répondre aux questions, ainsi que pour la justesse et la clarté de ses explications. Ses conseils et suggestions ont été très stimulants et fort utiles tout au long de ma thèse.

Plusieurs collègues et amis sont également à remercier sincèrement : Marie Larocque, pour sa disponibilité, son intérêt et ses judicieux conseils et Sébastien Turgeon ainsi que Marc-André Gosselin, qui ont fait la programmation du modèle de percolation. Je leur dois une fière chandelle.

Je tiens finalement à remercier vivement le Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie (CRSNG) et le Fonds pour la Formation de Chercheurs et l'Aide à la Recherche (FCAR) pour leurs généreux soutiens financiers.

RÉSUMÉ

Des réseaux de percolation ont été utilisés pour étudier l'écoulement et le transport de solutés conservatifs dans des aquifères hétérogènes (fracturés ou poreux). La théorie de percolation permet l'incorporation du désordre dans les réseaux en éliminant les fractures (ou zones) les moins transmissives pour ne conserver que celles dans lesquelles la majorité du fluide circule. Cette approche présente l'avantage d'avoir une résolution mathématique simple et rapide. L'usage des réseaux percolants afin d'étudier le transport et la dispersion dans les réservoirs souterrains est cependant une activité récente et qui n'a pas encore révélé tout son potentiel.

La théorie classique de percolation considère que la répartition des ouvertures des liens d'un réseau est aléatoire. Toutefois, les données de terrain indiquent que les propriétés des formations géologiques ne sont pas distribuées aléatoirement, mais généralement fortement corrélées. Les simulations ont donc été réalisées sur trois types de réseaux: 1) non corrélés, 2) corrélés sur de courtes distances et 3) corrélés sur de longues distances. Les réseaux corrélés sur de courtes et longues distances ont été générés à l'aide d'une méthode géostatistique (simulations séquentielles gaussiennes) et d'un processus fBm (*fractional Brownian motion*). Le premier objectif de ce travail était d'étudier l'effet de la structure spatiale des champs de conductivités hydrauliques sur la dispersion d'un soluté dans des réseaux percolants. Le second objectif était d'étudier l'applicabilité de ces réseaux.

Les simulations de transport ont été réalisées en utilisant la méthode de marche au hasard avec une approche Monte Carlo. Dans un souci de se rapprocher des conditions réelles, le coefficient de dispersion (paramètre décrivant l'étalement du soluté) a été calculé à partir des distributions des temps de parcours des particules. En effet, durant les essais de traçage en milieu naturel, seules les courbes de restitution de la concentration en fonction du temps peuvent être obtenues à divers endroits. Le coefficient de dispersion longitudinal (D_L) a ainsi été calculé de trois façons différentes : avec la distribution du logarithme des temps de parcours, avec les percentiles des temps de parcours et afin d'avoir des éléments de comparaison, avec la distribution des particules dans l'espace.

Nos simulations ont révélé que les réseaux au seuil de percolation ont un comportement très différent des réseaux mieux connectés en raison du manque d'homogénéisation des vitesses et du manque relatif de chemins disponibles pour le déplacement des particules. Les résultats ont montré que D_L est log-normalement distribué au seuil de percolation, indiquant qu'une moyenne arithmétique ne peut pas être utilisée pour caractériser ce paramètre, contrairement aux paramètres d'écoulement. Les valeurs médianes ont alors été choisies pour représenter la dispersion, quelle que soit la fraction de liens ouverts (p), malgré le fait que les distributions deviennent rapidement symétriques lorsque $p > p_c$. Dans

l'intervalle $p_c \leq p \leq 1$, ces valeurs médianes augmentent avec la diminution de p jusqu'à un certain point, puis chutent brusquement à proximité du seuil de percolation, en raison de la grande tortuosité des chemins dans lesquels peuvent circuler les particules. Classiquement, les aquifères fracturés ou poreux très hétérogènes sont assez mal connectés puisque l'écoulement est chenalisé; ils sont par conséquent mieux représentés par les réseaux « discontinus » ($p < 1$). Les modèles conventionnels continus ($p = 1$) sous-estimeraient donc systématiquement (de façon plus ou moins importante) la dispersion dans ce genre de milieux.

Par ailleurs, les simulations ont indiqué que le mode de calcul du coefficient de dispersion (avec les distributions temporelles ou spatiale) influence fortement les résultats, particulièrement à proximité du seuil de percolation. L'universalité de la loi $D_L \sim L^\alpha$ est par conséquent restreinte : la méthode utilisée pour calculer D_L doit être spécifiée. Ce travail a ainsi clairement mis en évidence le fait que la méthode à préconiser pour la caractérisation de la dispersion, même dans des aquifères confinés à l'aide d'un soluté non réactif, n'est pas triviale si le milieu est hétérogène. L'équation utilisant la distribution des temps, choisie étant donné que la distribution du soluté dans l'espace ne peut pas être mesurée sur le terrain, entraîne des comportements parfois contradictoires avec ceux attendus à cause de la grande tortuosité des chemins empruntés par les particules à proximité du seuil de percolation.

Les simulations réalisées avec les réseaux corrélés sur de courtes distances ont également indiqué que D_L augmente avec l'augmentation de la longueur de corrélation (λ), l'hétérogénéité des réseaux et leur taille (L). Le processus fBm, qui correspond à un mouvement brownien généralisé dont la racine carrée a été remplacée par le coefficient H ($0 < H < 1$), engendre des réseaux dont les valeurs de conductivité hydraulique sont corrélées à toutes les échelles et dont la structure est alors très compacte. Dès que $H > 0,1$, la structure n'est plus fractale au seuil de percolation, vraisemblablement parce que le désordre requis n'est plus présent. Les paramètres d'écoulement calculés au seuil de percolation augmentent tous avec H , rapidement dans la fourchette $0 < H < \frac{1}{2}$ puis plus lentement pour $\frac{1}{2} < H < 1$. Les paramètres de transport diminuent lentement avec H . Les exposants des coefficients de dispersion longitudinale et transversale augmentent avec H et semblent atteindre un plateau proche de 1 ($D_L \sim D_T \sim L$) pour des valeurs de H élevées. Comme les exposants des réseaux à longueurs de corrélation finies tendent vers la valeur obtenue à $\lambda = \infty$ à mesure que λ augmente, la dispersion n'augmenterait jamais plus rapidement que linéairement.

Finalement, la simulation de trois types d'essais de traçage a permis de mettre en évidence l'influence considérable qu'ont le type d'essai sélectionné, le débit utilisé durant l'essai et le degré de chenalisation du milieu sur la dispersion.

Mots clé : Hydrogéologie, milieux hétérogènes, modélisation, théorie de percolation, géostatistique, mouvement fractionnel brownien (fBm), traçage.

ABSTRACT

Percolation networks have been used to study flow and solute transport in heterogeneous (porous or fractured) aquifers. Percolation concepts allow the incorporation of disorder in network models of porous media by eliminating the less transmissive fractures (or zones) so as to preserve only those in which most of the fluid flows. This approach is advantageous as the concepts of percolation theory are now well-understood and, moreover, it allows efficient simulations of flow and transport processes in a realistic model of a disordered porous medium. Use of percolation networks to study transport and dispersion in groundwater reservoirs is nevertheless a recent activity that has not yet revealed its full potential.

The classical percolation theory considers the allocation of bond (fracture) apertures of the networks to be at random. However, site (field) data indicate that geologic formations' properties are not usually distributed randomly, but are rather generally highly correlated. The simulations have thus been implemented on three types of networks: (1) uncorrelated; (2) correlated over short distances, and (3) correlated over long distances. Networks with short and long-range correlations have been generated using geostatistical methods (sequential Gaussian simulations) and a fractional Brownian motion (fBm) process. The first objective of this work was to study the impact of the hydraulic conductivity field's spatial structure on solute dispersion in percolation networks. The second objective was to study the applicability of these network models to modeling such phenomena.

Transport simulations have been carried out using the random walk method with a Monte Carlo approach. In order to stay close to real conditions, the dispersion coefficient (the transport parameter that describes the solute spreading) has been calculated from the travel time distributions using solute particles. Indeed, during tracer tests in natural media, only breakthrough curves (concentration versus time) may be obtained in various places. Longitudinal dispersion coefficient (D_L) has thus been calculated with three different methods: One based on the logarithm of the travel times, another one using the travel time percentiles, and the third one using the spatial distributions of the tracer particles so as to be able to make a comparison.

Our simulations have revealed that networks at the percolation threshold have a very distinct behavior compared to well-connected networks due to the lack of velocity homogenization, and to a relative lack of paths available for the particle transport. The results have shown that the populations of D_L values for all network sizes are log-normally distributed at the percolation threshold, indicating that, unlike the flow parameters, the arithmetic mean cannot adequately characterize this parameter; it is also not a self-averaging property in the sense that even with very large networks the variance of the distribution of the D_L values does not approach zero and remains finite. Median values have then been chosen to represent dispersion, whatever the fraction of the open bonds (p), despite the fact that distributions become rapidly symmetric when $p > p_c$. Within the

interval $p_c \leq p \leq 1$, these median values increase as p decreases until a certain point, after which they fall abruptly near the percolation threshold because of the extreme tortuosity of the paths in which particles travel. Porous and fractured heterogeneous aquifers being generally poorly connected since flow is channelized, they are consequently often well-represented by discontinuous networks ($p < 1$). Dispersion obtained with conventional continuous models ($p = 1$) could thus lead to a significant under-estimation of the dispersion in this kind of media.

In other respects, the simulations have indicated that results are highly influenced by the method used to calculate the dispersion coefficient (i.e., with temporal or spatial distributions), especially at the percolation threshold. Universality of the $D_L \sim L^z$ law, where L is the travel distance, is consequently restricted: The method used must be specified. This work has thus shed light on the fact that the method to be recommended for the characterization of dispersion, even in confined aquifers with a non-reactive solute, is not trivial for heterogeneous media. Use of the equation using time distributions, chosen since spatial distributions cannot be measured on a site, can sometimes result in a somewhat contradictory behavior with regard to the one expected because of the high path tortuosity at the percolation threshold.

Simulations conducted with networks having short-range correlations have indicated that D_L increases as the correlation length (λ), the network heterogeneity and its length (L) increase. The fBm corresponds to a generalized Brownian motion in which the correlation function increases with distance, and is characterized by a coefficient H , called the Hurst coefficient. It can generate networks with hydraulic conductivity values correlated over several scales that, consequently, have a very compact structure. With $H \geq 0.3$, the structure is not fractal at the percolation threshold, rather it has a compact structure, presumably because the long-range correlation prevents the formation of sparse, fractal-like structures. All the flow parameters calculated at $p = p_c$ increase rapidly as H increases within the interval $0 < H < 1/2$, and then slowly for $1/2 < H < 1$. Transport parameters decrease slowly with H . The longitudinal and transversal dispersion coefficient exponents increase as H increases and seem to reach a plateau close to 1 ($D_L \sim D_T \sim L$) for high values of H . Since the exponents calculated with finite correlation networks tend towards the value obtained at $\lambda = \infty$ as λ increases, dispersion would never increase more rapidly than linearly.

Finally, simulation of three types of tracer tests has underlined the considerable influence of the selected test type, of the flow rate used during the test, and of the degree of channeling of the media on dispersion.

Keywords : Hydrogeology, heterogeneous media, percolation theory, geostatistics, fractional Brownian motion (fBm), tracer tests

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements.....	iii
Résumé	v
Abstract	vii
Liste des tableaux.....	xiii
Liste des figures	xiii
Liste des symboles	xix
Chapitre 1	
Introduction	1
Chapitre 2	
Modélisation du transport en milieux hétérogènes	5
2.1 Approches continue et discrète.....	7
2.1.1 Approche continue.....	7
2.1.2 Approche discrète.....	10
2.2 Dispersion et dispersivité	13
2.3 Comportement asymptotique et dépendance d'échelle de la dispersion.....	15
2.3.1 Relations fondées sur les essais de traçage.....	15
2.3.2 Relations pour milieux peu hétérogènes.....	19
2.3.3 Relations pour milieux très hétérogènes - approche fractale et théorie de percolation.....	22
2.4 Discussion	31
Chapitre 3	
Théorie de percolation	35
3.1 Introduction à la théorie de percolation	35
3.2 Présentation de la théorie de percolation.....	37
3.2.1 Concepts et définitions	37
3.2.2 Lois dites « universelles ».....	41
3.2.3 Dispersion au seuil de percolation	44
3.3 Revue des modèles à réseaux réguliers (sans corrélation spatiale des paramètres d'écoulement).....	48

3.4 Revue des modèles de percolation utilisant des réseaux dont les paramètres d'écoulement sont spatialement corrélés	51
3.4.1 Les modèles à corrélation courte distance	52
3.4.2 Les modèles à corrélation longue distance	53
3.5 Discussion	55
Chapitre 4	
Modèle de percolation	57
4.1 Modèle d'écoulement	57
4.1.1 Conception des réseaux	58
4.1.2 Conception du modèle d'écoulement	59
4.1.3 Validation des lois universelles pour l'écoulement	63
4.2. Modèle de transport	66
4.2.1 Conception du modèle de transport	66
4.2.2 Validation des lois universelles pour le transport	70
4.3 Discussion	84
Chapitre 5	
Application du modèle de percolation à des champs spatialement corrélés générés selon une méthode géostatistique	87
5.1 Variogramme, krigeage et simulations séquentielles gaussiennes	87
5.1.1 Variogramme	88
5.1.2 Krigeage	91
5.1.3 Simulations séquentielles gaussiennes	93
5.2 Génération des champs de conductivité hydraulique	94
5.3 Résultats des simulations	97
5.3.1 Comportement des paramètres au seuil de percolation	97
5.3.2 Comportement des paramètres à $p > p_c$	100
5.4 Discussion	105
Chapitre 6	
Application du modèle de percolation à des champs spatialement corrélés selon un processus fBm (fractional Brownian motion)	107
6.1 Généralités sur le processus fBm	107
6.2 Revue des modèles de percolation utilisant des corrélations longues distances	111
6.3 Génération des champs de conductivité hydraulique	113

6.4 Résultats obtenus avec des champs fBm isotropes ayant une longueur de corrélation infinie	115
6.5 Résultats obtenus avec des champs fBm isotropes ayant une longueur de corrélation finie	124
6.6 Résultats obtenus avec des champs fBm anisotropes ayant une longueur de corrélation infinie	128
6.7 Discussion	131
 Chapitre 7	
Utilisation du modèle de percolation pour interpréter les essais de traçage	135
7.1 Description des essais de traçage simulés	137
7.1.1 Type 1 : Traceur environnemental	137
7.1.2 Type 2 : Injection avec puits d'observation	138
7.1.3 Type 3 : Doublet	138
7.2 Résultats des essais de traçage	139
7.2.1 $p=1$	139
7.2.2 $p<1$	143
7.3 Comparaison avec les équations théoriques et empiriques	147
7.4 Discussion	150
 Chapitre 8	
Conclusion	153
 Chapitre 9	
Bibliographie	161
 Annexe A – Calcul des charges hydrauliques aux noeuds	
A-1 Rappel sur les différences finies	175
A-2 Méthode de Gauss-Seidel	176
Annexe B – Réseaux non corrélés	179
Annexe C – Réseaux fBm	185
Annexe D – Essais de traçage	193
Annexe E – Informations additionnelles sur les logiciels utilisés	197

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 Valeurs de seuils pour la percolation de liens et de sites pour des réseaux 2-D et 3-D	39
Tableau 3.2 Valeurs des exposants critiques pour les réseaux 2-D et 3-D (de liens)	42
Tableau 7.1 : Résumé des relations théoriques et empiriques pour α_L	148

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 Dispersivité en fonction de la distance a) Ensemble des données et b) Fiabilité associée aux données (à partir de Gelhar <i>et al.</i> , 1992)	17
Figure 3.1 Réseau de percolation de liens a) Réseau global et b) Amas et boucle	38
Figure 4.1 Amas infini et squelette d'un réseau 40x40 avec des conditions périodiques	60
Figure 4.2 Schéma des quatre nœuds et liens entourant le nœud à l'étude	62
Figure 4.3 Propriétés X^{A*p} , X^{B*p} et K_e en fonction de p pour un réseau 80x80	64
Figure 4.4 Dispersion longitudinale en fonction de la taille des réseaux	72
Figure 4.5 Dispersion longitudinale à $p=p_c$ calculée avec σ_x a) Exemples de courbes de $D_L(\sigma_x)$ en fonction de t et b) Exposant de la loi $D_L \sim t^\alpha$	75
Figure 4.6 Comportement des réseaux en fonction de la probabilité p a) Dispersion longitudinale et b) Dispersivité longitudinale	77
Figure 4.7 Dispersion pour des réseaux 100x100 à différents p	78
Figure 4.8 Comportement de $D_L(\sigma_x)$ pour des réseaux 80x80 à $p=p_c$ a) En fonction du nombre de passages et b) En fonction du temps	79
Figure 4.9 Comportement de D_L pour des réseaux 60x60 à $p=0,7$ a) En fonction du nombre de passages et b) $D_L(\sigma_x)$ en fonction du temps	81

Figure 4.10	Courbes de K_e et de $D_L(\ln t)$ en fonction de p pour $\sigma_{\ln K} = 0,5 ; 1$ et $1,5$	82
Figure 4.11	Distributions des temps de parcours et de D_L à $p=p_c$ pour différents $\sigma_{\ln K}$...	82
Figure 4.12	Comparaison des D_L à $p=p_c$ pour différents $\sigma_{\ln K}$ (méthode $\ln t$)	83
Figure 4.13	Exposant de la relation $D_L \sim t^\delta$ en fonction de la taille des réseaux.....	84
Figure 5.1	Caractéristiques d'un variogramme sphérique	91
Figure 5.2	Comportement des paramètres p_c , X^A , X^B , K_e et D_L à $p=p_c$ pour des réseaux 100×100 avec $\sigma_{\ln K} = 1$ en fonction de la longueur de corrélation	99
Figure 5.3	Exemples de squelettes obtenu à $p=p_c$ avec des champs 100×100 a) Aléatoire et b) Corrélés ($\lambda=20$).....	100
Figure 5.4	Courbes de D_L en fonction de λ pour des réseaux 100×100 avec $\sigma_{\ln K} = 1$	101
Figure 5.5	Courbes de $D_L(\ln t)$ en fonction de λ pour des réseaux 100×100 avec $\sigma_{\ln K} = 0,5 ; 1$ et $1,5$	101
Figure 5.6	Courbes de D_L en fonction de p pour des réseaux 100×100 pour $\lambda=20$	103
Figure 5.7	Courbes de D_L pour $\lambda=20$ et $\sigma_{\ln K} = 1$ en fonction de la taille des réseaux pour différentes fractions de liens ouverts.....	104
Figure 5.8	Intervalles de confiance pour les valeurs de $D_L(\ln t)$ obtenues avec $\lambda=20$ et $\sigma_{\ln K} = 1$ pour différentes tailles de réseaux pour $p=0,7$ et $p=1$	105
Figure 6.1	Exemples de champs isotropes sans limite 40×40 a) $H=0,3$ et b) $H=0,7$.	114
Figure 6.2	Champs anisotropes à $H=0,7$ a) $\omega_2/\omega_1=2$ et b) $\omega_2/\omega_1=4$	115
Figure 6.3	Comportement de X^A , X^B , K_e et $D_L(\ln t)$ en fonction de H pour des réseaux de trois différentes tailles (60×60 , 100×100 et 150×150) avec $\sigma_{\ln K} = 1$ à $p=p_c$	116
Figure 6.4	Squelettes de réseaux fBm 150×150 isotropes a) à $H=0,3$ et b) à $H=0,7$	117
Figure 6.5	Exposants en fonction du coefficient de Hurst à $p=p_c$ a) de K_e et b) de D_L	119
Figure 6.6	Comparaison des valeurs de α_L avec celles des essais de traçage a) à $H=0,3$ et b) à $H=0,7$ pour $\sigma_{\ln K} = 1$ et $p=p_c$ (à partir de Gelhar et al. 1992) .	121
Figure 6.7	Comparaison des valeurs de α_T avec celles des essais de traçage pour $H=0,7$ et $\sigma_{\ln K} = 1$ et $p=p_c$ (à partir de Gelhar et al. 1992).....	122

Figure 6.8	Dispersion dans les réseaux isotropes en fonction de p (réseaux 100×100 avec $H=0,7$ et $\sigma_{lnK}=0,5$) a) Longitudinale et b) Transversale.....	123
Figure 6.9	Comportement de p_c , X^A , X^B , K_e et D_L en fonction de λ	125
Figure 6.10	Comportement des exposants des paramètres X^B , K_e et D_L	126
Figure 6.11	Comportement de la dispersion en fonction de p pour $\lambda=20, 40$ et 60	127
Figure 6.12	Réseaux 100×100 anisotropes à $H=0,7$ a) $\omega_2/\omega_1=2$ ($p_c \approx 0,3$) et b) $\omega_2/\omega_1=4$ ($p_c \approx 0,2$)	128
Figure 6.13	Comportement des paramètres D_L , D_T , α_L et α_T au seuil de percolation pour des réseaux avec $H=0,7$ pour les trois rapports ω_2/ω_1 ($\sigma_{lnK}=1$).....	129
Figure 6.14	Comportement de D_L , D_T , α_L et α_T en fonction de p pour des réseaux 100×100 à $H=0,7$	131
Figure 7.1	Essai de traçage de type 1 ou 2 (type 1 : $Q=0$; type 2 : $Q>0$)	137
Figure 7.2	Type 3 : Doublet.....	138
Figure 7.3	Valeurs de D_L et α_L en fonction du débit utilisé pour trois types d'essais avec $\lambda=20$ à $p=1$	140
Figure 7.4	Valeurs de D_L et α_L en fonction du débit utilisé pour trois types d'essais à $p=1$ a) $\lambda=40$ et b) $\lambda=60$	141
Figure 7.5	Comportement de D_L et D_T en fonction du débit pour les essais de type 2 à $p=1$ a) Valeurs de D_T et de D_L et b) Rapport D_T/D_L	142
Figure 7.6	Comportement de D_L en fonction du débit pour différents coefficients de Hurst à $p=1$ a) Essais de type 2 et b) Essais de type 3	143
Figure 7.7	Comportement de D_L en fonction de p pour les essais de type 2 (λ finies) a) Pour deux longueurs de corrélation à $Q=0,2$ et b) Pour deux débits à $\lambda=20$	144
Figure 7.8	Comportement de D_L en fonction de p pour les essais de type 3 a) Pour trois longueurs de corrélation à $Q=0,2$ et b) Pour deux débits à $\lambda=40$	145
Figure 7.9	Comportement de D_L en fonction de p pour λ infinies et $Q=0,2$ a) Essais de type 2 et b) Essais de type 3.....	146
Figure 7.10	Essais de type 2 : comportement de α_L en fonction de p à $Q=0,2$ a) Pour $\lambda=20$ et 60 et b) Pour $H=0,3; 0,5$ et $0,7$	147

Figure 7.11	Essais de type 3 : comportement de α_L en fonction de p à $Q=0,2$ a) Pour $\lambda=20$ et 60 et b) Pour $H=0,3; 0,5$ et $0,7$	148
Figure A-1	Schéma des quatre nœuds entourant la charge à l'étude	175
Figure B-1	Pour trois tailles de réseaux aléatoires au seuil de percolation ($p=p_c$) a) Distributions du coefficient de dispersion longitudinale et b) Distributions du temps de parcours	179
Figure B-2	Graphiques log-log de DL en fonction de la taille des réseaux a) Pour la méthode utilisant les logarithmes des temps de parcours et b) Pour la méthode utilisant les percentiles des temps de parcours	180
Figure B-3	Temps de parcours, variances et coefficient de variation ($\sigma_V/\langle t \rangle$) en fonction de la taille des réseaux.....	181
Figure B-4	Distributions de DL pour $p=0,6, 0,7$ et $0,9$	182
Figure B-5	Comportement des réseaux 300×300 en fonction de la probabilité p a) Dispersion longitudinale et b) Dispersivité longitudinale	182
Figure B-6	Temps de parcours moyens et variances moyennes pour différentes probabilités p (réseaux 100×100 et 300×300).....	183
Figure B-7	Comportement de D_L calculé avec les trois approches (distribution des logarithmes des temps de parcours, percentiles des temps de parcours et distribution des particules dans l'espace) en fonction de p pour les trois distributions log-normales de K a) $\sigma_{\ln K}=0,5$, b) $\sigma_{\ln K}=1,0$ et c) $\sigma_{\ln K}=1,5$	184
Figure C-1	Temps de parcours, variance et coefficient de variation de réseaux fBm isotropes en fonction du coefficient de Hurst.....	185
Figure C-2	K_e , α_L et α_T en fonction de p (réseaux 100×100 isotropes ayant une longueur de corrélation infinie, $\sigma_{\ln K}=1$)	186
Figure C-3	Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm isotropes ayant une longueur de corrélation infinie	187
Figure C-4	Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la longueurs de corrélation pour des réseaux fBm 100×100 ayant des longueurs de corrélation finies ($\sigma_{\ln K}=0,5$)	188
Figure C-5	Temps de parcours moyen et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm 100×100 ayant des longueurs de corrélation finies ($\sigma_{\ln K}=0,5$).....	189
Figure C-6	Comportement des paramètres p_c , X^A , X^B et K_e au seuil de percolation pour des réseaux à $H=0,7$ pour les trois rapports ω_2/ω_1 ($\sigma_{\ln K}=1$)	190

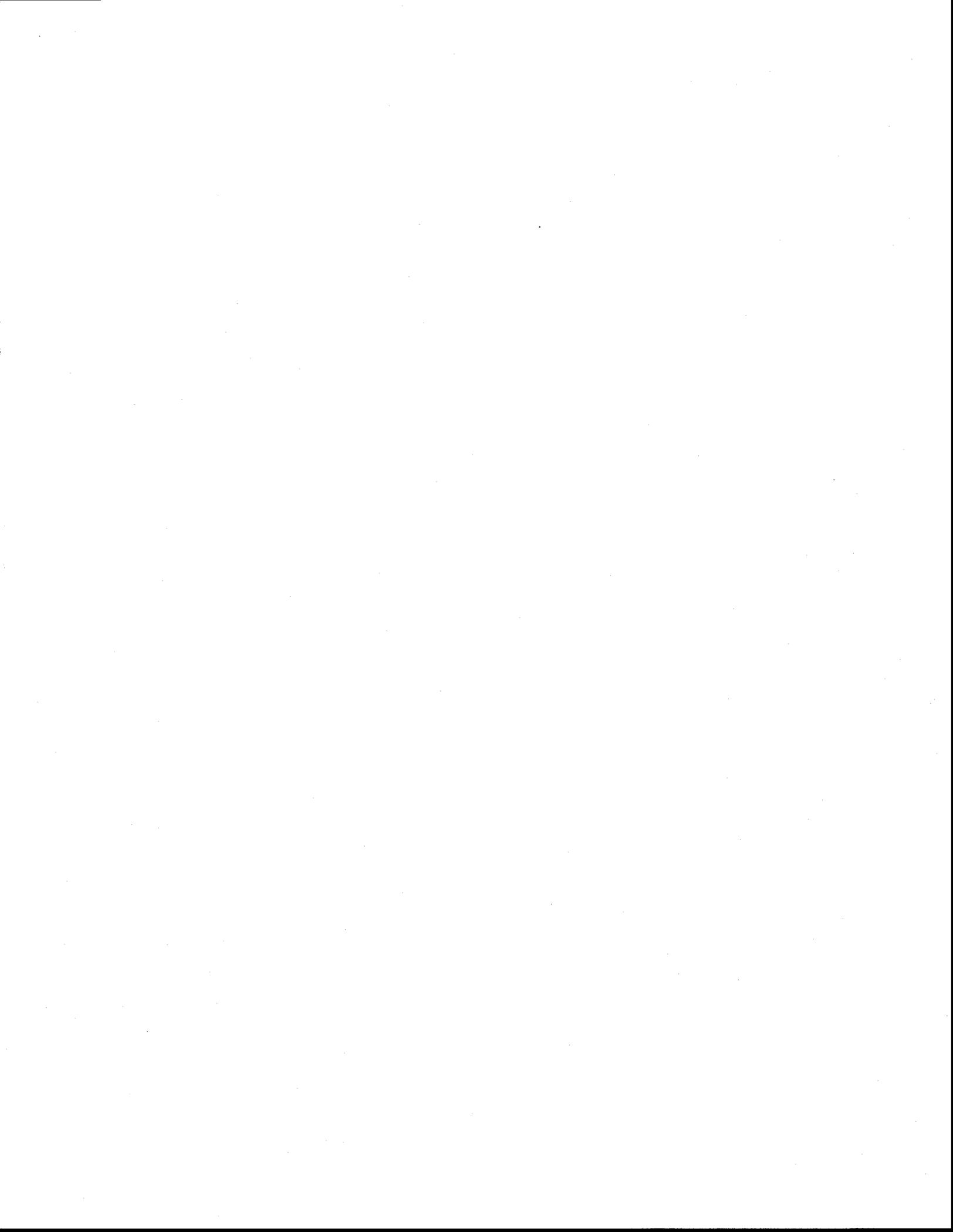
Figure C-7	Temps de parcours moyen et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm 100x100 anisotropes ayant des longueurs de corrélation infinies ($H=0,7$ $\sigma_{ln K}=1$).....	191
Figure D-1	Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux pour différentes longueurs de corrélation infinies ($\sigma_{ln K}=1$) pour des essais de type 2	193
Figure D-2	Type 2) Percentiles du nombre de particules en fonction de leurs temps de parcours a) Pour $p=0,7$ et b) Pour $p=1$ et c) Comparaison des médianes	194
Figure D-3	Type 3) Percentiles du nombre de particules en fonction de leurs temps de parcours a) Pour $p=0,7$ et b) Pour $p=1$ et c) Comparaison des médianes	195

LISTE DES SYMBOLES

A	Matrice des coefficients de conductivité hydraulique ;
a_i	Constantes
b	Ouverture d'une fracture ;
B	Matrice des conditions frontières ;
$B_H(t)$	Valeur d'un paramètre à un temps donné calculée avec un processus fBm;
c	Effet de pépite ;
c_o, C_o	Constantes positives ;
C	Concentration ;
$C(r)$	Fonction de corrélation ;
$Cov(r)$	Fonction de covariance ;
Cov_Y	Fonction de covariance ($Y = \ln K$) ;
d	Dimensionnalité ou dimension euclidienne du domaine (2-D ou 3-D) ;
d_B	Dimension fractale du squelette, $d_B = d - \beta_B/v$;
d_f	Dimension fractale, $d_f = d - \beta/v$;
d_L	Coefficient de dispersion relatif de l'approche de Dagan [1994] ;
d_w	Dimension fractale d'une particule, $d_w = 1/k$;
D	Coefficient de dispersion ;
D_L	Coefficient de dispersion longitudinal ;
D_T	Coefficient de dispersion transversal ;
D_m	Coefficient de diffusion moléculaire ;
D_0	Coefficient de diffusion du processus fBm ;
e	Exposant de K_e ;
F	Propriété quelconque ;
g_c	Conductance critique ;
$g_i(L)$	Fonctions de L utilisées par Sahimi [1994] ;
G	Conductivité électrique ;
h	Charge hydraulique ;
H	Coefficient de Hurst ;
i	Gradient hydraulique ;
K	Conductivité hydraulique ;
K_e	Conductivité hydraulique équivalente du système ;
l	Longueur d'un lien ;
l_{co}	Limite de corrélation dans les champs fBm, $l_{co} = (f_{co})^{-1/2}$;
l_v	Longueur verticale d'un lien dans les réseaux à 45° ;
L	Échelle de mesure, représentant soit la distance parcourue par le soluté, soit la longueur du domaine dans les réseaux percolants ;
M	Nombre de liens dans l'amas le plus important ;
n	Nombre (de liens dans une direction, d'itérations, de points, etc.) ;
n_e	Porosité cinématique ;

N	Nombre de paires de points ;
p	Probabilité d'ouverture (dans les réseaux aléatoires) ou fraction de liens ouverts ;
p_c	Seuil de percolation ;
P(p)	Probabilité de percolation ;
P_e	Nombre de Peclet ;
q_1 et q_2	Exposants de l'approche de Ross [1986] ;
Q	Débit ;
r	Distance entre deux points ou rayon ;
R^2	Coefficient de détermination ;
s_i	Probabilité d'occupation d'un site (1 ou 0) de Weinrib et Halperin (1983) et de Weinrib (1984) ;
S	Surface ;
S_s	Coefficient d'emménagement spécifique ;
t	Temps ;
T	Transmissivité ;
u	Vitesse ;
\bar{v}	Vitesse moyenne de l'eau souterraine ;
V	Vitesse moyenne dans le squelette ;
w	Valeur du palier du variogramme si l'effet de pépité $c=0$;
x	Position selon l'axe longitudinal ;
X	Matrice des charges hydrauliques ;
X^A	Fraction des liens ouverts appartenant à l'amas infini ;
X^B	Fraction des liens ouverts appartenant au squelette ;
y	Position selon l'axe transversal ;
Y	$Y = \ln K$;
z	Variable aléatoire (régionalisée) ;
Z	Fonction aléatoire ;
Z_c	Nombre de coordination ;
α	Dispersivité ;
α_L	Dispersivité longitudinale ;
α_T	Dispersivité transversale ;
β	Exposant de X^A ;
β_B	Exposant de X^B ;
χ	Exposant des lois de type $\sim L^\chi$;
δ	Exposant de la loi de type $\sim t^\delta$;
$\delta(r)$	Fonction de Kronecker ;
ε	Résidu ;
ϕ	Exposant de Glimm <i>et al.</i> (1993) et de Dagan [1884] : $C_\gamma \sim r^{-\phi}$;
γ	Variogramme ;

η	Paramètre représentant la corrélation de Prakash <i>et al.</i> (1992) pouvant être relié au coefficient de Hurst par la relation $\eta=2(H+d/2)$;
φ_i	Pondérateurs ;
λ	Longueur de corrélation des conductivités hydrauliques ;
μ	Moyenne ;
ν	Exposant de la longueur de corrélation d'un réseau (ξ) ;
θ	$(e - \beta) / \nu$;
θ_B	$(e - \beta_B) / \nu$;
ρ	Pour un processus fBm : $\rho=2H+1$ avec $1<\rho<3$;
σ	Écart-type ;
σ_t	Écart-type de la distribution des particules (masse) dans le temps à une distance donnée ;
σ_x	Écart-type de la distribution des particules (masse) dans l'espace à un temps donné ;
σ_Y	Écart-type de la distribution des $\ln K$ ($\sigma_Y=\sigma_{\ln K}$) ;
τ	Temps de diffusion ;
τ_0	Temps de diffusion du processus fBm ;
ν	Exposant de la conductivité électrique (G) ;
ω	Réalisation de l'espace probabilisé.
ω	Variable de la transformée de Fourier ;
ξ	Longueur de corrélation d'un réseau ;
ψ	Paramètre de relaxation ;
ζ	Échelle du domaine ;
l	Portée du variogramme ;
Ω	Précision désirée.



1 INTRODUCTION

Dans les milieux hétérogènes, l'écoulement est fortement chenalé, c'est-à-dire que l'eau souterraine circule par une minorité de chemins à cause de la grande variabilité des conductivités hydrauliques des différentes zones. Le transport de solutés dans ces milieux est par conséquent plus complexe qu'en milieu homogène, le nombre de chemins disponibles étant beaucoup plus limité et très variable dans l'espace. Étant donnée cette complexité, de nombreux modèles ont été développés pour simuler l'écoulement et le transport en utilisant des hypothèses simplificatrices plus ou moins contraignantes en fonction de la formation géologique à décrire. La modélisation des systèmes réels permet d'améliorer la compréhension des divers mécanismes de transport et s'avère le seul moyen de prédiction du déplacement des panaches de contamination. Les modèles constituent donc des outils précieux de gestion de l'eau souterraine, ressource souvent vulnérable, difficile voire impossible à décontaminer.

Deux types d'approches peuvent être utilisées pour modéliser les milieux hétérogènes : l'approche continue ou l'approche discrète. Dans le premier cas, l'aquifère est traité comme un milieu poreux équivalent caractérisé par des propriétés moyennes. Il est alors possible d'utiliser les modèles de transport originellement développés pour les milieux poreux. La seconde approche est généralement réservée aux milieux fracturés. Les modèles discrets simulent l'ensemble des fractures du réseau, ce qui implique la connaissance de leurs diverses caractéristiques individuelles ou de groupe.

Quel que soit le modèle choisi, le modèle de transport doit tenir compte de la dispersion, qui permet de décrire l'étalement du contaminant. Les essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde dans diverses formations montrent que la dispersion augmente avec la distance parcourue par le contaminant. L'interprétation la plus répandue pour expliquer cette dépendance d'échelle est que celle-ci serait causée par la présence d'hétérogénéités (variations spatiales des conductivités hydrauliques et de la porosité). Pour tenir compte de ces hétérogénéités, des modèles stochastiques ont été développés,

utilisant les propriétés statistiques du système ou faisant appel à la notion d'objets fractals, tels ceux issus de la théorie de percolation. La théorie de percolation, permettant de prédire l'effet de la connexité des fractures sur les propriétés du milieu, semble particulièrement bien adaptée à l'étude de cette dépendance des paramètres de transport. Cette théorie permet de simuler la chenalisation présente dans les milieux hétérogènes en ne conservant que les liens dans lesquels la majorité du fluide circule (correspondant à des zones homogènes ou des fractures individuelles).

L'objectif principal de cette recherche est de développer un modèle général basé sur la percolation, permettant la simulation du transport de solutés conservatifs (dont la concentration n'influence pas les propriétés de l'eau souterraine) dans des milieux hétérogènes, poreux ou fracturés, à une échelle locale (1 km ou plus) ou même régionale. Pour ce faire, deux objectifs secondaires ont été poursuivis. Le premier consiste à étudier l'influence de la structure spatiale des champs de conductivité hydraulique sur la dispersion d'un soluté dans les réseaux percolants. Le second vise l'étude de l'applicabilité des réseaux de percolation. Les champs de conductivité hydraulique abordés sont corrélés spatialement sur de courtes ou de longues distances. Ces champs sont générés soit à partir d'une méthode géostatistique (simulations séquentielles gaussiennes), soit avec le mouvement fractionnel brownien (processus fBm : fractional Brownian motion). Le comportement du coefficient de dispersion a été étudié en fonction de la longueur de corrélation des champs, de la taille du domaine et de la fraction de liens ouverts, chaque réseau étant soumis à un écoulement permanent entre charges hydrauliques constantes sur les limites nord et sud et limites à flux nuls sur les bords est et ouest (système perméamètre). La transformation des champs de conductivité hydraulique corrélés en réseaux percolants permet de simuler l'écoulement et le transport à l'intérieur d'aquifères moyennement ou fortement hétérogènes, sans instabilité numérique grâce à l'utilisation d'une méthode lagrangienne pour le transport de solutés. L'utilisation de l'approche Monte Carlo permet de fournir des statistiques moyennes sur les caractéristiques des réseaux. Notons que jusqu'à présent, toutes les études de réseaux percolants ont utilisé un écoulement en perméamètre dont le fonctionnement est assez éloigné des cas réels de contamination. Les réseaux ont ensuite servi à simuler trois types d'essais de traçage couramment réalisés dans la pratique dans le but de comparer les résultats obtenus avec divers types d'essai, débits

et champs de conductivité hydraulique et aussi avec ceux estimés avec les réseaux en perméamètres.

Le chapitre 2 présente les différentes approches trouvées dans la littérature qui ont été utilisées pour modéliser le transport dans les aquifères hétérogènes. Une attention particulière est prêté à la dispersion et à son effet d'échelle, thèmes d'importance majeure ayant fait l'objet de nombreuses études depuis près de trente ans. Le chapitre 3 introduit les concepts de la théorie de percolation et résume les résultats des études dans ce domaine. Le chapitre 4 présente le modèle de percolation développé ainsi que sa validation sur des réseaux non corrélés à l'aide des lois d'échelle dites « universelles » caractérisant plusieurs propriétés. Les chapitres 5 et 6 analysent la dispersion simulée par le modèle de percolation sur des champs de conductivité hydraulique corrélés sur de courtes et longues distances. Enfin le chapitre 7 aborde l'analyse de la dispersion des réseaux dans le cas de simulations d'essais de traçage.



2 MODÉLISATION DU TRANSPORT EN MILIEUX HÉTÉROGÈNES

La modélisation du transport de solutés admet généralement les deux hypothèses suivantes :

- 1) le soluté n'est présent dans le réservoir souterrain qu'en concentration assez faible pour ne pas influencer les propriétés physiques de l'eau ;
- 2) la conductivité hydraulique, la porosité et la compressibilité totale du milieu ne sont pas affectées par la présence du soluté.

Ces deux énoncés ont pour effet de rendre l'écoulement indépendant du transport des solutés, permettant en régime permanent d'écoulement de résoudre le problème de migration après avoir déterminé le champ de vitesse du fluide.

Les différentes échelles auxquelles l'écoulement et le transport peuvent être étudiées sont : microscopique (échelle du pore), macroscopique (échelle de la maquette de laboratoire ou de quelques mètres sur le terrain), mégascopique (échelle locale) et gigascopique (échelle régionale). L'équation macroscopique régissant l'écoulement à une dimension s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial h}{\partial x} \right) + Q(x, t) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.1)$$

où K représente la conductivité hydraulique, h la charge hydraulique, S_s le coefficient d'emmagasinement spécifique, Q le terme d'apport ou de perte (infiltration, drainance, injection ou pompage), x la coordonnée d'espace et t le temps. Si l'écoulement est en régime permanent, le terme de droite est nul (aucune variation dans le temps) et cette équation devient celle de Laplace.

L'équation classique de transport par advection-dispersion d'un soluté conservatif dans le cas d'un écoulement unidimensionnel est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial(\bar{v}C)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (2.2)$$

où C est la concentration du contaminant, \bar{v} est la vitesse moyenne de pore du fluide et D le coefficient de dispersion. Le premier terme de droite représente le mécanisme d'advection et le second terme la dispersion, exprimée selon la seconde loi de Fick. Cette loi implique que la dispersion est comparable à un processus diffusif, ce qui génère dans l'espace une distribution normale (gaussienne) des concentrations de soluté à un temps t donné.

L'advection et la dispersion sont les deux mécanismes de base qui gouvernent le transport des solutés conservatifs. L'advection est la composante du mouvement des solutés attribuée à l'écoulement moyen des eaux souterraines. En d'autres termes, c'est le transport du contaminant dissous à la vitesse moyenne de pore du fluide dans le milieu. La dispersion peut avoir plusieurs origines, notamment l'hétérogénéité locale des vitesses réelles du fluide autour de la valeur moyenne. En effet, une particule échantillonnera sur son parcours une gamme de lignes de courant lui donnant une vitesse globale différente de sa voisine. D'autres facteurs comme la multiplicité des chemins pour aller d'un point A à un point B contribuent à augmenter la dispersion du traceur. Lors d'études de cas réels de contamination, l'hétérogénéité macroscopique à mégascopique du milieu rend souvent difficile l'évaluation du champ de vitesse dont dépend fortement la modélisation correcte du transport des solutés.

La première section de ce chapitre présente les deux grands types de modèles mathématiques utilisés pour décrire les milieux hétérogènes, soit les modèles continus et les modèles discrets. La seconde section propose un bref rappel du processus de dispersion et la troisième discute du comportement asymptotique et de la dépendance d'échelle de la dispersion en présentant diverses expressions développées pour des milieux peu ou très hétérogènes. On y traite presque exclusivement des milieux poreux car l'analyse de la dispersion dans les réseaux discrets de fractures est nettement moins avancée, au moins sur le plan théorique.

2.1 Approches continue et discrète

Les modèles cherchant à représenter les milieux hétérogènes, et en particulier les milieux fracturés, peuvent être formulés selon une approche continue ou discrète. Dans l'approche continue, l'aquifère est considéré comme suffisamment connecté pour que le réseau de fractures puisse être représenté par un milieu poreux équivalent, caractérisé par des propriétés moyennes. Il est alors possible d'utiliser les modèles et méthodes de calculs originellement développés pour les milieux poreux. À l'opposé, les modèles discrets utilisent une description du système sous la forme d'un réseau connecté de fractures individualisées. Ces deux approches entraînent des différences majeures au niveau de l'écoulement et du transport puisque dans le cas de l'approche discrète, le nombre de chemins disponibles est beaucoup plus restreint.

Dans l'approche continue (§ 2.1.1), l'aquifère peut être traité comme un milieu poreux équivalent à simple porosité qui amalgame fractures et matrice, ou un milieu à double porosité qui sépare porosité de fracture et porosité de matrice. Les développements les plus récents de l'approche discrète (§ 2.1.2) sur réseau peuvent ainsi prendre en compte l'existence d'une matrice poreuse. Notons que parfois, le réseau est « dégénéré » en un modèle à fracture unique équivalente. Les références pour chaque type de modèle ont été sélectionnées sur les bases de leur représentativité ou de leur intérêt particulier afin de donner une vue d'ensemble des modèles existants. Leur résolution numérique n'est pas abordée.

2.1.1 Approche continue

Milieux poreux équivalent à simple porosité

Les modèles conçus pour les milieux poreux sont souvent utilisés pour les aquifères hétérogènes en supposant qu'à grande échelle le milieu se comporte comme un milieu poreux équivalent (MPÉ), c'est-à-dire qu'il peut être défini en tout point de l'espace par des paramètres moyens (éventuellement de valeur différente d'un endroit à l'autre). Cette échelle doit être définie pour contenir un volume assez petit pour se comparer au volume du système à l'étude afin de pouvoir décrire correctement l'hétérogénéité, et assez grand pour inclure un échantillon statistique représentatif de la population de fractures. Ceci

constitue la définition du volume élémentaire représentatif (VER). À l'échelle du VER, le milieu est considéré homogène.

Plusieurs auteurs ont étudié les réseaux de fractures discrètes afin de cerner les conditions dans lesquelles le milieu pouvait être considéré comme poreux équivalent au regard de l'écoulement et du transport [Long *et al.*, 1982; Schwartz *et al.*, 1983; Pankow *et al.*, 1986; Berkowitz *et al.*, 1988; Schwartz et Smith, 1988]. Pour l'écoulement, la première condition est de pouvoir définir un VER sur lequel un tenseur équivalent de conductivité hydraulique K_{ij} prédit correctement les flux en eau pour différents gradients de charge hydraulique. Ensuite, les conditions favorisant un comportement de milieu poreux sont une grande densité de fractures et une bonne distribution de leur orientation, c'est à dire deux caractéristiques permettant d'augmenter le nombre d'intersections (et donc la connexité). De plus, les réseaux avec une ouverture constante des fractures sont plus faciles à rapprocher d'un milieu poreux que ceux possédant une distribution de leurs ouvertures [Long *et al.*, 1982]. Néanmoins pour le transport, l'assimilation à un MPÉ reste difficile car Schwartz *et al.* (1983), Berkowitz *et al.* (1988) et Schwartz et Smith (1988) ont constaté que les courbes de concentration produites par des systèmes dont l'écoulement est globalement orienté dans le sens des fractures dominantes ne peuvent pas être assimilées à celles produites par un milieu poreux équivalent (comportement non gaussien).

Dans un MPÉ, les fractures ou les zones les plus transmissives peuvent être représentées par des mailles de conductivités hydrauliques élevées afin de simuler les écoulements préférentiels (chenalisation) à l'intérieur du système. Selon Tsang *et al.* (1996), un faible pourcentage de conductivités hydrauliques élevées avec des longueurs de corrélations importantes comparativement à la taille du réseau joue un rôle crucial dans le transport et leur prise en compte est nécessaire dans la description d'un aquifère hétérogène.

Milieux à double porosité

Plusieurs modèles conceptuels ont été proposés pour palier aux inconvénients des MPÉ à simple porosité [Banton et Bangoy, 1997], dont le plus connu et le plus utilisé est celui à double porosité et double perméabilité. Ce concept (appelé simplement double porosité)

a été initié par Barenblatt *et al.* en 1960. L'ingénierie pétrolière a largement contribué à son développement car bon nombre de réservoirs pétroliers comme les grès sont des milieux poreux fracturés. Le pétrole est essentiellement stocké dans la matrice, mais son déplacement lors de l'exploitation du réservoir est assuré par le réseau de fractures. En fait, les modèles à double porosité ont été développés dans le but de se rapprocher de l'écoulement réel en milieux fracturés, sans entrer dans le détail des fractures. Les fractures et les blocs de matrices sont considérés comme étant deux milieux continus distincts définis en tout point du domaine et communiquant par un terme d'échange de flux. La matrice est un milieu à emmagasinement élevé et perméabilité faible, les fractures sont un milieu à emmagasinement faible et perméabilité élevée. Dans le modèle de Barenblatt *et al.*, l'emmagasinement des fractures et la perméabilité de la matrice sont considérés négligeables.

Les équations d'écoulement et de transport, écrites séparément pour les fractures et les blocs de matrice, sont reliées par un terme source représentant l'échange entre les deux milieux en réponse aux différences de pression et aux gradients de concentration (autrement dit, un échange de type diffusif tant pour l'écoulement que le transport). Ce modèle doit posséder un VER pour la matrice et un VER pour les fractures car l'échelle d'homogénéisation des propriétés locales n'est pas forcément la même. L'analyse d'essais de pompage peut être effectuée en considérant que l'écoulement de la matrice vers les fractures se fait sous des conditions quasi-stationnaires [Barenblatt *et al.*, 1960; Warren et Root, 1963] ou transitoires [Moench, 1984 ; Gerke et Van Genuchten, 1993 ; Hamm et Bidaux, 1996]. La première approximation a l'avantage d'être plus simple mathématiquement, mais suppose que l'échange entre matrice et fractures sur un pas de temps est suffisamment régulier pour être linéairement dépendant de la différence de pression (ou de concentration) entre matrice et fracture. Le modèle transitoire implique la non linéarité du flux d'échange sur un pas de temps.

L'inconvénient majeur des modèles à double porosité réside dans la formulation d'une fonction de transfert. Celle-ci est habituellement construite en utilisant diverses approximations ou en ajustant les paramètres, perdant ainsi toute signification physique claire. Ces termes de transfert sont généralement considérés constants, mais devraient en réalité varier spatialement [Berkowitz *et al.*, 1988]. De plus, la paramétrisation de ces

modèles est un problème puisqu'il faut relier les caractéristiques des systèmes à des mesures de terrain pour bien les contraindre, ce qui n'est pas évident.

2.1.2 Approche discrète

Fracture unique

Les essais de traçage réalisés dans des fractures naturelles isolées indiquent que l'écoulement n'est pas uniforme (comme il le serait dans des fractures lisses), mais s'effectue plutôt au travers de chemins préférentiels, résultant de la variabilité des ouvertures des fractures [Tsang et Tsang, 1987 ; Moreno *et al.*, 1988 ; Dverstorp *et al.*, 1992]. Des études expérimentales ont montré que de 5 à 20% seulement de la section de la fracture était utilisée par le fluide [Moreno *et al.*, 1988]. Les zones avec de petites ouvertures véhiculent généralement peu d'eau, mais les zones à larges ouvertures n'ont pas forcément un écoulement important puisqu'elles peuvent être mal connectées ou obstruées par des matériaux de remplissage. Les propriétés de l'écoulement et du transport le long des chemins dominants peuvent donc différer significativement des propriétés moyennes du milieu et le degré de chenalisation affecte directement le temps de résidence et la dispersion des solutés.

Tsang, Moreno et collaborateurs ont été les premiers à modéliser le transport de solutés dans des fractures dont la variabilité spatiale des ouvertures est générée à partir de distributions statistiques [Tsang et Tsang, 1987 ; Moreno *et al.*, 1988 ; Tsang *et al.*, 1991]. Cependant, très peu de données sont disponibles quant à la distribution réelle des ouvertures d'une fracture. Des échantillons de quelques centimètres ont montré que la distribution des ouvertures pouvaient suivre une loi log-normale. La longueur de corrélation semble augmenter avec l'échelle de mesure et certains chercheurs croient qu'elle pourrait être fractale [Moreno *et al.*, 1988]. L'étude de Moreno *et al.* (1988) a indiqué qu'une large gamme de valeurs d'ouverture (écart-type élevé) avec une longueur de corrélation du même ordre de grandeur que l'échelle de mesure engendre une chenalisation très prononcée où 90% du flux en eau est véhiculé par 20% de la section d'écoulement. Moreno *et al.* (1990) ont par la suite montré que les courbes de concentration en fonction du temps dépendent de la variabilité spatiale des ouvertures, mais sont également sensibles au débit d'injection et aux localisations de la source et de la collecte.

Les modèles à fracture unique, bien qu'ils ne peuvent pas être utilisés pour étudier des problèmes de transport réels, ont permis de fournir de précieuses informations sur les mécanismes survenant à l'intérieur des fractures.

Réseaux de fractures

A l'évidence, les modèles en réseaux de fractures discrètes sont, au moins sur le plan géométrique, plus proches des aquifères fracturés que les milieux continus. Toutefois, leur application est généralement limitée car ils supposent *a priori* une caractérisation détaillée du terrain à l'étude. En effet, les données nécessaires à la création d'un tel modèle comprennent la densité, la longueur, la localisation, l'orientation et l'ouverture des fractures. La description exacte de chacune des fractures étant impossible, la génération statistique de réseaux de fractures pourrait constituer la solution idéale, mais ni les distributions statistiques ni les éventuelles corrélations spatiales de chacun des paramètres des fractures ne sont connues avec précision. Les modèles développés vont du plus simple, soit celui qui représente les fractures comme des plaques parallèles infinies dans une matrice imperméable, aux plus complexes, c'est-à-dire ceux qui tiennent compte de la nature tridimensionnelle des réseaux, de la variabilité spatiale des ouvertures et de la porosité de la matrice. Ces derniers ne sont toutefois applicables que sur des domaines restreints.

Snow (1969) a présenté un modèle 3-D qui idéalise les fractures en les représentant comme des plaques parallèles infinies. Il a développé une expression pour calculer un tenseur de perméabilité équivalent à partir de la somme des perméabilités de chacune des fractures. Parce que les fractures sont en réalité de longueurs finies, la perméabilité globale est plus petite que celle prédite par la théorie de Snow. Trois raisons justifient le fait [Long et Witherspoon, 1985]: 1) des fractures sont souvent isolées du réseau conducteur, 2) certaines fractures sont des culs-de-sac, c'est-à-dire connectées au réseau par une seule extrémité 3) même si une fracture véhicule de l'eau, sa contribution dépend de la façon dont elle est connectée au reste du réseau. En résumé, la perméabilité du milieu dépend de la connexité des fractures et les réseaux réels, constitués de fractures de tailles finies, sont souvent peu connectés.

Plusieurs modèles 2-D simulant les fractures par des segments linéaires de longueurs finies sont ensuite apparus, dont ceux de Schwartz *et al.* (1983), Rouleau (1984), Smith et Schwartz (1984), Long et Billaux (1987) et Rouleau et Gale (1987). Les fractures sont générées de façon stochastique et l'écoulement est calculé en couplant la loi cubique dans chaque lien, $Q \sim b^3$ (où b est l'ouverture des fractures) et un principe de conservation de la masse en loi de Kirchoff à chaque nœud (intersection) du réseau. Les simulations de Long et Billaux (1987) ont montré que même les matériaux très fracturés pouvaient être très peu connectés. Dans leurs simulations, l'écoulement se faisait dans seulement 0,1% des fractures générées à partir de données de terrain (observations et essais de pompage).

Cependant, les modèles 2-D ne sont pas réalistes au sens où les fractures qui apparaissent isolées en 2-D peuvent très bien être connectées dans la troisième dimension, entraînant une sous-estimation de la connexité et donc de la perméabilité du système réel. Les analyses de fractures à partir des logs de forage ont révélé que les fractures ont des formes plutôt elliptiques ou circulaires [Long *et al.*, 1985]. Plusieurs études ont été réalisées à partir de modèles 3-D de fractures discrètes circulaires générées stochastiquement dans une matrice imperméable [Long *et al.*, 1985 ; Andersson et Dverstorp, 1987 ; Cacas *et al.*, 1990a et b ; Dverstorp *et al.*, 1992 ; Nordqvist *et al.*, 1992]. Nordqvist *et al.* (1992) ont couplé le modèle de réseau d'Andersson et Dverstorp (1987) à celui de fracture unique à ouverture variable de Moreno *et al.* (1988) pour créer un modèle qui tient compte à la fois de la chenalisation provenant de la connexité du réseau et de la variabilité spatiale de l'ouverture de chacune des fractures. Therrien et Sudicky [1996] ont quant à eux développé un modèle 3-D à fractures discrètes insérées dans une matrice poreuse pouvant simuler l'écoulement et le transport autant dans la zone saturée que non saturée.

Afin de tirer parti des approches déterministes et stochastiques, des auteurs comme Cacas *et al.* (1990a) et Tsang *et al.* (1994) ont suggéré que les hétérogénéités majeures (fractures dominantes) soient identifiées et traitées de façon déterministe dans le modèle et que le reste du domaine soit traité en « blocs » en calculant une perméabilité équivalente pour chacun. Shapiro et Andersson (1983) ainsi que Clemo et Smith (1997) ont proposé des modèles utilisant ce concept.

Le principal désavantage des réseaux discrets de fractures est leur paramétrisation. Comme il a été dit plus haut, la caractérisation détaillée des sites est impossible sur de grandes distances et la génération statistique des réseaux est entravée par la méconnaissance des lois de distribution des différentes caractéristiques (localisation, longueur, orientation, ouverture). De fait, il est difficile de réaliser des essais hydrauliques sur des fractures isolées et les forages ne peuvent évidemment pas couvrir l'ensemble du terrain à l'étude. De plus, il semble y avoir peu de corrélation entre les ouvertures observées et celles calculées avec les essais hydrauliques [Long *et al.*, 1982]. Cette différence est probablement due en partie aux contraintes *in situ* qui réduisent l'espacement entre les blocs. Des différences sont également présentes entre les ouvertures calculées par traçage et par essais hydrauliques.

Quel que soit le type d'approche adoptée, la dispersion hydrodynamique est un mécanisme important du transport des solutés dans les aquifères. Les sections suivantes traitent de la dispersion, de la dispersivité et des différentes expressions développées pour les décrire.

2.2 Dispersion et dispersivité

La dispersion est un processus qui a pour conséquence de distribuer le temps de parcours du soluté autour du temps de transfert moyen. En effet, certaines molécules voyagent plus rapidement et d'autres plus lentement que la vitesse moyenne de l'eau. Le coefficient de dispersion est donc un paramètre crucial, en particulier pour l'évaluation de risques de pollution, puisque la dispersion dilue les concentrations mais étale aussi les temps d'arrivée en un point.

La dispersion dépend de deux processus : la dispersion hydrodynamique et la diffusion moléculaire. La diffusion moléculaire est un phénomène brownien (mouvement aléatoire des molécules) qui provoque le déplacement du soluté d'une région à forte concentration vers une région à plus faible concentration. Ce processus à l'échelle macroscopique peut devenir un mécanisme de transport important si les vitesses d'écoulement sont très lentes. Cependant, elle est généralement négligeable devant la dispersion hydrodynamique dans les aquifères. La dispersion hydrodynamique provient à l'échelle

microscopique de la distribution des vitesses à l'intérieur des pores causée par le frottement sur les parois, de la différence dans la taille des pores le long du chemin suivi par les molécules et de la tortuosité (complexité de l'agencement des pores entre eux) de ce chemin.

À l'échelle macroscopique, les particularités microscopiques du milieu deviennent négligeables et la dispersion est causée par la présence d'hétérogénéités à des échelles plus grandes (contrastes de conductivité hydraulique). De façon globale, plus le matériau est hétérogène, plus la dispersion est élevée [Banton et Bangoy, 1997]. La définition employée le plus souvent pour caractériser la dispersion dans l'équation d'advection-dispersion (équation 2.2) est : $D = \alpha \bar{v} + D_m$, où α est la dispersivité, \bar{v} la vitesse moyenne du fluide et D_m la diffusion moléculaire. Cette équation n'était à l'origine qu'une hypothèse de travail proposée pour des milieux isotropes statistiquement homogènes et n'a été validée avec succès qu'en laboratoire [Loaiciga, 1988]. Il faut souligner que le coefficient de dispersion peut être calculé de plusieurs façons. La définition choisie doit permettre la description de l'étalement du soluté de façon cohérente en fonction du système étudié. Par exemple lors de l'utilisation d'injections de particules, la dispersion peut être décrite en utilisant soit la variance des déplacements des particules à un temps donné, on parle de définition « sécante » : $D = \sigma^2 / 2t$, la dispersion est alors dite « apparente », soit on utilise les variances à deux temps donnés, on parle de définition « tangente » : $D = (\sigma^2(t_1) - \sigma^2(t_2)) / (2(t_2 - t_1))$, et la dispersion est dite « effective » ou « intrinsèque ».

Plus la distance parcourue par le soluté est grande, plus il est probable qu'un grand nombre d'hétérogénéités soient rencontrées, entraînant l'augmentation de la valeur du coefficient de dispersion. D'ailleurs, les essais de traçage montrent bien que la valeur de dispersivité augmente avec l'échelle à laquelle les mesures sont prises [Lallemand-Barrès et Peaudecerf, 1978 ; Gelhar *et al.*, 1985 ; 1992]. Ce comportement, bien différent de celui prédit par les propriétés moyennes du milieu, est souvent qualifié d'« anormal » (*anomalous dispersion*) ou de non fickien. Ceci limite l'utilisation de l'équation d'advection-dispersion, qui nécessite des valeurs du coefficient de dispersion indépendantes de l'échelle. Cela étant, pour des distances assez longues devant la taille

caractéristique des hétérogénéités, le coefficient de dispersion tendrait vers une valeur asymptotique constante qui redonne validité à l'équation de transport.

La dispersivité définie par la relation $\alpha = (D - D_m) / \bar{v}$ est homogène pour une longueur donnée et devrait correspondre à une dimension caractéristique du milieu. En pratique, le problème est plus compliqué. Par exemple, les valeurs de α obtenues en laboratoire sont généralement de plusieurs ordres de grandeur inférieures à celles des essais de terrain, même si les matériaux sont de même origine. En effet, les essais en laboratoire fournissent des valeurs variant généralement entre 0,01 et 1 cm, tandis que celles des essais de traçage vont de 0,1 à 100 m [Anderson, 1984]. Les essais de traçage possèdent l'avantage de pouvoir évaluer *in situ* l'effet des hétérogénéités à une échelle beaucoup plus grande que celle du laboratoire. Leurs résultats ne sont cependant valables que pour le secteur sondé durant l'essai, ce qui limite leur utilisation comme référence pour les modèles numériques à grande échelle. De plus, la dispersivité est généralement déterminée en calant une solution analytique ou numérique de l'équation d'advection-dispersion sur la courbe de restitution concentration-temps obtenue par traçage. Rien ne dit alors que la valeur estimée ne soit pas celle d'un paramètre « hybride » qui compense les limitations du calcul et/ou les hypothèses simplificatrices émises (isotropie, homogénéité, modèle 2-D pour un problème 3-D, etc.).

2.3 Comportement asymptotique et dépendance d'échelle de la dispersion

2.3.1 Relations fondées sur les essais de traçage

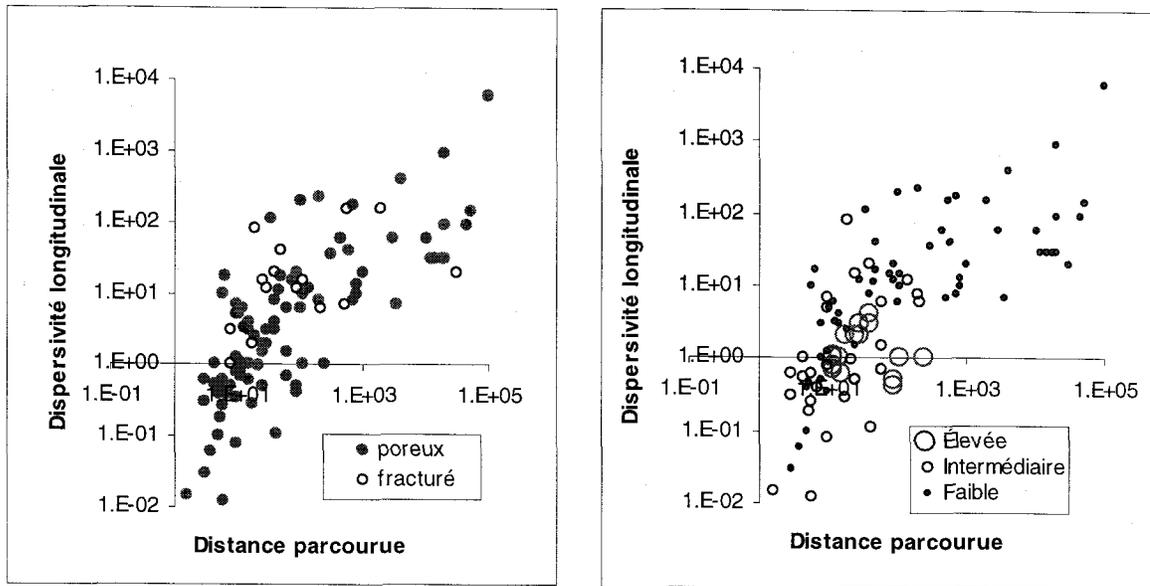
Lallemand-Barrès et Peaudecerf (1978) ont compilé une cinquantaine de valeurs de dispersivités longitudinales obtenues à partir d'essais de traçage pour plusieurs types de formations (comprenant des milieux poreux et fracturés). Ces valeurs, généralement obtenues par calage d'une solution de l'équation d'advection-dispersion, ont été reportées en fonction de la distance séparant les points d'injection et de prélèvement. Elles montrent que la dispersivité a tendance à augmenter avec la distance parcourue. Les auteurs ont toutefois conclu qu'aucune relation ne pouvait être tirée, tant la

dispersion des points sur le graphe était grande. Quelques années plus tard, Anderson (1984) a repris ces données et tracé la droite :

$$\alpha_L = 0,1 \cdot L \quad (2.3)$$

où α_L est la dispersivité longitudinale et L la distance de parcours entre les points d'injection et d'observation. Cette équation empirique est loin d'être précise, mais elle reste très populaire car à même de fournir rapidement un ordre de grandeur. Pickens et Grisak (1981) ont aussi obtenu en moyenne cette relation pour des essais de traçage réalisés par pompage dans un aquifère stratifié.

Gelhar *et al.* (1985) ont également rassemblé des résultats d'essais de traçage (comprenant ceux de Anderson (1984)), mais les ont classés en trois catégories en fonction de leur fiabilité. Cette dernière a été définie en fonction de la méthode employée pour l'essai et son interprétation. Sur les 99 valeurs de dispersivités longitudinales (provenant de 55 sites), trois seulement ont été considérées hautement fiables. En reportant toutes les données en fonction de la distance parcourue, on constate que α_L augmente indéfiniment avec la distance. En tenant compte de leur fiabilité, cette tendance devient beaucoup moins évidente étant donné que la valeur maximale obtenue pour les essais les plus fiables est de 2,7 m et que ceux-ci ont été effectués sur une distance de 100 m ou moins. Ceci pourrait indiquer que la dispersivité atteindrait un plateau au delà d'une certaine distance, mais aucune conclusion ne peut être tirée sans que des essais de traçage fiables sur de grandes distances soient réalisés. Une publication plus récente [Gelhar *et al.*, 1992] a cette fois jugé que 14 des 109 valeurs répertoriées étaient très fiables. Les observations sont semblables, sauf les valeurs maximales qui sont légèrement plus élevées, soit de 4 m pour α_L et 250 m pour L . La figure 2.1 présente les données utilisées par Gelhar *et al.* (1992). Il est à noter que les dispersivités reportées sont des valeurs équivalentes, puisque issues de calages par un modèle fickien de dispersion dans des milieux où le processus ne l'est vraisemblablement pas [Neuman, 1994]. La figure 2.1a révèle que les dispersivités des deux types de milieux (poreux ou fracturés) s'étendent sur un même intervalle.



a) b)
 Figure 2.1 : Dispersivité en fonction de la distance a) Ensemble des données et b) Fiabilité associée aux données (à partir de Gelhar *et al.*, 1992)

À partir de ces données, des équations reliant α_L et L ont été suggérées entre autres par Arya *et al.* (1988), Neuman (1990) et Xu et Eckstein (1995). Arya *et al.* (1988) ont analysé plus de 130 valeurs de dispersivités obtenues à partir d'essais de traçage réalisés sur des distances allant jusqu'à 10 km. Malgré la dispersion des points, leur analyse indique que 75% des points suivent une loi de puissance du type $\alpha_L \sim L^\chi$ où L représente la distance séparant la source du point d'observation. À partir de régressions linéaires, les auteurs ont suggéré $\chi=0,755$ pour les essais de traçage *in situ* et $\chi=1,13$ lorsque les essais en laboratoire étaient ajoutés. Neuman (1990) a choisi de regrouper les dispersivités trouvées en laboratoire et sur le terrain, mais d'éliminer les valeurs obtenues par calibration de modèles numériques (131 données) qui viennent selon lui biaiser les résultats. Il obtient $\chi=1,46$. Malgré l'étalement et la fiabilité variable des données, la droite de régression obtenue a un coefficient $R^2 = 0,74$ avec un intervalle de confiance de 95%. Lorsqu'il sépare les données en fonction de l'échelle de mesure, il obtient une courbe à deux pentes (échelle logarithmique) avec $\chi=1,53$ pour $L < 100$ m et $\chi=0,83$ pour $L \geq 100$ m, illustrant bien la diminution de la pente observée sur la figure 2.1 lorsque L augmente. Xu et Eckstein (1995) ont décidé d'utiliser l'ensemble des données (répertoriées par Gelhar *et al.*, 1992) en leur attribuant des poids en fonction de leur

fiabilité et de tracer une seule courbe. Leur analyse montrait que l'augmentation de α_L est pratiquement négligeable lorsque $L > 1 \text{ km}$.

Les équations obtenues sont donc les suivantes :

$$\text{Arya (1988)} \quad \alpha_L = 0,229 \cdot L^{0,755} \quad (\text{in situ}) \quad (2.4a)$$

$$\alpha_L = 0,044 \cdot L^{1,13} \quad (\text{in situ + laboratoire}) \quad (2.4b)$$

$$\text{Neuman (1990)} \quad \alpha_L = 0,0175 \cdot L^{1,46} \quad (2.5)$$

$$\left. \begin{array}{l} \alpha_L = 0,0169 \cdot L^{1,53} \quad L < 100 \text{ m} \\ \alpha_L = 0,32 \cdot L^{0,83} \quad L \geq 100 \text{ m} \end{array} \right\} \quad (2.6)$$

$$\text{Xu et Eckstein (1995)} \quad \alpha_L = 0,83 \cdot (\log_{10} L)^{2,414} \quad (2.7)$$

La dernière équation représente le cas où les données ayant une fiabilité douteuse se voient attribuer un poids de 1, celles moyennement fiables un poids de 2 et celles hautement fiables un poids de 3. Les équations de Anderson (1984) et de Neuman (1990) donnent des résultats très similaires pour les deux premiers kilomètres. Les valeurs les plus faibles sont toujours obtenues avec l'équation de Xu et Eckstein (1995) lorsque des poids élevés sont attribués aux résultats fiables.

Une des critiques principales de ces interprétations est que les données proviennent d'aquifères de composition variée, poreux et fracturés, dans lesquels les essais ont été réalisés selon différentes méthodologies et interprétés de façons diverses. Taylor *et al.* (1987) croient d'ailleurs que le coefficient de dispersion varie avec l'échelle utilisée pour l'essai, mais probablement pas autant que le rapporte la littérature. La sur-estimation des valeurs de dispersivité serait liée à la quantité et la qualité des données puisque ce paramètre compense pour le manque de connaissance de la variabilité spatiale des paramètres [Neuman, 1993]. D'ailleurs, la réinterprétation des données de quelques essais de traçage considérés peu fiables par Gelhar *et al.* (1992) a presque toujours mené à des valeurs de dispersivité plus petites, sauf pour des distances très courtes. À l'opposé, Neuman (1990) affirme que la qualité des données et leur interprétation ont peu d'effet sur le comportement d'échelle de α_L comparativement aux différences inhérentes à chacun des sites et ne s'intéresse donc pas à leur fiabilité relative.

2.3.2 Relations pour milieux peu hétérogènes

Les efforts consentis à décrire et comprendre le processus de dispersion se sont d'abord focalisés sur les effets des variations de la conductivité hydraulique en milieu poreux. La méconnaissance du comportement de la dispersivité pour de grandes distances a suscité deux philosophies : 1) une valeur asymptotique (limite de Taylor) est atteinte après un certain temps ou une certaine distance ; 2) la dispersivité continue d'augmenter à l'infini avec la distance. Aujourd'hui, nombre de chercheurs sont moins catégoriques et croient que si effectivement l'atteinte d'une valeur asymptotique reste plausible, le mélange requis pour l'obtenir pourrait n'être acquis qu'à des distances très grandes, voire ne jamais se produire.

Les milieux poreux stratifiés horizontalement ont fait l'objet de nombreuses études puisque cette forme d'hétérogénéité est assez facile à prendre en compte dans le développement de solutions analytiques. Quelques auteurs ont présenté des expressions qui indiquent que la dispersivité longitudinale augmente au départ linéairement avec la distance. La plus connue est sans doute celle de Mercado (1967), reprise entre autres par Gelhar *et al.* (1979) et Pickens et Grisak (1981). Elle est valide pour des distributions de conductivité hydraulique normales et s'écrit :

$$\alpha_L = (\sigma_K / \bar{K})^2 \cdot L \quad (2.8)$$

où σ_K et \bar{K} représentent l'écart-type et la moyenne de la distribution des conductivités hydrauliques et L la distance parcourue.

Pickens et Grisak (1981) ont proposé des relations $\alpha_L = c_o \cdot L$ spécifiques au type d'essai de traçage effectué. Ils ont obtenu des constantes « c_o » variant entre 0,041 et 0,256 avec une valeur moyenne de 0,1 (correspondant à l'équation 2.3). Les études théoriques de Matheron et Marsily (1980) ont montré que lorsque l'écoulement est strictement parallèle à la stratification, le transport n'est pas, en général, fickien. Toutefois, lorsque l'écoulement n'est plus parallèle, un mélange se produit entre les couches et asymptotiquement le comportement devient fickien. De leur côté, Molz *et al.* (1983) ont réinterprété les données de Pickens et Grisak (1981) à l'aide de la méthode des moments. Les expressions développées pour la dispersivité ont montré que si la dispersivité transversale α_T est nulle, la dispersivité longitudinale augmente à l'infini en

fonction de L , tandis que pour α_T non nulle (mais non infinie) α_L augmente puis atteint une valeur constante. Toutefois, d'après ces auteurs, la limite n'est atteinte qu'au delà de 100 km, ce qui interdirait l'utilisation d'une valeur constante dans la plupart des cas concrets.

Pour étudier la dispersion dans les milieux fracturés, Neretniek (1983) a modélisé un cas idéalisé d'un écoulement stratifié où l'eau circule entre des plaques parallèles dont les ouvertures (constantes sur chaque strate) sont distribuées log-normalement de façon aléatoire. Il a trouvé que la dispersivité augmentait proportionnellement avec la distance et que l'équation 2.8, développée pour les milieux poreux stratifiés, était applicable dans ce cas.

Le comportement de la dispersivité a également été étudié sur des champs de conductivité hydraulique spatialement hétérogènes. Smith et Schwartz (1980) ont trouvé que les panaches simulés n'avaient jamais une distribution normale dans l'espace, la dispersivité ne pouvant être caractérisée par une valeur constante que dans un nombre très limité de cas. Plus les variations de la conductivité hydraulique K sont fortes, plus le nombre de dispersivités constantes obtenues est faible car le transport est très sensible aux variations de K . L'étude théorique de Schwartz *et al.* (1983) réalisée sur des milieux dont les hétérogénéités ont été associées à des milieux fracturés a montré qu'une dispersivité constante ou même une fonction simple ne pouvait pas être définie. Les chemins préférentiels formés par les contrastes de K empêchent une propagation de type fickienne.

Gelhar *et al.* (1979) et Gelhar et Axness (1983) ont utilisé l'analyse spectrale pour obtenir une expression du tenseur de macrodispersivité en terme de paramètres mesurables sur le terrain pour des milieux isotropes et anisotropes. Selon ces auteurs, la dispersivité augmente de façon linéaire avec la distance à partir de la source jusqu'à ce qu'une valeur asymptotique soit atteinte (limite de Taylor). Ce n'est qu'après ce développement initial, durant lequel le processus de dispersion se développe, que l'équation d'advection-dispersion représenterait correctement le transport de soluté dans le milieu. Cette valeur asymptotique pourrait ne pas être trouvée par essais de traçage en raison des grandes distances requises. Les dispersivités longitudinale et transversale asymptotiques, qui dépendent du type de fonction de covariance utilisée pour décrire les hétérogénéités,

sont exprimées à partir des propriétés statistiques du milieu et sont proportionnelles à la variance du logarithme népérien des conductivités hydrauliques (σ_Y^2 où $Y = \ln K$). Des relations ont été développées pour les cas suivants : milieu statistiquement isotrope ou anisotrope avec écoulement parallèle ou non à la stratification. Pour des champs 2-D isotropes faiblement hétérogènes ($\sigma_{\ln K}^2 \ll 1$), la solution approximative obtenue est :

$$\alpha_L^\infty = \frac{\sigma_{\ln K}^2 \cdot \lambda}{\gamma^2} \quad (2.9)$$

où λ est la longueur de corrélation et $\gamma = 1 + \sigma_{\ln K}^2/6$ pour un milieu isotrope.

Neuman et Zhang (1990) ont développé une théorie (appelée quasi-linéaire) qui tient compte de la dispersion fickienne et non fickienne dans des milieux poreux anisotropes statistiquement homogènes. Contrairement aux autres expressions qui ne s'appliquent que pour des milieux très peu hétérogènes ($\sigma_Y^2 \ll 1$), cette théorie pourrait, selon les auteurs, s'appliquer lorsque $\sigma_Y > 1$. Alors que la dispersivité longitudinale asymptotique est proportionnelle à σ_Y^2 lorsque $\sigma_Y^2 < 1$, la théorie quasi-linéaire prédit que α_L^∞ est proportionnelle à σ_Y lorsque $\sigma_Y > 1$. La dispersivité longitudinale pré-asymptotique lorsque la distance parcourue est petite est définie par [Neuman, 1990] :

$$\alpha_L = c_o L \cdot \sigma_{\ln K}^2 \quad (2.10)$$

où $c_o \approx 0,5$ dans les milieux statistiquement isotropes et $c_o \geq 1$ dans les milieux statistiquement anisotropes. La dispersivité longitudinale varie donc encore une fois linéairement avec la distance parcourue avant d'atteindre le régime fickien.

Les approches stochastiques, impliquant une longueur de corrélation des conductivités hydrauliques petite devant la taille du domaine d'étude, entraînent un comportement fickien au delà d'un certain temps ou d'une certaine distance. En effet, un processus « normal » de diffusion ($D = \sigma^2/2t$) est obtenu lorsque le traceur a expérimenté toutes les valeurs du champ de conductivité hydraulique du domaine. Toutefois, si la longueur de corrélation de la conductivité hydraulique est comparable ou supérieure à la taille du domaine étudié, alors le traceur continue d'expérimenter les effets d'hétérogénéités de plus en plus grandes et la limite de Taylor n'est jamais atteinte [Koch et Brady, 1988]. De fait, de nombreuses études ont mis en évidence depuis quelques années le fait que les hétérogénéités des formations géologiques pouvaient être présentes sur plusieurs

échelles. Dans ce cas, les expressions développées pour les milieux faiblement hétérogènes ne peuvent pas être utilisées.

2.3.3 Relations pour milieux très hétérogènes - approche fractale et théorie de percolation

Introduction à la notion d'objet et de fonctions fractals

A cause d'un comportement non fickien de la dispersion dans bon nombre de cas, les modèles stochastiques ont été délaissés au profit d'approches traitant les milieux géologiques comme hétérogènes sur plusieurs échelles ou d'approches utilisant une définition statistique de la structure du milieu. Ce type d'approches a nécessité l'introduction du concept de «géométrie fractale». Ce concept est important car il permet de décrire la variabilité des paramètres avec la distance (ou le temps) et d'intégrer les corrélations des propriétés à toutes les échelles. Les relations développées pour la dispersion se présentent sous forme de lois de puissance, où l'exposant n'est pas forcément un nombre entier. Ces approches, dont fait partie la théorie de percolation, sont appliquées à l'hydrogéologie depuis une quinzaine d'années.

Une des clés de cette évolution est imputable à l'observation des irrégularités des objets dans la nature à différentes échelles. Plusieurs objets ayant une structure désordonnée possèdent en effet des patrons qui ont tendance à se répéter à différentes échelles, un phénomène appelé auto-similarité (*self-similarity*) [Fetter, 1993]. Les premiers objets fractals étudiés étaient des curiosités mathématiques tels le tapis de Sierpinski et la courbe de Koch. Ces études ont permis d'approfondir la connaissance des lois de puissance précédemment évoquées, mais ces objets sont trop réguliers pour pouvoir modéliser les propriétés géologiques. Les fonctions fractales les plus utiles pour décrire les distributions des propriétés réelles sont des fonctions stochastiques qui possèdent une auto-similarité statistique et non exacte [Hewett, 1986].

Dans les milieux fractals, les hétérogénéités sont présentes à toutes les échelles et possèdent des longueurs de corrélation infinies. Elles peuvent donc provoquer un accroissement continu de la dispersivité, la dispersion étant continuellement en état de transition sans jamais atteindre une valeur constante. En effet, l'interprétation la plus

répandue pour expliquer la dépendance d'échelle de la dispersivité est que celle-ci serait causée par la présence d'hétérogénéités à plusieurs échelles [Hewett, 1986 ; Ross, 1986 ; Sposito *et al.*, 1986 ; Dagan, 1990 ; Berkowitz et Scher, 1995]. Les propriétés de transport des milieux poreux hétérogènes étant déterminées par la structure de corrélation spatiale des champs de conductivité hydraulique, la dispersivité associée à des champs fractals est infinie, sauf si une limite correspondant à la taille des plus grandes hétérogénéités à prendre en compte est imposée. Si une limite correspondant à une longueur plus petite que celle du domaine étudié est imposée à la fonction de covariance (ou au variogramme), une dispersivité constante peut alors être obtenue asymptotiquement et sa valeur dépend de cette limite. Notons cependant que la règle empirique d'une distance minimale parcourue de l'ordre de dix longueurs de corrélation reste d'usage avant l'atteinte du régime asymptotique.

Des études récentes ont montré que des fonctions monofractales stochastiques telles que fBm (*fractional Brownian motion*) et fGn (*fractional Gaussian noise*) étaient appropriées pour caractériser les hétérogénéités des formations géologiques [Liu et Molz, 1996]. Le processus fBm dérive de la distribution normale (de Gauss), dans laquelle un exposant H , appelé coefficient de Hurst, a été introduit pour généraliser l'équation. Ce coefficient est relié à la dimension fractale par la relation $d_f = d + 1 - H$ où d est la dimensionalité (dimension euclidienne) du système. De nombreuses études ont permis de trouver des valeurs de H caractérisant les distributions de conductivité hydraulique et de porosité [Hewett, 1986 ; Philip, 1986 ; Wheatcraft et Tyler, 1988 ; Abadou et Gelhar, 1990 ; Neuman, 1990 ; Molz et Boman, 1993 ; Painter, 1996 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996]. Les valeurs estimées varient toutefois sur toute la gamme $0 < H < 1$, ce qui montre qu'un consensus n'est pas atteint, ou que la méthode possède possiblement en soit des faiblesses non encore résolues. Le processus fBm est présenté plus en détail au chapitre 6.

Des méthodes utilisant le processus fLm (*fractional Lévy motion*), un modèle non gaussien plus général englobant les processus fBm et fGn, peuvent également servir à interpréter les variations verticales et horizontales des propriétés hydrauliques [Painter, 1996]. Par ailleurs, Liu et Molz (1997) ont montré que les variations de K sont plus hétérogènes à petite échelle qu'à grande échelle, ce qui n'est pas cohérent avec les caractéristiques des fonctions monofractales, mais fait plutôt appel au concept «multi-

fractal». Il s'agit d'une généralisation de l'approche monofractale, caractérisée par une dimension fractale qui varie continuellement en fonction de la distance ou du temps. Trois des quatre sites étudiés par Liu et Molz (1997) ont montré un comportement universel multi-fractal pour les variations verticales de K , dont un était mono-fractal. Sur le quatrième site (Borden, Ontario), l'étude des variations horizontales de la conductivité hydraulique n'a pas révélé de comportement fractal.

Dans ce qui suit, nous souhaitons donner un aperçu des principaux résultats obtenus pour ce qui a trait à la dispersion dans les modèles incorporant la notion d'objet fractal. Les modèles fractals ont été divisés en trois groupes selon que ceux-ci sont basés sur la synthèse des essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde ou qu'ils utilisent des troncatures ou non dans la fonction de covariance du champ de conductivité hydraulique. La dernière sous-section concerne la dispersion estimée avec la théorie de percolation.

Théories fondées sur les essais de traçage

Ross (1986) a dérivé théoriquement une relation entre l'écart-type de la position d'une particule de soluté (σ) et la distance parcourue pour un modèle composé de fractures distribuées aléatoirement. Il utilise des lois de puissance pour décrire le nombre et la transmissivité des fractures en fonction de la longueur l : $n(l) \sim l^{-q_1}$ et $T(l) \sim l^{q_2}$. Il obtient une relation $\sigma \sim L^\chi$ où χ est fonction de q_1 et q_2 et dont le comportement dépend du signe de $(q_2 - q_1 + 4)$. Si $q_1 > q_2 + 4$, il trouve $\sigma \sim L^{1/2}$ comme dans le cas de la diffusion et si $q_1 < q_2 + 4$, il obtient avec ses hypothèses $\sigma \sim L$. La dispersivité apparente $\sigma^2/2L$ dépend donc linéairement de L comme dans les essais de traçage.

Wheatcraft et Tyler (1988) ont développé des expressions pour la dispersivité dans le cas de trajectoires uniques ou multiples de particules en milieu poreux. Leur théorie découle du principe qu'une particule parcourt une longueur fractale beaucoup plus grande que la longueur mesurée sur le terrain (L). Les expressions indiquent que la dispersion dépend de l'échelle de mesure selon une loi de puissance, l'exposant étant directement relié à la dimension fractale du trajet de la particule (d_f) : $\alpha_L \sim L^{1-H}$ dans le cas d'un trajet unique et $\alpha_L \sim L^{3-2H}$ dans le cas de trajets multiples. Tyler et Wheatcraft (1992) ont aussi réinterprété

les résultats de plusieurs publications [Hewett, 1986 ; Philip, 1986 ; Neuman, 1990 ; Abadou et Gelhar, 1990] et exprimé les dispersivités en fonction du coefficient de Hurst pour permettre une comparaison de celles-ci. Cependant, Berkowitz et Braester (1991) critiquent la marche au hasard fractale employée dans ce genre d'approche, arguant qu'elle n'est pas reliée directement en termes physiques au transport ni en milieu poreux, ni en milieu fracturé.

Neuman (1990) a tenté d'expliquer la dépendance d'échelle de la dispersivité directement à partir des données des essais de traçage. Pour ce faire, Neuman conçoit les milieux géologiques comme une hiérarchie d'unités homogènes distinctes non corrélées entre elles, chacune ayant un champ de $\ln K$ avec sa propre variance (σ_Y^2) et sa propre longueur de corrélation (*integral scale*). L'ensemble des données de terrain est interprété selon la théorie quasi-linéaire de Zhang et Neuman (1990) en supposant que les $\ln K$ ne sont pas statistiquement homogènes, mais forment plutôt un processus fBm, c'est-à-dire un champ ayant une structure fractale aléatoire. Cette hiérarchie se révèle avoir un variogramme auto-similaire de forme :

$$\gamma_Y(L) = C_o L^{2H} \quad \text{pour } 0 < H < 1/2 \quad (2.13)$$

où C_o est une constante positive et H est le coefficient de Hurst. Neuman trouve en moyenne avec les données de terrain :

$$\gamma_Y(L) = (0,0175 / c_o) L^{2H} \quad (2.14)$$

avec $H \approx 0,25$ et c_o entre 0,5 et 1. Ce variogramme, qu'il appelle «loi universelle», représente selon lui soit une auto-similarité globale lorsqu'un grand nombre de données provenant de sites de diverses origines, sous diverses conditions d'écoulement et de transport est examiné en groupe, soit une loi moyenne autour de laquelle les conditions à un site en particulier fluctuent. Il trouve :

$$\alpha_L = C_o \cdot L^{2H+1} \quad (2.15)$$

d'après les équations 2.10 et 2.13. Avec $H=0,25$, on a $\alpha_L \sim L^{1,5}$, ce qui correspond à la relation obtenue à partir des essais de traçage (équation 2.5) [Neuman, 1995]. L'exposant $(2H+1)$, nécessairement supérieur à 1, implique que la dispersivité augmente toujours plus rapidement que linéairement. Tyler et Wheatcraft (1992) soulignent que ce modèle ne respecte pas le comportement brownien à $H=1/2$ (α_L n'est pas indépendant de la distance ou du temps).

Modèles fractals incluant des troncatures

Philip (1986) a utilisé une approche lagrangienne basée sur la corrélation des variations de vitesse (sans prendre en compte directement la distribution de K). En tronquant le spectre de la covariance des vitesses à une échelle minimale ζ^* , il trouve aux temps courts $\alpha_L \sim t$, tandis que la dispersion asymptotique prendrait plutôt la forme d'une loi de puissance du type $\alpha_L \sim t^\delta / \zeta^*$. L'exposant δ correspond au taux de décroissance du spectre de covariance et serait compris dans l'intervalle $[0 ; 1]$. Tyler et Wheatcraft (1992) relient cet exposant au coefficient de Hurst selon $\delta = 2H - 1$ car le spectre de vitesse utilisé est similaire à un spectre fGn (voir chapitre 6). Selon eux, les travaux de Hewett (1986), également basés sur des fonctions fGn, devraient aussi mener au même résultat, soit $\alpha_L \sim t^{2H-1}$.

Di Federico et Neuman (1998a et b) ont poursuivi les travaux de Neuman (1990 ; 1995) sur des milieux multi-échelles en tronquant le variogramme qui caractérise le champ des $\ln K$ aux deux extrémités. La limite supérieure correspond à la longueur du domaine (ζ_l) et la limite inférieure à l'espacement des mesures sur le terrain (ζ_u). En tenant compte de ces troncatures et pour $0 < H < 1/2$, Di Federico et Neuman (1998a) ont développé une équation générale pour le variogramme, qui se simplifie à $C_0 L^{2H}$ (correspondant à l'équation 2.13) lorsque $\zeta_l \rightarrow \infty$ et $\zeta_u \rightarrow 0$.

Abadou et Gelhar (1990) se sont également intéressés à la troncature d'un champ $\ln K$ fractal ayant une distribution fBm. Dans la continuité des travaux de Gelhar et Axness (1983), ils ont étudié l'influence de la taille du domaine sur les caractéristiques de l'écoulement et du transport dans des milieux poreux multi-échelles. Ils obtiennent pour la macrodispersivité longitudinale :

$$\alpha_L = \frac{\sigma_Y^2 \cdot (L - \zeta_u)}{2 \cdot \ln(L / \zeta_u)} \quad (2.16)$$

où L est la longueur caractéristique du panache de soluté et ζ_u représente l'échelle de grandeur de l'espacement des mesures sur le terrain. Ils ont trouvé que la dispersivité augmente à peu près linéairement avec la taille du panache. Sur les données de conductivités hydrauliques verticales provenant de trois forages, ils ont obtenu un coefficient de Hurst presque nul, c'est-à-dire une grandeur non corrélée qui par

conséquent ne valide pas mais n'invalide pas non plus leur théorie. Selon Tyler et Wheatcraft (1992), leurs données correspondraient plutôt à $H \approx 1$ avec $\alpha_L \sim t^{2H-1} = t$.

Zhan et Wheatcraft (1996) ont développé les équations des tenseurs de macrodispersivité asymptotiques pour des milieux poreux fractals isotropes et anisotropes en 1, 2 et 3-D. Leurs champs $\ln K$ ont été générés à partir d'un processus fBm. Ce sont les limites du champ qui déterminent la taille des hétérogénéités qu'une particule peut expérimenter et donc la troncature des corrélations. Cette limite est reliée à ζ_{\max} , la frontière la plus proche entre ζ_x , ζ_y et ζ_z . En 1, 2 et 3-D, les macrodispersivités longitudinales diminuent lorsque la dimension fractale (d_f) augmente. Elles sont proportionnelles à ζ_{\max}^2 en 1-D et proportionnelles à ζ_{\max} en 2 et 3-D. Les hétérogénéités ont donc plus d'influence sur la dispersion dans les domaines en 1-D, ce qui est normal puisque les particules n'ont aucune possibilité de contourner les zones de faibles perméabilités. Comparées aux données de terrain, les macrodispersivités longitudinales obtenues pour ces champs fBm sont plus fortes. La raison évoquée par les auteurs serait la sous-évaluation des dispersivités obtenues par traçages car les distances sont trop faibles pour atteindre un régime de dispersion fickien. Les macrodispersivités transversales sont indépendantes de d_f et de ζ_{\max} et correspondent à celles trouvées par Gelhar et Axness (1983).

Hassan *et al.* (1997) ont étudié le transport des contaminants avec la méthode de marche au hasard dans des milieux poreux 2-D avec un champ de perméabilité fBm. Les résultats ont montré que la dimension fractale a peu d'effet aux temps courts sur la dispersion du soluté, mais aux temps longs, plus d_f augmente et moins les dispersions longitudinale et transversale sont importantes à cause du mélange provoqué. Cette conclusion est en partie contradictoire avec les travaux de Zhan et Wheatcraft (1996), puisque ceux-ci avaient obtenu une dispersion transversale indépendante de d_f .

Modèles fractals sans troncature

Les modèles multi-échelles sans troncature supérieure, c'est-à-dire sans limite imposée pour éliminer les plus grandes hétérogénéités, montrent que les variations de vitesse présentes aux différentes échelles entraînent un comportement anormal de la dispersion quelle que soit la distance de la source. Koch et Brady (1988) ont utilisé l'approche «non

locale» pour étudier la dispersion. L'équation non locale de transport implique que le déplacement d'une particule n'est pas seulement influencée par son voisinage immédiat, mais dépend de ce qui arrive partout ailleurs dans le domaine et aussi de son historique de migration [Cushman, 1991]. Avec une fonction de corrélation diminuant lentement (semblable à une fGn), ils ont trouvé que la variance de déplacement des particules augmentait plus rapidement que linéairement ($\sigma^2 \sim L^\chi$ où $\chi > 1$).

Glimm *et al.* (1993) ont trouvé que pour un champ aléatoire hétérogène sur plusieurs échelles dont la fonction de covariance est $Cov_Y \sim r^{-\phi}$, trois régimes sont possibles, dépendant de la valeur de ϕ . Pour $\phi < -1$, Cov_Y décroît rapidement (propriétés corrélées sur de courtes distances) et la dispersivité tend vers une valeur constante. Pour $\phi > 0$, la covariance Cov_Y doit être tronquée pour pouvoir définir une dispersivité, dont le comportement asymptotique dépend de cette limite imposée. Pour $-1 < \phi < 0$, Cov_Y décroît lentement et on a $\alpha_L \sim L^\chi$ où χ diminue continuellement avec la distance parcourue. La dispersion est donc considérée multi-fractale dans ce cas.

Les expressions de dispersivité présentées jusqu'à maintenant supposaient que le traceur emprunte *a priori* tout le champ d'écoulement, impliquant que l'hypothèse d'ergodicité est valable. Cette hypothèse, qui stipule que les moyennes spatiales sur un champ de taille tendant vers l'infini sont assimilables à l'espérance mathématique, implique que le soluté à chaque réalisation est supposé avoir expérimenté la totalité des hétérogénéités du domaine. Ceci induit évidemment une sur-estimation de la dispersivité lorsque le panache n'est pas infini ou que la variance du champ $\ln K$ (σ_Y^2) n'est pas nulle. Puisque le panache ne grossit que sous l'influence des variations de vitesse (hétérogénéités) des longueurs inférieures à la sienne, la dispersion devrait donc être calculée en tenant compte exclusivement de ces échelles [Dagan, 1990 ; 1994 ; Rajaram et Gelhar, 1995 ; Bellin et al., 1996].

Dagan (1994) a utilisé la méthode des moments spatiaux pour étudier la dispersion dans des formations 2-D hétérogènes sur plusieurs échelles. Il est clair que les milieux fractals n'obéissent pas à l'hypothèse d'ergodicité puisque le panache de soluté ne peut avoir expérimenté toute la distribution des conductivités hydrauliques si les hétérogénéités sont présentes à toutes les échelles. Les milieux réels seraient donc non ergodiques. Dagan

(1994) utilise les dérivées en temps des moments spatiaux d'ordre un et deux de la concentration pour retrouver une dispersion obéissant à la définition tangente :

$$D_L = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_x^2}{\partial t}. \text{ La dispersion calculée qu'il renomme «coefficient de dispersion relatif» } d_L$$

remplace alors le coefficient D_L . Le paramètre d_L représente l'entité mesurable dans un essai de traçage en réponse à une injection ponctuelle ou de taille limitée, tandis que D_L caractérise l'enveloppe statistique d'un ensemble de panaches en réponse à n injections ponctuelles distribuées sur l'ensemble du champ. Si l'hypothèse d'ergodicité est respectée $d_L = D_L$, sinon $d_L < D_L$. En s'inspirant de l'étude de Glimm *et al.* (1993), il utilise une covariance $\text{Cov}_{Y \sim r^\phi}$ avec l'intervalle $-1 < \phi < 0$ dans lequel le domaine n'est pas borné. Il trouve que D_L a un comportement anormal (non gaussien), tandis que d_L tend vers une valeur constante (comportement fickien) lorsque $L \rightarrow \infty$ et que sa valeur est contrôlée par la taille initiale de la source dans la direction perpendiculaire à l'axe principal d'écoulement. Cette méthode utilisant la définition tangente de la dispersion à l'avantage de ne pas nécessiter de limite arbitraire pour les hétérogénéités, le panache fournissant lui-même les limites. Elle est de surcroît directement comparable aux dispersions calculées grâce à la variance des temps d'arrivée du soluté sur un système de traçage entre deux points. En effet cette dispersion ne s'intéresse qu'à la partie du champ investie par le traceur et nous verrons notamment au chapitre 7 que les valeurs sont toujours plus faibles que celles où fictivement on impose au traceur d'investir la totalité du champ (injection d'un front dans un écoulement en perméamètre). Dagan croit que la dispersion ne peut pas augmenter plus rapidement que linéairement avec la distance, en opposition avec les résultats de Neuman (1990).

Rajaram et Gelhar (1995) ont également développé des équations pour la dispersivité calculée par la méthode des moments spatiaux de la concentration en réponse à une injection ponctuelle. Cette fois par contre, les moments sont dérivés par rapport à la distance et non au temps. Les résultats obtenus avec des champs fGn en 3-D indiquent que la dispersivité longitudinale associée à la concentration moyenne globale du système est dépendante du déplacement ($\alpha_L \sim L^{2H-1}$), tandis que la dispersivité calculée en suivant la progression du panache (qu'ils appellent $\alpha_L^{\text{relative}}$) tend vers une valeur constante lorsque $L \rightarrow \infty$, en accord avec les résultats de Dagan (1994). Les composantes transversales $\alpha_T^{\text{relative}}$ diminuent et tendent vers zéro à de grandes distances.

Modèles de percolation

Les réseaux percolants, qui utilisent une définition statistique de la structure du milieu, permettent de représenter les chemins où la majorité du fluide circule. Ces réseaux, formés des fractures ou des zones les plus transmissives, peuvent être fractals ou non selon le degré de connexité des fractures. Les réseaux de percolation sont intéressants car ils permettent : (1) d'évaluer le comportement global de type continu ou discontinu du milieu, avec pour conséquence dans le cas discontinu, l'impossibilité d'utiliser les outils numériques classiques des milieux poreux ; (2) de quantifier les effets de la connexité des fractures et/ou des zones perméables. En effet, plusieurs études ont montré que même dans les milieux très fracturés, seule une fraction minime de ces fractures participe à l'écoulement et au transport [par exemple, De Marsily, 1985; Long et Billaux, 1987; Long *et al.*, 1991]. La connexité des fractures joue donc un rôle fondamental.

La théorie de percolation s'utilise de plus en plus non seulement pour l'écoulement et le transport dans les milieux poreux et fracturés, mais aussi dans les études morphologiques qui traitent de la géométrie et la taille des grains (ou des pores), des fractures et leur connexité. Par exemple, la théorie de percolation a été utilisée pour étudier la morphologie des réseaux de fractures [Sahimi, 1993 ; Bour et Davy, 1997], l'écoulement dans les milieux poreux [Halperin *et al.*, 1985 ; Sahimi, 1987 ; 1993; Sahimi et Imdakm, 1988 ; Alon *et al.*, 1990 ; Berkowitz et Balberg, 1992 ; Bernabé et Bruderer, 1998 ; Bruderer et Bernabé, 2001] et l'écoulement dans les milieux fracturés [Englman *et al.*, 1983 ; Balberg *et al.*, 1984 ; Charlaix *et al.*, 1984 ; 1987 ; Robinson, 1984 ; Wilke *et al.*, 1985 ; Berkowitz *et al.*, 1988 ; Charlaix *et al.*, 1988 ; Hestir et Long, 1990 ; Balberg *et al.*, 1991 ; Berkowitz et Braester, 1991 ; Lee *et al.*, 1994 ; Berkowitz, 1995 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996 ; Bour et Davy, 1997 ; 1998]. Une revue récente de ces problèmes est proposée par Sahimi (2000).

Par contre, très peu de travaux abordent la dispersion dans ce type de réseaux. Les principales publications sont de Sahimi et collaborateurs. Ils ont développé des expressions pour la dispersivité dans des milieux poreux hétérogènes à l'échelle macroscopique [Sahimi, 1987, 1993, 1995 ; Sahimi et Imdakm, 1988] ainsi que pour des champs de perméabilités générés avec un processus fBm [Sahimi, 1995 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996]. Dans les champs fBm, la dispersivité serait proportionnelle à t^{δ} où

$0 < \delta < 1$, conformément aux travaux de Philip (1986) et la variance de position des particules (σ^2) augmenterait plus rapidement que linéairement en fonction de la distance parcourue, conformément aux travaux d'auteurs comme Ross (1986) et Koch et Brady (1988). Ces résultats seront revus en détails dans les chapitres suivants, notamment au chapitre 3, consacré à la théorie de percolation, et au chapitre 6 qui traite exclusivement des champs fBm.

2.4 Discussion

Pour représenter les milieux hétérogènes, l'approche continue, bien que très pratique, n'est pas toujours applicable étant donné que le milieu doit avoir une bonne densité de fractures de petite taille (par rapport au domaine étudié) ou de zones transmissives très bien connectées pour qu'un VER puisse exister. Notons de plus que l'existence d'un VER pour un problème diffusif comme l'écoulement, n'implique pas l'existence d'un VER pour un problème advectif-dispersif comme le transport. En effet, même si le milieu peut se représenter par des conductivités hydrauliques effectives (une seule valeur moyenne par zone) pour l'écoulement, le transport de soluté ne sera pas nécessairement bien décrit. Selon De Marsily (1985), la variabilité de vitesse d'une fracture à l'autre à l'intérieur d'un système est tellement grande que réaliser des simulations pour le transport avec le champ de vitesse d'un milieu poreux équivalent ne voudrait absolument rien dire. De Marsily (1985) va même jusqu'à avancer l'idée que le concept même de VER ne serait pas pertinent dans le cas des aquifères fracturés puisque si un système de fractures ne se comporte pas comme un milieu poreux équivalent à une échelle, augmenter l'échelle d'observation n'améliorera pas le comportement de ce système. En effet, si les fractures ne sont pas interconnectées à une échelle, l'augmentation de cette échelle ne changera en rien ce manque de connexion. Cependant, la caractérisation géométrique complète d'un aquifère fracturé étant impossible, l'approche continue reste le plus souvent le modèle conceptuel employé. Il est vrai que ce genre d'approche a rendu et rend encore de nombreux services avec parfois de belles réussites comme en ingénierie pétrolière. Cela étant, même dans cette activité non philanthropique, le besoin d'approches plus réalistes (exhaustives) se fait sentir et les élans vers une approche discontinue sont de plus en plus fréquents.

Les essais de traçage *in situ* réalisés dans les milieux poreux et fracturés montrent que la dispersivité augmente avec la distance parcourue par le soluté depuis sa source. Très peu d'essais ont été réalisés sur plus de 1 km, mais il est peu probable qu'une valeur asymptotique constante soit atteinte à des distances raisonnables puisque les aquifères réels montrent souvent des hétérogénéités sur plusieurs échelles. En effet, l'augmentation de la dispersivité est principalement attribuée à la variabilité spatiale de la conductivité hydraulique. De nombreuses tentatives ont vu le jour durant les dernières années afin de développer des expressions pour la dispersivité intégrant l'effet d'échelle, en fonction de la distance ou du temps. Si la fonction de covariance décrivant la structure du champ de conductivité hydraulique décroît rapidement, un modèle stochastique impliquant un comportement fickien de la dispersion peut être utilisé pour de grandes distances. Toutefois, des modèles utilisant la notion de géométrie fractale doivent être utilisés pour décrire les formations géologiques hétérogènes sur plusieurs échelles. Dans ce cas, la fonction de covariance décroît lentement car la longueur de corrélation est infinie ou très grande et le soluté n'arrive jamais à investir toute les hétérogénéités du milieu, provoquant une augmentation continue de la dispersivité avec la distance parcourue. Pour qu'un comportement asymptotique fickien puisse être atteint, la fonction de covariance doit être tronquée (élimination des échelles supérieures) ou les échelles supérieures à celle du panache doivent être exclues du calcul. Plusieurs auteurs [Hewett, 1986 ; Neuman, 1995 ; Sahimi 1995 ; Liu et Molz, 1997] croient que les processus fGn et fBm fournissent des modèles adéquats pour représenter la structure spatiale des propriétés hydrodynamiques des formations géologiques.

L'inconvénient majeur associé aux approches fractales est que les expressions développées pour la dispersion sont très complexes. Les modèles issus de la théorie de percolation s'avèrent particulièrement prometteurs car (1) ils permettent d'intégrer l'effet d'échelle dans le transport de soluté tout en étant relativement faciles à élaborer et (2) ils permettent de simuler autant les milieux continus que discontinus. En effet, l'applicabilité de l'équation d'advection-dispersion est souvent remise en question lors de la modélisation de milieux hétérogènes (discontinus) due à l'effet d'échelle de la dispersion. L'advection pure peut être utilisée pour représenter la dispersion mécanique provenant de l'hétérogénéité des vitesses du fluide à l'intérieur des chemins préférentiels. Ceci peut être réalisé rapidement, avec précision et sur de nombreux réseaux. De plus, les méthodes basées sur les éléments finis ou les différences finies pour simuler l'advection souffrent de

dispersion numérique et requièrent généralement une discrétisation très fine du maillage pour être précis.

Malgré ces grandes qualités, le transport et la dispersion dans les milieux poreux et fracturés ont été relativement peu étudiés avec les réseaux percolants et d'ailleurs, les conditions d'application étaient généralement trop simples pour permettre l'étude de cas réels. La raison principale de ce manque d'intérêt provient sans doute du fait que dans la théorie de percolation classique, la connexité des fractures ou des zones transmissives et les conductivités hydrauliques sont distribuées aléatoirement (au sens de non corrélé dans l'espace) alors que ces propriétés sont spatialement corrélées dans de nombreux cas réels. Dans leur forme la plus générale, les simulations sur réseaux percolants sont à même de quantifier les effets de connexité des zones les plus transmissives, que les propriétés du milieu soient corrélées ou non. C'est pourquoi l'analyse systématique du comportement de réseaux de percolation a été choisie pour étudier la dispersion dans les aquifères hétérogènes. Le chapitre 3 présente les concepts de cette méthode et passe en revue les modèles développés en fonction de leurs spécificités.



3 THÉORIE DE PERCOLATION

3.1 Introduction à la théorie de percolation

Lorsque les hétérogénéités sont d'une échelle comparable à celle du domaine à l'étude, la dispersion présente des effets d'échelle (c'est-à-dire qu'elle dépend des distances investiguées par le soluté) et l'équation d'advection-dispersion classique n'est plus appropriée pour décrire correctement la migration du soluté. Parmi les méthodes susceptibles d'aborder ces effets, l'introduction d'une géométrie fractale du milieu est une voie intéressante car elle permet de décrire des systèmes dont l'hétérogénéité peut tendre vers l'infini.

La théorie de percolation est utilisée dans des domaines aussi variés que la chimie (par exemple pour la polymérisation), la physique (entre autre pour les circuits électriques) et la géologie (pour la fracturation) afin d'expliquer certains processus. Dans la littérature mathématique, les processus de percolation ont été introduits par Broadbent et Hammersley (1957) qui s'étaient intéressés à la propagation d'un fluide dans un milieu aléatoire poreux. Le nom de la théorie provient de l'analogie avec le percolateur à café.

Les concepts de la théorie de percolation sont assez simples et peuvent être facilement illustrés lorsque le milieu étudié correspond à une roche fracturée. À mesure que la densité ou la taille des fractures augmente, plusieurs plans s'intersectent pour former des amas localement perméables. Pour un certain degré de connexité, appelé seuil de percolation, l'eau peut alors circuler d'une extrémité à l'autre du domaine étudié. Au delà de ce seuil, la perméabilité du milieu continue à augmenter puisque les amas se connectent de plus en plus entre eux. Si le système est sous le seuil de percolation, la perméabilité globale est nulle et aucune échelle d'observation est susceptible de fournir un VER. Les propriétés fondamentales des réseaux de fractures ne dépendent donc pas seulement de la densité des fractures, mais principalement de leur connexité.

Des arguments pour l'existence de réseaux comparables dans les milieux naturels existent. Par exemple, des essais de traçage effectués par injection/pompage dans du granite ont montré que des puits séparés de 10 m pouvaient ne pas être connectés même si l'un et l'autre pouvaient être pompés, suggérant la présence d'amas de fractures isolés [Wilke *et al.*, 1985]. De plus, l'étude réalisée par Long et Billaux (1987) qui montrait que seulement 0,1% des fractures contribuaient à la perméabilité du système confirme que plusieurs milieux fracturés possèdent une structure comparable à celle d'un réseau percolant et peuvent être très proches du seuil de percolation. D'ailleurs, Sahimi (1995) défend l'idée qu'à une échelle de quelques kilomètres, la majorité des aquifères pourraient se comporter comme des réseaux percolants.

Dans le cadre de la théorie de percolation, un milieu hétérogène est représenté par un réseau de fractures discrètes ou par un réseau régulier constitué de nœuds reliés entre eux par des liens qui peuvent individuellement représenter une fracture ou une zone homogène. Dans le premier cas, les fractures sont générées à partir de distributions décrivant leurs positions, leurs orientations et leurs longueurs alors que dans le second cas, les nœuds ou les liens peuvent être (aléatoirement ou non) fermés ou ouverts à l'écoulement et au transport. Le système en réseau régulier correspond au cas autour duquel la théorie de percolation a été développée.

Même si le système est bien connecté, la distribution des conductivités hydrauliques peut également jouer un rôle important sur la façon dont l'eau va percoler à travers le réseau (chenalisation de l'aquifère) lorsque le milieu est hétérogène (variations de K importantes) [Sahimi, 1993 ; 1995]. En effet, les liens ayant de faibles conductivités peuvent être éliminés puisque ce sont les zones les plus perméables qui fournissent les chemins par lesquels la grande majorité du fluide circule et le problème peut être avantageusement résolu à l'aide de réseaux percolants. Parce que la théorie de percolation fournit un modèle conceptuel et quantitatif pour expliquer des phénomènes telle la dépendance d'échelle de la dispersion, elle représente un outil précieux pour étudier l'écoulement et le transport dans les milieux hétérogènes.

La section 3.2 présente cette théorie en s'attardant particulièrement sur la dispersion de solutés dans un système en écoulement permanent. Les sections 3.3 et 3.4 discutent des différents modèles de percolation trouvés dans la littérature s'intéressant aux réseaux

aléatoires et corrélés spatialement. Le lecteur intéressé par le développement théorique complet des expressions présentées dans ce chapitre pourra utilement se référer aux ouvrages de Feder (1988), de Stauffer et Aharony (1992) et de Sahimi (1995).

3.2 Présentation de la théorie de percolation

3.2.1 Concepts et définitions

Le développement d'un réseau percolant consiste à éliminer du réseau la fraction des fractures ou zones les moins conductrices de façon à simuler les réseaux d'écoulement naturels dans lesquels l'eau et les solutés circulent à l'intérieur de seulement quelques chemins (les plus transmissifs). Les réseaux constitués d'éléments discrets (représentant les fractures, les grains ou les pores) sont appelés « continus » (ce qui n'empêche pas les discontinuités et par conséquent, la présence de fractures isolées et de bras morts par exemple) et ceux composés de nœuds et de liens (de même longueur) à l'intérieur d'un maillage portent le nom de réseaux réguliers. Les concepts de la théorie de percolation sont introduits ici avec les réseaux réguliers puisque leur géométrie simple permet de calculer plus facilement des expressions théoriques pour différents paramètres. Toutefois, la plupart des réseaux réels d'écoulement possèdent un réseau beaucoup moins bien « ordonné ». C'est pourquoi de nombreuses recherches se sont intéressées aux réseaux continus composés d'objets dont la position, la taille et l'orientation peuvent être distribuées selon différentes lois.

Les modèles à réseaux continus servent à simuler le comportement de milieux poreux en utilisant des formes géométriques comme les cercles et les sphères pour représenter les pores ou les grains, ou encore les milieux fracturés en utilisant des segments (bâtonnets) ou des plaques pour représenter les fractures. Les principales différences qui distinguent les réseaux continus des réseaux réguliers sont le nombre variable de connections possibles par objet et la variabilité de la taille, de la forme et de la direction de ces objets. Celles-ci rendent la détermination des propriétés critiques beaucoup plus ardue dans les réseaux continus que dans les réseaux réguliers. Notons cependant que les réseaux continus peuvent souvent être représentés par des réseaux réguliers équivalents, beaucoup plus faciles à traiter. Jerauld *et al.* (1984) ont montré qu'un réseau désordonné

ayant un nombre moyen de connections par objet égal à celui d'un réseau régulier, aura plusieurs de ses propriétés presque identiques à celles du réseau régulier. Il faut cependant que les deux réseaux aient la même distribution de perméabilité.

Dans les réseaux réguliers, deux types de percolation sont courants : la percolation de sites (correspondant aux nœuds) et celle de liens. Dans les deux cas, les éléments peuvent être ouverts ou fermés à l'écoulement. Dans la théorie de percolation classique, l'ouverture des sites ou des liens est aléatoire non corrélée, c'est-à-dire que chacun est ouvert ou fermé indépendamment de ses voisins. Un lien (ou site) est ouvert avec une probabilité p et fermé avec une probabilité $(1-p)$. Un ensemble de liens (sites) voisins ouverts forme ce qu'on appelle un amas (*cluster*). La figure 3.1 illustre un réseau de percolation de liens dans lequel les liens fermés sont en pointillés (a) et un de ses amas (b). Les amas sont composés de voisins «proches», c'est-à-dire que les liens doivent partager un site pour être reliés (pas de liaison diagonale possible). Les groupes de liens dont les deux extrémités sont reliées à un amas mais qui forment un assemblage de liens en parallèle sont désignés par le terme « boucles » (*blobs*). Dans un réseau de percolation dit standard, tous les liens (sites) ouverts sont identiques.

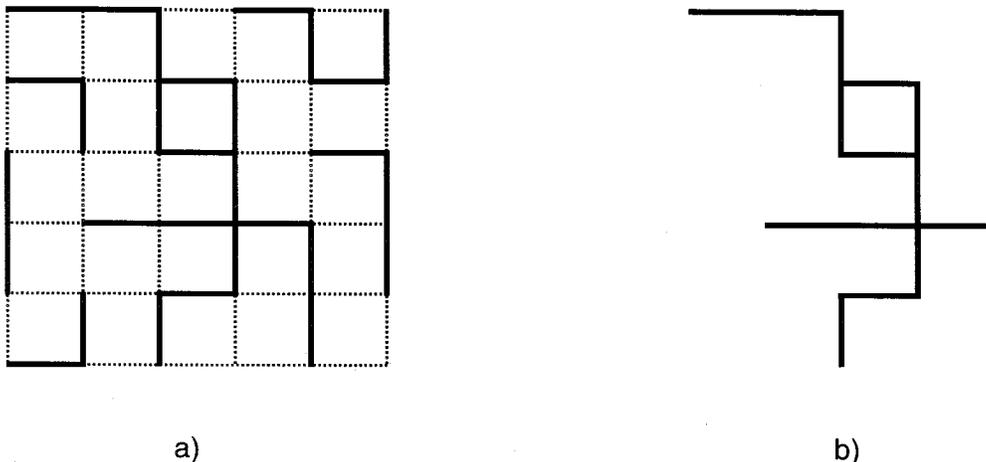


Figure 3.1 : Réseau de percolation de liens a) Réseau global et b) Amas et boucle

La transition entre un milieu conducteur et isolant est caractérisée par le seuil de percolation p_c , c'est-à-dire la probabilité critique d'ouverture des liens (ou sites) au-delà de laquelle il existe toujours un amas permettant l'écoulement et le transport d'une extrémité à l'autre du domaine. Étant donné que la théorie de percolation a été développée pour les milieux infinis, l'amas qui percole d'une extrémité à l'autre porte

souvent le nom d'«amas infini» même si les domaines étudiés sont de taille finie. À mesure que la probabilité d'ouverture diminue, la taille des amas diminue. À $p < p_c$, la densité de sites ou de liens ouverts n'est pas assez grande pour que l'écoulement puisse se produire et la perméabilité globale du système est nulle. L'amas infini à $p = p_c$ est un objet fractal statistiquement auto-similaire. D'ailleurs, tous les amas à $p < p_c$ sont des objets fractals, tandis que pour $p > p_c$ ils sont normaux. La détermination exacte du seuil de percolation p_c est un problème complexe et n'a été possible qu'avec un nombre restreint de réseaux. Les valeurs du seuil de percolation et du nombre de coordination Z_c (nombre de liens par site) des réseaux réguliers les plus courants sont présentées au tableau 3.1. Il est à noter que les seuils de percolation sont toujours beaucoup plus élevés en 2-D qu'en 3-D étant donnée la possibilité de connections plus restreinte.

Tableau 3.1 : Valeurs de seuils pour la percolation de liens et de sites pour des réseaux 2-D et 3-D

Bidimensionnel				Tridimensionnel			
Réseau	Z_c	p_c^b *	p_c^s *	Réseau	Z_c	p_c^b	p_c^s
Alvéolé	3	0,6527	0,6962	Cubique simple	6	0,2488	0,3116
Carré	4	1/2	0,5927	Diamant	4	0,3886	0,4299
Triangulaire	6	0,3473	1/2				

* p_c^b et p_c^s désignent les seuils pour la percolation de liens (b pour *bond*) et de sites respectivement.

La percolation de liens est mieux adaptée à l'écoulement dans les milieux fracturés car l'enlèvement des liens permet d'avoir des nœuds conducteurs représentant une intersection de fractures ayant deux, trois ou quatre branches. De plus dans la percolation de sites, l'enlèvement d'un site ampute le système de tous les liens qui y sont rattachés. Pour ces raisons, le reste du chapitre ne s'intéresse qu'à la percolation de liens dans laquelle tous les sites sont ouverts, tandis que les liens le sont avec une probabilité p .

L'amas infini est constitué de culs-de-sac dans lesquels l'eau est immobile et d'un squelette (*backbone*) dans lequel le fluide circule. En d'autres termes, le squelette correspond à l'amas infini moins les terminaisons mortes. La majorité des liens de l'amas infini ne participe pas à l'écoulement près du seuil de percolation et fait donc partie des culs-de-sac. Les liens du squelette peuvent être divisés en deux catégories : rouges et

bleus. Les liens uniques (*singly-connected*), appelés liens « rouges », ont la particularité d'être indispensables à l'écoulement. En effet s'ils sont coupés, le réseau est divisé en deux parties et le fluide ne peut plus circuler du point d'entrée au point de sortie. Les boucles, elles, contiennent plusieurs liens en parallèle appelés « bleus » et l'élimination de l'un d'eux n'empêchera pas l'écoulement. Les couleurs sont rattachées au développement de la théorie de percolation pour les circuits électriques. Tout le courant passe dans les liens stratégiques qui chauffent et rougissent. Dans les boucles, le courant se répartit dans les différents liens qui restent froids donc bleus. La majorité de la masse (nombre de liens) du squelette se trouve dans les boucles.

Comme les réseaux générés pour l'étude de la théorie de percolation ne peuvent être infinis par construction, l'influence de la taille des systèmes a été étudiée. La relation entre le seuil de percolation d'un milieu fini avec celui d'un milieu infini est la suivante :

$$|p_c(L) - p_c^\infty| \sim L^{-1/\nu} \quad (3.1)$$

où L est la taille du domaine étudié et ν est un exposant relié à la longueur de corrélation du milieu (égal à $4/3$ pour les réseaux 2-D et $0,88$ pour les réseaux 3-D). Ce paramètre sera revu en détail à la section 3.2.2. Dans le cas d'un modèle 3-D, la discrétisation verticale a également une grande influence sur la structure du réseau aléatoire. Les travaux de Silliman (1990) montrent que la perte d'information résultant d'une diminution de la discrétisation verticale ne peut pas être remplacée par l'augmentation de celle dans le plan horizontal, ce qui, en poussant le raisonnement à l'extrême, signifierait qu'il est impossible d'étudier pleinement un phénomène 3-D dans un réseau 2-D.

Plusieurs termes doivent être définis avant de présenter les caractéristiques des réseaux percolants :

- (i) p : probabilité qu'un lien du réseau soit ouvert ou fraction des liens ouverts;
- (ii) $P(p)$: probabilité qu'un lien appartienne à l'amas infini;
- (iii) Fraction accessible $X^A(p)$: fraction des liens ouverts appartenant à l'amas infini ;
- (iv) Fraction du squelette $X^B(p)$: fraction des liens ouverts appartenant au squelette ;
- (v) Longueur de corrélation $\xi(p)$: rayon des amas de liens ouverts de taille finie pour $p < p_c$ et rayon des amas de liens fermés (ou « trous ») pour $p > p_c$. À $p = p_c$, $\xi(p)$ est infinie. Elle représente une échelle de transition qui permet de déterminer à quelle échelle les milieux peuvent être considérés homogènes.

3.2.2 Loïs dites « universelles »

Parmi les caractéristiques des processus de percolation, les plus importantes sont : l'universalité des lois d'échelles (*scaling laws*) et le comportement des propriétés à proximité du seuil de percolation. En effet, plusieurs quantités près du seuil de percolation sont insensibles à la structure du réseau (triangulaire, carré, alvéolé...). Elle peuvent être exprimées sous forme de lois de puissance utilisant la longueur de corrélation ξ_p du réseau dont l'exposant dépend essentiellement de la dimensionalité du système. Par exemple :

$$\left. \begin{aligned} \xi_p &\sim (p-p_c)^{-\nu} \\ P(p) &\sim (p-p_c)^\beta \sim \xi_p^{-\beta/\nu} \\ X^A(p) &\sim (p-p_c)^\beta \sim \xi_p^{-\beta/\nu} \\ X^B(p) &\sim (p-p_c)^{\beta_B} \sim \xi_p^{-\beta_B/\nu} \end{aligned} \right\} \quad (3.2a)$$

$$\left. \begin{aligned} G(p) &\sim (p-p_c)^\mu \sim \xi_p^{-\nu/\nu} \\ K(p) &\sim (p-p_c)^e \sim \xi_p^{-e/\nu} \end{aligned} \right\} \quad (3.2b)$$

où G est la conductivité électrique et K est la conductivité hydraulique du système. Dans les réseaux standard, G est égal à K à une constante près puisque tous les liens ouverts sont identiques. Les exposants ν , β et β_B devraient être universels pour tous les types de milieux (réseaux continus ou réguliers) près du seuil de percolation puisque ces paramètres sont liés à la connexité des liens du réseau, quelles que soient la forme des liens et leur conductivité [Feng *et al.*, 1987]. L'utilisation de champs de conductivités hydrauliques corrélées spatialement ne change pas cette universalité (bien que p_c soit modifié) pourvu que la longueur de corrélation soit petite devant la taille du domaine [Sahimi, 1994]. Les exposants e et ν sont égaux et universels dans les réseaux réguliers, mais ne le sont pas nécessairement dans les réseaux continus.

La longueur de corrélation des réseaux ξ_p représente une limite qui permet de déterminer si le milieu est fractal ou non. En effet si L est nettement supérieure à ξ_p , le domaine peut-être considéré macroscopiquement homogène. Par contre, si L est inférieure à ξ_p (comme au seuil de percolation puisque ξ_p est infinie) alors un amas s'étend sur tout le domaine et celui-ci possède une structure fractale (statistiquement auto-similaire). La longueur L devient la longueur caractéristique (représentative) du milieu et toutes les

propriétés du système en dépendent. La longueur de corrélation ξ_p doit alors être remplacée par L dans les équations 3.2 et 3.4. Au seuil de percolation, ξ_p diverge (voir équation 3.2a) et l'amas infini ainsi que son squelette sont des objets fractals à n'importe quelle échelle L . Les hétérogénéités présentes à une échelle inférieure à ξ_p n'ont aucune influence sur l'écoulement.

Les valeurs des différents exposants actuellement acceptées [Sahimi, 1995] pour les cas bidimensionnel et tridimensionnel sont présentés au tableau 3.2. Elles peuvent être déterminées selon différentes méthodes théoriques, dont la technique de renormalisation et celle permettant de relier les systèmes de taille finie à ceux infinis (*finite-size scaling*). Elles ont généralement été vérifiées à l'aide de méthodes numériques, par exemple de type Monte Carlo, appliquées sur de très grands réseaux.

Tableau 3.2 : Valeurs des exposants critiques pour les réseaux 2-D et 3-D (de liens)

Exposant	d=2	d=3
β	5/36	0,41
β_B	0,48 ¹	1,05
ν	4/3	0,88
e	1,3	2,0

Les relations (3.2) peuvent aussi être utilisées pour développer d'autres relations. Par exemple, la vitesse moyenne de l'eau dans le squelette étant proportionnelle à K/X^B , on obtient [Sahimi, 1987] :

$$V \sim (p - p_c)^{e-\beta_B} \sim \xi_p^{-\theta_B} \quad (3.3)$$

où $\theta_B = (e - \beta_B)/\nu$. Une équation similaire peut être définie pour l'amas infini lorsque la diffusion dans les culs-de-sac est dominante avec $\theta = (e - \beta)/\nu$. La dispersion aussi peut être exprimée sous forme de lois de puissance, mais les exposants diffèrent d'un régime d'écoulement à l'autre (en fonction du nombre de Peclet) ; ceux-ci font l'objet de la sous-section 3.2.3.

Il est logique de penser que la masse M de l'amas (le nombre de liens dans l'amas le plus important) soit environ égale à $P(p) \times L^d$ pour $p > p_c$ et qu'à p_c elle soit très proche de

¹ Berkowitz et Balberg (1993) fournissent cependant une valeur de β_B de 0,53 pour les réseaux 2-D.

$P(p) \times L^{d_f}$ où $d_f = d - \beta/\nu$ est la dimension fractale. À $p < p_c$ $P(p) \rightarrow 0$ lorsque $L \rightarrow \infty$, l'augmentation très lente de la masse avec L correspond à une fonction logarithmique. On a donc les relations de proportionnalité suivantes pour $L < \xi_p$ [Feder, 1988] :

$$M(L) \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \begin{cases} \ln L & p < p_c \\ L^{d_f} & p = p_c \\ L^d & p > p_c \end{cases} \quad (3.4)$$

Si on veut se restreindre à l'étude du squelette au seuil de percolation, on peut définir la dimension fractale du squelette d_B de façon similaire à d_f :

$$M_B(L) \sim L^{d_B} \quad \text{où} \quad d_B = d - \beta_B / \nu . \quad (3.5)$$

Évidemment, $d_B < d_f < d$. Le fait que d_B soit inférieur à d_f implique que le rapport M_B/M tende vers zéro lorsque L est grand et donc que la majorité de la masse se retrouve dans les culs-de-sac.

Des corrections doivent être apportées aux lois universelles si les réseaux utilisés sont petits. Au seuil de percolation, L est nécessairement inférieur à ξ_p et chaque propriété F du système doit alors s'écrire [Sahimi, 1994] :

$$F(L) \sim L^\chi \cdot [a_1 + a_2 \cdot g_1(L) + a_3 \cdot g_2(L)] \quad (3.6)$$

où χ correspond à l'exposant de la propriété, a_1 , a_2 et a_3 sont des constantes. Les fonctions g_1 et g_2 généralement utilisées sont : $g_1 = (\ln L)^{-1}$ et $g_2 = L^{-1}$.

Les relations (3.2) sont supposées être valides dans une région critique à proximité de p_c , dont l'étendue peut-être approximée par $(p-p_c) \leq 1/Z_c$ où Z_c est le nombre de coordination. Kirpatrick (1973) avait trouvé que la loi de puissance pour la conductivité hydraulique était valide jusqu'à 0,2 au-dessus du seuil de percolation dans des réseaux réguliers carrés et cubiques simples. Lorsque p est nettement au-dessus du seuil p_c dans un modèle de percolation de liens, la conductivité hydraulique du système est décrite par l'équation suivante [Kirpatrick, 1973] :

$$\frac{K}{K_{p=1}} = 1 - \frac{(1-p)}{(1-2/Z_c)} \quad (3.7)$$

où $K_{p=1}$ est la conductivité hydraulique lorsque $p=1$ (maximale). La conductivité hydraulique d'un réseau régulier est donc nulle jusqu'à p_c , augmente d'abord

exponentiellement en fonction de $(p-p_c)$ selon l'équation 3.2b lorsque $p \geq p_c$, puis linéairement en fonction de p selon l'équation 3.7 lorsque $p \gg p_c$ [Hestir et Long, 1990].

3.2.3 Dispersion au seuil de percolation

Deux caractéristiques des réseaux au seuil de percolation influencent la dispersion. La première est la grande quantité de culs-de-sac que l'amas infini possède et la seconde est la structure fractale de l'amas infini et du squelette. La première caractéristique implique qu'une bonne partie de l'eau est emprisonnée dans les culs-de-sac et que les solutés ne peuvent s'échapper que par diffusion et la seconde signifie que la dispersivité n'atteindra jamais une valeur constante (voir au chapitre 2 les arguments développés dans la littérature).

Le cas de diffusion pure peut être modélisé par une simple méthode de marche au hasard, qui permet à une particule de se déplacer aléatoirement dans n'importe quelle direction à l'intérieur de l'amas infini. La diffusion par marche au hasard dans les milieux désordonnés a été étudiée par de Gennes (dès 1976), qui l'a baptisée «la méthode de la fourmi dans le labyrinthe». Dans un réseau de percolation régulier, la particule sélectionne aléatoirement un lien (ou site) pour poursuivre son chemin. Si le lien (site) est ouvert, elle se déplace à cet endroit, s'il est fermé, elle reste sur place. À chaque tentative, le temps t est augmenté d'une unité. Ce processus est répété plusieurs fois et «moyenné» avec de nombreuses particules (fourmis) et sur plusieurs réseaux différents afin de déterminer le déplacement d'une particule durant un temps t (t correspondant au nombre de pas de temps).

La variance des déplacements des particules est définie par :

$$\sigma_x^2 = 2Dt \quad (3.8)$$

où σ_x représente l'écart-type des distances parcourues par les particules, D le coefficient de dispersion et t le temps. Lorsque p est nettement au-dessus du seuil de percolation, le système se comporte comme un milieu homogène à D constant [Stauffer et Aharony, 1992]. À proximité de p_c toutefois, D est proportionnel à $1/t^\delta$ où la puissance δ est inférieure à 1 ($D \sim 1/t^{0-1}$). On a alors à $p \gg p_c$, $\sigma_x \sim t^{1/2} \sim t^k$. Lorsque $p < p_c$, l'écart-type tend vers une constante puisque l'amas a une taille finie ($\sigma_x \sim t^0$). À $p = p_c$, l'exposant k prend

une valeur entre 0 et $\frac{1}{2}$. Il est facile de comprendre pourquoi le comportement des particules est si différent au-dessus et au-dessous du seuil de percolation. À $p < p_c$, il y a seulement des amas de taille finie et une particule à l'intérieur de ceux-ci ne peut bouger que sur une certaine distance (elle ne peut pas s'échapper). À $p > p_c$, une particule peut circuler sur une distance illimitée si elle débute dans l'amas infini. À $p = p_c$, la particule est contrainte de bouger sur un objet fractal et est donc forcée d'avancer et de reculer dans différentes parties de l'amas jusqu'à temps de trouver une sortie. Ceci prend donc beaucoup de temps et l'exposant k est inférieur à $\frac{1}{2}$. Stauffer et Aharony (1992) ont trouvé qu'à des temps très longs et à $p = p_c$:

$$k = \frac{\nu - \beta/2}{2\nu + \mu - \beta} \quad (3.9)$$

pour des particules situées initialement n'importe où dans le réseau. Cet exposant vaut donc environ 0,33 en 2-D et 0,20 en 3-D.

Le déplacement des particules est souvent écrit en remplaçant k par $1/d_w$, on a alors pour les différentes directions (lorsque l'écoulement se fait dans la direction de l'axe des x) :

$$\sigma_x^2 \sim t^{2/d_w^L} \quad \text{et} \quad \sigma_y^2 = \sigma_z^2 \sim t^{2/d_w^T} \quad (3.10)$$

où d_w est la dimension fractale de la marche au hasard et les indices L et T se rapportent aux directions longitudinale et transversale [Sahimi, 1987]. À $d_w = 2$, la dispersion est fickienne. Par contre, pour $d_w \neq 2$, la dispersion ne peut pas être décrite par l'équation d'advection-dispersion. Si $d_w > 2$ (correspondant à $k < \frac{1}{2}$), le déplacement moyen des particules augmente avec le temps plus lentement que linéairement (phénomène appelé *subdiffusion*) et D_L diminue jusqu'à devenir nulle après un temps assez long puisque $D_L \sim d\sigma_x^2/dt$. Par contre, si $d_w < 2$, le déplacement moyen des particules augmente avec le temps plus rapidement que linéairement (phénomène appelé *superdiffusion*) et D_L diverge.

Sahimi (1987 ; 1993 et 1995) et Sahimi et Imdakm (1988) ont étudié en détail les processus de dispersion au seuil de percolation dans les milieux poreux avec la méthode de marche au hasard (en fait avec des marcheurs aléatoires en régime advectif-diffusif). Les relations ont été développées pour des réseaux réguliers de tubes capillaires, dans lesquels les particules débutent leur trajet à l'intérieur de l'amas infini. Les exposants k (ou d_w) déterminés pour les différents régimes n'ont donc pas tout à fait la même

signification que celui défini à l'équation 3.9. Quatre régimes ont été définis en fonction de la valeur du nombre de Peclet, correspondant à $V \cdot \xi_p / D_m$ où D_m est la diffusion moléculaire.

1) Le nombre de Peclet est petit ($P_e \rightarrow 0$). En absence d'advection, la dispersion est due uniquement à la diffusion moléculaire (D_m) et on a :

$$\begin{aligned} D_L = D_T = D_m = D &\sim L^{-\theta} \\ d_w^L = d_w^T = d_w &\sim 2 + \theta \end{aligned} \quad (3.11)$$

où $\theta = (e - \beta)/v$. Comme $\sigma_x^2 \sim t^{2/d_w} \sim t^{2/(2+\theta)}$, $\theta=0$ correspond à la diffusion fickienne. Avec les valeurs du tableau 3.2 on trouve $d_w(d=2)=2,87$ et $d_w(d=3)=3,81$, ce qui donne $\sigma_x^2 \sim t^{0,70}$ et $\sigma_x^2 \sim t^{0,52}$. Les exposants étant plus petits que 1, la dispersion est *subdiffusive*.

2) Le nombre de Peclet est relativement grand ($300 < P_e < 10^5$), la dispersion se produit principalement dans le squelette et $D_L/D_m \sim D_T/D_m \sim P_e$ (Koplik *et al.*, 1988). Puisque la dispersion pour ce régime provient de l'advection, D_L et D_T dépendent linéairement de V et on peut écrire $D_L \sim L_1 \cdot V$ et $D_T \sim L_2 \cdot V$ où L_1 et L_2 sont deux longueurs caractéristiques correspondant à la dispersivité [Sahimi, 1987]. On obtient alors pour $L_1 \sim L_2 \sim L$:

$$\begin{aligned} D_L \sim D_T &\sim L^{1-\theta_B} \\ d_w^L = d_w^T &= 1 + \theta_B \end{aligned} \quad (3.12)$$

On trouve $D_L \sim L^{0,39}$, $d_w=1,62$ et $\sigma_x^2 \sim t^{1,24}$ en 2-D et $D_L \sim L^{-0,08}$, $d_w=2,08$ et $\sigma_x^2 \sim t^{0,96}$ en 3-D. La dispersion est donc *superdiffusive* en 2-D et *subdiffusive* en 3-D. La dispersion et la dispersivité peuvent également s'exprimer en fonction du temps. Pour $L < \xi_p$:

$$\begin{aligned} D_L &\sim t^{(1-\theta_B)/(1+\theta_B)} \\ \alpha_L &\sim t^{1/(1+\theta_B)} \end{aligned} \quad (3.13)$$

On a donc $D_L \sim t^{0,24}$ et $\alpha_L \sim t^{0,62}$ pour un milieu 2-D et $D_L \sim t^{-0,04}$ et $\alpha_L \sim t^{0,48}$ pour un milieu 3-D. Dans les réseaux 3-D, la dispersion et la dispersivité n'ont pas le même comportement au seuil de percolation. L'exposant de la dispersion a un signe négatif qui signifie qu'à t ou L très grand, elle tend vers 0, tandis que la dispersivité augmente rapidement avec le temps. Cependant, si $\alpha_L \sim t^\delta$, σ_x^2 devrait normalement être proportionnel à $t^{1+\delta}$ puisque $\sigma_x^2 = 2D_L t = 2\alpha_L V t$, ce qui n'est pas le cas.

- 3) Pour des valeurs de P_e intermédiaires ($5 < P_e < 100$), la dispersion hydrodynamique domine, mais la diffusion moléculaire ne peut pas être négligée. Si la diffusion moléculaire dans les régions les plus lentes du squelette est prise en compte (en négligeant toutefois celle dans les culs-de-sac), $D_L/D_m \sim P_e \ln P_e$ et $D_T/D_m \sim P_e$ et on doit alors apporter aux équations 3.12 et 3.13 une correction logarithmique sur D_L et σ_x^2 [Sahimi et Imdakm, 1988]. Cette correction est cependant la plupart du temps négligée, étant donné qu'une loi de puissance croît ou décroît toujours plus rapidement qu'une fonction logarithmique.
- 4) Il existe également un type de dispersion distinct qui se produit dans les culs-de-sac, appelé *holdup dispersion*. Les particules ne peuvent entrer ou s'échapper des culs-de-sac (de taille de l'ordre de ξ_p) que par diffusion moléculaire et $D_L/D_m \sim P_e^2$. Ce régime correspond à la dispersion de Taylor pour laquelle $D_L \sim V^2 \tau$, où τ est le temps caractéristique de diffusion dans un cul-de-sac indépendant de la vitesse d'écoulement [Charlaix *et al.*, 1988 ; Koplik *et al.*, 1988]. Dans ce régime, le plus grand cul-de-sac domine le processus de dispersion, les autres n'ayant pas d'effet significatif [Sahimi et Imdack, 1988]. Sahimi (1987) a obtenu pour ce régime :

$$\begin{aligned} D_L &\sim L^{2-\theta} \\ d_w^L &= d_w^T = \theta \end{aligned} \quad (3.14)$$

d'où $D_L \sim L^{1,13}$ et $\sigma_x^2 \sim t^{2,30}$ pour un milieu 2-D et $D_L \sim t^{0,19}$ et $\sigma_x^2 \sim t^{1,11}$ pour un milieu 3-D. La dispersion en 2-D et 3-D est donc *superdiffusive*. De Gennes (1983) avait défini τ dans le cas où $L > \xi_p$ par $\tau \sim \xi_p^2 / D_{ant}$ où D_{ant} est le coefficient de diffusion de la méthode de la fourmi dans le labyrinthe.

Les expressions obtenues pour les quatre régimes montrent que pour des échelles inférieures à ξ_p , le coefficient de dispersion dépend de la longueur du domaine (dispersion anormale). Malgré le fait qu'une particule puisse diffuser dans n'importe quel amas, seule la dispersion hydrodynamique à l'intérieur du squelette contribue significativement à l'étalement des solutés miscibles dans la modélisation des aquifères à grande échelle (plusieurs centaines de mètres) et donc, seul le second régime nous intéressera. Même si ces équations ont été développées pour des systèmes à l'échelle macroscopique, Sahimi et Imdakm (1988) croient qu'elles seraient applicables pour des milieux poreux hétérogènes à l'échelle régionale, dans lesquels la dispersion est due aux

variations du champ de vitesse (et donc aux contrastes de conductivités hydrauliques des différentes régions).

3.3 Revue des modèles à réseaux réguliers (sans corrélation spatiale des paramètres d'écoulement)

Les modèles à réseaux réguliers ont surtout été utilisés pour étudier le comportement des milieux poreux à l'échelle macroscopique. Seul Sahimi (1995) a suggéré que ce genre de modèle pourrait servir à l'étude de systèmes aux échelles locale ou régionale, en émettant l'hypothèse que chaque site ou lien puisse représenter une région où la conductivité hydraulique serait constante.

Une idée ingénieuse pour étudier l'écoulement et le transport dans les milieux hétérogènes a été proposée par Ambegaokar *et al.* (1971) sous le nom d'«analyse du chemin critique» (*critical path analysis*) ou de méthode AHL à cause du nom de ses auteurs. Selon le concept du chemin critique, le transport dans un système ayant une distribution des valeurs de conductance (ou de conductivité hydraulique) étendue est dominé par une petite fraction de liens dont les valeurs sont supérieures à un certain seuil. Le reste du système ne contribue pas significativement à l'écoulement et peut donc être éliminé (attribution de valeurs nulles aux liens). Ceci implique que le transport dans des réseaux bien connectés, mais hétérogènes (c'est-à-dire qui ont une distribution des valeurs de K étendue), peuvent être traités comme des réseaux percolants dans lesquels les liens ayant des valeurs de K inférieures au seuil ont été éliminés. Ce seuil (ou conductance critique g_c) est trouvé comme suit : les liens sont tous retirés, puis ils sont remis un par un en ordre décroissant de leur conductance à leur position originale dans le réseau et la conductance globale est calculée à chaque fois. Le lien qui complète l'amas infini, appelé chemin critique, a une conductance g_c . Shante (1977) a par la suite construit un champ de conductances en assignant la valeur g_c à tous les liens dont la conductance est supérieure ou égale à g_c et une valeur nulle aux autres. Il a ainsi obtenu un réseau de percolation de liens équivalent à un réseau standard, dans lequel les liens ont une conductance g_c avec une probabilité p ou nulle avec une probabilité $1-p$.

Quelques expériences ont été réalisées en laboratoire pour étudier la dispersion dans les milieux poreux. Deux des plus connues sont celles de Charlaix *et al.* (1988) et Gist *et al.* (1990). Charlaix *et al.* (1988) ont démontré expérimentalement avec un système alvéolé (hexagonal) que la dispersion n'est pas contrôlée par les caractéristiques microscopiques de la structure (taille des grains ou des pores), mais plutôt par les hétérogénéités macroscopiques du milieu, la dispersivité étant de l'ordre de la longueur de corrélation ξ_p . Même après un temps correspondant à 5 fois le temps moyen d'arrivée, plusieurs endroits n'étaient pas encore envahis par le traceur. Ceci indique que l'écoulement préférentiel joue un rôle de premier plan et que la relation $D \sim V^2 \tau$ (voir section 3.2.4) pourrait en conséquence ne pas être valable à proximité du seuil de percolation (les culs-de-sac jouant donc un rôle secondaire). Gist *et al.* (1990) ont effectué des mesures sur des échantillons de calcaires, de grès et d'un milieu poreux synthétique de façon à prédire la dispersion macroscopique à partir des propriétés microscopiques. Leurs simulations les ont amené à conclure que les concentrations résiduelles (*long-time tails*) obtenues avec les différents échantillons de roche consolidé dans leur cas provenaient non pas des particules de soluté retenues prisonnières à l'intérieur des culs-de-sac (explication généralement retenue pour expliquer le profil asymétrique des concentrations), mais plutôt des hétérogénéités macroscopiques (chemins préférentiels). Les auteurs extrapolent cette conclusion à l'échelle du terrain, en disant que la diffusion dans les culs-de-sac n'aurait pas non plus d'influence dans les essais de traçage à long terme.

Plusieurs auteurs ont modélisé des réseaux de liens (tubes) au seuil de percolation dans lesquels la distribution de la concentration des particules dans chaque tube est simulée par advection-diffusion 1-D [De Arcangelis *et al.*, 1986 ; Roux *et al.*, 1986 ; Koplik *et al.*, 1988 ; Charlaix et Gayvallet, 1991]. Les trois premières publications ont utilisé des liens identiques tandis que Charlaix et Gayvallet (1991) ont utilisé une distribution uniforme des perméabilités. Cette formulation permet selon Koplik *et al.* (1988) de tenir compte de façon plus appropriée de la compétition entre l'advection (dans le squelette) et la diffusion (dans les culs-de-sac et les régions stagnantes) qu'avec la marche au hasard. Charlaix et Gayvallet (1991) ont calculé la dispersion hydrodynamique dans des réseaux carrés et en diamants pour différentes lois uniformes de perméabilités. Puisque le milieu est aléatoire, le théorème central limite s'applique et la dispersion devient fickienne lorsque la longueur L du domaine tend vers l'infini, particulièrement rapidement lorsque les réseaux sont

faiblement ou moyennement hétérogènes. Les auteurs ont déterminé graphiquement une longueur de dispersion qui rend celle-ci indépendante du désordre (hétérogénéité) du système et en accord avec des résultats expérimentaux sur billes de verre. Ils estiment que leurs résultats pourraient s'appliquer à des milieux poreux ayant peu de culs-de-sac et pour lesquels $\xi_p < L$.

Quelques auteurs se sont impliqués dans la modélisation des milieux fracturés avec des réseaux réguliers, dont Wilke *et al.* (1985) et Berkowitz et Braester (1991). Wilke *et al.* (1985) ont modifié un réseau standard de liens (modèle cubique simple) en imposant que la probabilité p affecte non pas seulement un, mais quatre liens constituant un carré afin de représenter des plaques (*plate percolation*). L'étude du comportement de ν , l'exposant de la longueur de corrélation, a montré que la valeur de celui-ci était très proche de celle d'un réseau standard au seuil de percolation. Berkowitz et Braester (1991) ont quant à eux développé un modèle 2-D dont les liens (représentant un réseau de fractures orthogonales de longueur identique) ont une distribution log-normale des ouvertures. Les fractures ayant les ouvertures les plus petites ont été enlevées, rendant le modèle équivalent à un réseau percolant de liens. L'objectif était de tester la validité de l'équation 3.12, soit $\sigma_x^2 \sim t^{1,24}$. Ils ont obtenu un exposant de 1,3 avec des réseaux composés de 40x40 liens.

Peu d'auteurs se sont intéressés aux processus de dispersion dans les milieux désordonnés. Sahimi et collaborateurs, avec leurs nombreuses publications, font figure dominante dans ce domaine. Les résultats de la section 3.2.3 proviennent presque entièrement de leurs travaux. Rappelons qu'à proximité du seuil de percolation, ils ont montré que la dispersion est anormale et que le coefficient de dispersion dépend de l'échelle (longueur ou temps) à laquelle les mesures sont prises. Les relations sont exprimées sous forme de lois de puissance dont les exposants sont déterminés en fonction du régime d'écoulement considéré. Parce que l'épaisseur des aquifères est généralement très faible devant leur l'étendue horizontale et que les processus de dispersion devraient être dominés par les contrastes de conductivité hydraulique bien plus que par la diffusion, ils croient que les essais de traçage devraient être bien représentés par les équations pour le régime d'advection pure en 2-D, soit $D_L \sim L^{0,39}$ et $\sigma_x^2 \sim t^{1,24}$. La seconde relation signifie que le déplacement des particules devrait être *superdiffusif*. Plusieurs auteurs sont d'ailleurs arrivés à la même conclusion [Philip, 1986 ;

Ross, 1986 ; Koch et Brady, 1988]. Leur théorie utilise $\alpha_L \sim L$, ce qui est plutôt en accord avec les données des essais de traçage, pour lesquelles l'exposant χ varie entre 0,76 et 1,53 (équations 2.4 à 2.6) selon les auteurs et les données conservées [Arya *et al.*, 1988 ; Neuman, 1990 ; Xu and Eckstein, 1995].

3.4 Revue des modèles de percolation utilisant des réseaux dont les paramètres d'écoulement sont spatialement corrélés

Les modèles de percolation réguliers décrits précédemment étaient constitués de liens ou de sites dont la valeur d'ouverture était attribuée aléatoirement. Ces modèles fournissent une justification théorique à l'existence de la dépendance d'échelle du coefficient de dispersion et de la dispersivité dans les milieux hétérogènes. Cependant, la répartition des propriétés en réalité n'est pas purement aléatoire non corrélée, mais généralement corrélée sur des distances plus ou moins grandes. En effet, même si les processus aléatoires sont inhérents aux phénomènes naturels, les hétérogénéités des formations géologiques ne se conforment généralement pas aux hypothèses simplistes de répartition purement aléatoire ou non corrélée d'une région à l'autre. Les propriétés des aquifères poreux et fracturés montrent souvent des corrélations sur de grandes distances et les hétérogénéités y sont présentes à plusieurs échelles. D'ailleurs, plusieurs études ont montré que la fracturation est un phénomène régional, c'est-à-dire un phénomène montrant une structure de corrélation spatiale à grande échelle [De Marsily, 1985]. En conséquence, la génération des champs stochastiques simulant les propriétés des milieux naturels devrait reproduire la structure de corrélation des données expérimentales.

Deux types de corrélation peuvent être intégrés dans les modèles : courte et longue distance. Les deux sous-sections suivantes présentent les différents modèles trouvés dans la littérature pour ces deux types de corrélation. À notre connaissance, la corrélation spatiale a été incorporée uniquement dans les modèles à réseaux réguliers.

3.4.1 Les modèles à corrélation courte distance

L'existence de corrélation courte distance entre les valeurs attribuées aux liens (ou sites) d'un réseau ne modifie pas nécessairement les propriétés conductrices et dispersives de ces réseaux. En effet, si la fonction de covariance de la probabilité d'ouverture des liens utilisée décroît plus rapidement que r^{-d} , où r est l'espacement entre deux points et d la dimensionnalité du système, les propriétés (ξ_p , X^A , X^B , K et D) sont identiques à celles des réseaux aléatoires [Weinrib et Halperin, 1983 ; Weinrib, 1984 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996 pour ξ_p , X^A , X^B , K et Sahimi, communication personnelle, pour D]. Le comportement du seuil de percolation est cependant différent. L'ajout de corrélation spatiale courte distance fait beaucoup diminuer p_c (le système est mieux connecté), tandis qu'il fait augmenter sa variance [Kirkpatrick, 1973 ; Silliman et Wright, 1988 ; Renault, 1991].

Kirkpatrick (1973) a été un des premiers à montrer l'influence de la corrélation spatiale. Il a développé trois types de modèles standard dont un possède une corrélation spatiale, pour étudier l'évolution de la conductivité électrique G en fonction de la probabilité p . Le modèle corrélé est un réseau cubique simple à percolation de liens défini comme suit : chaque site s'est vu attribuer un nombre aléatoire entre -1 et 1 et les valeurs de probabilité d'ouverture des liens ont été calculées en utilisant la moyenne des valeurs des sites correspondant à leurs extrémités. En conséquence, si un lien est présent, ses voisins ont une probabilité plus grande que la moyenne d'être également présents. La courbe $G(p)$ obtenue était très différente de celle sans corrélation excepté lorsque p est supérieur à 0,8, soit dans la partie linéaire de la courbe (voir équation 3.7).

Silliman et Wright (1988) ont généré des champs de perméabilités 3-D aléatoires et corrélées (avec ou sans conditionnement) afin d'étudier les chemins préférentiels avec une méthode semblable à celle de l'analyse du chemin critique. Les valeurs de conductivité hydraulique ayant été normalisées pour varier entre 0 et 1, la conductivité critique K_c correspond à $1-p_c(L)$ et le système est équivalent à un réseau de percolation de sites. Les valeurs de K corrélées ont été générées en utilisant la méthode d'analyse discrète, qui reproduit les deux premiers moments de la population échantillonnée. Le conditionnement a été réalisé par krigeage à l'aide d'un variogramme obtenu avec les données d'une formation granitique de l'Arizona. Leurs résultats ont montré que l'atteinte

d'un plateau pour le graphique de $p_c(L)$ en fonction de la taille du domaine est plus lente avec corrélation que sans et que l'ajout de conditionnement diminue la variance de $p_c(L)$ par rapport à la corrélation seule.

Renault (1991) a étudié la variation du seuil de percolation avec quatre types de modèles : carré (sites), simple cubique (sites et liens) et tétraédrique (liens). La génération des réseaux de sites ou de liens corrélés spatialement a été réalisée avec la méthode des bandes tournantes (*turning band method*) pour trois modes de corrélation : exponentiel, gaussien et sphérique. Les résultats ont montré que l'augmentation de la longueur de corrélation λ fait décroître rapidement la valeur de p_c jusqu'à l'atteinte d'un plateau. Même si les valeurs sont différentes, la tendance des courbes est la même pour les trois modes de corrélation. En 3-D, le réseau cubique simple fournit toujours les valeurs les plus élevées et le tétraédrique les plus faibles. La variation de p_c est grande entre les différents types de réseaux lorsqu'il n'y a pas de corrélation ($\lambda=0$), mais s'atténue jusqu'à devenir presque inexistante au plateau ; p_c est alors compris entre 0,1 et 0,2. L'auteur conclut que p_c devient indépendant de la longueur de corrélation lorsque celle-ci est élevée ($\lambda \geq 5$). En 2-D, p_c diminue également avec l'augmentation de λ , mais de façon moins importante et semble se stabiliser à 0,5 pour une grande longueur de corrélation. L'auteur suggère que dans le cas de réseaux de percolation de liens 2-D, la corrélation spatiale n'aurait aucune influence et que le seuil aurait toujours une valeur de 0,5 quelle que soit λ .

3.4.2 Les modèles à corrélation longue distance

L'adjectif «longue distance» s'applique aux domaines dans lesquels la longueur de corrélation est du même ordre de grandeur que la taille du système à l'étude. Plusieurs études montrent que les formations géologiques pourraient posséder des propriétés (porosité et conductivité hydraulique) corrélées sur de très grandes distances (*long-range correlations*), nécessitant l'utilisation de fonctions de covariance à décroissance lente pour les représenter correctement [Hewett, 1986 ; Abadou et Gelhar, 1990 ; Molz et Boman, 1993 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996]. Cette hypothèse a cependant l'inconvénient de faire perdre l'universalité des exposants.

Les premiers modèles à corrélation longue distance sont attribuables à Weinrib et Halperin (1983) et Weinrib (1984). Ils ont étudié des modèles pour lesquels l'occupation des sites est définie par $p = \langle s_i \rangle$ où s_i peut prendre la valeur 1 ou 0 selon que le site i est ouvert ou fermé. Weinrib (1984) a défini la fonction de covariance par $\text{Cov}(r) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \sim r^{-a}$ avec $a < d$ et $a - 2 < 0$, où r est la distance entre deux sites, d la dimensionnalité et ν l'exposant de la longueur de corrélation (ξ_p) dans les réseaux aléatoires. Lorsque $a \geq d$, la fonction de covariance décroît plus rapidement que r^{-d} et le système se comporte comme un réseau aléatoire. Le nouvel exposant de la longueur de corrélation utilisé est $\nu = 2/a$.

Plusieurs années après, Prakash *et al.* (1992) ont considéré un modèle de percolation légèrement différent de celui de Weinrib (1984) dans lequel la fonction de corrélation est définie par $C(r) = f(\eta) r^{-(d-\eta)} \sim r^{-(d-\eta)}$, où $\eta \leq d=2$. Le cas où $\eta=0$ correspond à un système non corrélé car $f(\eta=0)=0$. Le cas intéressant est celui où η est compris entre 0 et 2, puisque si η est négatif, la fonction de corrélation diminue plus rapidement que pour un réseau aléatoire. Les auteurs ont, entre autres, trouvé que p_c diminuait continuellement selon une courbe convexe avec l'augmentation de η et que d_B , la dimension fractale du squelette, augmentait continuellement avec η indiquant que l'amas devient de plus en plus compact. Il devient d'ailleurs identique au squelette lorsque η est supérieur à 1,75 ($d_B \approx 1,9$). En effet lorsque la corrélation augmente, le nombre de sites nécessaire pour créer le réseau percolant diminue et la conductivité est régie principalement par les «liens rouges». Leur modèle a montré que si $\eta \leq 0,5$, l'exposant de la longueur de corrélation ν est identique aux systèmes de percolation aléatoire, soit $4/3$. Si $0,5 \leq \eta \leq 1$, leurs résultats sont en accord avec ceux de Weinrib (1984), soit $\nu = 2/(d-\eta)$. Par contre si $\eta \geq 1$, leurs résultats sont considérablement plus faibles que cette prédiction. Makse *et al.* (2000), dans la continuité des travaux de Prakash *et al.* (1992), ont étudié la compétition entre les effets d'advection et de diffusion en utilisant $\eta=0.6$. Ils ont développé une loi de puissance pour le temps de parcours moyen dont l'exposant dépend du nombre de Peclet.

Sahimi (1995) et Sahimi et Mukhopadhyay (1996) ont utilisé une distribution fBm pour générer des champs de perméabilités, ce processus stochastique engendre des longueurs de corrélations infinies qu'il est possible de réduire par troncature. Sahimi et

Mukhopadhyay (1996) ont réinterprété les données de Hewett et analysé les données de plusieurs sites en Iran. Ils sont arrivés à la conclusion que les perméabilités analysées montraient des corrélations longue distance avec des H inférieurs à 0,2. Le réseau percolant a été obtenu en éliminant 30% des liens ayant les plus faibles perméabilités. Leurs simulations ont permis d'obtenir un exposant δ pour la dispersivité variant entre 0,5 et 0,6 ($\alpha_L \sim t^\delta$, δ dépendant de la valeur de H) et un exposant pour la variance des déplacements σ_x^2 supérieur à 1 (comportement *superdiffusif*), deux résultats en accord avec ceux d'autres auteurs comme Neuman, Abadou et Gelhar ainsi que Philip qui auraient également obtenu $\alpha_L \sim t^\delta$ avec $0,5 < \delta < 0,6$ (résultats non publiés).

3.5 Discussion

Dans les milieux très hétérogènes, l'eau souterraine et les solutés circulent à la faveur de quelques chemins préférentiels engendrés par les variations spatiales importantes de la conductivité hydraulique. Les zones peu perméables (ou les fractures obstruées ou isolées) peuvent raisonnablement être assimilées à des secteurs imperméables ($K=0$) puisque ce sont les zones les plus perméables qui fournissent l'essentiel du flux et le système peut se réduire à un processus de percolation.

La théorie de percolation permet d'étudier les propriétés des systèmes en fonction de la connexité de ces zones (ou fractures) plus transmissives en reliant les propriétés physiques globales du système à une mesure moyenne des caractéristiques géométriques. Les réseaux percolants ont l'intérêt de pouvoir représenter tant un milieu continu si la probabilité p est élevée, qu'un milieu discontinu si p est proche de p_c et donc de tester rapidement si le milieu peut être traité comme un milieu poreux équivalent. De plus, la simplification des calculs par l'utilisation d'une approche lagrangienne pour le transport élimine aussi les instabilités numériques qui pourraient découler des forts contrastes de vitesse du fluide. Les réseaux non corrélés ou à courte distance de corrélation ont l'avantage de posséder des propriétés qui suivent des lois universelles à proximité du seuil de percolation. Celles-ci s'expriment sous forme de lois de puissance en fonction de la distance ou du temps dont les exposants ne dépendent que de la dimensionnalité du système. Les propriétés telles la dispersion et la dispersivité se

comportent ainsi, conformément aux résultats des essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde.

Les modèles de percolation peuvent traiter les milieux hétérogènes comme des milieux poreux équivalents avec des réseaux réguliers en considérant que chaque lien ou site représente une zone homogène. Ils peuvent aussi représenter les fractures individuellement avec des réseaux orthogonaux (réseaux réguliers dans lesquels la longueur des fractures est un multiple de la longueur d'un lien) ou avec des fractures discrètes. Étant donné le caractère peu prédictible des réseaux naturels, nous avons choisi de développer une typologie de comportement de réseaux synthétiques en commençant par le plus simple, c'est-à-dire les réseaux réguliers. D'ailleurs, Berkowitz (1995) fait remarquer que malgré les nombreuses études s'intéressant depuis les dernières années aux réseaux de fractures, les capacités de prédiction reliées au transport et à l'écoulement dans les milieux fracturés demeurent très limitées en grande partie à cause de la quasi impossibilité de localiser, mesurer et analyser les fractures *in situ*.

La théorie de percolation classique considère que l'élimination des liens est aléatoire (en fonction de l'ouverture attribuée à chacun). Toutefois, les données de terrain indiquent que les propriétés des formations géologiques ne sont pas distribuées aléatoirement, mais le plus souvent corrélées. Les champs de conductivité hydraulique générés devraient donc être compatibles avec les données de terrain recueillies de façon à incorporer leur structure de corrélation spatiale. Depuis quelques années, certains auteurs ont exploré la possibilité de traiter des réseaux réguliers corrélés spatialement avec la théorie de percolation. Peu se sont intéressés à la dispersion dans ce genre de systèmes.

Le chapitre 4 présente le modèle de percolation à réseau régulier développé pour cette recherche et sa validation sur des réseaux aléatoires. Ce modèle servira dans les chapitres suivants à simuler l'écoulement et le transport de solutés par marche au hasard dans des réseaux corrélés sur de courtes et de longues distances.

4 MODÈLE DE PERCOLATION

La percolation de liens sur des réseaux 2-D carrés a été choisie pour représenter des aquifères à nappe captive à une échelle locale (1 km ou plus) ou régionale. La bidimensionnalité est justifiée car à ces échelles, l'épaisseur de l'aquifère est très faible devant son étendue horizontale. L'utilisation d'un réseau régulier pour représenter un aquifère hétérogène se justifie par le fait que les caractéristiques des fractures (et de la matrice) ou des différentes zones plus transmissives sont rarement connues en détail. Une typologie simple semble en conséquence bien adaptée pour représenter leur comportement dans un premier temps. Le réseau d'écoulement peut alors être représenté par un ensemble de zones (liens) homogènes dont les valeurs de conductivité hydraulique sont générées avec ou sans corrélation spatiale suivant les cas de figure.

Ce chapitre se divise en deux sections : l'une concernant l'écoulement et l'autre le transport de particules. La méthode employée pour développer les modèles d'écoulement et de transport est présentée, avec la description des différentes étapes de calcul ainsi que les équations utilisées. L'objectif de ce chapitre est de tester le modèle de percolation sur des réseaux aléatoires non corrélés et ayant une distribution log-normale des conductivités hydrauliques en comparant leurs résultats aux lois dites universelles.

4.1 Modèle d'écoulement

L'utilisation de réseaux de percolation pour simuler l'écoulement est justifiée pour de nombreux aquifères hétérogènes où les fortes fluctuations de conductivité hydraulique provoquent la chenalisation de l'écoulement. Même dans des aquifères très bien connectés, l'eau s'écoule souvent dans un nombre très limité de fractures [Cacas *et al.*, 1990a]. Les propriétés des réseaux dans lesquels l'écoulement est dominé par un nombre limité de chemins très conducteurs peuvent alors être déterminées à l'aide des concepts de percolation.

4.1.1 Conception des réseaux

Le modèle 2-D développé attribue à chaque lien une variable d'ouverture à partir d'une loi uniforme (valeurs entre 0 et 1). Dans un réseau standard non corrélé, pour une valeur fixée de p à l'échelle du réseau, tout lien ayant une variable d'ouverture supérieure ou égale à $1-p$ est ouvert à l'écoulement. Tous les réseaux sont carrés, ayant de 50 à 300 liens dans chaque direction. Les réseaux plus petits que 50×50 n'ont pas été retenus car ils entraînent des erreurs trop importantes. Pour valider les modèles d'écoulement et de transport, nous avons utilisé des réseaux standard ($K_{\text{lien}}=1$ ou 0) ainsi que des réseaux ayant une distribution continue des conductivités hydrauliques (loi log-normale). Pour les réseaux non standard, deux valeurs doivent être attribuées à chaque lien. La première est la variable d'ouverture (voir plus haut), permettant de déterminer le réseau d'écoulement (squelette) et la seconde la conductivité hydraulique du lien, permettant de calculer la conductivité hydraulique du système et le temps de parcours. Cette approche diffère de celles de Sahimi *et al.* (1986) et de Sahimi (1995), qui attribuent plutôt une ouverture (au sens géométrique) aux liens pour ensuite calculer la conductance (ou la résistivité) avec la loi d'Hagen-Poiseuille dans un réseau où les liens ont été éliminés de façon aléatoire. Les deux méthodes sont toutefois équivalentes.

Deux types de réseaux orthogonaux peuvent être générés avec le modèle. Les réseaux peuvent avoir des liens à 0 ou 90° par rapport à la direction principale d'écoulement ou à 45° , ces deux cas représentant les situations extrêmes pour la dispersion. Dans le premier cas, l'écoulement peut être très rapide dans les liens à 0° et extrêmement lent dans les liens à 90° , tandis que dans les réseaux à 45° , l'écoulement est réparti plus uniformément. Les réseaux à $0-90^\circ$ possèdent $2n \cdot (n-1)$ liens où n est le nombre de liens dans une direction, tandis que les réseaux à 45° ont $n \cdot (n-1)$ liens, soit deux fois moins de liens. Cependant, les réseaux à $0-90^\circ$ ont été délaissés au profit des réseaux à 45° dès les premières simulations de transport à cause des particules qui restaient piégées dans les liens horizontaux (à 90°). Dans le texte qui suit, seuls seront traités les réseaux à 45° .

Les réseaux percolants peuvent représenter des milieux hétérogènes à l'échelle désirée, en fonction de la longueur de lien attribuée et de la taille du réseau. Par exemple, un réseau 100×100 avec une distance verticale entre les nœuds de 20 m représenterait un terrain d'une longueur de 2 km ayant jusqu'à 20 m d'épaisseur (1% de la longueur, donc

troisième dimension négligeable). L'utilisateur du modèle doit simplement fournir la longueur totale du réseau (L) et sa taille (n). La division de ces deux longueurs fournit la distance verticale (l_v) parcourue par une particule entre deux nœuds. La longueur d'un lien dans les réseaux à 45° correspond à $l_v/\cos 45^\circ$.

4.1.2 Conception du modèle d'écoulement

Les modèles d'écoulement et de transport ont été développés en langage C++. Les bords est et ouest des réseaux sont affectés de conditions aux limites périodiques de façon à obtenir un réseau latéralement infini (les valeurs des liens de l'extrémité est sont identiques à celles des liens de l'extrémité ouest). Des charges hydrauliques constantes imposées aux nœuds des premières et dernière rangées (limites nord et sud) du système assurent l'écoulement. Le système est donc équivalent à un perméamètre.

La première étape consiste à calculer le seuil de percolation (p_c) de chaque réseau. Celui-ci est déterminé en cherchant un chemin qui relie les deux extrémités du réseau une fois que 40% des liens (ceux ayant les plus faibles valeurs de la variable d'ouverture) sont éliminés puisqu'il est improbable que le seuil de percolation soit au dessus de 0,6 pour les réseaux étudiés (d'ailleurs, ce seuil est augmenté à 45% pour les réseaux de taille supérieure à 180×180). Une fois ce chemin trouvé, la valeur minimale de la variable d'ouverture du chemin est cherchée et tous les liens du réseau ayant une valeur inférieure à celle-ci sont éliminés. Le processus est ensuite recommencé. Si un autre chemin existe, la nouvelle valeur minimale de probabilité d'ouverture remplace la première trouvée. Cette procédure revient en fait à éliminer les liens un par un en ordre croissant d'ouverture jusqu'à ce que l'enlèvement d'un lien interdise la communication entre les limites nord et sud du réseau. Cette dernière est toutefois plus lente. Le seuil de percolation correspond au rapport entre le nombre de liens restants (ou ouverts, incluant le lien ayant la dernière valeur minimale) et le nombre total de liens.

La détermination de l'amas infini est effectuée à l'aide d'une procédure récursive. Cette procédure équivaut à suivre un marcheur qui tente de traverser le domaine de haut en bas en se déplaçant sur les liens. Pour qu'il y ait déplacement, deux liens ouverts doivent être voisins (c'est-à-dire appartenir à un même nœud). Chaque lien est connecté au

maximum à six liens (3 à chaque extrémité) sauf aux frontières nord et sud du domaine. Le départ du marcheur se fait toujours aux nœuds de la première rangée, où sont imposées les conditions aux limites (h_{\max}). Comme il existe souvent plusieurs liens ouverts à chaque nœud, toutes les possibilités doivent être testées pour essayer d'atteindre l'extrémité sud. La procédure est répétée avec tous les liens ouverts de la première rangée. Un amas infini est un ensemble de liens connectés entre eux et qui contient au moins un chemin de haut en bas du réseau. Les amas isolés (ceux qui ne s'étendent pas de haut en bas) sont éliminés. Le nombre de liens compris dans l'amas infini sur le nombre de liens ouverts correspond à la quantité X^A . Au-delà d'une probabilité d'ouverture de 0,6, à peu près tous les liens ouverts font partie de l'amas infini.

Le squelette du réseau est ensuite trouvé en éliminant les culs-de-sac. Pour ce faire, le marcheur cherche d'abord un chemin qui lui permettra de traverser le domaine de haut en bas. Les liens de ce chemin deviennent alors des liens de référence. Pour imaginer la procédure, on pourrait dire par exemple que ces liens sont alors colorés en vert. Le marcheur, en partant d'un lien vert, tente de trouver une sortie, qui peut être soit le haut ou le bas du réseau, soit un autre lien vert (on serait alors en présence d'une boucle). Chaque lien de l'amas infini doit être testé. Si aucune sortie n'est possible, ces liens sont considérés comme des culs-de-sac et éliminés du réseau. Le paramètre X^B est calculé en faisant le rapport du nombre de liens dans le squelette sur le nombre de liens ouverts. La figure 4.1 illustre l'amas infini et le squelette d'un réseau 40×40 .

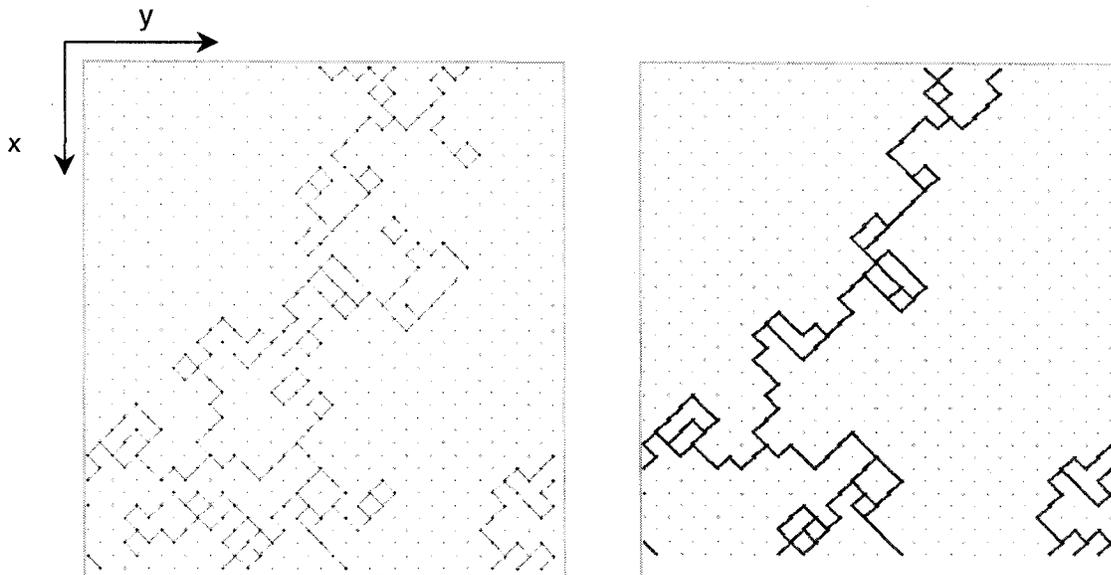


Figure 4.1 : Amas infini et squelette d'un réseau 40×40 avec des conditions périodiques

Une fois le squelette trouvé, le calcul des charges hydrauliques est effectué pour déterminer le réseau d'écoulement et calculer la conductivité hydraulique du système. Des essais réalisés avec la loi de Kirchoff (somme des débits à un nœud égale 0) simplement résolue à chaque nœud de façon itérative (balayages successifs) ont montré que cette méthode était beaucoup trop lente pour les grands réseaux. Différentes méthodes itératives de résolution de matrices de forme $A \cdot X = B$ ont été examinées (A représente la matrice de « raideur » regroupant les conductivités hydrauliques de liens connectés à chaque nœud du réseau, X le vecteur des charges hydrauliques à chaque nœud du réseau et B le vecteur du second membre, nul en régime permanent sauf pour les nœuds situés aux limites du réseau). Une méthode relativement efficace tout en restant simple à programmer car elle ne nécessite pas d'algorithme sophistiqué pour stocker les coefficients non nuls de la matrice est celle de Gauss-Seidel « relaxée ». A titre d'exemple, pour un réseau de taille 100×100 à $p=1$, le système à résoudre contiendrait environ 9700 inconnus (les charges de la première et de la dernière rangées ainsi que de la colonne de droite n'étant pas des inconnues) et donc la matrice A contiendrait 9700×9700 éléments. La mise en équation d'un problème de Laplace en 2-D sur un réseau dont le nombre de coordination est 4 génère une matrice creuse (*sparse*) puisqu'un maximum de cinq coefficients par rangée est non nul.

La méthode Gauss-Seidel couplée à une relaxation de type SOR (*successive over-relaxation*) a donc été la procédure adoptée pour le calcul des charges hydrauliques aux nœuds. Cette méthode est décrite en détail à l'annexe A. La méthode Gauss-Seidel est une méthode itérative qui mixe à chaque itération n les charges calculées à l'itération n et à l'itération $n-1$. Cette méthode possède l'avantage d'être extrêmement simple, mais ne converge, comme toutes les méthodes itératives, que sous certaines conditions, généralement toutes remplies lorsque la matrice A est symétrique à diagonale dominante. Dans notre cas, cette condition est toujours satisfaite puisque les éléments de la diagonale représentent la somme des coefficients des liens entourant ce nœud. La méthode SOR ajoute un paramètre de relaxation ψ , qui permet d'accélérer la convergence. Il correspond en termes plus classiques d'optimisation à une longueur parcourue le long de la direction de descente choisie pour converger vers la solution. L'équation utilisée pour déterminer les charges hydrauliques est :

$$h'_{i,j} = h^{l-1}_{i,j} + \Psi \cdot \varepsilon' \quad (4.1)$$

avec

$$\varepsilon' = h_{moyenne} - h_{i,j} = \frac{K_1 h_1 + K_2 h_2 + K_3 h_3 + K_4 h_4}{K_1 + K_2 + K_3 + K_4} \quad (4.2)$$

où ε' est le résidu, K_1, K_2, K_3, K_4 sont les conductivités hydrauliques des liens et h_1, h_2, h_3, h_4 sont les charges hydrauliques aux nœuds. Les K_i et h_i sont illustrées à la figure 4.2.

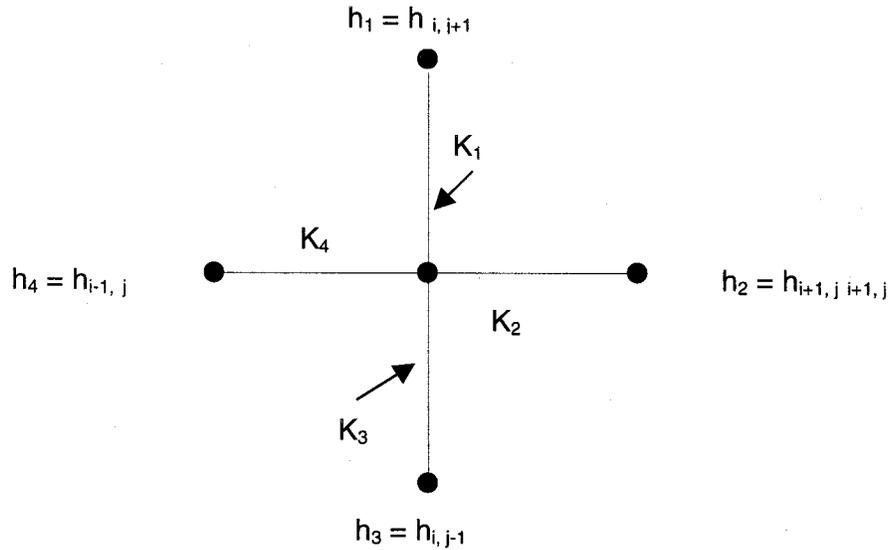


Figure 4.2 : Schéma des quatre nœuds et liens entourant le nœud à l'étude

Le processus itératif est arrêté lorsque les différences entre les charges (à chaque nœud) calculées à l'itération n et celles de l'itération $n-1$ sont toutes inférieures à $(h_{max}-h_{min}) \cdot 10^{-\Omega}$, Ω étant la précision désirée. Des tests ont montré qu'une valeur de ψ proche de 2 permettait de diminuer significativement le nombre d'itérations.

D'après les résultats des charges, les liens dans lesquels l'écoulement est impossible (ceux par exemple dont l'écoulement converge tous vers un nœud) sont éliminés. La conductivité hydraulique globale équivalente du système peut alors être déterminée à l'aide du débit moyen en additionnant les débits des liens d'une rangée (la dernière dans notre cas) et en répartissant cette somme sur la longueur totale du réseau. Si une surface I_v (correspondant à la longueur verticale ou horizontale d'un lien) est utilisée pour représenter la surface d'écoulement dans un lien d'un réseau 2-D, le débit dans chaque lien est égal à :

$$Q_{lien} = K \cdot i \cdot S = K_{ij} \cdot \frac{\Delta h_{ij}}{l} \cdot I_v \quad (4.3)$$

où i est le gradient hydraulique, S est la surface, K_{ij} est égal à la conductivité hydraulique d'un lien, Δh_{ij} est la différence de charge dans un lien et l est la longueur du lien. La conductivité hydraulique équivalente du système (K_e) est donc égale à :

$$K_e = \frac{\sum Q_{lien}}{(L-l) \cdot (h_{max} - h_{min}) / L} \quad (4.4)$$

où L est la longueur (ou largeur) totale du domaine et $(h_{max} - h_{min}) / L$ représente le gradient hydraulique global (i_{global}) du domaine.

Une comparaison des valeurs de K_e obtenues avec une précision de 10^{-6} et 10^{-10} sur le critère d'arrêt du calcul des charges a montré que l'erreur commise est minime, mais croît avec la taille des réseaux. La différence sur le K_e moyen obtenu avec des réseaux 300x300 (les plus grands utilisés) est de 0,2%, les écarts individuels (en valeur absolue) étant de 0,7% et l'erreur maximale observée sur un des 200 réseaux simulés de 2,3%. Il sera montré à la section 4.2.1 que l'accroissement de la précision au-delà de 10^{-6} n'influence presque pas non plus la dispersion. Étant donné que la conductivité hydraulique dans les formations géologiques est une propriété extrêmement variable, cette différence maximale est considérée comme très faible. Parce que les erreurs engendrées par l'utilisation d'une précision de 10^{-6} sont petites et que la réduction des temps de calcul est très importante, cette précision est celle utilisée en routine pour l'ensemble des réseaux.

4.1.3 Validation des lois universelles pour l'écoulement

L'objectif est ici de s'assurer que les codes engendrent des résultats conformes à ceux des lois dites « universelles ». Les lois de type L^x ont été vérifiées avec des réseaux standard ($K_{lien} = 1$ ou 0), puis avec des réseaux ayant une distribution log-normale des conductivités hydrauliques. L'ensemble des simulations a été réalisé avec des réseaux ayant un gradient hydraulique de 0,01 et une distance verticale entre deux nœuds de 20. Le seuil de percolation p_c , la fraction des liens ouverts appartenant à l'amas infini (X^A), la fraction des liens ouverts appartenant au squelette (X^B) ainsi que la conductivité hydraulique équivalente du système (K_e) ont été calculés pour des réseaux de douze tailles différentes.

Les exposants des lois de type $(p-p_c)^x$ n'ont pas été vérifiés car celles-ci se rapportent à des domaines infinis. Toutefois, les courbes montrant le nombre de liens dans l'amas sur le nombre total de liens ($X^A \cdot p$ ou P), le nombre de liens dans le squelette sur le nombre total de liens ($X^B \cdot p$) et K_e pour un réseau donné sont présentées à la figure 4.3. Des courbes similaires ont entre autres été présentées par Kirkpatrick (1973), Stauffer et Aharony (1992) et Sahimi (1995).

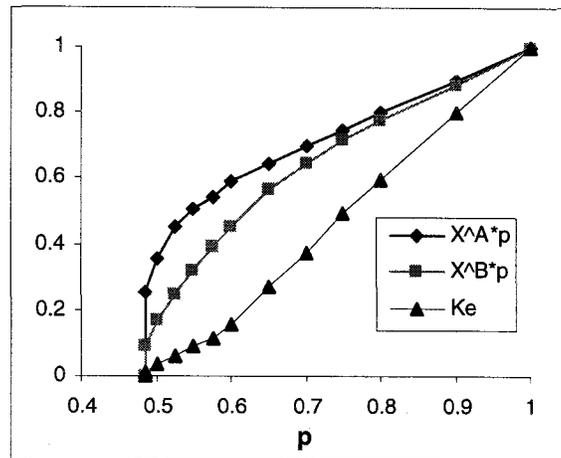


Figure 4.3 : Propriétés $X^A \cdot p$, $X^B \cdot p$ et K_e en fonction de p pour un réseau 80×80

Réseaux standard

Les exposants des lois de type L^x pour les différentes propriétés hydrauliques des réseaux percolants ($(p(L)-p_c)$, X^A , X^B et K_e) ont été obtenus par une représentation log-log de chacune des propriétés en fonction de la taille des réseaux. Les pentes, calculées par régression linéaire, représentent les exposants recherchés. Chaque valeur est obtenue à partir de 500 réseaux simulés au seuil de percolation ; plusieurs lots de 500 réseaux ont été utilisés pour étudier la variabilité des paramètres. Les valeurs des exposants de X^A et X^B ont aussi été obtenus à partir du calcul des masses M de l'amas et du squelette et de leurs dimensions fractales correspondantes (d_f et d_B , voir section 3.2.2), une méthode beaucoup plus précise que le calcul direct.

Les valeurs des exposants obtenues correspondent bien aux valeurs théoriques sauf dans le cas de $(p(L)-p_c)$. La dispersion des points est toutefois très grande pour ce paramètre ($R^2=0,67$ où R^2 est le coefficient de détermination), celui-ci étant extrêmement sensible. Il aurait sans doute fallu plusieurs centaines de points pour retrouver la valeur théorique. Les valeurs obtenues avec les réseaux à $0-90^\circ$ sont également très proches

des valeurs théoriques. La dispersion des points dans le cas de $(p(L)-p_c)$ est beaucoup moins importante ($R^2=0,86$) et l'exposant estimé est très proche de la valeur théorique.

Les valeurs moyennes des différents paramètres sont généralement légèrement plus élevées (0 à 10%) pour les réseaux à 45° que pour ceux à $0-90^\circ$. Les différences les plus importantes, pouvant atteindre 25%, sont trouvées pour le paramètre X^B et les écarts-types de p_c et de K_e . Les écarts-types plus élevés montrent que les réseaux à 45° ont des formes plus variables que les réseaux à $0-90^\circ$. Le fait que le paramètre X^B soit plus élevé alors que X^A est semblable indique qu'il y a un peu moins de culs-de-sac dans les réseaux à 45° . À titre d'exemple, 500 réseaux standard 100×100 à 45° ont fourni les valeurs moyennes suivantes : $p_c=0,496$; $X^A=0,597$; $X^B=0,243$ et $K_e=0,0096$. L'erreur moyenne commise en utilisant seulement 200 réseaux par rapport à 500 est de 2% tout au plus pour X^A , X^B et K_e et inférieure à 0,2% pour p_c .

Réseaux à distribution log-normale de conductivité hydraulique

Des distributions log-normales ont également été utilisées pour générer les valeurs de conductivités hydrauliques dans les liens. Ce type de loi a été choisie car la conductivité hydraulique est souvent reconnue pour avoir une distribution log-normale [Freeze et Cherry, 1979 ; Dagan, 1990 ; Banton et Bangoy, 1997]. Il est également possible avec le modèle d'utiliser des champs pré-générés (dans un autre logiciel) avec une distribution de conductivité en loi normale centrée réduite et de les transformer pour le calcul de K_e (et de la dispersion) en spécifiant les paramètres $\mu_{\ln K}$ et $\sigma_{\ln K}$ désirés.

Des réseaux avec $\mu_{\ln K}=1$ et $\sigma_{\ln K}$ égal à 0,5 ; 1 et 1,5 ont été simulés. Ces valeurs de $\sigma_{\ln K}$ correspondent respectivement à une hétérogénéité faible, moyenne et forte. En effet, Bruderer et Bernabé (2001) considèrent qu'un coefficient de variation ($\sigma_{\ln K}/\mu_{\ln K}$) de 1,6 représente un degré d'hétérogénéité extrêmement élevé. Les valeurs de K lorsque $\sigma_{\ln K}=1,5$ s'étendent sur plus de trois ordres de grandeur (0,005 à 20). Les valeurs de l'exposant de K_e obtenues pour des réseaux à 45° avec les trois distributions varient entre 1,01 et 1,03, soit des valeurs très proches de celle théorique (0,98). Évidemment, la valeur de K_e diminue avec l'augmentation de l'écart-type puisque la valeur du mode (valeur la plus élevée) d'une distribution log-normale diminue avec l'augmentation de la variance. Les coefficients de variation restent toutefois semblables.

D'après ces résultats, nous pouvons conclure que le modèle d'écoulement développé reproduit bien le comportement décrit par la théorie de percolation. Les propriétés sont toutefois assez variables d'un réseau à l'autre, ce qui rend nécessaire l'utilisation d'un grand nombre de réseaux (au moins 200). Les coefficients de variation pour des réseaux standard à 45° sont en moyenne de 26,5% pour X^A , 41,5% pour X^B et 43% pour K_e . Le coefficient de variation du seuil de percolation diminue continuellement avec l'augmentation de la taille des réseaux, allant de 4,3% à 1,4% pour les réseaux simulés (50x50 à 300x300).

4.2. Modèle de transport

Le transport de solutés conservatifs est ensuite étudié avec la méthode de marche au hasard à l'intérieur des réseaux percolants. La marche au hasard est une méthode lagrangienne, c'est-à-dire une méthode dans laquelle les équations sont résolues dans un système de référence local, par exemple celui des particules. Elle est basée sur la résolution séparée des processus d'advection et de dispersion. Dans notre cas, cette méthode est réduite à sa plus simple expression car nous n'avons cherché qu'à quantifier la dispersion liée à la multiplicité des chemins dans un milieu hétérogène, la diffusion moléculaire jouant fréquemment un rôle très secondaire dans les aquifères. Nous considérons alors la dispersion essentiellement causée par les variations des chemins d'écoulement et des vitesses dans les liens. Le transport des particules à l'intérieur du squelette est donc effectué uniquement par déplacements convectifs, correspondant à la méthode du suivi de particules (*particle tracking*).

4.2.1 Conception du modèle de transport

La méthode de marche au hasard utilisée pour cette étude tient compte du sens de l'écoulement : lorsqu'une particule arrive à un nœud, elle ne peut se diriger que dans les liens dont l'écoulement s'éloigne de ce nœud. En négligeant la diffusion moléculaire, les phénomènes de chenalisation par rugosité des parois du lien et les processus de sorption, la dispersion à l'intérieur d'un lien est alors nulle. Le temps mis par une particule pour parcourir un lien est alors simplement $t_l = l \cdot n_e / v_{\text{Darcy}}$ où l est la longueur d'un lien, $v_{\text{Darcy}} = K \cdot i$ est la vitesse de Darcy et n_e la porosité cinématique locale ($n_e = 1$ dans un lien).

Au départ, la particule est introduite aléatoirement dans un des liens ouverts de la première rangée. À chaque pas, la particule sélectionne le lien suivant avec une probabilité proportionnelle à la vitesse (ou au débit) dans les liens (on admet que la particule quitte le nœud instantanément et que le mélange des flux à chaque intersection est parfait (*perfect mixing model*)). Du fait des conditions périodiques sur les limites est et ouest du réseau, aucune particule ne peut quitter le système avant d'atteindre la limite sud du réseau. Les temps requis pour parcourir les liens sont additionnés au fur et à mesure.

Pour la modélisation du mélange aux nœuds dans les réseaux, l'hypothèse du mélange parfait [Smith et Schwartz, 1984 ; Koplik *et al.*, 1988 ; Moreno *et al.*, 1988 ; Cacas *et al.*, 1990 ; Berkowitz et Braester, 1991 ; Moreno et Neretnieks, 1993 ; Berkowitz et Scher, 1998 ; Lin et Lee, 1998 ; Mukhopadhyay et Cushman, 1998 ; Huseby *et al.*, 2001] et la méthode des lignes de courant [Endo *et al.*, 1984 ; Sahimi *et al.* 1986 ; Sahimi et Imdakm, 1988 ; Wels et Smith, 1994 ; Parney et Smith, 1995] ont été utilisées dans de nombreuses études. Certains auteurs croient que l'hypothèse du mélange parfait ne peut être utilisée que lorsque le nombre de Peclet aux nœuds ($2u \cdot r_i / D_m$ où u : vitesse, r_i : rayon du nœud, D_m : diffusion moléculaire) est petit (inférieur à 100), [Park et Lee, 1999 ; Park *et al.*, 2001] ou même jamais [Berkowitz *et al.*, 1994], mais il n'y a pas encore de consensus à ce sujet. À proximité du seuil de percolation, les deux modèles de mélange conduisent sensiblement aux mêmes résultats, car peu de liens sont ouverts. En effet, le seul cas pour lequel les modèles de mélange diffèrent est celui de la jonction continue, c'est-à-dire un nœud à quatre liens ouverts où deux directions d'écoulement convergent et se croisent au nœud [Kupper *et al.*, 1995].

La dispersion longitudinale est définie par :

$$D_L = \frac{\sigma_x^2}{2t} \quad (4.5)$$

où σ_x^2 représente la variance des déplacements des particules à un temps t . Dans les cas d'observation en milieu naturel, la dispersion est évaluée avec la distribution des particules dans le temps à une distance donnée. En effet, des échantillons sont prélevés à intervalles réguliers au puits de pompage ou aux différents puits d'observation dépendant du type d'essai de traçage réalisé. Pour cette raison, la dispersion à partir de

la variation des temps, soit σ_t , a également été calculée dans le modèle. Cette méthode entraîne toutefois une difficulté supplémentaire puisque le temps n'a pas de borne supérieure alors que la distance parcourue est toujours limitée par les frontières du domaine.

La relation qui relie σ_x à σ_t est [Domenico et Schwartz, 1990] :

$$\sigma_x = \langle u \rangle \cdot \sigma_t \quad (4.6)$$

où $\langle u \rangle$ est la vitesse moyenne d'un trajet. La dispersion longitudinale est alors calculée avec :

$$D_L(t) = \frac{\sigma_t^2 \cdot \langle u \rangle^2}{2t} \quad (4.7)$$

où t est le temps total requis pour que la particule atteigne pour la première fois la distance x (il est possible que la particule puisse retourner temporairement vers l'arrière avant de poursuivre vers le bas). Le temps t est donc la somme des temps de parcours dans chacun des liens, soit la somme des $t_i = l^2 / (K_{ij} \cdot \Delta h_{ij})$ où Δh_{ij} est la différence de charge dans un lien. Dans des systèmes homogènes, les vitesses calculées avec $L/\langle t \rangle$ ou avec $Q/S = K_e \cdot i_{\text{global}}$ sont équivalentes. D'ailleurs il a été vérifié que ces deux méthodes donnent des résultats semblables dès que la probabilité p est supérieure à 0,7. Cependant à proximité du seuil de percolation, seulement quelques chemins sont disponibles ce qui rend la vitesse calculée avec $K_e \cdot i_{\text{global}}$ très peu représentative des vitesses à l'intérieur des chemins préférentiels. La première méthode permet en effet de prendre en compte dans le calcul de vitesse le temps « perdu » par certaines particules dans les boucles des réseaux. L'hypothèse d'homogénéité sous-entendue dans la seconde méthode ne permet que de calculer des propriétés moyennes, inadéquates pour la modélisation du transport lorsque l'écoulement est chenalisé. De plus lors des essais de traçage, la seconde méthode n'est pas applicable. Pour ces raisons, nous avons décidé d'utiliser $\langle u \rangle = x/\langle t \rangle$, où x est la distance verticale parcourue. Le coefficient de dispersion s'écrit donc :

$$D_L = \frac{\sigma_t^2 \cdot x^2}{2\langle t \rangle^3} \quad (4.8)$$

L'équation 4.8 calcule un paramètre « agrégé » ne traduisant pas toute la physique fine du processus de dispersion dans un réseau. Cela étant, cette approche est de règle dans de nombreux cas pratiques comme par exemple l'interprétation d'essais de traçage. Dans ce cas, le système peut être considéré comme un « milieu homogène équivalent 1-D » pour lequel la théorie est bien connue. Les simulations numériques permettront ainsi d'étudier le comportement des distributions des temps d'arrivée avec leurs valeurs de dispersion correspondantes en fonction des paramètres topologiques des réseaux percolants. Nous espérons ainsi pouvoir discerner des comportements différenciés qui ouvriraient alors la voie à une utilisation des réseaux percolants pour la simulation de systèmes naturels investigués par essais de traçage. Puisque des valeurs différentes peuvent découler des méthodes utilisées pour calculer D_L , surtout à proximité du seuil de percolation, trois méthodes ont été employées (utilisant les équations 4.5 et 4.8).

Deux méthodes d'évaluation des paramètres σ_t et $\langle t \rangle$ ont été testées. La première est basée sur l'hypothèse que les temps de parcours des particules dans un système tendent à être distribués log-normalement [Banton *et al.*, 1997] (hypothèse qui a d'ailleurs été vérifiée par la suite). La moyenne et la variance des logarithmes ont donc été utilisées pour caractériser les distributions des temps. La moyenne et la variance des temps sont alors calculées avec les équations suivantes [Banton et Bangoy, 1997] :

$$\langle t \rangle = \mu_t = \exp \left(\mu_{\ln t} + \frac{\sigma_{\ln t}^2}{2} \right) \quad (4.9)$$

et

$$\sigma_t^2 = \exp(2 \cdot \mu_{\ln t} + 2 \cdot \sigma_{\ln t}^2) - \exp(2 \cdot \mu_{\ln t} + \sigma_{\ln t}^2) \quad (4.10)$$

Pour la seconde méthode, les temps d'arrivée des particules sont classés par ordre croissant afin d'obtenir la fonction cumulative de fréquence correspondant à l'arrivée du front de concentration. La dispersion est déterminée à l'aide des temps t_{16} , t_{50} et t_{84} définis comme les temps où les masses récupérées sont respectivement 16%, 50% et 84% du nombre total de particules. Si la distribution n'est pas très éloignée d'une distribution normale, ces percentiles correspondent aux probabilités de réalisation des valeurs $\mu_t - \sigma_t$, μ_t et $\mu_t + \sigma_t$. On peut donc utiliser $\langle t \rangle = t_{50}$ et $\sigma_t = (t_{84} - t_{16})/2$ dans l'équation 4.8. Il est clair que la seconde méthode apporte un biais lorsque le délai entre t_{50} et t_{84} est nettement plus grand que celui entre t_{16} et t_{50} . Cette méthode a toutefois été conservée car elle est souvent utilisée dans l'interprétation des essais de traçage [Banton et Bangoy, 1997]. Il existe probablement aussi un léger biais avec la première méthode dû

au fait que les distributions des temps ne correspondent pas nécessairement toutes à des lois (parfaitement) log-normales.

De nombreuses particules doivent être injectées dans différents réseaux de percolation pour obtenir un échantillon représentatif des déplacements moyens de l'ensemble des particules. En effet, chacune des particules injectées a un trajet différent et donc un temps d'arrivée à l'autre extrémité différent. Le nombre de particules nécessaires a été testé en même temps que la précision du calcul des charges dans des réseaux 300x300. La simulation sur 200 réseaux 300x300 avec une précision de 10^{-6} pour le critère d'arrêt du calcul des charges et 5 000 particules et avec une précision de 10^{-10} et 10 000 particules a montré qu'il n'y a pratiquement pas de différence (écart de moins de 5%) sur les valeurs du coefficient de dispersion. Nous avons donc utilisé comme paramètres pour toutes les tailles de réseaux 10^{-6} et 5 000, puisque une taille de 300x300 représente le cas d'erreur maximale, les écarts diminuant avec la diminution de la taille des réseaux.

Pour la dispersion calculée avec σ_t , une seule valeur par réseau est calculée par le modèle à la distance désirée (à la sortie ou à n'importe quelle distance à l'intérieur du réseau selon un facteur multipliant la longueur totale du réseau). Pour la dispersion calculée avec σ_x , une trentaine de valeurs sont calculées à différents temps afin de suivre l'évolution de la dispersion au cours de l'avancée du traceur dans le réseau.

4.2.2 Validation des lois universelles pour le transport

Seule la dispersion longitudinale (D_L) a été calculée dans des réseaux standard ($K_{\text{lien}} = 1$ ou 0) et avec une distribution log-normale des conductivités hydrauliques dans les liens. Dans les réseaux standard, la dispersion est dite « topologique » car elle est uniquement causée par la tortuosité du milieu (tous les liens ayant la même conductivité hydraulique). Malgré l'utilisation d'un modèle de mélange parfait au nœud rendant peu probable le fait qu'une particule emprunte un lien très lent (à cause de la probabilité d'emprunt du lien proportionnelle à la vitesse dans le lien), dans les réseaux à 0-90° la probabilité de circuler dans les liens perpendiculaires au gradient de charge général reste non négligeable et a pour effet d'augmenter démesurément les temps de parcours. Pour cette raison, seuls les réseaux à 45° ont été utilisés pour simuler le transport des particules.

Les simulations ont toutes été effectuées avec un gradient hydraulique de 0,01 et une distance verticale entre deux nœuds de 20. Les résultats sont volontairement présentés sans unités puisque la taille des liens pourrait aussi bien être fournie en m qu'en km ou même en unités impériales (par exemple en pieds). Les unités du coefficient de dispersion sont par exemple des m^2/s lorsque la dimension des liens est fournie en m et les valeurs de conductivité hydraulique en m/s. Les résultats pourraient être rendus adimensionnels en multipliant le coefficient de dispersion par $(K_{\text{moyen}} \cdot i_{\text{moyen}} \cdot l)^{-1}$ où K_{moyen} est la conductivité hydraulique moyenne du réseau, i_{moyen} est le gradient hydraulique moyen et l est la longueur d'un lien. En raison de conductivités hydrauliques très fortes utilisées pour les simulations consignées dans ce chapitre, les temps de parcours dans les liens sont tous inférieurs à 10^{10} (et en moyenne de l'ordre de 10^4) alors que le temps correspondant à la diffusion moléculaire serait de l'ordre de 10^{12} pour un coefficient de diffusion moléculaire D_m de 10^{-10} (valeur moyenne courante selon Freeze et Cherry, 1979; Banton et Bangoy, 1997) et une distance minimale de 20. La non prise en compte de la diffusion moléculaire est donc parfaitement justifiée.

Réseaux standard

Pour valider le modèle de transport avec des réseaux standard, 5 000 particules ont été introduites dans des réseaux de tailles allant de 50x50 à 300x300. Au seuil de percolation, le coefficient de dispersion ne se stabilise pas dans le temps ou dans l'espace. En effet, à $p=p_c$, le nombre de chemins disponibles est très limité et une homogénéisation des vitesses échantillonnées par chaque particule est impossible. Il est par conséquent difficile de déterminer un coefficient de dispersion qui caractérise les réseaux. Nous avons choisi d'évaluer la dispersion des réseaux en utilisant les coefficients de dispersion calculés à l'aide de la distribution des particules dans le temps (σ_t) à la sortie des réseaux. Le D_L ainsi calculé est donc une valeur pré-asymptotique dépendante de la taille du réseau et de la vitesse moyenne du fluide. La population des coefficients de dispersion obtenue avec 500 réseaux à $p=p_c$ s'apparente à une distribution log-normale dont la variance ne diminue pas avec la taille des réseaux. La figure B-1 (de l'annexe B) présente les distributions de D_L et du temps de parcours pour trois tailles de réseaux. Le fait que la variance ne tende pas vers une valeur nulle à mesure que la taille des réseaux augmente implique que le coefficient de dispersion n'est pas une propriété « homogène » (*self-averaging property*). La conséquence pratique est

qu'indépendamment de leur taille, les réseaux au seuil de percolation se comportent comme des milieux de dimensions finies dans lesquels D_L dépend de l'échelle de temps ou d'espace. Par ailleurs, différents tests ont montré qu'une ou plusieurs valeurs devaient souvent être éliminées pour pouvoir considérer que l'échantillon des valeurs de dispersion obéisse à une loi de distribution log-normale. Pour cette raison, nous avons préféré caractériser ces distributions par la valeur médiane et non par la moyenne géométrique, ce qui permet de s'affranchir d'une éventuelle troncature des données.

La figure 4.4 présente les médianes des coefficients de dispersion obtenus avec les deux méthodes utilisant la distribution des temps (méthodes des logarithmes et des percentiles, appelées dorénavant « $\ln t$ » et « $t_{84}-t_{16}$ »). Les valeurs obtenues par les deux méthodes sont très proches et les variations pour une même méthode sont assez faibles. Sont également présentées quelques valeurs obtenues avec les logarithmes en éliminant 5% des particules les plus lentes. Ceci correspond à une récupération sur le terrain de 95% de la masse de soluté. Ces points permettent de constater l'importance de la non prise en compte des particules les plus lentes. En effet, les valeurs obtenues en éliminant 5% des particules sont inférieures de 25 à 40% par rapport à celles estimées en conservant l'ensemble des particules. Étant donnée qu'une fraction de la masse seulement peut être récupérée durant les essais de traçage, il serait probablement sage d'utiliser un facteur de sécurité sur les résultats obtenus, ce qui permettrait d'obtenir un intervalle de confiance pour ce paramètre.

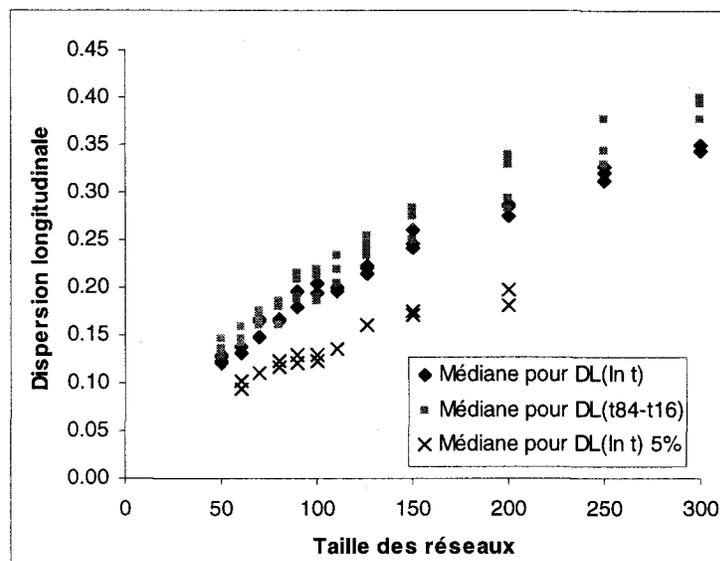


Figure 4.4 : Dispersion longitudinale en fonction de la taille des réseaux

L'exposant χ , correspondant à la pente des représentations log-log de D_L en fonction de la taille des réseaux, est de 0,61 pour $D_L(\ln t)$ (sans troncature des temps les plus longs) et de 0,58 pour $D_L(t_{84}-t_{16})$. Ces graphiques sont présentés à la figure B-2 (annexe B). Les valeurs du coefficient de dispersion obtenues avec la distribution des particules dans l'espace ont également été reportées sur une échelle log-log en fonction de la taille des réseaux à différents temps (sans que le régime asymptotique ne soit atteint), permettant de retrouver d'une autre façon une loi de type $D_L \sim L^\chi$. Pour tous les temps, la pente était de 0,54, soit une valeur légèrement inférieure à celles obtenues avec la méthode précédente. Toutes les pentes ont été obtenues avec un coefficient de détermination (R^2) supérieur à 0,9. Il faut noter que ces pentes, variant entre 0,54 et 0,61, sont assez éloignées de la valeur de 0,39 proposée par Sahimi et Imdakm (1988) (voir l'équation 3.12). Cependant, Sahimi et Imdakm (1988), comme d'autres auteurs qui ont confirmé leurs résultats [Berkowitz et Braester, 1991 ; Lee *et al.*, 1994 ; Huseby *et al.*, 2001], ont uniquement utilisé les distributions spatiales de particules et calculé D_L avec la moyenne arithmétique. Des tests réalisés avec notre modèle ont montré qu'une pente similaire à celle de Sahimi et Imdakm (1988) peut effectivement être retrouvée de cette façon. Toutefois, nos simulations indiquent clairement qu'à proximité du seuil de percolation, la moyenne arithmétique de la distribution de D_L n'est pas l'élément le plus significatif de la « vraie » valeur du coefficient de dispersion puisque la distribution de cette population est log-normale. En outre, une valeur moyenne de D_L basée sur les distributions spatiales des particules à $p=p_c$ est encore plus éloignée de la valeur asymptotique que celle basée sur les distributions temporelles puisque pour avoir la totalité des particules à l'intérieur des réseaux, la distance moyenne parcourue doit être inférieure à $L/3$, où L est la longueur des réseaux. Cette distance est donc trois fois plus courte que celle utilisée pour les distributions temporelles.

Néanmoins, des simulations réalisées avec quelques très grands réseaux (jusqu'à 1000x1000) ont indiqué que les valeurs de D_L estimées avec ceux-ci sont inférieures à celles prédites par la pente de 0,6 obtenue avec des réseaux plus petits. Ceci signifie que l'utilisation de très grands réseaux mènerait éventuellement à retrouver l'exposant de la loi universelle ($D_L \sim L^{0,39}$). Plus les réseaux utilisés sont grands, plus les résultats devraient tendre vers la pente théorique suggérée pour des réseaux infinis. L'augmentation de la taille des réseaux augmente significativement le nombre de chemins disponibles pour les particules et en conséquence, les temps de parcours, leur variance et également le

coefficient de variation $\sigma_t/\langle t \rangle$). La figure B-3 (annexe B) illustre d'ailleurs l'accroissement continu de ces trois paramètres en fonction de la taille des réseaux. L'exposant de 0,6 étant plus élevé que celui suggéré dans la littérature, ceci implique une très forte augmentation de la variance des temps à mesure que la taille des réseaux augmente puisque les temps moyens de parcours sont élevés au cube dans l'expression de la dispersion calculée avec les distributions temporelles. Cet exposant représente néanmoins une valeur effective, résultant spécifiquement de l'utilisation de l'équation de D_L basée sur les distributions des temps dans des réseaux de tailles finies.

Les dispersivités ont également été calculées en fonction de la taille des réseaux pour retrouver l'exposant d'une représentation log-log. Les valeurs de dispersivité proviennent de la division de la valeur médiane de la dispersion par la moyenne arithmétique de la vitesse de l'ensemble des réseaux pour une simulation donnée, les vitesses étant distribuées normalement. La valeur de l'exposant obtenu est 1,3, soit de 30% supérieur à ce que prédit la théorie de percolation ($\alpha_L \sim L$).

Les valeurs de dispersion calculées avec la distribution des distances (σ_x) pour des réseaux 80x80, 100x100 et 150x150 sont présentés sur la figure 4.5a. Encore une fois, les valeurs médianes sont utilisées. Ces courbes augmentant rapidement montrent bien que le régime asymptotique est loin d'être atteint. Pour retrouver l'exposant de la loi $D_L \sim t^\delta$, les reports log-log de D_L en fonction du temps pour toutes les tailles de réseaux ont été tracés. Ils révèlent que les réseaux ont des pentes qui varient entre 0,74 et 0,98. Les pentes obtenues sont reportées en fonction de la taille des réseaux à la figure 4.5b. Elles ne semblent pas constantes, mais tendent plutôt à diminuer avec la taille des réseaux, rapidement pour les petites tailles, puis lentement à partir de $n=150$. La dispersion des points est importante, surtout pour les réseaux de petites tailles. Ces valeurs sont encore une fois très loin de la valeur de 0,24 présentée par Sahimi et Imdakm (1988) (voir équation 3.13). Ceux-ci ne l'ont, à notre connaissance, jamais validé pour des réseaux non corrélés.

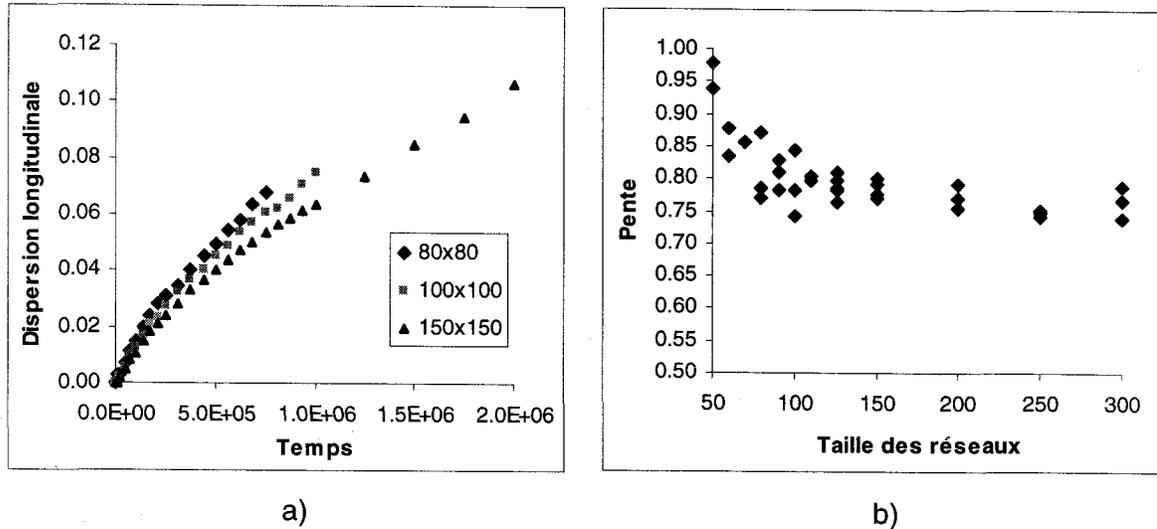


Figure 4.5 : Dispersion longitudinale à $p=p_c$ calculée avec σ_x a) Exemples de courbes de $D_L(\sigma_x)$ en fonction de t et b) Exposant de la loi $D_L \sim t^\alpha$

Les populations de D_L ne sont distribuées log-normalement qu'au seuil de percolation. Pour $p > p_c$, les distributions sont parfois asymétriques, mais elles se rapprochent beaucoup plus de lois normales. La figure B-4 (annexe B) illustre les populations de D_L pour les probabilités $p=0,6$, $0,7$ et $0,9$. Les distributions des D_L obtenues avec les logarithmes et les percentiles sont très semblables jusqu'à $p=0,6$. Lorsque p devient supérieur à $0,6$, la distribution « $t_{84}-t_{16}$ » s'éloigne légèrement de celle « $\ln t$ ». Les valeurs plus petites obtenues avec la méthode des percentiles se justifient par le σ_t calculé avec les valeurs « centrales » des temps ($\sigma_t=(t_{84}-t_{16})/2$) et par conséquent la non prise en compte des particules les plus lentes. À $p=0,7$, les courbes « $t_{84}-t_{16}$ » se rapprochent plus des courbes obtenues avec σ_x et à $p > 0,8$, les courbes obtenues avec σ_x sont entre les deux courbes obtenues avec σ_t . Il est difficile de déterminer laquelle des méthodes utilisant σ_t est la meilleure. Il est probablement préférable de conserver les deux résultats pour obtenir un minorant et un majorant de la dispersion, sachant que la méthode utilisant la distribution des particules dans l'espace est généralement située entre les deux lorsque $p \geq 0,7$.

Les figures 4.6a et b présentent les courbes des valeurs médianes de D_L et de α_L obtenues avec des réseaux 100×100 en fonction de différentes probabilités p imposées. Nous avons considéré que la probabilité qu'un réseau percole à une fraction de liens ouvert p inférieure à $0,45$ était nulle. Les valeurs obtenues à $p=p_c$ ont également été

incluses sur les graphiques (étant donné que le seuil de percolation pour les différents réseaux peut varier approximativement entre 0,45 et 0,55). Des graphiques similaires, mais pour des réseaux 300x300 sont présentés à l'annexe B (figure B-5). Tel que prédit par Sahimi et Imdackm (1988), la dispersion et la dispersivité augmentent à mesure que p tend vers le seuil de percolation, les chemins devenant de plus en plus tortueux. Par contre, nos simulations montrent qu'une valeur maximale de D_L est atteinte pour une valeur de p proche de 0,5 (correspondant au seuil de percolation moyen), puis les valeurs diminuent brusquement. Le sommet des courbes pour les réseaux 100x100 est atteint à $p=0,53$ et pour les réseaux 300x300 à $p=0,51$. Ce phénomène devrait disparaître lorsque L devient très grand.

Pour comprendre ce comportement, les distributions des valeurs médianes de σ_t^2 et $\langle t \rangle$ ont été examinées, celles-ci concordant respectivement avec le comportement du numérateur et du dénominateur de l'équation 4.8. La figure B-6 (annexe B) montre que la diminution est d'abord attribuable à un accroissement considérable du temps de parcours moyen (puisque les chemins deviennent de plus en plus tortueux) qui ne peut pas être compensé par l'augmentation de la variance (rappelons que dans l'équation 4.8, $\langle t \rangle^3$ est au dénominateur). Une explication possible de ce changement brusque de comportement est que les valeurs maximales de D_L (et de α_L) pourraient correspondre à la probabilité p pour laquelle l'écoulement dans tous les liens devient orienté vers le bas. Lorsque la probabilité p devient très faible (inférieure à 0,5), très peu de chemins sont disponibles et les particules prennent toutes à peu près les mêmes chemins, entraînant une diminution importante de σ_t^2 et conséquemment des valeurs de D_L . Les deux méthodes de calcul fournissent des résultats très semblables. Pour $p \geq 0,7$, nous avons également inséré dans la figure 4.6 les valeurs de D_L obtenues avec σ_x étant donné que les systèmes devraient être suffisamment homogènes pour permettre la comparaison des deux types de distribution. Celles-ci concordent d'ailleurs très bien avec les autres valeurs trouvées.

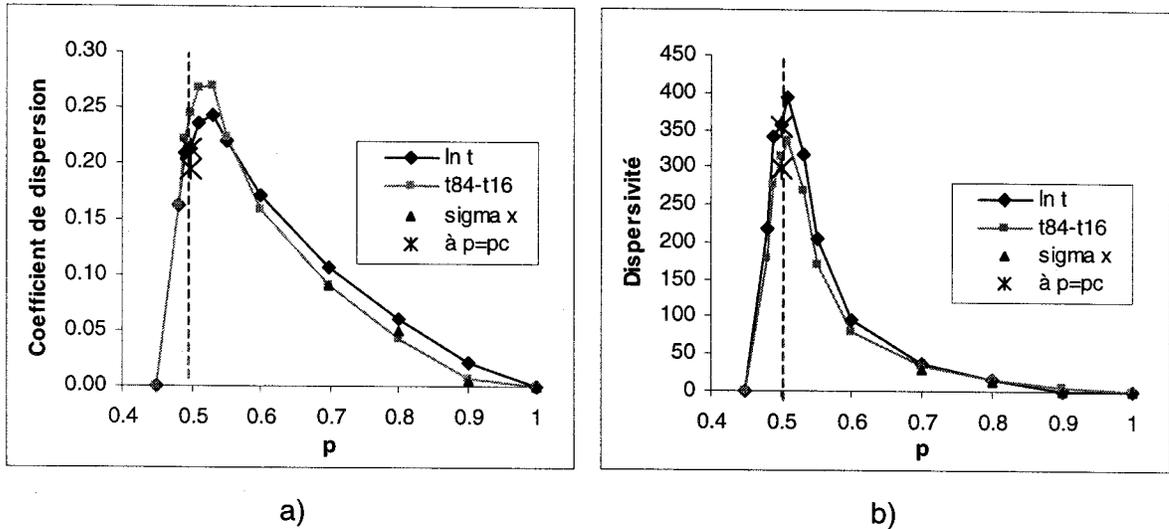


Figure 4.6 : Comportement des réseaux en fonction de la probabilité p a) Dispersion longitudinale et b) Dispersivité longitudinale

Les courbes de D_L obtenues avec σ_x en fonction du temps à différentes probabilités p pour des réseaux 100×100 sont présentées à la figure 4.7. Chaque point représente la valeur médiane de 500 réseaux et n'est conservé que si toutes les particules sont à l'intérieur du réseau. Étant donné que les particules dans notre modèle ne peuvent traverser que la distance L et sortir à l'extrémité (les conditions périodiques ne sont présentes que sur les côtés est et ouest), les courbes n'atteignent jamais vraiment de plateau. Celui-ci est toutefois proche lorsque $p \geq 0,7$, car l'avant dernière valeur des courbes correspond toujours à plus de 90% de la dernière valeur. Généralement, plus p augmente, plus la dispersion diminue (les chemins étant moins tortueux) et plus la courbe est courte puisque le temps requis pour traverser les réseaux est court (l'ouverture des liens étant aléatoire). Cependant, la dispersion à $p=p_c$ a un comportement différent. Les valeurs de cette courbe pour des temps courts ont été insérées sur la figure 4.7 afin de pouvoir faire une comparaison (à noter que si les réseaux étaient de longueur infinie, D_L continuerait longtemps d'augmenter et dépasserait les autres courbes). La dispersion est plus faible que pour toutes les autres courbes à l'exception de celle à $p=0,9$. Ceci provient du fait que très peu de chemins sont disponibles à proximité de p_c , entraînant une diminution significative de σ_x^2 . Ce phénomène semble s'atténuer à mesure que la taille des réseaux augmente puisque chaque particule a ainsi une plus grande probabilité d'expérimenter le long des quelques chemins conducteurs (qui sont plus longs) une grande variabilité de vitesses, entraînant par conséquent des écarts plus importants entre

les différentes positions des particules à un temps donné et donc une dispersion plus forte (ressemblant plus aux valeurs observées à des p supérieurs au seuil).

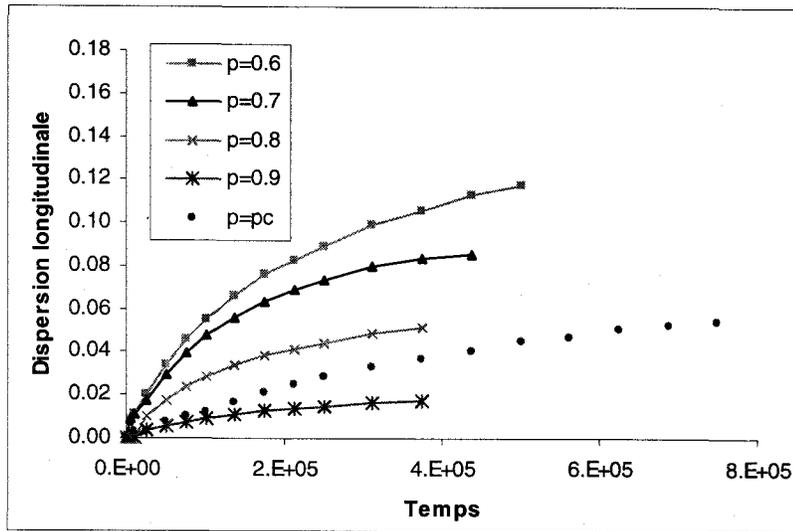


Figure 4.7 : Dispersion pour des réseaux 100x100 à différents p

Les valeurs du coefficient de dispersion longitudinale obtenues avec 200, 300, 400 et 500 réseaux ont été comparées. Nous avons constaté que l'écart relatif entre les résultats obtenus avec 200, 300 et 400 réseaux et ceux obtenus avec 500 réseaux est toujours inférieur respectivement à 10%, 5% et 2%.

Nous avons également considéré le cas de réseaux pseudo-infinis en plaçant des conditions aux limites périodiques sur les bords nord et sud des réseaux. Les particules sont alors réinjectées en boucle : à chaque fois qu'elles atteignent le bas des réseaux, elles sont repositionnées au nœud correspondant de la première rangée du système. Cette procédure permet de simuler la dispersion sur de grandes distances longitudinales (dans le sens de l'écoulement). Les simulations pour toutes les tailles de réseaux à $p=p_c$ ont indiqué que les valeurs médianes de $D_L(\sigma_t)$ atteignent une valeur constante (régime asymptotique) après une dizaine de passages à travers les réseaux (figure 4.8a). L'atteinte d'une valeur constante n'est pas surprenante étant donné que la dispersion dans les systèmes spatialement périodiques est gaussienne [Sahimi, 1995]. Les valeurs de D_L obtenues avec les méthodes « $\ln t$ » et « $t_{84}-t_{16}$ » sur les réseaux périodiques sont assez différentes et leurs écarts sont constants quelle que soit la taille du réseau élémentaire (le motif répété). L'écart relatif moyen entre les deux méthodes pour toutes les tailles de réseau élémentaire pour dix passages ou plus est de 30%. Les valeurs

variant d'une façon importante d'une simulation à l'autre à cause des distributions de temps de parcours très étendues, aucun exposant caractérisant la dépendance d'échelle de D_L n'a pu être calculé avec précision.

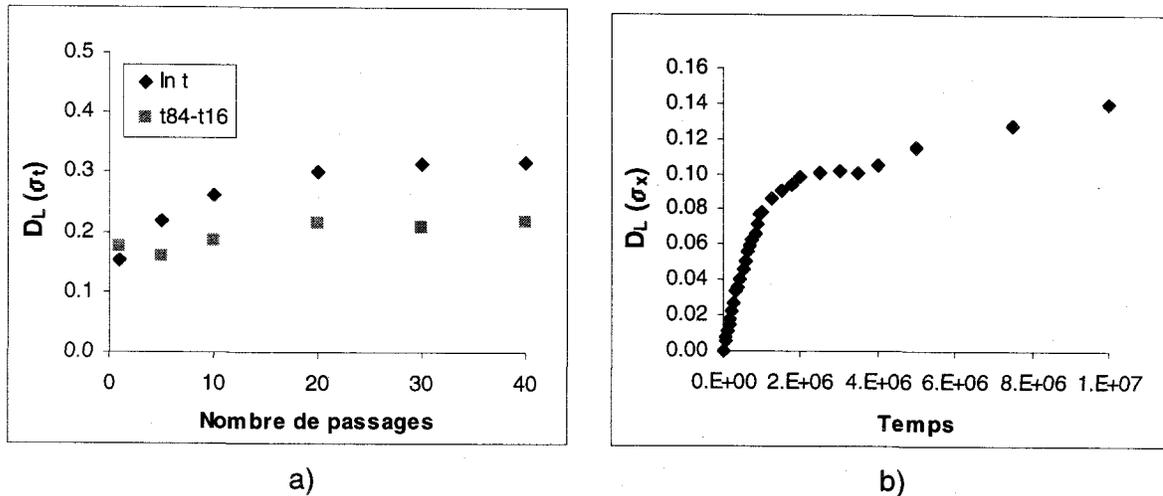


Figure 4.8 : Comportement de $D_L(\sigma_x)$ pour des réseaux 80x80 à $p=p_c$ a) En fonction du nombre de passages et b) En fonction du temps

Les valeurs de D_L obtenues à partir des distributions spatiales des particules ont un comportement très différent. La figure 4.8b montre que la courbe des valeurs médianes de $D_L(\sigma_x)$ en fonction du temps a un comportement en trois phases : une pente abrupte suivie par un plateau et finalement une pente douce qui pourrait éventuellement tendre vers un autre plateau. Ce plateau indique que la dispersion atteint un régime asymptotique temporaire. Cependant, une fois que les particules ont dépassé une longueur critique de déplacement (correspondant à une longueur de corrélation), la dispersion dépend à nouveau des caractéristiques du réseau. Nous avons trouvé que la distance moyenne parcourue par les particules lorsque le plateau débute correspond à la longueur du réseau L . En fait, des valeurs constantes pourraient probablement être atteintes pour d'autres longueurs. Par ailleurs, une augmentation constante pourrait indiquer que la dispersion au seuil de percolation pourrait se rapprocher d'un « régime convectif » dans lequel σ_x^2 est proportionnel à t^2 (au lieu de t), comme si chaque particule conservait sa propre vitesse. En conséquence, le coefficient de dispersion calculé est toujours proportionnel au temps. Ce type de dispersion est courant dans les réseaux d'écoulement fortement chenalés où les particules ne suivent que quelques chemins, presque indépendants les uns des autres. Le report log-log des valeurs stabilisées (plateaux) de D_L en fonction de la taille des réseaux fournit une pente de 0,39 (avec

$R^2=0,95$), identique à la valeur de l'exposant théorique prédit par Sahimi et Imdakm (1988) ($D_L \sim L^{0,39}$, équation 3.12). Ceci indiquerait que cette loi pourrait n'être valide que pour un régime asymptotique de dispersion.

Un des renseignements majeurs apporté par l'ensemble des simulations est que la méthode utilisée pour calculer D_L (basée sur les distributions temporelles ou spatiale) influence largement le comportement du coefficient de dispersion. Nous concluons donc qu'il est difficile de parler de « lois universelles » au sens strict sauf à considérer ces dernières comme des lois générales de comportement qui dans tous les cas nécessitent que l'on précise la méthode selon laquelle la dispersion est estimée. À cause des fortes hétérogénéités présentes à $p=p_c$, les distributions temporelles des particules sont tellement étendues que nous croyons que les valeurs de D_L calculées avec σ_t et σ_x ne peuvent pas vraiment être comparées. Pour la même raison, les méthodes « $\ln t$ » et « $t_{84}-t_{16}$ » ne peuvent pas fournir des valeurs de D_L identiques.

Des simulations avec $p > p_c$ ont aussi été réalisées de façon à vérifier si les valeurs de D_L obtenues avec un seul passage demeuraient constantes après plusieurs passages. Nous avons trouvé que des valeurs constantes ne pouvaient être obtenues qu'après de nombreux passages, même lorsque $p \geq 0,7$. La figure 4.9a présente les valeurs de $D_L(\sigma_t)$ en fonction du nombre de passages, tandis que 4.9b montre les valeurs de $D_L(\sigma_x)$ en fonction du temps obtenues pour 40 passages dans des réseaux 60×60 à $p=0,7$. Les valeurs du coefficient de dispersion semblent atteindre un plateau seulement quand les particules ont traversé les réseaux de 10 à 15 fois, même lorsque la probabilité est élevée ($p > 0,7$), ce qui est assez surprenant. Ceci semblerait indiquer que même lorsque $p > p_c$, D_L demeure une propriété non homogène (*non self-averaging property*). Toutefois, pour $p \gg p_c$, (c'est-à-dire p proche de 1), les réseaux deviennent suffisamment homogènes pour fournir rapidement des valeurs de D_L similaires quelle que soit la méthode de calcul.

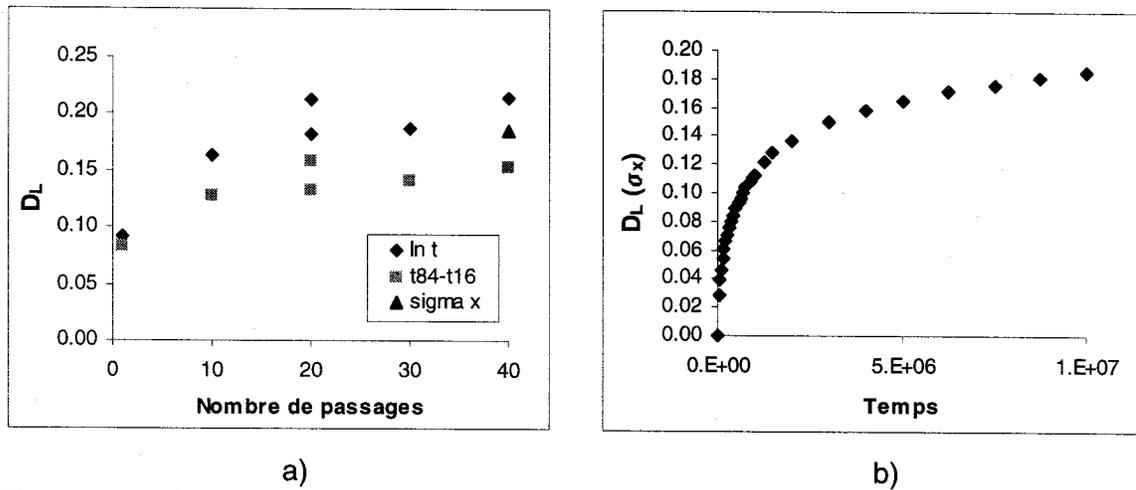


Figure 4.9 : Comportement de D_L pour des réseaux 60x60 à $p=0,7$ a) En fonction du nombre de passages et b) $D_L(\sigma_x)$ en fonction du temps

Réseaux à distribution log-normale de conductivité hydraulique

Le transport des particules a également été simulé dans des réseaux ayant une distribution log-normale des valeurs de conductivité hydraulique ($\mu_{\ln K}=1$, $\sigma_{\ln K}=0,5$; 1 et 1,5). La figure 4.10 présente les courbes de K_e et D_L calculées avec les logarithmes en fonction de la probabilité p pour les trois distributions (réseaux 100x100). Les courbes de D_L en fonction de p pour les trois distributions, mais cette fois avec les trois méthodes de calcul ($\ln t$, $t_{84}-t_{16}$ et σ_x) réunies sur une même figure sont présentées à la figure B-7 (annexe B). La courbe de K_e est semblable dans les trois cas (puisque $\mu_{\ln K}=1$). Comme dans le cas des réseaux standard, la dispersion augmente avec la diminution de p , puis chute à proximité de p_c . Pour $p \geq 0,6$, D_L augmente à mesure que $\sigma_{\ln K}$ augmente, ce qui est normal puisque le milieu est de plus en plus hétérogène. La diminution du coefficient de dispersion longitudinal lorsque p augmente est de moins en moins importante à mesure que $\sigma_{\ln K}$ augmente. Il n'y a que 17% de différence entre les valeurs de D_L obtenues à $p=0,55$ et $p=1$ lorsque $\sigma_{\ln K}=1,5$.

Par contre, la figure 4.10 montre que le comportement de D_L est encore une fois bien différent à proximité de p_c . En effet, la tendance s'inverse : D_L diminue avec l'augmentation de $\sigma_{\ln K}$. L'augmentation de l'hétérogénéité amplifie les variations de vitesses dans les quelques chemins disponibles au seuil de percolation, ce qui provoque une augmentation des temps de parcours. Par contre pour de faibles hétérogénéités, la dispersion continue d'augmenter près du seuil car les temps de parcours sont courts.

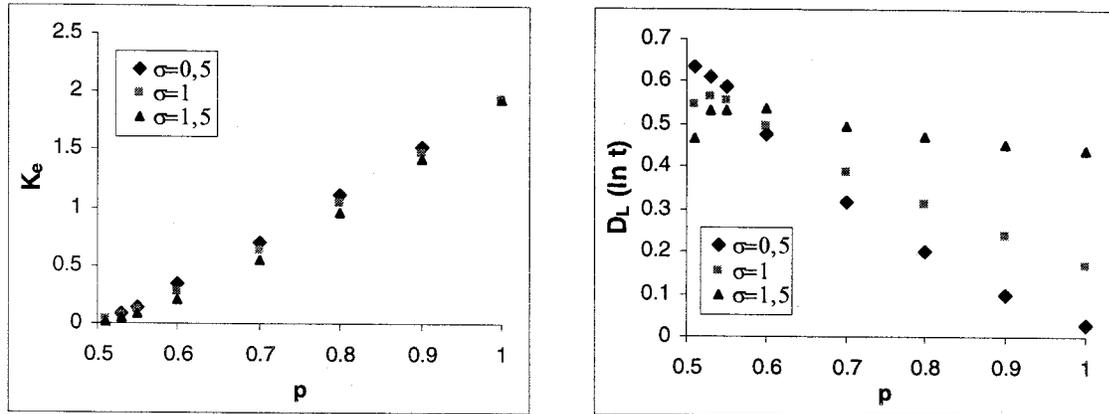


Figure 4.10 : Courbes de K_e et de $D_L(\ln t)$ en fonction de p pour $\sigma_{\ln K} = 0,5 ; 1$ et $1,5$

La figure 4.11 présente les distributions des temps de parcours et de D_L pour les trois $\sigma_{\ln K}$. Les distributions des temps sont de plus en plus étalées et ont de moins en moins de temps courts à mesure que $\sigma_{\ln K}$ augmente. Le comportement de D_L découle encore directement de l'utilisation de l'équation 4.8 (le temps moyen de parcours au dénominateur étant élevé au cube, ceci lui donne nettement plus de poids que la variance située au numérateur). Étonnamment, la distribution des temps de parcours des réseaux standard possède moins de temps courts et est plus étalée que les autres car ces réseaux contiennent plus de liens à vitesses faibles. L'homogénéité des conductivités hydrauliques ($K=1$) entraîne une répartition des vitesses dans les liens plus uniformes (et donc plus faibles) sur l'ensemble du réseau d'écoulement. Les temps particulièrement élevés entraînent nécessairement les valeurs coefficients de dispersion les plus faibles.

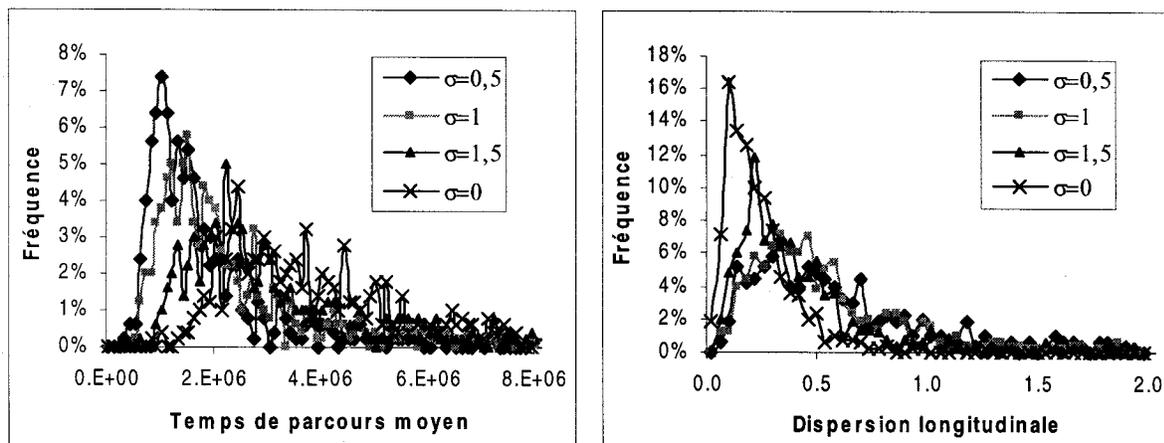


Figure 4.11 : Distributions des temps de parcours et de D_L à $p=p_c$ pour différents $\sigma_{\ln K}$

La figure 4.12 permet de comparer les valeurs de D_L obtenues avec les différentes distributions de conductivités hydrauliques à $p=p_c$ pour les différentes tailles de réseaux. Cette figure met en évidence les comportements décrits au paragraphe précédent : les valeurs les plus faibles sont obtenues avec les réseaux standard ($\sigma=0$), mais l'augmentation de $\sigma_{in K}$ fait diminuer le coefficient de dispersion. Les six pentes correspondant aux graphiques log-log pour $\sigma_{in K}=0,5$; 1 et 1,5 avec la méthode des logarithmes et celle des percentiles vont de 0,54 à 0,68, soit des valeurs semblables à celles obtenues avec les réseaux standard (0,58 et 0,61). Les représentations log-log des D_L obtenus avec σ_x en fonction de la taille des réseaux à des temps donnés donnent également des pentes similaires à celles des réseaux standard. Les pentes à différents temps ($t=50\ 000$, $100\ 000$, et $250\ 000$) pour les trois distributions varient entre 0,51 et 0,66 et ont une moyenne de 0,58 (comparativement à 0,54 avec des réseaux standard).

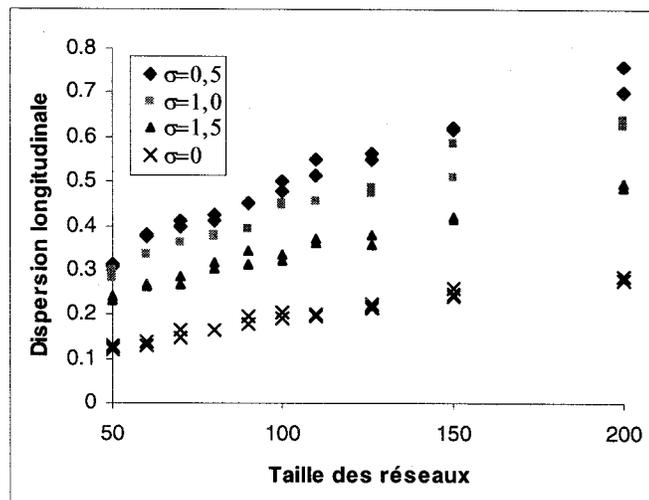


Figure 4.12 : Comparaison des D_L à $p=p_c$ pour différents $\sigma_{in K}$ (méthode $\ln t$)

La figure 4.13 montre que les exposants de la relation $D_L \sim t^\delta$ ont des valeurs semblables et le même comportement que ceux des réseaux standard (diminution de δ avec l'augmentation de la taille des réseaux avec stabilisation possible lorsque $L > 150$). Leurs valeurs semblent diminuer avec l'augmentation de $\sigma_{in K}$.

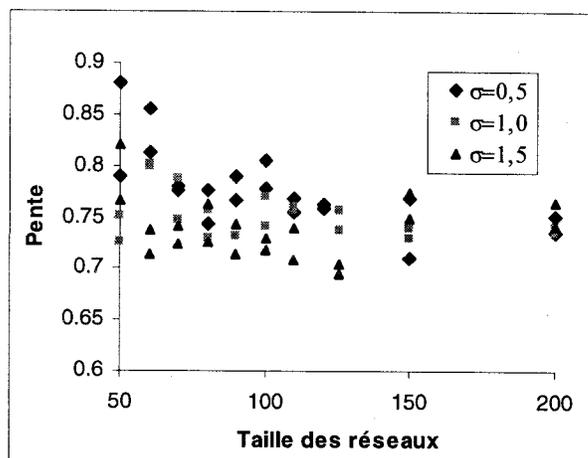


Figure 4.13 : Exposant de la relation $D_L \sim t^\delta$ en fonction de la taille des réseaux

4.3 Discussion

Un modèle de percolation a été développé pour simuler l'écoulement et le transport de solutés dans les aquifères hétérogènes, étant donné que l'eau souterraine y circule généralement à la faveur d'un nombre très limité de chemins préférentiels, particulièrement dans les aquifères fracturés. Les paramètres d'écoulement et de transport des réseaux percolants ont été déterminés en utilisant une approche Monte Carlo. Le transport, de type purement advectif, a été réalisé à l'aide d'un suivi de particules.

Des réseaux réguliers 2-D ont été adoptés car la caractérisation détaillée des fractures ou des pores (ou grains) est pratiquement impossible à une échelle de plusieurs kilomètres et l'épaisseur de l'aquifère peut souvent être considérée négligeable devant son étendue à cette échelle. Les réseaux percolants standard et ceux dans lesquels les conductivités hydrauliques ont une distribution log-normale ont montré que les paramètres d'écoulement suivent bien le comportement prédit par la théorie de percolation au seuil de percolation. Toutefois, nos simulations exposent clairement un comportement particulier du coefficient de dispersion D_L à proximité de p_c , c'est-à-dire lorsque les chemins disponibles pour l'écoulement sont peu nombreux et très tortueux. Au seuil de percolation, les populations de D_L s'apparentent à une distribution log-normale dont la variance ne diminue pas avec la taille des réseaux. Ceci indique que, contrairement aux paramètres d'écoulement, D_L n'est pas un paramètre homogène (*self-averaged*

parameter). Dès lors, quelle que soit la taille du réseau (même infinie), D_L serait toujours dépendant de la distance et du temps. Ce résultat implique de plus que la moyenne arithmétique de la population de D_L n'est pas représentative de la dispersion réelle et que la valeur médiane fournit une meilleure estimation de D_L au travers de n simulations équiprobables.

Le coefficient de dispersion a été calculé selon trois méthodes différentes, dont deux utilisent la distribution des temps d'arrivée des particules en un point particulier (ou une zone particulière, σ_t) et l'autre leur distribution spatiale à un temps donné (σ_x). Force est de constater que même dans le cas de solutés non réactifs en régime permanent, le mode de calcul de la dispersion n'est pas anodin en milieu hétérogène et influence fortement les résultats. Comme dans les cas concrets de terrain, la dispersion est rarement estimée autrement que par la distribution des temps d'arrivée à un endroit donné (courbes de concentration obtenues à un puits durant les essais de traçage), nous avons choisi de nous intéresser plus particulièrement au calcul de $D_L(\sigma_t)$, calculé à l'aide de l'équation 4.8. L'utilisation de réseaux de taille finie et non périodiques longitudinalement pour les deux méthodes utilisant les distributions temporelles (utilisant les logarithmes et les percentiles) fournit des valeurs de D_L pré-asymptotiques semblables dont la valeur des exposants est plus élevée que les prédictions théoriques de Sahimi et Imdakm (1988) (0,6 plutôt que 0,4). Cependant, les simulations réalisées avec de très grands réseaux (1000x1000) ont indiqué qu'à mesure que la taille des réseaux augmente, les valeurs des exposants qui relient D_L à L , et résultant des méthodes basées sur les distributions des temps, convergent vers les prédictions théoriques de Sahimi et Imdakm.

Cependant, la loi de puissance de type $D_L \sim L^\alpha$ prédite par Sahimi et Imdakm (1988) pour la dispersion dans le squelette a été validée en utilisant les distributions spatiales des particules et en simulant de nombreux passages dans les réseaux grâce à des conditions aux limites (nord et sud) périodiques. D'ailleurs, les trois méthodes fournissent des valeurs de D_L bien définies lorsque les particules sont passées plusieurs fois à travers les réseaux, indiquant qu'un régime asymptotique, au moins temporaire, peut être atteint même si le système possède une morphologie apparemment fractale. Toutefois, les valeurs de $D_L(\sigma_t)$ montrent des variations importantes d'une simulation à l'autre dues aux

distributions de temps de parcours très étendues et donc aucun exposant caractérisant la dépendance d'échelle de D_L ne peut être calculé avec précision dans ce cas.

Le comportement des courbes du coefficient de dispersion et de la dispersivité longitudinales en fonction de la probabilité p (fraction de liens ouverts) concorde bien avec les prédictions de la théorie de percolation : les valeurs augmentent avec la diminution de p . Cependant, nos simulations ont montré qu'elles atteignent une valeur maximale proche du seuil de percolation, puis décroissent rapidement, à cause de la tortuosité des quelques chemins que peuvent emprunter les particules. Il est à noter que dans les réseaux à distribution continue de conductivités hydrauliques, D_L augmente avec l'hétérogénéité ($\sigma_{ln K}$), sauf à proximité du seuil de percolation où la tendance s'inverse.

Les simulations permettent de conclure que les valeurs de D_L calculées avec les deux types d'approches (σ_t et σ_x) ne peuvent pas être comparées entre elles, vraisemblablement à cause du manque d'homogénéisation des champs de vitesses des réseaux percolants et donc de l'étendue des distributions des temps de parcours. Les deux méthodes utilisant les distributions temporelles ne peuvent pas fournir non plus des valeurs identiques pour les mêmes raisons. Par conséquent, l'universalité de la loi $D_L \sim L^\alpha$ est restreinte : la méthode utilisée pour calculer D_L doit être spécifiée. Les deux méthodes de calcul de $D_L(\sigma_t)$ seront par la suite utilisées dans l'application du modèle de percolation, de façon à obtenir un intervalle représentatif des valeurs de dispersion possibles.

5 APPLICATION DU MODÈLE DE PERCOLATION À DES CHAMPS SPATIALEMENT CORRÉLÉS GÉNÉRÉS SELON UNE MÉTHODE GÉOSTATISTIQUE

Les hétérogénéités des aquifères n'étant pas complètement aléatoires, mais plutôt corrélées sur des distances plus ou moins grandes, les champs de conductivité hydraulique de ce chapitre ont été générés à l'aide d'une méthode géostatistique. Ces champs ont ensuite été introduits dans le modèle de percolation afin d'étudier le comportement du coefficient de dispersion en fonction de la longueur de corrélation des conductivités hydrauliques.

La première section fait un bref survol de certaines notions de géostatistiques nécessaires à la génération des champs corrélés. La seconde décrit la méthode employée pour générer les champs de conductivité hydraulique et la dernière présente les résultats relatifs aux valeurs du coefficient de dispersion en fonction de la longueur de corrélation, la fraction des liens ouverts et la taille des réseaux.

5.1 Variogramme, krigeage et simulations séquentielles gaussiennes

Modéliser le comportement d'un milieu naturel nécessite un minimum d'information à propos des paramètres qui gouvernent le ou les processus physiques que l'on souhaite étudier. Cela étant, l'accès à l'information mesurée est souvent limité en raison des coûts. C'est le problème endémique des réservoirs souterrains uniquement accessibles ponctuellement (par mesures aux puits) alors que leur fonctionnement hydrodynamique est fondamentalement un processus spatialisé. L'information manquante peut alors être estimée à l'aide de méthodes géostatistiques. Ces méthodes s'appuient sur la théorie des fonctions aléatoires et offrent entre autres la possibilité d'intégrer aux interpolateurs et

simulateurs qu'elles proposent la notion de structure spatiale (on limite ici la notion de structure spatiale à l'état de corrélation entre deux points de localisation différente dans l'espace). Cet état de corrélation est quantifié grâce à une fonction de covariance ou un variogramme, fonction qui servira au calcul de pondérateurs scalaires permettant d'interpoler localement l'information mesurée.

Cette section s'intéresse particulièrement au variogramme, au krigeage simple et à la méthode de simulations séquentielles gaussiennes retenue pour la génération des champs spatialement corrélés. Ces trois sujets font chacun l'objet d'une sous-section. Les ouvrages de Isaaks et Srivastava (1989) ou de Goovaerts (1997) fournissent la théorie complète des éléments abordés dans ce chapitre.

5.1.1 Variogramme

Le variogramme est une fonction permettant de décrire la variation spatiale du paramètre étudié (dans notre cas la conductivité hydraulique) en fonction de la distance et de la direction. La construction d'un variogramme fait appel aux concepts de variable régionalisée et de fonction aléatoire. La variable régionalisée constitue la représentation scalaire du phénomène régionalisé (réalité physique). Elle possède une distribution spatiale avec une certaine structure. Le passage du phénomène régionalisé à la variable régionalisée forme une première étape vers l'estimation du paramètre et s'effectue par la description du phénomène au moyen d'une ou plusieurs fonctions numériques définies sur le domaine. Une fonction aléatoire est définie à la fois dans l'espace géographique et dans un espace probabiliste constitué d'une infinité de réalisations. On note la fonction aléatoire $Z(x, \omega)$ où x est un point de l'espace et ω est une réalisation de l'espace probabilisé. En général, on supprime la référence ω dans la fonction aléatoire afin d'alléger la notation. La géostatistique désigne l'utilisation d'un modèle probabiliste afin d'interpoler ou de simuler dans l'espace un phénomène régionalisé représenté par sa variable régionalisée (fonction discrète), cette dernière étant considérée comme une réalisation d'une fonction aléatoire.

La variable régionalisée que l'on suppose assimilable aux réalisations mesurables de la fonction aléatoire est très souvent de réalisation unique. Dans ces conditions, il est clair

qu'on ne pourra accéder à toute la description de la fonction aléatoire. Il faut restreindre les prétentions et formuler des hypothèses qui stipulent que toute l'information nécessaire est accessible dans la ou les quelques réalisations disponibles. Par exemple, la stationnarité dans un modèle probabiliste est l'hypothèse de l'invariance par translation de la loi spatiale du phénomène. En d'autres termes, les densités de probabilité n -variables $n=1, \dots, \infty$, de la fonction aléatoire sont indépendantes de la localisation spatiale. Une forme « adoucie » de la stationnarité consiste à limiter l'invariance par translation aux moments d'ordres 1 à n de la fonction aléatoire. Cela étant, dans les cas de phénomènes physiques naturels, l'hypothèse de stationnarité, même limitée aux deux premiers moments (espérance et variance), est souvent contraignante car la moyenne et les fluctuations autour de la moyenne varient et dans ce cas, les deux premiers moments de la fonction aléatoire ne sont pas définis. L'hypothèse intrinsèque affaiblit cette contrainte en n'imposant la stationnarité des deux premiers moments que sur l'accroissement (écart entre deux points). Pour la fonction aléatoire Z on a :

$$\begin{aligned} E[Z(x) - Z(x+r)] &= \mu(r) \\ \text{Var}[Z(x) - Z(x+r)] &= 2\gamma(r) \\ E[Z(x) \cdot Z(x+r)] - E[Z(x)] \cdot E[Z(x+r)] &= \text{Cov}(r) \end{aligned} \quad (5.1)$$

où r est l'écart (distance entre deux points), $\gamma(r)$ est appelé variogramme et $\text{Cov}(r)$ est la fonction de covariance. Ces deux fonctions représentent dans le cas intrinsèque les fonctions structurales, c'est-à-dire les fonctions qui caractérisent la structure spatiale du paramètre Z . Le variogramme est encore appelé semi-variogramme à cause du terme $\frac{1}{2}$ devant l'expression décrivant la fonction $\gamma(r)$. Ce coefficient permet en effet de relier directement $\gamma(r)$ à la variance de la population de Z (σ^2), car si $Z(x)$ et $Z(x+r)$ ne sont pas corrélées mais de même variance σ^2 , la variance de $Z(x)-Z(x+r)$ vaut $\text{Var}(Z(x))+\text{Var}(Z(x+r))=2\sigma^2$. Le variogramme, qui correspond à la demi-variance d'accroissement d'une fonction aléatoire, peut alors s'écrire :

$$\gamma(r) = \frac{1}{2} \left\{ E[(Z(x) - Z(x+r))^2] - (E[Z(x) - Z(x+r)])^2 \right\} \quad (5.2)$$

Le deuxième terme s'annule car le problème est habituellement ramené à un processus d'espérance nulle. Pour une fonction aléatoire stationnaire, le variogramme et la covariance de Z existent et leur dépendance s'écrit donc :

$$\gamma(r) = \text{Cov}(0) - \text{Cov}(r) \quad (5.3)$$

dans laquelle $Cov(0)$ peut être remplacée par la variance de l'ensemble des données (σ^2) puisque la fonction de covariance est égale à la variance lorsque r vaut zéro.

Pour construire le variogramme à partir des données expérimentales, l'équation suivante est utilisée :

$$\gamma(r) = \frac{1}{2 \cdot N} \sum_{i=1}^n [z(x_i) - z(x_i + r)]^2 \quad (5.4)$$

où z est la variable régionalisée et N le nombre de paires de points séparées par la distance r . Le variogramme expérimental représente donc une mesure de la variabilité spatiale d'un paramètre entre deux points (dont la distance peut être orientée selon une direction particulière), exprimée par la moyenne des différences au carré de chaque paire de points. Le comportement normal d'un variogramme devrait être caractérisé par une valeur nulle à l'origine suivie d'un accroissement avec l'augmentation de la distance r . En effet à de petites distances, les points comparés tendent à être similaires, mais les différences entre les points devraient augmenter avec la distance. En pratique, on observe des comportements variés autant pour de faibles distances qu'à de grandes distances.

Le variogramme expérimental ne fournit qu'une fonction structurale discrète. Le nombre de points de mesures étant fini, on ne peut calculer le variogramme que pour un nombre fini de valeurs de r , généralement en classes régulières de distances croissantes. Les interpolateurs et simulateurs géostatistiques requièrent un variogramme continu défini pour toutes les distances et on doit ajuster un modèle analytique sur le variogramme expérimental. Les modèles les plus utilisés sont les modèles linéaire, sphérique, cubique, exponentiel et gaussien. Le modèle sphérique se présente sous la forme suivante :

$$\gamma(r) = c(1 - \delta(r)) + \begin{cases} w \cdot \left(\frac{3r}{2\lambda} - \frac{r^3}{2\lambda^3} \right) & \text{si } r \leq \lambda \\ w & \text{si } r > \lambda \end{cases} \quad (5.5)$$

où c est appelé l'effet de pépité, traduisant une variance systématique d'erreur de mesure ou une variance locale dès que la distance entre deux points est non nulle, $\delta(r)$ est la fonction de Kronecker (égale à 1 en $r=0$ et égale à 0 pour $r>0$), λ est la portée et $c+w$ est la valeur du palier. La portée représente la distance au delà de laquelle les données ne

sont plus corrélées (ou la longueur de corrélation), $\gamma(r)$ étant alors constant et égal à la variance de la variable aléatoire ponctuelle $Z(x)$. La figure 5.1 illustre ces caractéristiques.

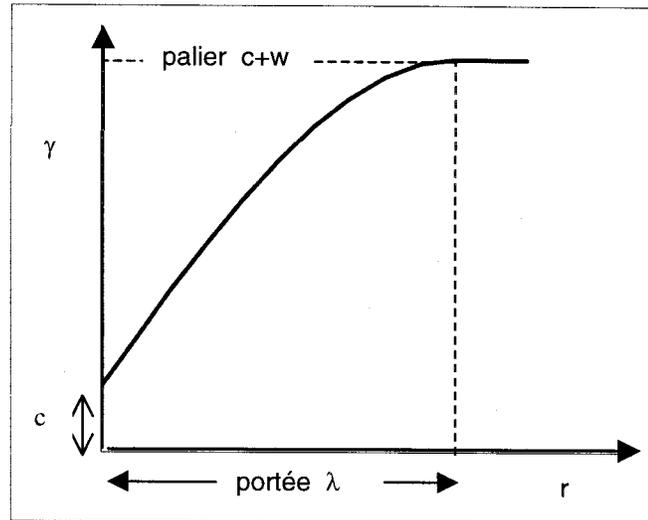


Figure 5.1 : Caractéristiques d'un variogramme sphérique

5.1.2 Krigeage

Une fois la fonction structurale définie, le krigeage permet d'estimer la valeur d'un paramètre en n'importe quel point du domaine étudié. Le krigeage cherche à estimer la valeur optimale Z^* du paramètre Z en un point du domaine en fonction des points de mesures Z_i et de la structure spatiale du paramètre (décrite par sa fonction structurale). En un point x_0 , la valeur estimée est telle que la moyenne de l'erreur d'estimation $Z^*_{x_0} - Z_{x_0}$ est nulle et la variance de l'erreur est minimale. Dans le cas stationnaire, les deux méthodes de krigeage les plus utilisées sont le krigeage simple et le krigeage ordinaire qui correspondent respectivement aux cas de moyennes connue et inconnue. L'estimateur par krigeage simple s'exprime comme une combinaison linéaire des n données disponibles :

$$Z^*(x_0) = \mu + \sum_{i=1}^n \varphi_i [Z(x_i) - \mu] \quad (5.6)$$

où μ est la moyenne spatiale du paramètre Z (pour une variable centrée réduite, ce terme disparaît) et les φ_i sont les poids inconnus. En d'autres termes, le krigeage calcule l'estimation d'une donnée non échantillonnée Z^* en un point x_0 en utilisant une moyenne pondérée des valeurs connues (mesurées) de la variable z aux n points de mesure x_i . Le

problème se résume à chercher les inconnus φ_i qui permettent d'obtenir un estimateur optimal (variance minimale de l'erreur d'estimation) et non-biaisé (moyenne nulle de l'erreur d'estimation). Les distinctions principale entre le krigeage simple et ordinaire sont

l'écriture de l'estimateur sous la forme $Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \varphi_i Z(x_i)$ qui permet de s'affranchir

de la connaissance de la moyenne et d'une contrainte supplémentaire $\sum \varphi_i = 1$ dans le cas du krigeage ordinaire qui assure une erreur d'estimation d'espérance nulle.

L'estimateur par krigeage respecte les quatre caractéristiques suivantes :

1) **Linéarité** : L'estimateur et l'erreur d'estimation doivent être des combinaisons linéaires de la fonction aléatoire ;

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^n \varphi_i Z_i \quad \text{et} \quad Z_0^* - Z_0 = \sum_{i=1}^n \varphi_i Z_i - Z_0 ;$$

2) **Autorisation** : Une combinaison linéaire $\sum \varphi_i Z_i$ est autorisée si et seulement si son espérance et sa variance sont définies ;

3) **Universalité** : L'espérance de l'erreur d'estimation est nulle : $E[Z_0^* - Z_0] = 0$;

4) **Optimum** : La variance de l'erreur d'estimation soumise aux contraintes 2 et 3 doit être minimale. Cette variance s'écrit :

$$\sigma_k^2 = \text{Var}[Z_0^* - Z_0] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i \varphi_j \text{Cov}_{ij} - 2 \sum_{j=1}^n \varphi_j \text{Cov}_{i0} + \text{Cov}(0) \quad (5.7)$$

où Cov représente la fonction de covariance qui peut être remplacée dans le cas d'une fonction aléatoire intrinsèque (équation 5.1) par une expression utilisant le variogramme à l'aide de l'équation 5.3. Pour minimiser la variance de l'erreur estimation $\text{Var}[Z_0^* - Z_0]$ en krigeage simple, il suffit d'annuler toutes les dérivées partielles de l'expression de la variance par rapport à φ_i . La détermination des poids φ_i donne la valeur de l'estimateur linéaire Z_0^* . Dans le cas du krigeage ordinaire, la résolution de ce système d'équations linéaires nécessite l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange car ce système est à n inconnues (les poids φ_i) et (n+1) équations à cause de l'ajout de la contrainte $\sum \varphi_i = 1$.

Le krigeage fournit une estimation optimale non biaisée du paramètre étudié. Cette estimation est *a priori* unique sauf à changer la technique utilisée ou le variogramme de référence, et ne procure aucune mesure de l'incertitude associée à la réponse du système (par exemple l'écoulement). La variance de l'erreur d'estimation ne fournit en fait

qu'une mesure locale de la robustesse de l'estimation. De plus, les champs krigés ont tendance à être plus lisses que ce qui est observé en réalité, ce qui peut parfois sembler peu compatible avec certains milieux géologiques très perturbés.

5.1.3 Simulations séquentielles gaussiennes

Les méthodes de simulations peuvent combler ces faiblesses par la construction d'un ensemble de réalisations équiprobables, permettant ainsi d'obtenir une série de réponses du système étudié à un même scénario et par conséquent une idée des incertitudes liées aux paramètres. Les méthodes de simulations permettent la représentation de la structure globale du paramètre, contrairement au krigeage qui cherche la « meilleure » valeur en un point sans considération particulière pour le résultat global. Ces méthodes sont généralement séparées en deux grandes classes, selon que la génération des réalisations suppose ou non le caractère multi-gaussien de la fonction aléatoire. L'avantage majeur des méthodes gaussiennes est que chaque valeur locale de la fonction aléatoire est une variable gaussienne complètement caractérisée par sa moyenne μ et sa variance σ^2 . Les calculs sont alors moins lourds que ceux des méthodes où la variable locale est laissée libre. Certaines transformations peuvent être effectuées sur les données pour les rendre normales. Par exemple, étant donné que les données de conductivités hydrauliques et de transmissivités sont reconnues pour être distribuées log-normalement, les opérations doivent donc être effectuées sur le logarithme des données. De plus, une transformation (*normal score transform*) doit généralement être appliquée pour ramener la variable gaussienne à une loi normale centrée réduite de moyenne 0 et de variance 1. La méthode retenue pour ce travail, soit celle des simulations séquentielles gaussiennes est, comme son nom l'indique, multi-gaussienne.

Lors des simulations, chaque point d'une réalisation est obtenu avec une loi de distribution différente. En effet, la méthode des simulations séquentielles gaussiennes estime, par krigeage linéaire simple (avec voisinage glissant si nécessaire), la fonction cumulative de distribution de la variable en un point à partir de l'information sur les données initiales et celle obtenue pour toutes les valeurs locales précédemment simulées. La nouvelle valeur simulée est alors ajoutée au jeu de données. Par exemple, Z_1 (le premier point simulé) est déterminé uniquement à partir des observations, Z_2 à

partir des observations et de Z_1 , Z_3 à partir des observations, de Z_1 et de Z_2 et ainsi de suite. L'ordre pour le traitement des points à simuler est aléatoire. Cette méthode permet non seulement de représenter la variabilité observée sur le terrain, mais aussi de reproduire les valeurs mesurées. Elle fait donc partie de la famille des simulations dites « conditionnées ».

Les différentes étapes des simulations séquentielles gaussiennes se résument ainsi [Delay et Lamotte, 1997 ; 2000]:

- 1) Transformer les données afin d'obtenir une variable centrée réduite ;
- 2) Définir un ordre aléatoire pour le traitement des points à simuler ;
- 3) En chaque point, calculer par krigeage simple sur les données et les valeurs déjà simulées une moyenne et une variance de la fonction cumulative de distribution (fcd) locale. Moyenne et variance correspondent respectivement à l'estimateur et à la variance de l'erreur d'estimation par krigeage.
- 4) Tirer un nombre d'une loi uniforme entre 0 et 1, le seuil sur la fcd correspondant à ce nombre constitue la valeur locale simulée. Ajouter la valeur simulée au jeu de points pouvant servir à l'estimation suivante ;
- 5) Recommencer les étapes 3 et 4 avec un autre point ;
- 6) Une fois tous les points simulés, appliquer la transformation inverse pour retrouver la forme initiale des données.

Pour la génération des autres réalisations, le même ordre de traitement des points peut être conservé (les pondérateurs de krigeage ne changent pas et la procédure est très rapide) ou changé à chaque fois. Malgré le fait que le processus doit être recommencé à chaque fois lorsque l'ordre est changé, ceci a toutefois l'avantage de fournir des réalisations plus indépendantes les unes des autres. Un ordre différent a donc été utilisé pour nos simulations.

5.2 Génération des champs de conductivité hydraulique

Dans le cas d'une modélisation à l'échelle locale ou régionale avec un réseau de percolation régulier, chaque lien du réseau représente une fracture ou une région de l'aquifère qui peut être considérée homogène. Pour obtenir une distribution log-normale des conductivités hydrauliques, le modèle de percolation doit appliquer la relation

suyvante à chaque lien : $K_{lien} = e^{K_{ssg} \cdot \sigma_{\ln K} + \mu_{\ln K}}$, où K_{ssg} représente les valeurs de conductivité hydraulique générées par simulations séquentielles gaussiennes, étant donné que la méthode des simulations séquentielles gaussiennes génère des valeurs « normales réduites ».

Les simulations théoriques (sans données réelles) donc non conditionnées pour la génération des champs corrélés ont été réalisées avec un logiciel prêté par F. Delay (Université de Poitiers). Normalement il est possible par simulations séquentielles de calculer directement des champs non conditionnés. Cependant à l'usage on s'aperçoit qu'en procédant ainsi, de nombreux champs dans un même jeu de simulations n'ont pas une structure spatiale conforme à celle imposée par le variogramme utilisé. Les champs sont donc générés de la manière suivante : 1) un groupe de simulations est d'abord réalisé avec le variogramme sélectionné et un jeu fictif d'une soixantaine de points répartis aléatoirement sur le domaine (appelés *seed points*) dont la valeur a été tirée d'une loi normale centrée réduite; 2) le variogramme des différentes simulations est alors calculé et ceux qui se rapprochent le plus du variogramme théorique sont conservés; 3) un second groupe de simulations est effectué à partir d'environ 60 points prélevés sur les champs conservés; 4) les variogrammes des champs simulés sont calculés et les champs dont le variogramme correspond aux critères de sélection pré-établis sont conservés pour être intégrés par la suite dans le modèle de percolation. Le rayon utilisé pour le voisinage est pris égal ou légèrement supérieur (10%) à la portée du variogramme et le nombre total de points (expérimentaux et simulés) utilisés pour calculer un point est de 25. Il est important, pour donner peu d'importance au jeu de données utilisé (puisque dans le cas présent aucune données réelles n'est utilisée), de limiter le nombre de points expérimentaux à prendre en compte à 4 ou 5. Les champs sont assez sensibles aux *seed points*, ce qui peut se révéler un avantage s'il s'agit de générer des champs d'aspect assez différents les uns des autres tout en ayant la même structure spatiale. Le variogramme expérimental obtenu de ceux-ci lors de l'étape 2 doit donc être proche du variogramme théorique pour obtenir des champs satisfaisants.

Les critères de sélection sont établis en fonction de la moyenne et de la variance des valeurs de K du champs ainsi que du variogramme. Le variogramme du champ simulé est

jugé en fonction de son écart par rapport à celui imposé à l'aide de l'erreur moyenne quadratique (RMSE, *root mean square error*). Ces critères sont :

- 1) La moyenne doit être inférieure à 0,25 (un biais positif étant présent dans les champs générés, la valeur est donc généralement comprise entre 0 et 0,25) ;
- 2) La variance doit être supérieure à 0,75 ;
- 3) L'erreur moyenne quadratique, calculée sur la portée du variogramme, doit être inférieure à 0,06. Cette erreur (RMSE) est calculée avec :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_1^n (\gamma_{sim} - \gamma_{théorique})^2} \quad (5.8)$$

où n est le nombre de points utilisés, γ_{sim} est la valeur du variogramme du champ simulé et $\gamma_{théorique}$ est la valeur du variogramme théoriquement imposé au même espacement r .

La méthode de simulations séquentielles gaussiennes permet de préserver la structure spatiale : le champ généré devrait donc posséder un variogramme conforme à celui imposé. Cependant, plus la portée du variogramme augmente par rapport à la longueur du domaine et plus le nombre de champs générés rejetés devient élevé. Lorsque le rapport λ/L est faible, les quelques champs rejetés le sont à cause du variogramme expérimental trop différent de celui théorique (RMSE trop élevée). Lorsque le rapport λ/L est élevé (0,3 ou plus), la grande majorité des champs sont rejetés à cause de la variance des valeurs qui est trop faible.

L'automatisation du processus de sélection a été rendu nécessaire à cause du grand nombre de champs à générer. En effet pour obtenir une bonne représentativité de la variabilité des paramètres, trois séries de 200 champs ont été retenus pour une même taille de réseaux et une même longueur de corrélation. De plus, un programme a dû être développé pour modifier la structure des données dans les fichiers pour qu'ils puissent être utilisés dans le modèle de percolation.

Les réseaux corrélés étudiés ont des tailles variant entre 50x50 et 100x100 avec des longueurs de corrélation (portée du variogramme) de 10 à 30 et des fractions de liens ouverts (p) allant du seuil de percolation à 1. Des réseaux plus grands que 100x100 n'ont pas été générés car au-delà de cette taille, les temps de calculs deviennent très longs. Les longueurs de corrélation (de 10 à 30) ont été choisies pour que le rapport entre

celles-ci et la taille des réseaux soit inférieur ou égal à un tiers ($\lambda/L \leq 1/3$). Au-delà de cette limite, nous considérons que la taille du système est trop faible par rapport à la longueur de corrélation pour que le système puisse intégrer suffisamment d'information pour s'assurer de l'ergodicité du champ. Le modèle sphérique, couramment utilisé dans les études pour représenter la structure spatiale des conductivités hydrauliques, a été retenu comme variogramme théorique. De nombreuses études ont effectivement montré que les K mesurées répondent bien à ce modèle. Celui-ci présente également l'avantage de produire des matrices de covariance facilement inversibles évitant ainsi d'éventuelles instabilités numériques dans le krigeage des moyennes et variances locales.

Les nombreux champs générés permettront d'étudier les paramètres de façon stochastique à l'aide de l'approche Monte Carlo. Contrairement à une méthode déterministe qui n'utilise qu'une seule réalisation (obtenue par exemple par krigeage), les méthodes stochastiques permettent de quantifier l'incertitude des prédictions et fournissent donc des résultats plus représentatifs et beaucoup plus informatifs.

5.3 Résultats des simulations

Le comportement des différents paramètres d'écoulement (p_c , X^A , X^B et K_e) et de transport (D_L) a été étudié au seuil de percolation, puis à $p_c < p < 1$ en fonction de la longueur de corrélation, de la fraction de liens ouverts et de la taille des réseaux.

5.3.1 Comportement des paramètres au seuil de percolation

Le variogramme avec la plus petite portée ($\lambda=10$) décroît un peu plus rapidement que la fonction de covariance r^{-d} où r est l'espacement entre deux points et d la dimensionnalité du système, soit $1/r^2$ en 2-D. Tous les champs générés par géostatistique devraient donc induire des lois de puissance au seuil de percolation différentes de celles des réseaux aléatoires. En effet, si la fonction de covariance des valeurs attribuées aux liens utilisée décroît plus rapidement que r^{-d} , les propriétés du système sont identiques à celles des réseaux aléatoires (voir section 3.4).

Nous devons souligner que, contrairement aux réseaux aléatoires, les distributions de conductivités hydrauliques sont tronquées dès que la fraction de liens ouverts est inférieure à 1. En effet, la génération des champs corrélés peut difficilement être réalisée sur des réseaux ayant déjà des liens éliminés car cette pratique est fastidieuse et peut dénaturer assez fortement la structure spatiale générée au préalable. L'élimination des liens est donc effectuée après l'attribution des valeurs de K à chacun des liens. Cette élimination est effectuée par ordre croissant de valeur de conductivité hydraulique, car comme le fait remarquer Sahimi (1995), les liens des réseaux corrélés ne peuvent pas être éliminés aléatoirement puisque la corrélation des champs serait affectée. De surcroît, éliminer les liens ayant les valeurs de K les plus faibles est physiquement cohérent puisque dans les réseaux d'écoulement, les fortes valeurs seront toujours privilégiées. Cette procédure se rapproche donc de celle de l'analyse du chemin critique discutée au chapitre 3.

La figure 5.2 illustre le comportement des cinq paramètres (p_c , X^A , X^B , K_e et D_L) pour des réseaux 100×100 avec différentes longueurs de corrélation (λ). A mesure que la longueur de corrélation augmente, le seuil de percolation diminue tandis que les autres paramètres augmentent. Ces résultats proviennent du fait que l'augmentation de la longueur de corrélation provoque le regroupement en amas compacts des valeurs de K similaires. Le coefficient de variation (σ/μ) des paramètres considérés pour l'ensemble des réseaux simulés a généralement un comportement opposé : il augmente avec λ pour p_c , mais diminue pour X^A et X^B . Le coefficient de variation pour K_e semble être stable pour les réseaux corrélés, mais très élevé pour les réseaux aléatoires, provenant de la faible valeur de ce paramètre. Conformément aux travaux de Renault (1991), les valeurs de p_c restent toujours proches de 0,5. Cependant, nos valeurs semblent indiquer que p_c diminue légèrement avec l'augmentation de λ . L'augmentation du coefficient de dispersion longitudinale provient du fait que le regroupement des valeurs similaires de conductivités hydrauliques permet aux particules d'avoir des chemins moins tortueux. En effet, la variance et surtout le temps de parcours moyen diminuent rapidement avec λ , entraînant l'augmentation de D_L (encore une fois à cause du facteur $\langle t \rangle^3$ au dénominateur de l'équation 4.8). Évidemment, l'hétérogénéité des réseaux ($\sigma_{\ln K}$) fait aussi augmenter D_L .

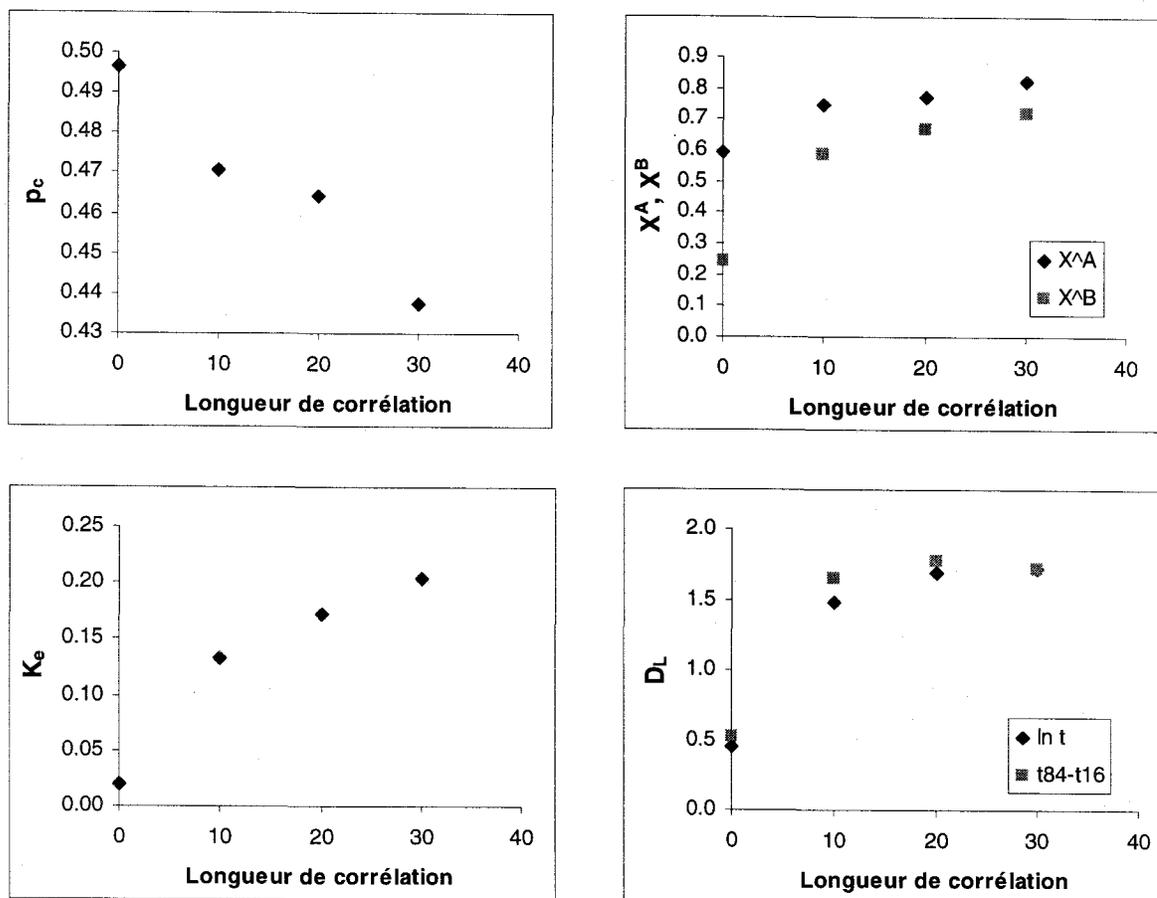


Figure 5.2 : Comportement des paramètres p_c , X^A , X^B , K_e et D_L à $p=p_c$ pour des réseaux 100×100 avec $\sigma_{\ln K}=1$ en fonction de la longueur de corrélation

Le comportement de tous les paramètres à $p=p_c$ en fonction de la taille des réseaux est approximativement le même que celui observé pour les réseaux aléatoires. Les valeurs obtenues sont toutefois plus dispersées que dans le cas des réseaux aléatoires et, en conséquence, les exposants qui caractérisent les différentes lois de puissance à proximité du seuil de percolation (obtenus à partir des graphiques log-log) ont des coefficients de détermination (R^2) beaucoup plus faibles, surtout pour D_L . Il n'est donc pas possible de tirer des conclusions. Néanmoins, nous pouvons dire que les exposants de X^A et K_e ont des valeurs similaires ou plus faibles et que ceux de X^B ont des valeurs nettement plus faibles que celles des réseaux aléatoires, et que toutes ces valeurs tendent à diminuer avec l'augmentation de λ . L'introduction d'une corrélation des conductivités hydrauliques engendre une plus grande proportion de liens ouverts (perméables) appartenant à l'amas et au squelette et donc une diminution significative du nombre de culs-de-sac (les valeurs de X^B sont plus proches de celles de X^A). Ces

tendances semblent également s'accroître avec l'augmentation de λ . Ceci est logique, puisque le développement d'amas est favorisé, autrement dit, l'augmentation de la longueur de corrélation facilite le regroupement spatial de valeurs de K similaires (voir l'exemple de la figure 5.3). Les exposants de D_L sont plus élevés que ceux des réseaux aléatoires, mais leur coefficient de détermination est généralement très bas (en moyenne $R^2 \approx 0,6$).

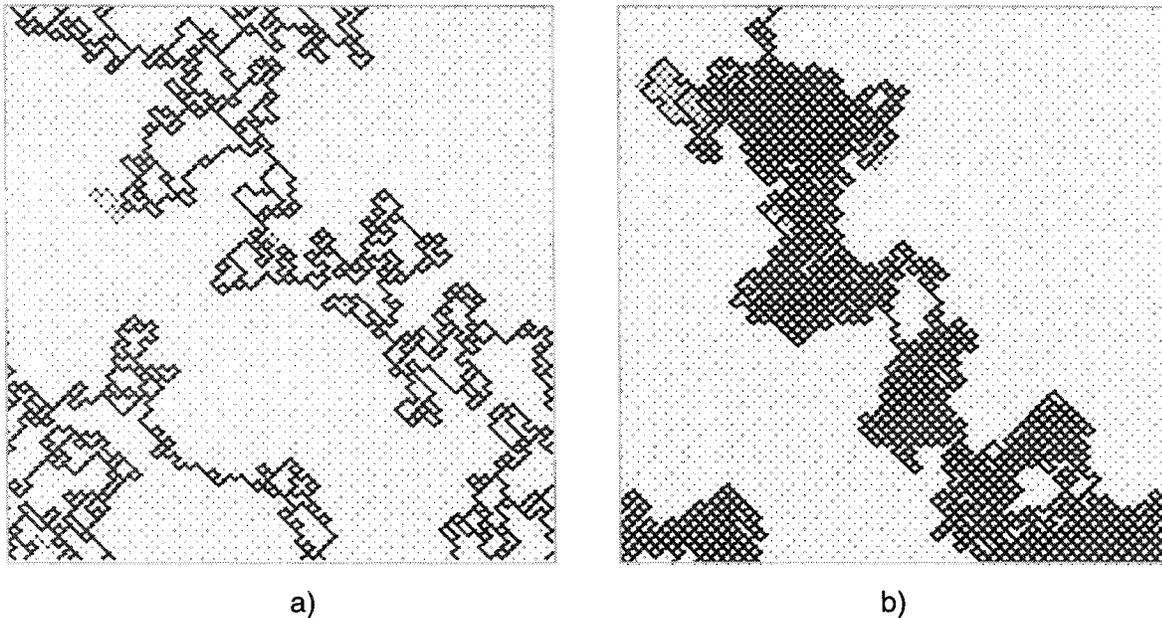


Figure 5.3 : Exemples de squelettes obtenus à $p=p_c$ avec des champs 100x100 a) Aléatoire et b) Corrélés ($\lambda=20$)

5.3.2 Comportement des paramètres à $p > p_c$

Des simulations ont également été réalisées à $p > p_c$. Seuls les résultats du coefficient de dispersion sont présentés car les autres paramètres n'ont montré aucun comportement particulier. L'influence de la longueur de corrélation, de la fraction de liens ouverts et de la taille des réseaux sur le coefficient de dispersion ont fait l'objet d'une analyse de sensibilité.

Dispersion en fonction de la longueur de corrélation

Le comportement du coefficient de dispersion longitudinale en fonction de la longueur de corrélation est présenté aux figures 5.4 et 5.5. La figure 5.4 propose les dispersions de réseaux 100x100 moyennement hétérogènes ($\sigma_{\ln K}=1$) à $p=1$ et $p=0,7$ et calculés par les

deux méthodes utilisant les distributions temporelles et la méthode des moments spatiaux. La figure 5.5 présente les valeurs de D_L calculées sur ces mêmes réseaux avec les logarithmes des temps pour les trois distributions des conductivité hydraulique (σ_{ln} $\kappa=0,5$; 1 et 1,5, soit faible, moyenne et forte hétérogénéités).

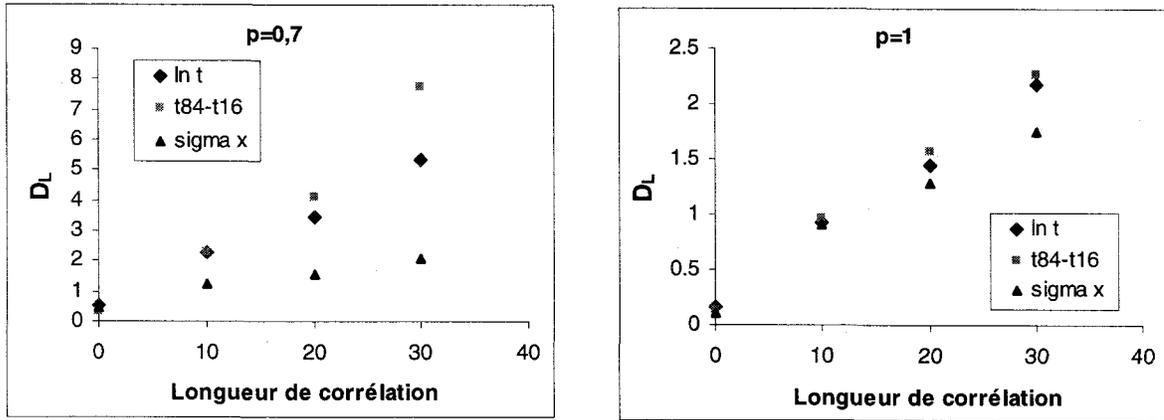


Figure 5.4 : Courbes de D_L en fonction de λ pour des réseaux 100x100 avec $\sigma_{ln \kappa}=1$

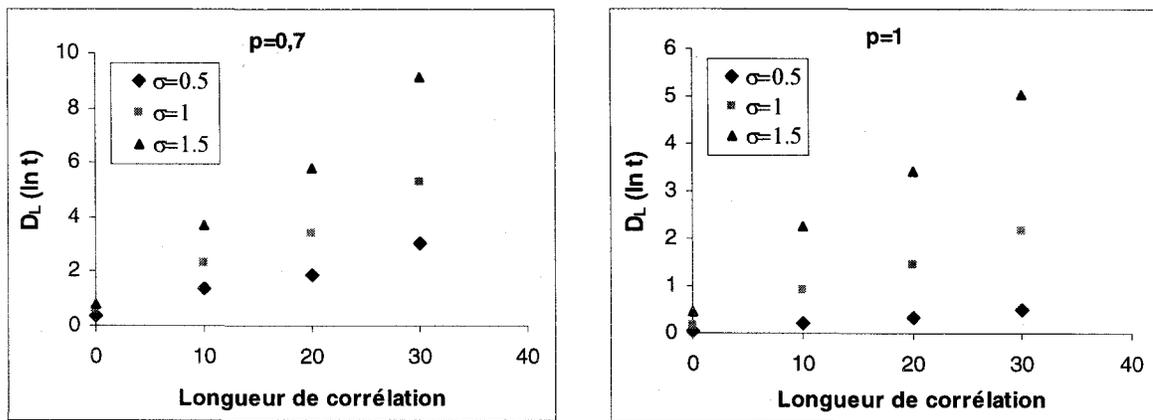


Figure 5.5 : Courbes de $D_L(\ln t)$ en fonction de λ pour des réseaux 100x100 avec $\sigma_{ln \kappa}=0,5$; 1 et 1,5

Les calculs attestent que le coefficient de dispersion longitudinale augmente toujours avec la longueur de corrélation. Cette fois cependant, la raison est tout à fait différente : le temps de parcours moyen et surtout la variance augmentent avec λ dû à la formation d'amas de valeurs similaires de K . L'hétérogénéité des parcours augmente soit parce que les particules doivent contourner les îlots de faibles valeurs si p est petit, soit parce que les particules expérimentent des vitesses très variables le long des chemins d'écoulement durant leur traversée lorsque p est grand. La tortuosité des chemins est toutefois nettement moins grande qu'au seuil de percolation et celle-ci s'estompe à mesure que p

augmente. En effet, lorsque presque tous les liens sont ouverts ($p \rightarrow 1$), il est alors plus facile pour les particules de trouver un chemin rapide pour traverser le réseau. On remarquera aussi que plus λ et/ou $\sigma_{in\ K}$ augmentent, plus la différence entre les trois façons de calculer D_L devient importante.

Dispersion en fonction de la fraction de liens ouverts (p)

Nos simulations confirment qu'un plus grand nombre de réseaux percolent dans les champs corrélés que dans les champs non corrélés pour une même fraction de liens ouverts (p) et indiquent que K_e augmente linéairement avec p , tandis que D_L diminue (comportements similaires à ceux observés dans les réseaux non corrélés). De fait, que les conductivités hydrauliques de mêmes valeurs soient regroupées ne change absolument rien au débit global dans les liens d'une rangée puisque dans les réseaux aléatoires, la distribution des K s'effectue après l'élimination et dans le cas des réseaux corrélés, seules les K les plus faibles sont éliminées, n'entraînant pas de différence majeure.

Le comportement de D_L en fonction de p , illustré à la figure 5.6, montre que le coefficient de dispersion longitudinale augmente rapidement à mesure que p tend vers p_c (puisque les chemins deviennent de plus en plus tortueux à mesure que la fraction de liens ouverts diminue) puis diminue à proximité du seuil de percolation. D_L atteint cette fois sa valeur la plus élevée vers $p=0,6$ (la valeur maximale était atteinte vers 0,53-0,55 avec les réseaux non corrélés). On constate également que D_L augmente avec $\sigma_{in\ K}$ pour une même fraction de liens ouverts p : les variations de K plus importantes entre les liens amènent une plus grande variabilité des temps de parcours. Contrairement aux réseaux non corrélés, les valeurs de D_L obtenues avec la distribution des particules dans l'espace (σ_x) sont assez éloignées de celles calculées avec la distribution des temps, sauf à $p=1$, à cause de l'hétérogénéité des champs de vitesses. Les différences entre les valeurs de D_L obtenues à $p < 0,7$ avec les deux méthodes utilisant la distribution des temps est aussi attribuable à la grande variabilité des réseaux entre eux. Le fait que les valeurs de D_L soient beaucoup plus élevées que celles des réseaux non corrélés reflète le fait que le regroupement des liens oblige les particules soit à contourner les amas constitués de liens à faibles K (p petit), soit à circuler dans des liens de vitesses variables (p grand)

pour traverser les réseaux. De fait, la variance des temps de parcours dans les réseaux corrélés est beaucoup plus élevée.

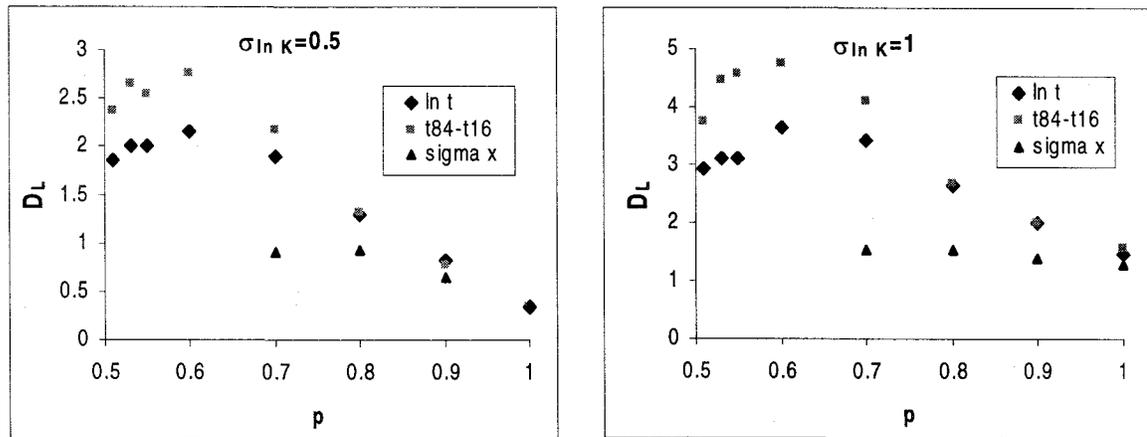


Figure 5.6 : Courbes de D_L en fonction de p pour des réseaux 100x100 pour $\lambda=20$

Le fait d'éliminer des liens a donc un impact majeur sur l'estimation du coefficient de dispersion. Toutefois, plus l'hétérogénéité des réseaux ($\sigma_{\ln \kappa}$) augmente, moins les écarts entre les valeurs de D_L calculées pour $p_c \leq p \leq 1$ sont importants étant donné que les contrastes de K augmentent (plus de valeurs extrêmes). En effet, pour des réseaux 100x100 avec $\lambda=20$, le rapport des valeurs de D_L à $p=1$ sur celles à $p=0,7$ est respectivement de 18%, 39% et 60% pour $\sigma_{\ln \kappa} = 0,5; 1$ et $1,5$. Ces résultats montrent que même avec une forte hétérogénéité, les différences restent significatives.

Dispersion en fonction de la taille des réseaux

Malgré la variabilité des résultats, il est possible de constater que le coefficient de dispersion augmente globalement avec la taille des réseaux. À $p=1$, les trois méthodes de calcul fournissent presque les mêmes résultats. À $p=0,7$ par contre, les valeurs de D_L obtenues avec la distribution des particules dans l'espace sont nettement sous-évaluées. Les valeurs obtenues avec les deux méthodes utilisant la distribution des particules dans le temps sont du même ordre, la méthode des percentiles fournissant généralement des valeurs légèrement plus élevées. La figure 5.7 présente les résultats obtenus avec la méthode des logarithmes pour des fractions de liens ouverts allant de 0,6 à 1.

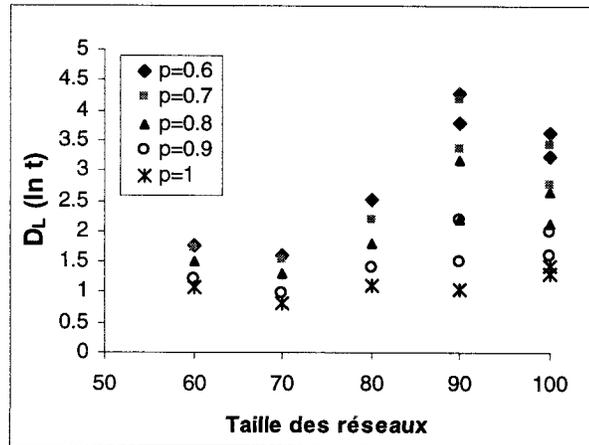


Figure 5.7 : Courbes de D_L pour $\lambda=20$ et $\sigma_{\ln K}=1$ en fonction de la taille des réseaux pour différentes fractions de liens ouverts

Des intervalles de confiance à plus ou moins un écart-type pour les D_L obtenus avec les deux méthodes utilisant la distribution des particules dans le temps ont été obtenus pour chacune des valeurs (les valeurs minimale et maximale de l'intervalle correspondant approximativement aux percentiles 15 et 85). La figure 5.8 présente les valeurs de $D_L(\ln t) \pm$ un écart-type obtenues avec $\lambda=20$ et $\sigma_{\ln K}=1$ à $p=0,7$ et $p=1$. Les intervalles sont assez semblables d'une taille à l'autre sauf dans le cas des réseaux 90×90 avec $\lambda=20$ lorsque $p=0,7$. Ceci est probablement dû à quelques réseaux plus différents. Les variations sont généralement légèrement plus importantes avec la méthode des percentiles ($t_{84}-t_{16}$) que pour celle des logarithmes. La légère remontée observée pour les réseaux 60×60 est vraisemblablement due au fait que le rapport $\lambda/L=20/60=1/3$ est trop élevé et ne permet pas d'obtenir des valeurs représentatives (comparativement à celles obtenues pour des tailles de réseaux supérieures). En effet, il n'y a probablement pas assez de longueurs de corrélation dans ces champs et la dispersion devient « bâtarde » (c'est-à-dire à mi-chemin entre corrélée et non corrélée).

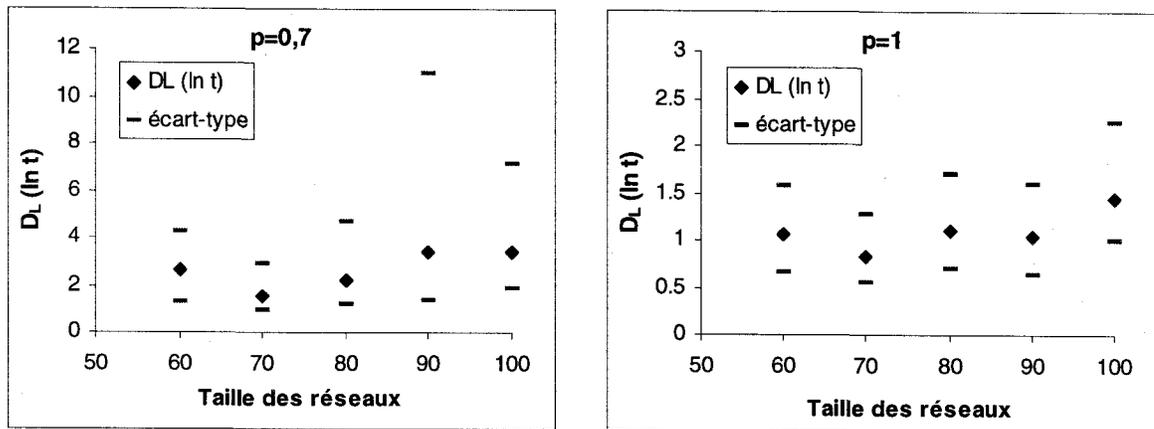


Figure 5.8 : Intervalles de confiance pour les valeurs de $D_L(\ln t)$ obtenues avec $\lambda=20$ et $\sigma_{\ln K}=1$ pour différentes tailles de réseaux pour $p=0,7$ et $p=1$

5.4 Discussion

Les propriétés des formations géologiques étant généralement très hétérogènes et corrélées, une méthode géostatistique a été utilisée pour générer les champs de conductivités hydrauliques de façon à préserver la structure spatiale d'un jeu de données initial (qui, dans l'étude d'un site réel, correspondrait aux mesures de terrain). La méthode géostatistique qui a été choisie est celle des simulations séquentielles gaussiennes car elle permet une étude stochastique des paramètres et ainsi de tendre vers la variabilité du champ réel en évitant l'effet lissant des méthodes d'estimation optimale non biaisée comme le krigeage. Chaque valeur générée correspond à la valeur de conductivité hydraulique d'un lien du réseau percolant. Les liens sont ensuite éliminés en fonction des valeurs de K car seule la partie la plus transmissive est conservée pour modéliser les aquifères à l'échelle locale ou régionale.

Les simulations de transport de solutés réalisées avec ces champs ont montré que le coefficient de dispersion longitudinale augmente avec l'augmentation de la longueur de corrélation, de l'hétérogénéité des réseaux ($\sigma_{\ln K}$) et de leur taille, mais diminue à mesure que la fraction de liens ouverts (p) augmente (sauf à proximité de p_c). La valeur à $p=1$ est généralement la plus faible. Or, $p=1$ correspond aux modèles permettant de simuler des milieux continus. Les aquifères fracturés ou poreux très hétérogènes étant généralement assez mal connectés (puisque l'écoulement est chenalisé), ils sont en conséquence mieux représentés par les milieux discontinus ($p < 1$). Même si les écarts entre les valeurs de D_L obtenues pour différentes fractions de liens ouverts diminuent avec l'augmentation

de l'hétérogénéité des réseaux, nos simulations ont montré que des différences de 50 à 600% pouvaient être trouvées entre celles calculées à $p=1$ et celles pour l'intervalle $p_c \leq p < 1$. Le fait de simuler les milieux fortement chenalisés avec des réseaux continus (c'est-à-dire à $p=1$) aurait donc pour effet de sous-estimer la valeur de D_L . Bien que les distributions de K soient tronquées lorsque $p < 1$ (ce qui devrait « normalement » diminuer la variabilité des vitesses et par conséquent diminuer D_L), on observe que l'élimination des liens provoque en fait une augmentation de D_L , ce qui prouve que la troncature est largement compensée par la tortuosité.

Au seuil de percolation, les valeurs des exposants de X^A , X^B et K_e semblent diminuer avec la longueur de corrélation et ceux de D_L augmenter. Toutefois, ces valeurs varient trop pour que des estimations fiables des exposants puissent être avancées. L'obtention de coefficients de détermination particulièrement faibles pour D_L constitue vraisemblablement une autre indication du manque d'homogénéisation (*self-averaging*) de cette propriété dans les milieux peu ou mal connectés.

6 APPLICATION DU MODÈLE DE PERCOLATION À DES CHAMPS SPATIALEMENT CORRÉLÉS SELON UN PROCESSUS fBm (fractional Brownian motion)

Les propriétés des formations géologiques sont non seulement très hétérogènes et corrélées, mais plusieurs études ont montré que des propriétés telles que la conductivité hydraulique et la porosité seraient corrélées sur plusieurs échelles (se référer à la section 3.4). Ces observations ont mené les chercheurs depuis une quinzaine d'années à utiliser des méthodes impliquant des structures fractales de façon à reproduire ces corrélations longues distances (*long-range correlations*).

Ce chapitre se penche sur l'étude du comportement de champs de conductivité hydraulique générés à l'aide du mouvement fractionnel Brownien (*fractional Brownian motion*) et intégrés dans le modèle de percolation. La première section présente les caractéristiques du processus fBm et la seconde discute des différents modèles impliquant des corrélations longues distances trouvés dans la littérature. La troisième section expose la méthode utilisée pour générer les réseaux. Les résultats obtenus avec des champs de K isotropes ayant des longueurs de corrélation infinies et finies sont présentés aux sections 6.4 et 6.5 respectivement. La sixième section est consacrée aux champs anisotropes.

6.1 Généralités sur le processus fBm

Des études récentes ont montré que des fonctions monofractales stochastiques telles que les fBm (*fractional Brownian motion*) et les fGn (*fractional Gaussian noise*) étaient appropriées pour caractériser les hétérogénéités des formations géologiques [Liu et Molz, 1996]. Mandelbrot a introduit le concept de fBm en généralisant la distribution de

probabilité d'une loi normale en remplaçant la racine carrée par un coefficient H. Au lieu d'avoir $\sigma = \sqrt{2Dt}$, cette méthode utilise :

$$\sigma = \sqrt{2D_0 \tau_0} (t/\tau_0)^H \quad (6.1)$$

où D_0 représente le coefficient de diffusion, τ_0 le temps caractéristique de diffusion et H est appelé le coefficient de Hurst. Ce coefficient est souvent utilisé pour décrire un comportement fractal. Il est relié à la dimension fractale par la relation $d_f = d + 1 - H$ où d est la dimensionnalité du système.

Si $B_H(t)$ est utilisé pour décrire la valeur d'un paramètre à un temps donné, la moyenne et la variance du processus fBm sont :

$$\begin{aligned} \langle B_H(t) - B_H(t') \rangle &= 0 \\ \langle [B_H(t) - B_H(t')]^2 \rangle &= 2D_0 \tau_0 \left(|(t-t')/\tau_0| \right)^{2H} \sim |t-t'|^{2H} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Les cas où le coefficient de Hurst n'est pas égal à $1/2$ sont dits fractionnels tandis que le cas $H=1/2$ représente le cas particulier des mouvements browniens à incréments successifs indépendants. Le processus fBm est auto-affine, c'est-à-dire que les paramètres requièrent chacun un facteur d'échelonnage différent (contrairement à l'auto-similarité, qui nécessite le même facteur). Par exemple, si le temps est $a \cdot t$ et non t , la variance de l'équation 6.2 sera multipliée par un facteur a^{2H} . Le processus fBm peut être vu comme une sommation d'incrémentes (positions successives entre deux temps) fGn stationnaires de variances infinies. Le processus fBm n'est pas un processus stochastique stationnaire, il dépend donc des temps t et t' et non pas seulement de l'accroissement $|t-t'|$ comme les variogrammes. Ajoutons que la variance, proportionnelle à $|t-t'|^{2H}$, ne tend jamais vers une valeur proportionnelle à $|t-t'|$ (sauf pour $H=1/2$), ce qui est aussi un critère de non stationnarité du processus.

Le coefficient de dispersion étant égal à $\sigma^2/(2t)$, on trouve $D \sim t^{2H-1}$. La diffusion devient donc de plus en plus difficile au cours du temps pour $H < 1/2$ (subdiffusion), alors que pour $H > 1/2$, il y a superdiffusion : la diffusion est de plus en plus forte avec le temps. Comme le fait remarquer Gouyet (1996), la diffusion anormale peut être observée dans les milieux désordonnés ou peu connectés ($H < 1/2$) dans lesquels les particules ont un comportement semblable à celui de la « fourmi dans le labyrinthe » ou dans les milieux turbulents ($H > 1/2$) dans lesquels les particules sont emportées par les tourbillons, permettant de voyager

très loin sans changer de direction. La dispersivité serait en conséquence également proportionnelle à t^{2H-1} , puisque $D_L = \alpha_L \cdot \bar{v}$ (la vitesse moyenne étant supposée indépendante du temps).

En généralisant le processus fBm pour une fonction définie cette fois dans un repère euclidien, soient x et x' deux positions de cet espace, la fonction de covariance peut être déduite de l'équation 6.2 :

$$\begin{aligned} \langle [B_H(x) - B_H(x')]^2 \rangle &= \langle [B_H(x)^2 - 2 \cdot B_H(x) \cdot B_H(x') + B_H(x')^2] \rangle \\ &= \langle B_H(x)^2 \rangle + \langle B_H(x')^2 \rangle - 2 \langle B_H(x) \cdot B_H(x') \rangle \end{aligned}$$

Comme $\langle B_H(x)^2 \rangle = \langle [B_H(x) - B_H(0)]^2 \rangle \sim |x-0|^2$, on trouve :

$$\langle B_H(x) \cdot B_H(x') \rangle = a \left(x^{2H} + x'^{2H} - (x-x')^{2H} \right) \quad (6.3)$$

où a représente une constante. Cette fonction est décroissante lorsque $H > 0$. Si le processus fBm est généré sur un domaine bidimensionnel, des distances relatives peuvent être utilisées pour définir les positions.

Le variogramme d'un processus fBm est :

$$\gamma(r) = f(H+d/2) \cdot r^{2H} \quad (6.4)$$

où r est l'espacement ($x-x'$), d la dimensionalité et f une fonction. Ce variogramme est donc toujours croissant (sans plateau) pour $H > 0$. Les courbes sont convexes pour $0 < H < 1/2$, concaves (exponentielles) pour $1/2 < H < 1$ et linéaires à $H = 1/2$.

Une propriété remarquable du processus fBm est qu'il génère des corrélations dont l'étendue est infinie. De plus, la fonction de corrélation des incréments est indépendante du temps ou de l'espace (démonstration dans Gouyet (1996) p. 50). En considérant la symétrie de la fonction de corrélation et en prenant $B_H(0) = 0$, un processus fGn peut être défini uniquement en fonction de l'espacement r et du coefficient de Hurst [Beran, 1994 ; Barton et La Pointe, 1995 ; Gouyet, 1996] :

$$C(r, H) = \frac{\langle -B_H(-r) \cdot B_H(r) \rangle}{\langle B_H(r)^2 \rangle} = \frac{1}{2} \left(|r+1|^{2H} - 2|r|^{2H} + |r-1|^{2H} \right) \quad (6.5)$$

Pour $r=1$, on obtient $C(r, H) = 2^{2H-1} - 1$.

Si $H > \frac{1}{2}$, la distribution présente une persistance puisque la valeur de la fonction de corrélation $C(r, H)$ est positive (même tendance en $r + \Delta r$ qu'en r) tandis que lorsque $H < \frac{1}{2}$, la fonction est négative et le processus fBm génère de l'antipersistance. $H = \frac{1}{2}$ correspond au bruit blanc, le système est donc plus ou moins aléatoire lorsque H est négatif. À $H = \frac{1}{2}$, il n'y a aucune corrélation entre les données générées ($C(r, H) = 0$) et ce cas correspond au mouvement brownien. Il est à noter que le comportement du processus fBm est en contradiction avec de nombreuses approches géostatistiques des champs stochastiques présupposant une longueur de corrélation finie. Cela dit, des modèles de variogrammes linéaires ou en loi de puissance (qui génèrent des corrélations infinies) sont également employés en pratique. D'ailleurs, les fractals et la géostatistique ne sont pas complètement séparés puisque le variogramme d'un processus fBm est représenté par une fonction de puissance (équation 6.4). Le variogramme peut ainsi être utilisé pour déterminer le coefficient de Hurst, étant donné que la pente du graphique log-log de $\gamma(r)$ en fonction de l'espacement r est égale à $2H$. Pour les fGn, la pente correspond à $2H-1$.

Les variations verticales de perméabilités [Molz et Boman, 1993] et de porosité [Hewett, 1986] ont été jugées en accord avec le processus fGn, tandis que les variations spatiales de K suivraient plutôt un processus fBm [Hewett, 1986]. La valeur que devrait prendre H est toutefois sujette à discussion. Plusieurs auteurs ont trouvé des valeurs de H comprises dans l'intervalle $[0 ; \frac{1}{2}]$ [Neuman, 1990 ; Abadou et Gelhar, 1990 ; Painter, 1996 ; Sahimi et Mukhopadhyay, 1996]. Toutefois, Hewett (1986) a obtenu 0,855 pour des variations verticales de la porosité et 0,7 pour la distribution spatiale de perméabilités et les études théoriques de Philip (1986) et Wheatcraft et Tyler (1988) considèrent la valeur de H comprise entre $\frac{1}{2}$ et 1. Tyler et Wheatcraft (1992) suggèrent que H devrait être supérieur à $\frac{1}{2}$ pour les variations horizontales des propriétés hydrauliques et inférieur pour les variations verticales.

Les transformées de Fourier sont fréquemment utilisées pour générer des champs stochastiques obéissant à un processus fBm. En effet, la densité spectrale correspond à la covariance de la transformée de Fourier de la variable étudiée. En admettant la stationnarité de la covariance dans l'espace réel ($\langle B_H(x) \cdot B_H(x+r) \rangle = \langle B_H(0) \cdot B_H(r) \rangle$), la fonction aléatoire $B_H(r)$ est donc reliée à la densité spectrale $S(\omega)$ par [Molz *et al.*, 1997] :

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Cov}(r, H) \cdot e^{-i\omega r} \cdot dr \quad (6.6)$$

où la fonction de covariance $\text{Cov}(r, H)$ est définie par l'équation 6.3 et ω est la variable de la transformée de Fourier. Lorsque le théorème de Wiener-Khintchine s'applique (c'est-à-dire lorsque la fonction $\text{Cov}(r, H)$ converge suffisamment rapidement vers l'infini), on a :

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Cov}(r, H) \cdot \cos(\omega r) \cdot dr \quad (6.7)$$

Après résolution de l'intégrale et de la transformée inverse, on trouve $S(\omega) \sim 1/f^\rho$ où $f = \omega/2\pi$ [Gouyet, 1996 ; Molz *et al.*, 1997]. Pour un processus fBm, $\rho = 2H+1$ avec $1 < \rho < 3$ et pour les fGn, $\rho = 2H-1$ avec $-1 < \rho < 1$.

L'équation générale de la densité spectrale correspondant à un processus fBm dépendant d'une variable à d dimensions est :

$$S(\omega, f_{co}) \sim \frac{1}{\left(f_{co} + \sum_{i=1}^d \omega_i^2\right)^{H+d/2}} \quad (6.8)$$

L'introduction de la limite f_{co} permet de contrôler la longueur sur laquelle les propriétés spatiales d'un système sont corrélées. Si l'inter-distance de deux valeurs locales d'un champ aléatoire est inférieure à $l_{co} = 1/\sqrt{f_{co}}$, les valeurs sont corrélées alors que pour une distance supérieure, elles sont indépendantes. Si $f_{co}=1$, le modèle équivaut à un champ de variables indépendantes dont la covariance est nulle ; si $f_{co}=0$ ($l_{co}=\infty$) les variables sont corrélées à toutes les échelles et la covariance n'est jamais nulle.

6.2 Revue des modèles de percolation utilisant des corrélations longues distances

En fait, peu d'auteurs se sont intéressés à la percolation dans des milieux spatialement corrélés sur de longues distances. Les résultats de quatre publications portant sur ce sujet sont rapportées ici. D'autres recherches traitent également de ce problème, mais portent sur la percolation d'invasion (multi-phase).

Prakash *et al.* (1992) ont étudié la percolation de sites avec des réseaux 2-D dont la fonction de corrélation diminue lentement ($C(r) \sim f(\eta) \cdot r^{-(d-\eta)}$, voir section 3.4.2). Le paramètre η peut être relié au coefficient de Hurst par la relation $\eta=2(H+d/2)$. Il est à noter que cette fonction est décroissante lorsque $\eta < 2$ ($H < 0$) pour des réseaux 2-D. Avec des valeurs de η variant entre -2 et 2 ($-1 \leq H \leq 0$), ils ont pu étudier des réseaux corrélés sur de courtes ($\eta \rightarrow 0$) et longues distances ($\eta \rightarrow 2$). Rappelons qu'ils ont obtenu un seuil de percolation diminuant lentement avec η et un exposant de la longueur de corrélation (ν) augmentant rapidement lorsque $0,5 < \eta < 2$. Ils ont également trouvé que la dimension fractale du squelette augmente avec η et tend vers 2 lorsque η est grand (la structure devient de plus en plus compacte) et que le rapport e/ν , où e est l'exposant de la conductivité hydraulique équivalente (K_e), diminue avec η . Makse *et al.* (2000) ont repris leurs réseaux pour étudier la compétition entre l'advection et la diffusion avec $\eta=1,6$ ($H=-0,2$). Ils ont développé une loi de puissance pour le temps moyen de parcours de forme $\langle t \rangle \sim L^\chi$ où χ dépend du nombre de Peclet. Pour des nombres de Peclet élevé, c'est-à-dire pour un régime dominé par les processus d'advection, ils ont trouvé $1 < \chi < 2$.

Sahimi et Mukhopadhyay (1996) ont étudié des systèmes carrés et cubiques simples avec la percolation de liens dans des champs fBm ayant des valeurs de H allant de $-1/2$ à 1. Ces auteurs ont trouvé qu'en 2 et 3 dimensions, les valeurs de p_c , ν et e restaient plutôt stables et très proches de celles des réseaux non corrélés pour l'intervalle $0 < H < 1/2$ et diminuaient ensuite rapidement avec l'augmentation de H . Les auteurs expliquent ce résultat par le fait que lorsque H est petit, le regroupement des valeurs similaires n'est pas vraiment possible. Ils ont également trouvé que le paramètre β_B (l'exposant de X^B) diminuait constamment (et donc que la dimension fractale du squelette d_B augmentait) avec l'augmentation de H . Un seuil de percolation de 0,18 a été obtenu avec $H=0,95$.

Les résultats d'une étude conduite par Sahimi (1995) portant sur des réseaux fBm dans lesquels les régions de faibles perméabilités (régions stagnantes) ont été soit conservées soit éliminées ont montré que la dispersion hydrodynamique dans le squelette est le processus adéquat pour étudier la dispersion dans ces milieux hétérogènes. En effet, comme la fraction des culs-de-sac des réseaux générés est petite et que la longueur de corrélation est toujours supérieure à L (la longueur du réseau) dans des champs fBm, les équations de la section 3.2.4 pour la dispersion dans le squelette devraient s'appliquer.

Sahimi (1995) a trouvé que l'exposant de la dispersivité $\delta=1/(1+\theta_B)$ ($\alpha_L \sim t^\delta$, équation 3.17) variait entre 0,5 et 0,6 pour l'intervalle $0 < H < 1$. L'exposant de la variance du déplacement des particules σ_x^2 étant deux fois plus grand que δ , le processus serait donc superdiffusif.

6.3 Génération des champs de conductivité hydraulique

Nous avons utilisé le logiciel développé par Sahimi et Mukhopadhyay (1996) pour la génération des champs fBm. La méthodologie est la suivante : 1) des valeurs aléatoires et indépendantes de K sont associées à chaque lien du réseau, 2) la transformée de Fourier est effectuée sur chaque valeur en utilisant la fonction de corrélation $C(r, H)$ définie dans l'équation 6.5, 3) chaque valeur de K est multipliée par la densité spectrale $S(\omega)$ définie à l'équation 6.8 pour le coefficient H désiré et 4) la transformation de Fourier inverse est effectuée. Les valeurs générées ont une distribution normale. Les paramètres imposés pour nos simulations étaient $\mu=0$ et $\sigma=1$. Étant donnée la périodicité intrinsèque aux transformées de Fourier, les champs utilisés sont au moins deux fois plus petits que les champs générés en réalité et ils proviennent de la partie centrale.

Dans un premier temps, des champs isotropes dont la longueur de corrélation des conductivités hydrauliques est infinie ont été générés en posant $f_{co}=0$ ($l_{co}=\infty$) dans l'équation 6.8. Deux exemples ($H=0,3$ et $H=0,7$) sont présentés à la figure 6.1. Les images montrent bien que plus H est élevé, plus les valeurs similaires de K sont regroupées. Il est à noter que le modèle utilisé pour générer les champs fBm de conductivités hydrauliques possède un léger biais lorsque H est petit, certainement en raison de la périodicité inhérente aux méthodes de Fourier. En effet, pour obtenir des variogrammes semblables à ceux théoriques pour $H=0$ (variogramme plat) et $H=0,1$, il a fallu générer les champs en utilisant $H=-1$ et $-0,1$ respectivement. Tout comme au chapitre précédent, l'erreur quadratique a été utilisée pour vérifier les champs générés en comparant leur variogramme avec le modèle théorique (en loi de puissance). Une comparaison systématique a montré que le fait de trier ou non les réseaux en fonction de l'adéquation de leur variogramme au modèle théorique n'avait aucune incidence sur les résultats de transport qui seront présentés.

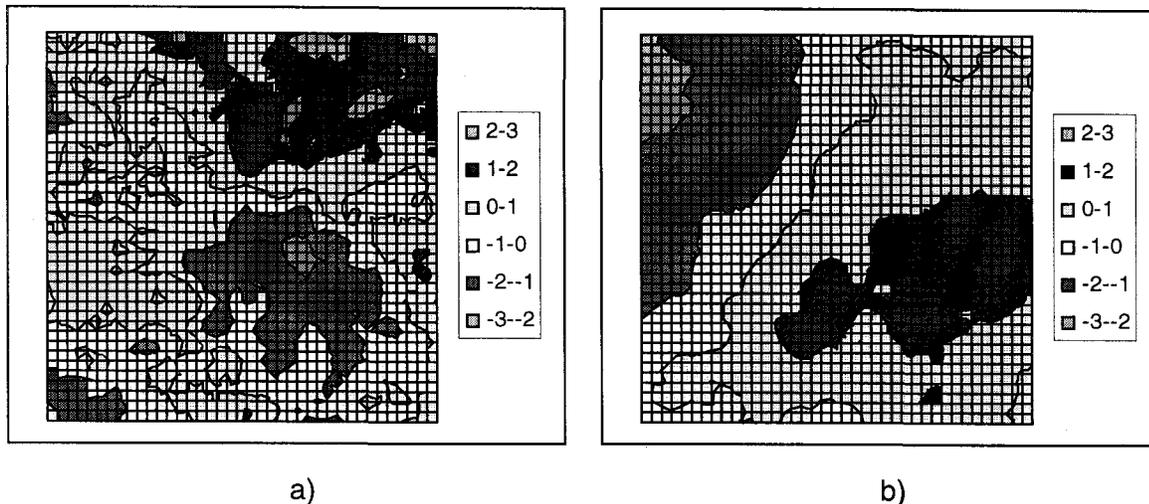


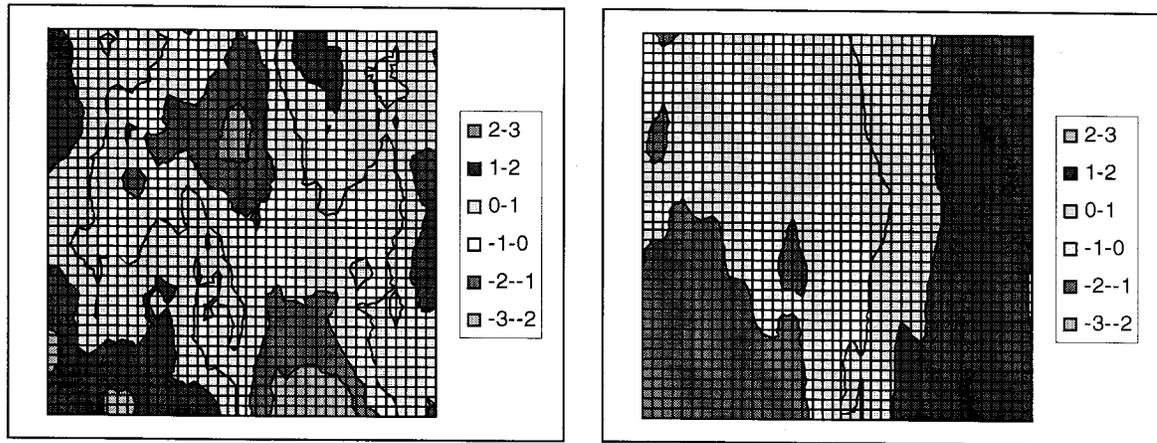
Figure 6.1 : Exemples de champs isotropes sans limite 40x40 a) $H=0,3$ et b) $H=0,7$

Ensuite, pour produire des champs ayant des longueurs de corrélations finies (comparables à ceux générés par géostatistique), différentes limites l_{co} ont été imposées. Pour obtenir des champs le plus près possible du variogramme sphérique désiré, un coefficient de Hurst de 0,9 a été utilisé. Ces champs sont plus rapides à obtenir que ceux produits par simulations séquentielles gaussiennes et la vérification des variogrammes a montré que des champs ayant des longueurs de corrélation (portée du variogramme) supérieures à $L/3$ pouvaient être obtenus sans tri.

Finalement, des champs anisotropes ont été construits en attribuant des coefficients différents à ω_1 et ω_2 . En effet, pour un champ 2-D, modifier le rapport ω_2/ω_1 a le même effet sur le spectre que d'avoir une covariance d'anisotropie géométrique de rapport y/x identique. La figure 6.2 illustre deux champs anisotropes, l'un avec un rapport $\omega_2/\omega_1=2$ et l'autre avec $\omega_2/\omega_1=4$.

Pour préserver la corrélation, les liens ont été éliminés en fonction de leur conductivité hydraulique (les liens ayant les plus faibles valeurs sont éliminés en premier). Plus H est grand, plus les liens possédant des perméabilités semblables sont regroupés spatialement (en amas) et donc le retrait des liens de faible perméabilité n'entraîne pas tellement de hasard (les chemins sont peu tortueux) dans le squelette [Sahimi, 1995]. Même si $H=1/2$ correspond à un mouvement brownien aléatoire, les valeurs équivalant celles d'un système purement aléatoire surviennent seulement pour des valeurs

négatives de H puisque dans le mouvement brownien, ce sont les déplacements successifs qui sont non corrélés et non les valeurs elles-mêmes.



a)

b)

Figure 6.2 : Champs anisotropes à $H=0,7$ a) $\omega_2/\omega_1=2$ et b) $\omega_2/\omega_1=4$

Chaque résultat est obtenu à partir d'une série comptant au moins 200 champs. Les champs ont été générés avec des coefficients de Hurst allant de 0 à 1 et des tailles de réseaux de 60×60 à 400×400 . Les distributions des conductivités hydrauliques imposées dans le modèle de percolation sont des lois log-normales ayant comme moyenne et variances : $\mu_{\ln K}=1$ et $\sigma_{\ln K}=0,5; 1$ et $1,5$.

6.4 Résultats obtenus avec des champs fBm isotropes ayant une longueur de corrélation infinie

Pour toutes les tailles de réseaux et quel que soit le coefficient de Hurst utilisé, nous avons obtenu une valeur du seuil de percolation $p_c(L)$ proche de 0,5. Ceci montre que malgré la compacité des réseaux fBm (peu de culs-de-sac), ils nécessitent autant de liens ouverts que les réseaux non corrélés et ce, même si les valeurs similaires de conductivité hydraulique sont de plus en plus regroupées à mesure que H augmente. Tout comme la longueur de corrélation, l'augmentation de H fait toutefois considérablement augmenter la variance du seuil de percolation. Le coefficient de variation (σ/μ) est d'environ 16% pour $H=0,1$ et de 45% pour $H=0,9$ alors qu'il est en moyenne de 3% pour les réseaux non corrélés.

Les résultats des paramètres d'écoulement et de transport pour l'intervalle $0 \leq H < 1$ au seuil de percolation sont présentés à la figure 6.3 pour trois différentes tailles de réseaux ($n=60, 100$ et 150). Les paramètres X^A , X^B et K_e montrent des courbes continues croissantes. Les valeurs de D_L diminuent généralement lentement avec l'augmentation de H , sauf à $H=0$ où on observe des valeurs beaucoup plus faibles que celles obtenues à $H=0,1$. Les courbes des temps de parcours moyens, de leurs variances et des coefficients de variation diminuent également avec H (voir figure C-1 de l'annexe C). Cette discontinuité à $H=0$ provient du manque de corrélation entre les liens (variogramme plat), ce qui limite les possibilités de déplacement des particules aux nœuds. Les valeurs obtenues avec des réseaux non corrélés (résultats du chapitre 4) n'ont pas été ajoutées puisqu'elles correspondent à un coefficient de Hurst de $-\frac{1}{2}$. Toutefois, nous avons vérifié que les réseaux non corrélés ont des valeurs de K_e et de D_L plus faibles que celles des réseaux fBm avec $H=0$. Ces différences s'expliquent aussi par le fait que dans le cas de réseaux fBm à $H=0$, les liens sont éliminés en fonction de la valeur de K attribuée, contrairement aux réseaux non corrélés.

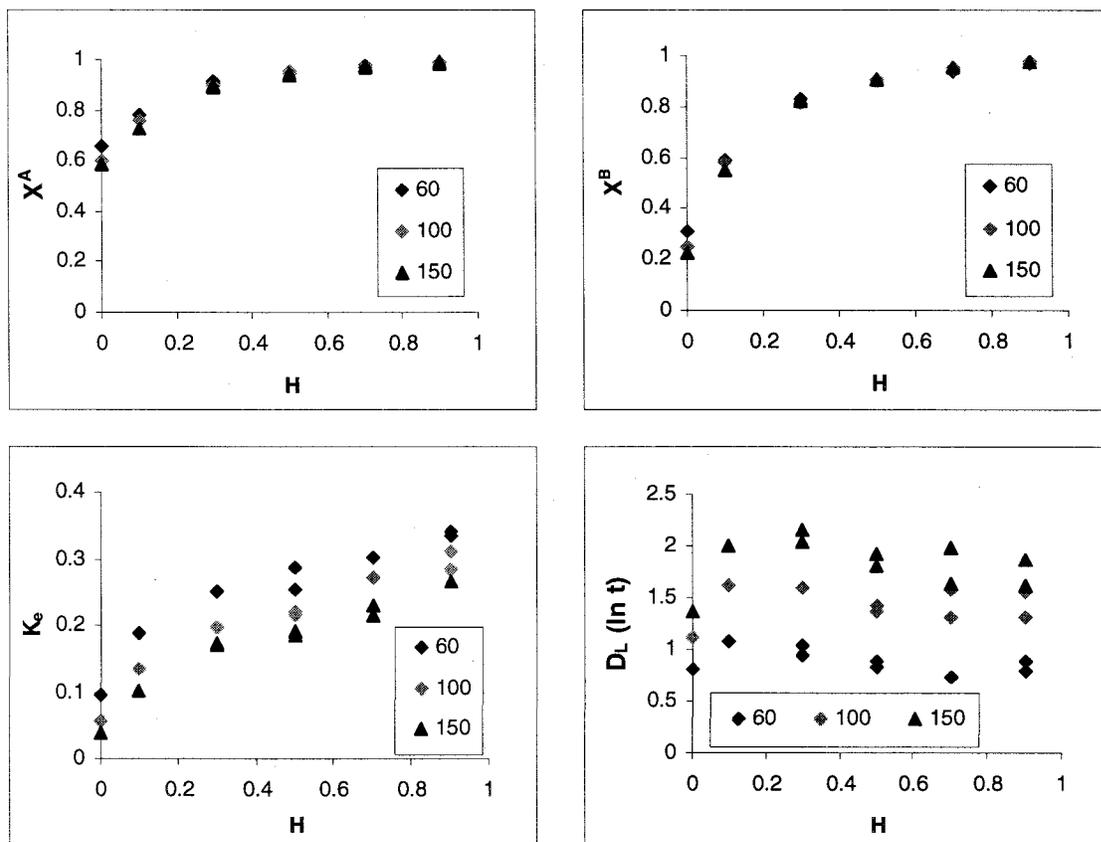


Figure 6.3 : Comportement de X^A , X^B , K_e et $D_L (\ln t)$ en fonction de H pour des réseaux de trois différentes tailles (60x60, 100x100 et 150x150) avec $\sigma_{\ln K} = 1$ à $p = p_c$

Les courbes de X^A et X^B montrent que les réseaux fBm avec $0 < H < 1$ sont toujours très compacts, même lorsque $H=0,1$. En effet, les culs-de-sac dans ce cas ne représentent que 18% des liens (comparativement à environ 34% dans les réseaux non corrélés) et ce pourcentage diminue rapidement avec l'augmentation de H . Pour $H=0,9$, il n'y a plus de culs-de-sac et la valeur de X^B est égale à 1 (correspondant à la situation où tous les liens ouverts appartiennent au squelette). En fait, dès que H est supérieur à 0, le variogramme des réseaux générés $\gamma(r) \sim r^{2H}$ n'atteint jamais de plateau, ce qui entraîne un assemblage très différent des liens comparativement aux réseaux non corrélés. Cette augmentation de la compacité, correspondant au regroupement géométrique des liens, est clairement illustrée la figure 6.4, où sont présentés des exemples de squelettes à $H=0,3$ et $H=0,7$.

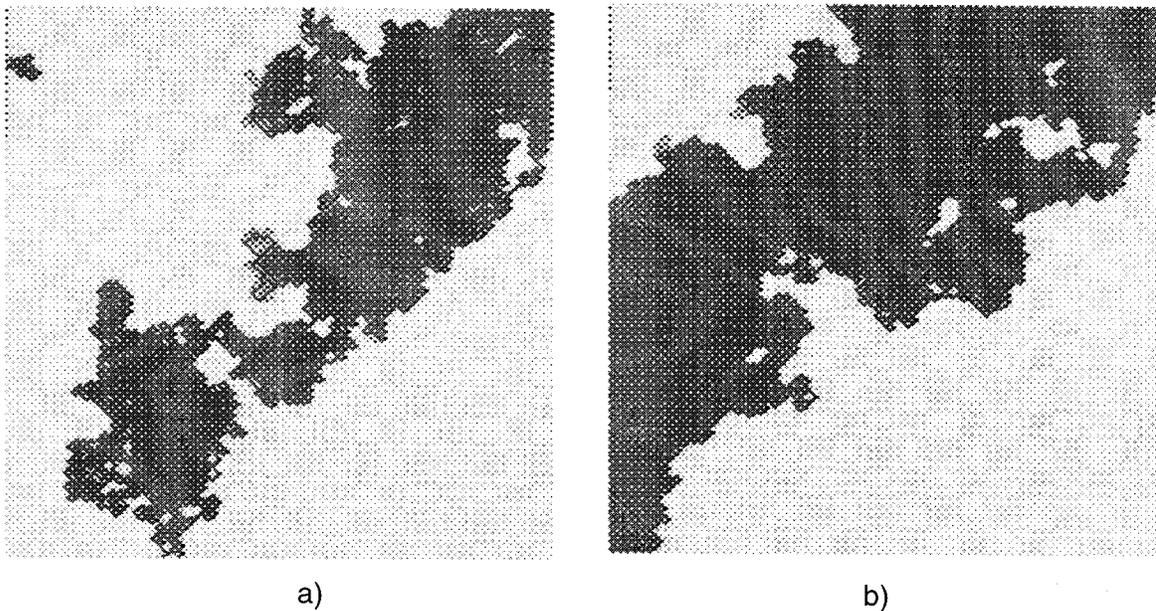


Figure 6.4 : Squelettes de réseaux fBm 150x150 isotropes a) à $H=0,3$ et b) à $H=0,7$

Les valeurs des dimensions fractales de l'amas (d_f) et du squelette (d_B) (obtenues avec le graphique du logarithme de la masse de l'amas et du squelette en fonction de $\ln L$) à $H=0$ correspondent à celles des réseaux non corrélés. Ces valeurs augmentent cependant très rapidement pour atteindre la valeur maximale de 2 (correspondant à $\beta = \beta_B = 0$) pour $H \geq 0,3$. Même à $H=0,1$, les valeurs sont assez proches de 2 : $d_f = d_B = 1,94$ ($-\beta/\nu = -\beta_B/\nu = 0,06$). Ces résultats découlent du caractère très compact des réseaux fBm. Ceux-ci sont légèrement en désaccord avec l'argument analytique de Isichenko (1992) qui prédisait que $d_f = 2$ pour $0 < H < 1$ [Knackstedt *et al.*, 2000] et avec les travaux de Sahimi et Mukhopadhyay (1996). Il faut toutefois noter que Sahimi et Mukhopadhyay (1996) ont

déterminé les charges et éliminé les liens lents avant d'effectuer le calcul du squelette, ce qui modifie certainement la structure de ce dernier. Cependant, nous avons trouvé comme eux que le rapport de l'exposant e/ν ($K_e \sim L^{-e/\nu}$) diminue avec H , mais les valeurs estimées diffèrent. Pour la gamme $0 < H < 1/2$, Sahimi et Mukhopadhyay (1996) ont obtenu des valeurs proches de celles des réseaux non corrélés. Ces résultats semblent étranges puisque dès que le coefficient de Hurst est supérieur à 0, les réseaux fBm possèdent des corrélations qui s'étendent d'une extrémité à l'autre (le variogramme $\gamma(r) \sim r^{2H}$ augmente continuellement), entraînant des assemblages très compacts possédant peu de culs-de-sac. Il est donc peu probable que les exposants des réseaux avec $0 < H < 1/2$ (ayant en moyenne de 4 à 18% de culs-de-sac) aient des valeurs semblables à celles des réseaux non corrélés pour lesquels la proportion de culs-de-sac est d'environ 34%.

Nous concluons d'après ces résultats que le fait de corréliser la distribution des conductivités hydrauliques sur de longues distances et d'éliminer les liens dont les valeurs sont les plus faibles fait rapidement perdre le caractère fractal de l'amas et du squelette (puisque $\beta = \beta_B = 0$ dès que $H > 0,1$) vraisemblablement à cause du fait que le désordre nécessaire pour obtenir une structure fractale n'est plus présent. Même au seuil de percolation, les réseaux semblent donc devenir équivalents à des milieux sub-continus.

Le coefficient de dispersion devient rapidement proportionnel à la taille du système (soit $D_L \sim L$) comme dans les milieux continus dans lesquels on aurait une dispersion pré-asymptotique dite de « régime advectif ». Le comportement de l'exposant χ est présenté à la figure 6.5b. La figure 6.5a montre que l'exposant e/ν de la conductivité hydraulique équivalente du système diminue lui rapidement à mesure que H augmente. L'exposant χ étant égal à $1 - \theta_B = 1 - (e - \beta_B)/\nu$, il semble normal de voir ces deux exposants diminuer (dans le cas de e/ν) et augmenter (dans le cas de χ) au même rythme et ainsi d'observer leurs paramètres perdrent simultanément leur caractère fractal, la valeur de β_B/ν étant nulle (ou presque). Le fait que le squelette ne soit plus fractal n'empêche pas les distributions de conductivité hydraulique des liens de continuer à chenaliser en partie les écoulements à l'intérieur de ceux-ci et en conséquence, de générer une dispersion pseudo-fractale. En effet, l'augmentation graduelle de χ pour tendre vers une valeur de 1 pourrait être attribuable au fait que le regroupement spatial des K est plus lent que le regroupement

géométrique des liens (acquisition de la compacité). Ce retard générerait une acquisition progressive du caractère non fractal de la dispersion, alors que la géométrie du réseau ne l'est plus depuis déjà longtemps. Celui-ci devrait toutefois s'atténuer à mesure que la taille des réseaux augmente puisque pour un réseau géométriquement compact de taille infinie, l'hétérogénéité complète devrait être échantillonnée le long du chemin parcouru pour traverser le réseau même si les valeurs de conductivité hydraulique ne sont pas aussi bien regroupées. Il serait donc logique que D_L devienne proportionnel à L pour les très grands réseaux et pour les réseaux dont la taille tend vers l'infini, D_L devrait devenir constant, indépendant de L .

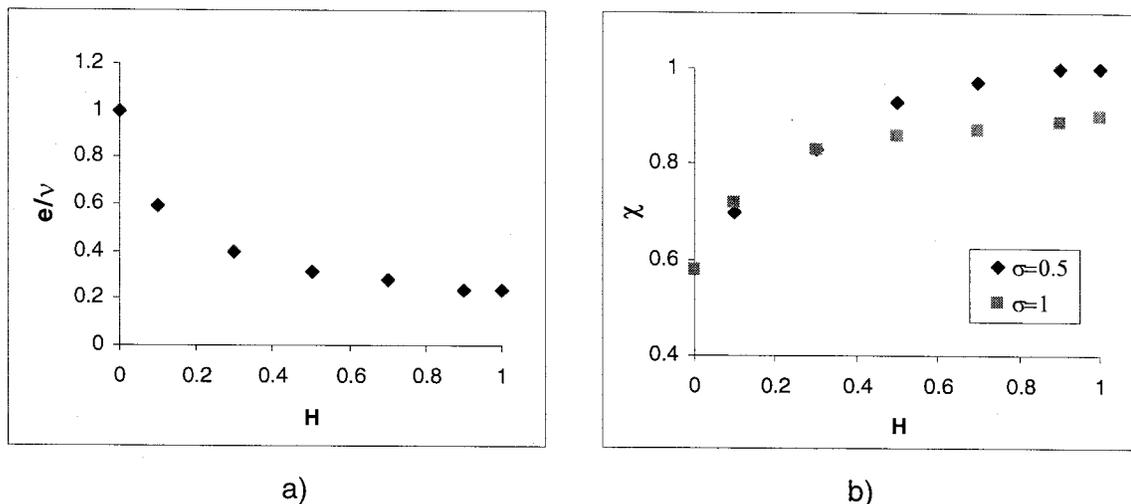


Figure 6.5 : Exposants en fonction du coefficient de Hurst à $p=p_c$ a) de K_e et b) de D_L

Comme il a été mentionné à la section 6.2, les variogrammes des réseaux ont été vérifiés à l'aide de l'erreur quadratique (RMSE pour *Root Mean Square Error*). La comparaison des résultats obtenus avec les deux types de champs (triés et non triés) a montré que les valeurs de tous les paramètres sont restées semblables, même pour les paramètres de transport. En effet, les paramètres d'écoulement ont montré des différences généralement inférieures à $\pm 3\%$. Les variations les plus importantes ont été enregistrées pour les valeurs de D_L dont la différence peut atteindre $\pm 20\%$ (moyenne de 9% en erreurs absolues pour la distribution $\sigma_{ln K}=1$). Ces variations ne semblent pas influencées ni par la taille ni par la valeur de H . Elles sont considérées comme faibles devant la grande variabilité de la dispersion d'un réseau à l'autre et par conséquent tous les réseaux ont été conservés. La similarité des statistiques obtenues avec les réseaux triés et non triés apparaît normale étant donné que la longueur de corrélation est infinie et que les résultats correspondent à des moyennes obtenues avec de nombreux réseaux. De plus,

la sensibilité des paramètres macroscopiques comme K_e ou D_L est assez faible vis-à-vis de la forme du variogramme.

La dispersivité a été calculée pour chaque réseau en divisant la dispersion par la vitesse moyenne ($\alpha_L = D_L / \langle u \rangle$). Comme au chapitre 5, la valeur médiane a été utilisée pour la dispersion et la moyenne arithmétique a été retenue pour les vitesses puisque celles-ci sont normalement distribuées. Les courbes α_L en fonction de la distance parcourue à $p = p_c$ ont des pentes qui diminuent avec l'augmentation de H . D'ailleurs plus H augmente, plus les valeurs α_L sont proches de la droite théorique souvent employée dans la pratique comme règle approximative: $\alpha_L = 0,1 * L$. Les exposants de α_L ($\alpha_L \sim L^\chi$) pour la gamme $0 < H < 1$ sont plutôt constants, les valeurs varient entre 1,26 et 1,31, ce qui correspond à la valeur obtenue pour les réseaux non corrélés ($\chi = 1,3$).

Ces résultats ont été superposés aux valeurs de terrain présentées par Gelhar *et al.* (1992). Rappelons que celles-ci ont été obtenues à partir d'essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde, sans distinction du type de milieu conducteur ou du type d'essai de traçage. Comme nos réseaux ne pouvaient couvrir quatre ordres de grandeur, les mêmes résultats ont été utilisés quatre fois : les valeurs de α_L ont été multipliées par le rapport de la longueur de liens désirée sur celle de référence. Étant donné que les valeurs de dispersivité obtenue pour tous les H sont assez similaires et comme la dispersion des points est grande, les valeurs obtenues avec tous les coefficients de Hurst ($0 < H < 1$) sont cohérentes avec les données de terrain. La figure 6.6 présente les résultats obtenus avec $H = 0,3$ et $H = 0,7$ pour $\sigma_{\ln K} = 1$. Les valeurs semblent un peu mieux concorder avec celles de terrain à mesure que H augmente (mieux centrées), particulièrement lorsque l'hétérogénéité ($\sigma_{\ln K}$) est moyenne à forte. Ceci renforce donc l'hypothèse qu'un coefficient de Hurst entre $\frac{1}{2}$ et 1 pourrait être associé à la variation spatiale de K , mais n'infirme pas pour autant les résultats des études qui ont avancé des valeurs de H inférieures à $\frac{1}{2}$ (voir section 6.1). La bonne adéquation des valeurs simulées et mesurées est potentiellement la manifestation de la présence d'hétérogénéités sur plusieurs échelles dans les nombreux aquifères. Cette comparaison confirme donc la pertinence de l'utilisation de champs fBm pour simuler des sites réels. Celle-ci ne permet pas toutefois de trancher sur la « bonne » valeur de H à utiliser pour modéliser les aquifères.

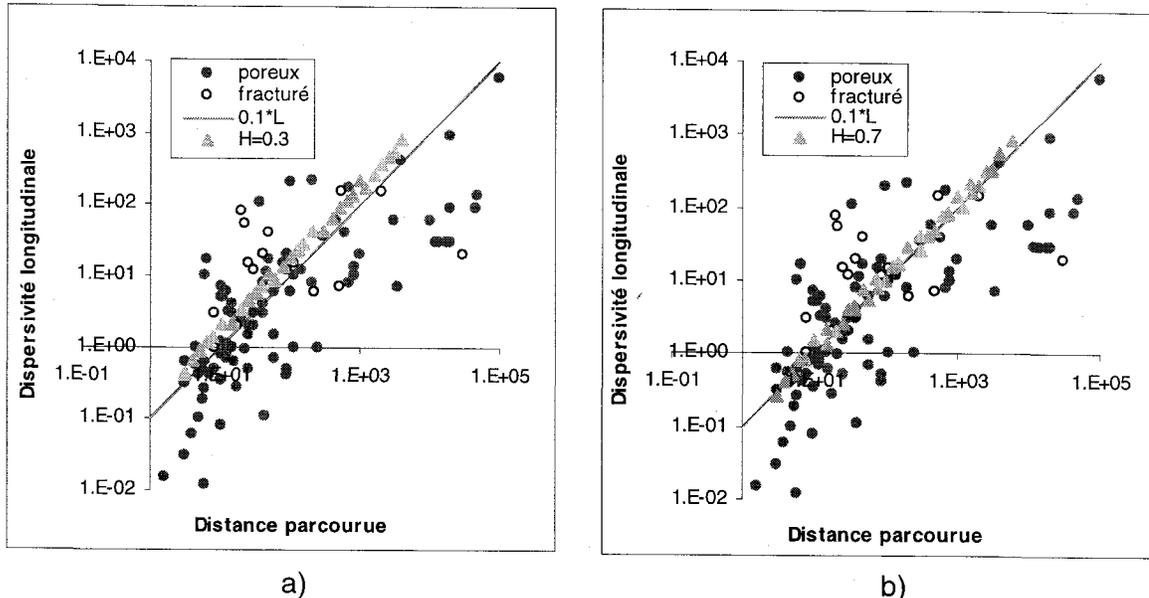


Figure 6.6 : Comparaison des valeurs de α_L avec celles des essais de traçage a) à $H=0,3$ et b) à $H=0,7$ pour $\sigma_{\ln K}=1$ et $p=p_c$ (à partir de Gelhar et al. 1992)

Les dispersions et dispersivités transversales ont également été calculées en utilisant $\langle y \rangle$, la distance transversale moyenne parcourue par les particules dans l'équation 4.8. La dispersion transversale s'écrit donc :

$$D_T = \frac{\sigma_t^2 \cdot \langle y \rangle^2}{2 \cdot \langle t \rangle^3} \quad (6.9)$$

En raison des conditions aux limites périodiques (qui ramènent les particules de l'autre côté lorsqu'elles atteignent la frontière est ou ouest), un compteur a été implanté afin de calculer la distance totale parcourue. Les conditions aux limites (qui impliquent un milieu infini périodique dans le sens transversal des réseaux) n'ont pas d'influence sur la dispersion transversale car la distance moyenne maximale $\langle y \rangle$ est au plus de l'ordre de grandeur du réseau et les particules ne traversent les réseaux qu'une seule fois. La distance moyenne $\langle y \rangle$ utilisée correspond à la moyenne arithmétique de toutes les distances transversales totales (effectives) parcourues par les particules dans un même réseau. En effet, les distributions de ces distances transversales sont approximativement linéaires décroissantes et la moyenne arithmétique fournit une bonne approximation de la valeur médiane. Nous avons calculé que l'écart entre la valeur médiane et celle utilisée était d'au plus 12%, n'affectant que très peu les valeurs de D_T et de α_T . Les simulations des réseaux au seuil de percolation ont montré que les exposants de D_T sont très

proches de ceux estimés pour la dispersion longitudinale, confirmant le fait que D_T est proportionnelle à D_L à une constante près.

La dispersivité transversale correspond au rapport de la valeur médiane de D_T sur la moyenne arithmétique des vitesses $\langle u \rangle$. Cette fois encore, les valeurs simulées pour $H > 1/2$ concordent bien avec les valeurs des essais de traçage (figure 6.7). Cependant, peu de résultats d'essais de traçage sont disponibles et les données sont assez dispersées. De plus, les α_T mesurées pour des distances supérieures à 1 km ne sont pas fiables d'après Gelhar *et al.* (1992). Moins d'une dizaine de valeurs sont disponibles entre 10 et 1000 m.

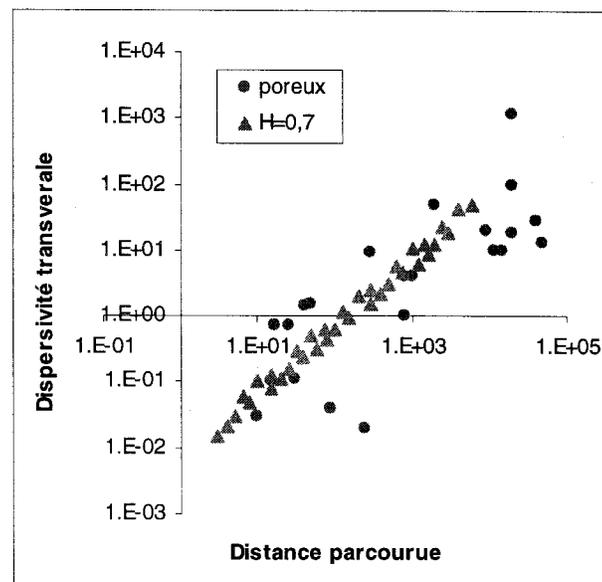


Figure 6.7 : Comparaison des valeurs de α_T avec celles des essais de traçage pour $H=0,7$ et $\sigma_{\ln K}=1$ et $p=p_c$ (à partir de Gelhar *et al.* 1992)

Selon nos simulations, le rapport α_T/α_L au seuil de percolation serait égal ou légèrement plus faible que la valeur de 0,1 généralement supposée en l'absence d'information précise. Ce rapport ne semble pas être influencé par la taille des réseaux, mais simplement lié à la valeur du coefficient de Hurst. Les valeurs moyennes de α_T/α_L obtenues à $p=p_c$ pour l'ensemble des tailles diminuent avec l'augmentation de H , de 0,1 ($H=0,1$) à 0,05 ($H=0,9$).

Les résultats des simulations réalisées avec $p > p_c$ pour $H=0,3$ et $H=0,7$ sont présentés pour la dispersion à la figure 6.8 et pour K_e , α_L et α_T en annexe C (figure C-2). Ces simulations ont montré que le comportement des réseaux au seuil de percolation est

encore une fois très différent. En effet, les courbes de K_e et des paramètres de transport (D_L , D_T , α_L , α_T) chutent toutes à proximité du seuil de percolation (à l'exception de α_T pour $H=0,3$). Cette chute serait probablement moins prononcée si tous les réseaux avaient un seuil de percolation de 0,5 (et non des valeurs variant entre 0,15 et 0,85 avec une moyenne de 0,5) puisque pour $p > p_c$, les valeurs de p sont imposées (les réseaux sont éliminés s'ils ne percolent pas à la valeur p désirée). Le comportement du reste des courbes est semblable à celui observé pour tous les autres réseaux (non corrélés et corrélés sur de courtes distances) : K_e diminue et la dispersion et la dispersivité (longitudinale et transversale) augmentent à mesure que p diminue.

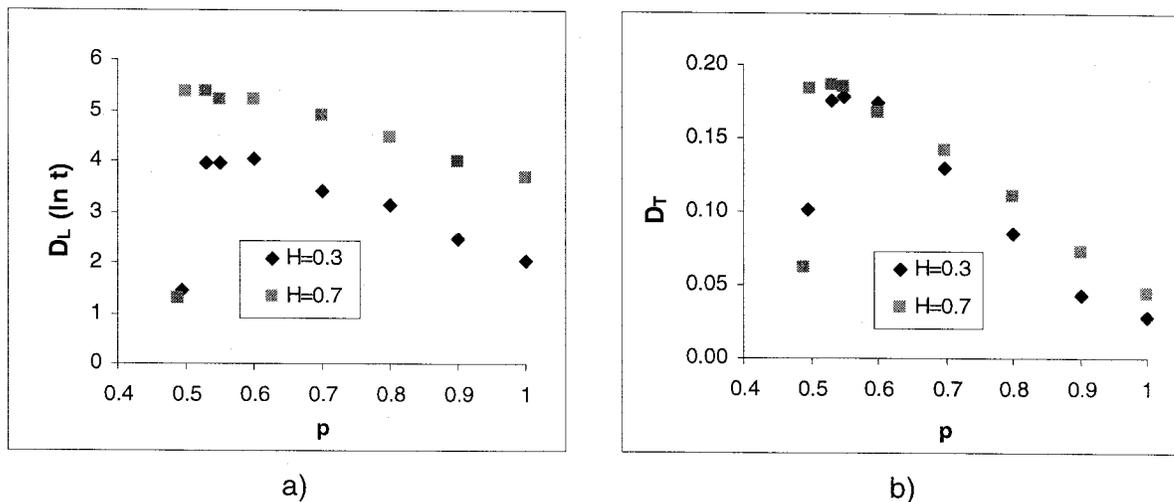


Figure 6.8 : Dispersion dans les réseaux isotropes en fonction de p (réseaux 100x100 avec $H=0,7$ et $\sigma_{\ln K}=0,5$) a) Longitudinale et b) Transversale

La figure 6.8 montre également que D_L augmente avec l'augmentation de H pour un même p (sauf à $p=p_c$). La figure C-3 de l'annexe C, présentant le comportement des temps de parcours moyens (élevés au cube) et de leurs variances, révèle que cette augmentation est encore une fois attribuable au poids très important accordé au temps de parcours dans l'équation 4.8 ($D_L = \sigma_t^2 * L^2 / 2 * \langle t \rangle^3$). En effet, $\langle t \rangle^3$ et σ_t^2 diminuent à mesure que H augmente puisque les valeurs similaires de K se regroupent spatialement. Les pentes des courbes de α_L et α_T en fonction de p diminuent avec l'augmentation de H , ce qui fait que les deux courbes se croisent à $p=0,7$. Les résultats obtenus avec des réseaux simulés à $p=0,8$ pour différentes tailles ont indiqué que les dispersivités longitudinales varient en fonction de L avec une pente proche de 0,1.

6.5 Résultats obtenus avec des champs fBm isotropes ayant une longueur de corrélation finie

Dans la section précédente, le paramètre f_{co} de l'équation 6.8 était considéré nul puisque la longueur de corrélation l_{co} était supposée infinie ($1/\infty=0$). Dans cette section, nous avons imposé une limite de façon à reproduire des corrélations courtes distances pour pouvoir obtenir des réseaux semblables à ceux du chapitre 5. Cette limite, correspondant à la distance à laquelle les données ne sont plus corrélés, équivaut donc à la portée du variogramme.

Une procédure identique à celle du chapitre 5 a été utilisée : les champs ont été générés avec une moyenne nulle et une variance unitaire, puis les variogrammes ont été vérifiés individuellement à l'aide de l'erreur quadratique (RMSE). Un coefficient de Hurst de 0,9 a été utilisé pour générer les réseaux, puisque c'est avec cette valeur que les variogrammes se rapprochaient le plus du variogramme sphérique pour la longueur de corrélation désirée. En effet, lorsque des champs sont générés avec une corrélation de longueur finie, leurs variogrammes ne ressemblent pas à celui pour lequel aucune limite n'a été imposée. Ils ressemblent à des variogrammes sphériques et c'est pourquoi les résultats pourront être comparés à ceux obtenus avec la méthode géostatistique. Le nombre de réseaux conservés, tout comme pour les simulations séquentielles gaussiennes, diminue avec l'augmentation de la longueur de corrélation. Toutefois, le tri des champs n'a apporté encore une fois aucun changement significatif aux valeurs des différents paramètres, incluant la dispersion. Nous avons donc conservé l'ensemble des réseaux générés à chaque fois.

Des réseaux dont la taille varie de 60x60 à 300x300 et ayant des longueurs de corrélation (λ) allant de 10 à 60 ont été simulés. Les valeurs des différents paramètres obtenues avec les champs fBm sont beaucoup moins dispersées que celles obtenues avec la méthode géostatistique, probablement parce que les champs à $H=0,9$ sont assez semblables entre eux. Le comportement des paramètres d'écoulement et de transport en fonction de la limite l_{co} (ou longueur de corrélation) est en accord avec celui trouvé pour les réseaux provenant des simulations séquentielles gaussiennes. Les quatre graphiques de la figure 6.9 présentent les valeurs des paramètres p_c , X^A , X^B , K_e et D_L obtenues avec des réseaux 100x100 en fonction de la longueur de corrélation pour $\sigma_{ln K}=0,5$.

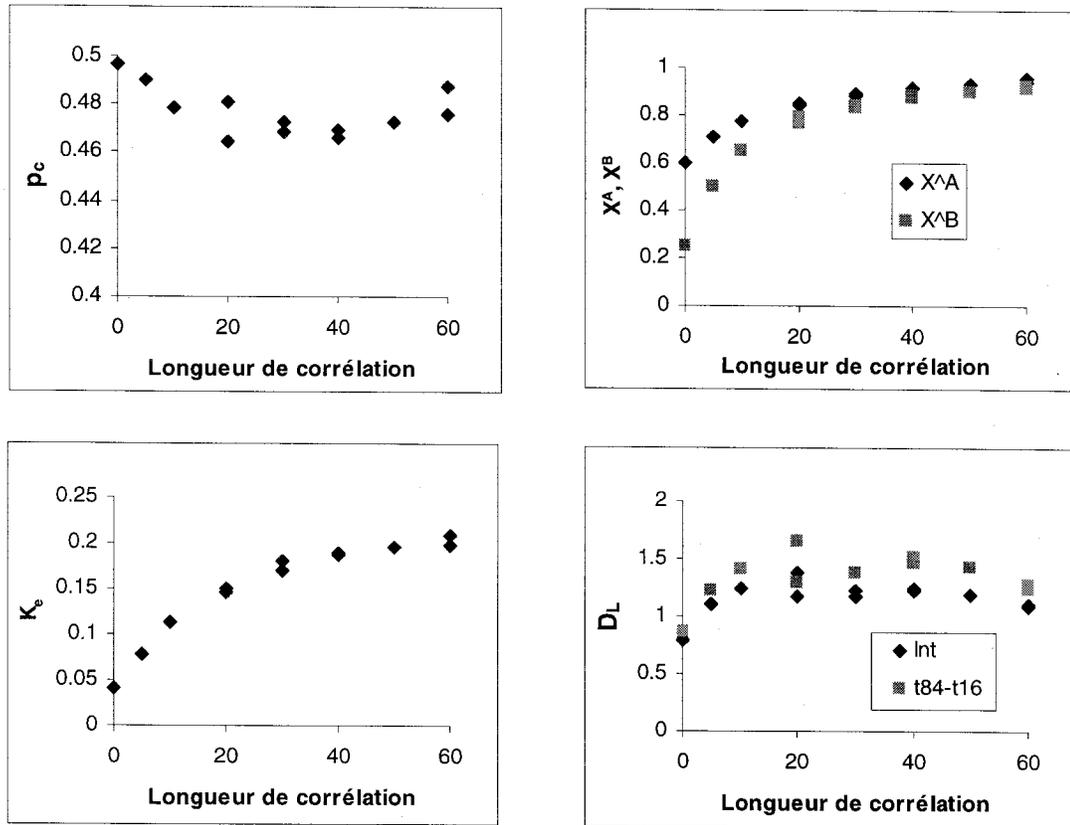


Figure 6.9 : Comportement de p_c , X^A , X^B , K_e et D_L en fonction de λ

Le seuil de percolation diminue effectivement jusqu'à $\lambda=30$ comme pour les champs générés par simulations séquentielles gaussiennes, mais les simulations effectuées avec des λ plus élevées montrent que le seuil reste stable ou même remonte (comme dans le cas des réseaux 100x100). Il ne diminue donc pas continuellement comme on aurait pu le croire avec des simulations réalisées seulement avec $0 < \lambda < 30$. Tout comme dans le cas de p_c en fonction de H , les valeurs restent toujours proches de 0,5. Les paramètres X^A , X^B et K_e ont exactement les mêmes comportements que ceux obtenus avec la méthode géostatistique : ils augmentent avec λ , d'abord rapidement, puis beaucoup plus lentement. Les valeurs de X^A et X^B deviennent rapidement très semblables. En fait, elles sont quasiment identiques lorsque $\lambda=30$ et ce, pour toutes les tailles de réseaux. Ceci indique encore une fois que le nombre de culs-de-sac diminue rapidement avec l'augmentation de la corrélation. Par exemple, pour des réseaux 200x200 avec $\lambda=30$, le rapport λ/L n'est que de 0,15 et les valeurs X^A et X^B sont presque identiques (la différence est de 6,8%). La dispersion longitudinale, comme le seuil de percolation, semble avoir un comportement différent avant et après $\lambda=30$. Elle augmente jusqu'à $\lambda=30$

puis reste stable ou même diminue légèrement. Les graphiques des temps de parcours (élevés au cube) et de leurs variances en fonction de λ , présentés à la figure C-4 (annexe C), aident à comprendre ce phénomène : les deux paramètres diminuent rapidement au départ, puis se stabilisent. Cette quasi stabilisation est vraisemblablement le résultat de l'utilisation de réseaux de tailles finies, puisque lorsque le rapport λ/L devient supérieur à $1/3$, les particules ne peuvent plus échantillonner toute la variabilité des réseaux (non ergodicité des champs de vitesses).

La figure 6.10 montre le comportement des exposants β_B/v , e/v et χ , soit les exposants liés aux paramètres X^B , K_e et D_L , en fonction de la longueur de corrélation imposée. Cette figure permet de constater que les valeurs de β_B/v et e/v diminuent avec l'augmentation de λ , rapidement aux petites longueurs de corrélation, lentement ensuite. Ces tendances avaient été identifiées avec les champs de K générés par géostatistique, sans toutefois que des valeurs fiables aient pu être déterminées. Si la figure 6.10 montrait le résultat de simulations effectuées avec des longueurs de corrélation beaucoup plus élevées, on verrait les valeurs tendre vers celles obtenues avec les champs de longueur de corrélation infinie ($\lambda=\infty$). Toutefois, χ atteint rapidement un plateau dont la valeur est celle des réseaux ayant une longueur de corrélation infinie ($\chi\approx 1$). L'atteinte aussi rapide du plateau suggère que les (légers) changements dans le comportement de X^B et de K_e n'ont pas vraiment d'influence sur celui de la dispersion. Nous croyons que tous les exposants atteignent des plateaux à une certaine valeur de λ (avant $\lambda=\infty$), plus ou moins grande.

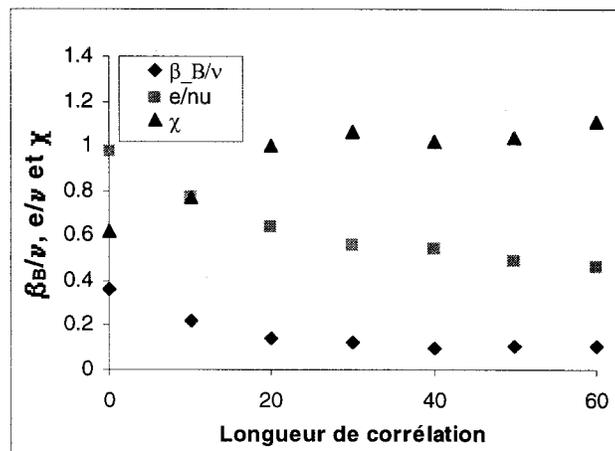


Figure 6.10 : Comportement des exposants des paramètres X^B , K_e et D_L

Les réseaux ont également été simulés à des fractions de liens ouverts supérieures au seuil de percolation ($p_c < p < 1$). La figure 6.11 présente les résultats de D_L et D_T pour trois longueurs de corrélation différentes ($\lambda=20, 40$ et 60). Cette figure montre encore une fois que les valeurs de dispersion augmentent à mesure que p diminue, puis chutent à proximité du seuil de percolation (à l'exception de D_T pour $\lambda=20$). La comparaison des valeurs du coefficient de dispersion et de dispersivité avec celles des réseaux générés par géostatistique a montré qu'elles correspondent parfaitement. La figure C-5 de l'annexe C présente le comportement des temps de parcours moyen et de la variance pour $\lambda=20$ et 60 : ils diminuent à la fois avec l'augmentation de la fraction de liens ouverts et de la longueur de corrélation puisque la tortuosité des chemins diminue. Les écarts entre les valeurs obtenues avec $\lambda=20$ et 60 sont assez faibles pour les deux paramètres (sauf au seuil de percolation) et s'estompent rapidement à mesure que p augmente. Les valeurs de D_L sont en conséquence assez similaires pour toutes les longueurs de corrélations (sauf à proximité du seuil de percolation), mais les valeurs des réseaux avec $\lambda=20$ sont légèrement différentes. Ceci est normal puisque la dispersion a montré qu'elle atteignait un plateau dès $\lambda=30$ (soit $\lambda/L \geq 1/3$). Le comportement de la dispersivité est identique à celui de la dispersion et n'est donc pas présenté ici. Les représentations log-log de α_L en fonction de la distance parcourue ont indiqué que les pentes varient de 1,33 jusqu'à 1,58 ($10 \leq \lambda \leq 60$), ce qui est étonnant puisque les exposants obtenus avec des champs ayant des longueurs de corrélation infinies ($0 < H < 1$) étaient d'environ 1,3, donc similaires à ceux des réseaux non corrélés. Le rapport α_T/α_L diminue avec l'augmentation de p : de 0,1 à $p=p_c$, il diminue jusqu'à 0,01 en moyenne à $p=1$.

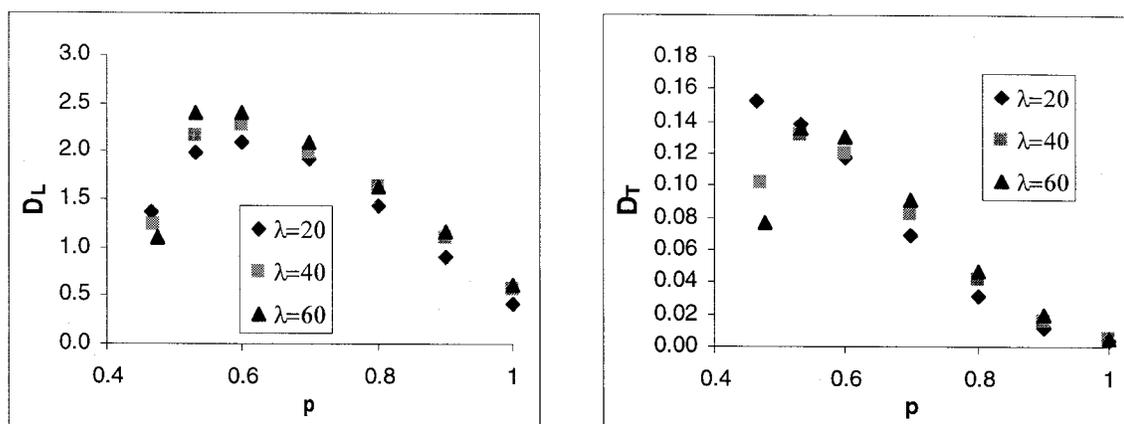


Figure 6.11 : Comportement de la dispersion en fonction de p pour $\lambda=20, 40$ et 60

6.6 Résultats obtenus avec des champs fBm anisotropes ayant une longueur de corrélation infinie

Les caractéristiques hydrodynamiques des réservoirs souterrains sont fréquemment corrélées, mais aussi anisotropes en raison du caractère orienté de nombreuses formations géologiques. Nous avons donc modifié le rapport ω_2/ω_1 de l'équation 6.8 afin de générer des champs fBm stratifiés dans le sens de l'écoulement (ω_2 et ω_1 étant les composantes du vecteur d'onde dans les directions respectivement parallèle et perpendiculaire à l'écoulement). En effet, modifier le rapport ω_2/ω_1 est directement identifiable à l'imposition du même ratio x/y d'anisotropie de la covariance dans l'espace réel. Ceci peut être démontré par anamorphose des coordonnées. Plus le rapport ω_2/ω_1 est élevé, plus le réseau est stratifié parallèlement à l'écoulement et donc plus l'anisotropie du système est importante.

Des champs anisotropes ayant des rapports ω_2/ω_1 de 2, 4 et 8 (correspondant respectivement à des anisotropies faible, moyenne et élevée) ont été générés. La figure 6.12 présente deux exemples de squelettes obtenus avec des rapports ω_2/ω_1 de 2 et de 4.

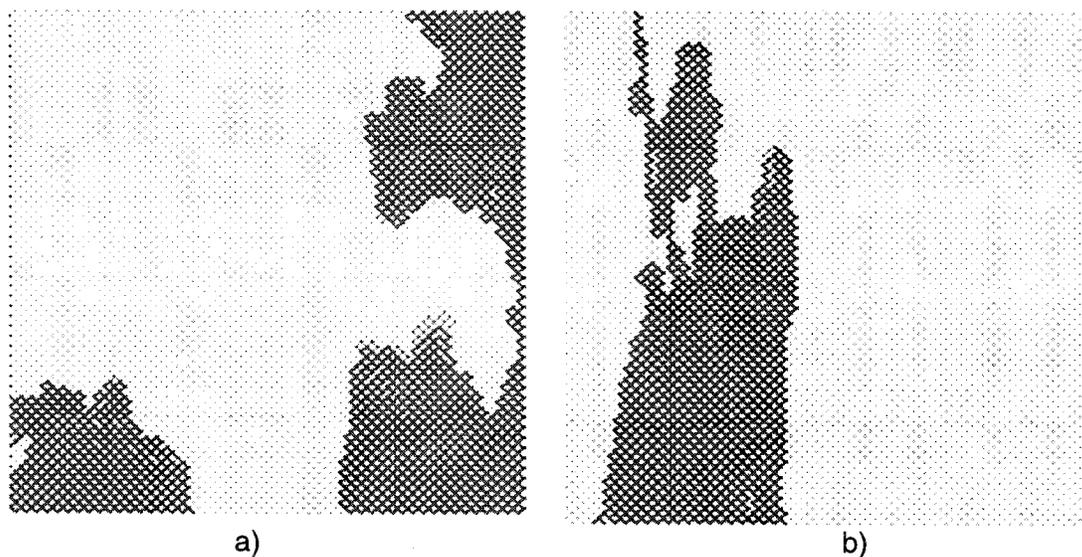


Figure 6.12 : Réseaux 100x100 anisotropes à $H=0,7$ a) $\omega_2/\omega_1=2$ ($p_c \approx 0.3$) et b) $\omega_2/\omega_1=4$ ($p_c \approx 0.2$)

Les résultats des paramètres d'écoulement p_c , X^A , X^B et K_e pour des simulations réalisées au seuil de percolation avec différentes tailles de réseaux et un coefficient de Hurst de

0,7 sont présentés en annexe C (figure C-6). Les résultats des réseaux isotropes y ont été ajoutés pour fins de comparaison. L'augmentation de l'anisotropie des réseaux fait diminuer le seuil de percolation car plus la stratification dans le sens de l'écoulement est importante, plus il est facile de se créer un chemin de haut en bas. A l'inverse, l'anisotropie augmente le nombre de culs-de-sac ainsi que la conductivité hydraulique équivalente des réseaux.

Les résultats sur les paramètres de transport (D_L , D_T , α_L et α_T) sont présentés à la figure 6.13. La dispersion longitudinale, contrairement à la transversale, semble assez peu affectée par l'anisotropie, sauf lorsque celle-ci est élevée. Les résultats pour les grands réseaux ($L \geq 150$) montrent que le coefficient de dispersion longitudinale des réseaux isotropes est plus faible que celui des réseaux pour lesquels l'anisotropie est faible ou moyenne, en raison de la facilité pour les particules à voyager à l'intérieur des strates (plus de possibilités aux nœuds).

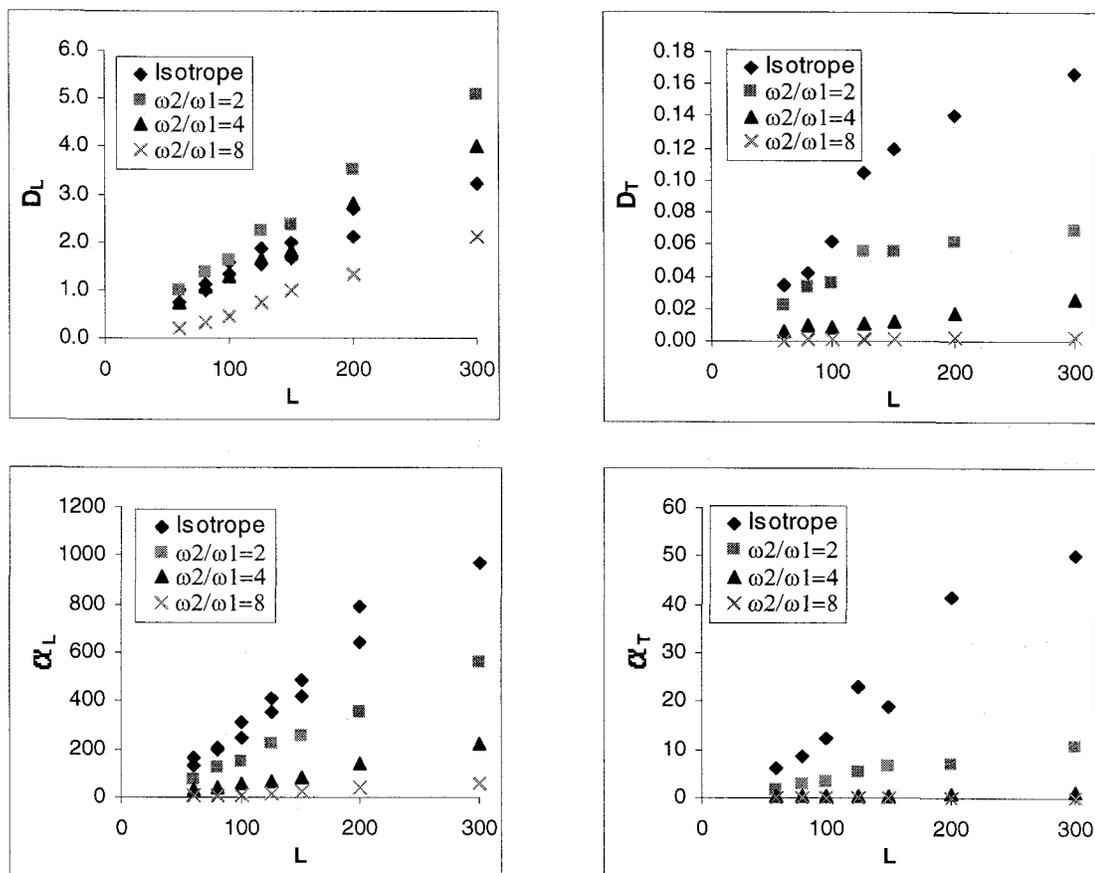


Figure 6.13 : Comportement des paramètres D_L , D_T , α_L et α_T au seuil de percolation pour des réseaux avec $H=0,7$ pour les trois rapports ω_2/ω_1 ($\sigma_{inK}=1$)

Cependant, lorsque l'anisotropie devient très élevée, les particules trouvent facilement une série de liens directs et rapides, provoquant la diminution de D_L . La dispersion transversale diminue par contre rapidement avec l'augmentation du rapport ω_2/ω_1 . Ceci provient du fait que les particules ne peuvent pas traverser les « barrières » de contrastes de perméabilité créées par l'anisotropie (strates parallèles au sens de l'écoulement) et par conséquent, les valeurs de $\langle y \rangle$ restent toujours faibles. Les valeurs de α_L et de α_T sont très faibles lorsque l'anisotropie est forte à cause de la faible dispersion et des vitesses élevées ($\alpha = D/\langle u \rangle$) présentes dans les strates verticales transmissives. Les rapports α_T/α_L sont en moyenne respectivement de 0,025, 0,007 et 0,002 pour les rapports ω_2/ω_1 de 2, 4 et 8 (comparativement à 0,055 pour le cas isotrope).

La figure 6.14 illustre le comportement de la dispersion et de la dispersivité de réseaux 100×100 avec $H=0,7$ pour différentes fractions de liens ouverts (p). Il est intéressant de constater que les tendances sont renversées à mesure que l'anisotropie augmente. En effet, D_L , D_T , α_L et α_T dans le cas isotrope augmentent à mesure que p tend vers p_c (sauf à proximité du seuil où une chute se produit) alors qu'à partir de $\omega_2/\omega_1=4$, les valeurs diminuent continuellement (et sans chute). La figure C-7 (annexe C) montre que les temps de parcours et leurs variances augmentent à mesure que p augmente, probablement à cause du fait que les particules ont de plus en plus de possibilités à chaque nœud et surtout qu'elles peuvent démarrer leurs trajets à de multiples endroits. Plus l'anisotropie augmente, plus les valeurs de D_L sont élevées pour une même fraction p imposée (c'est-à-dire $p > p_c$ puisque le seuil de percolation diminue avec l'augmentation de ω_2/ω_1) tandis que pour D_T c'est plutôt l'inverse (sauf pour $p \geq 0,9$). Les rapports α_T/α_L diminuent généralement avec l'augmentation de p lorsque les réseaux sont isotropes ou que l'anisotropie est faible ; ils atteignent 0,01 à $p=1$. Ces rapports restent toutefois constants à 0,01 et 0,007 dans les cas d'anisotropies moyenne et élevée, probablement parce que les couloirs transmissifs privilégiés dans lesquels voyagent les particules sont présents depuis l'atteinte du seuil de percolation jusqu'à l'ouverture totale du réseau lorsque l'anisotropie est suffisamment élevée.

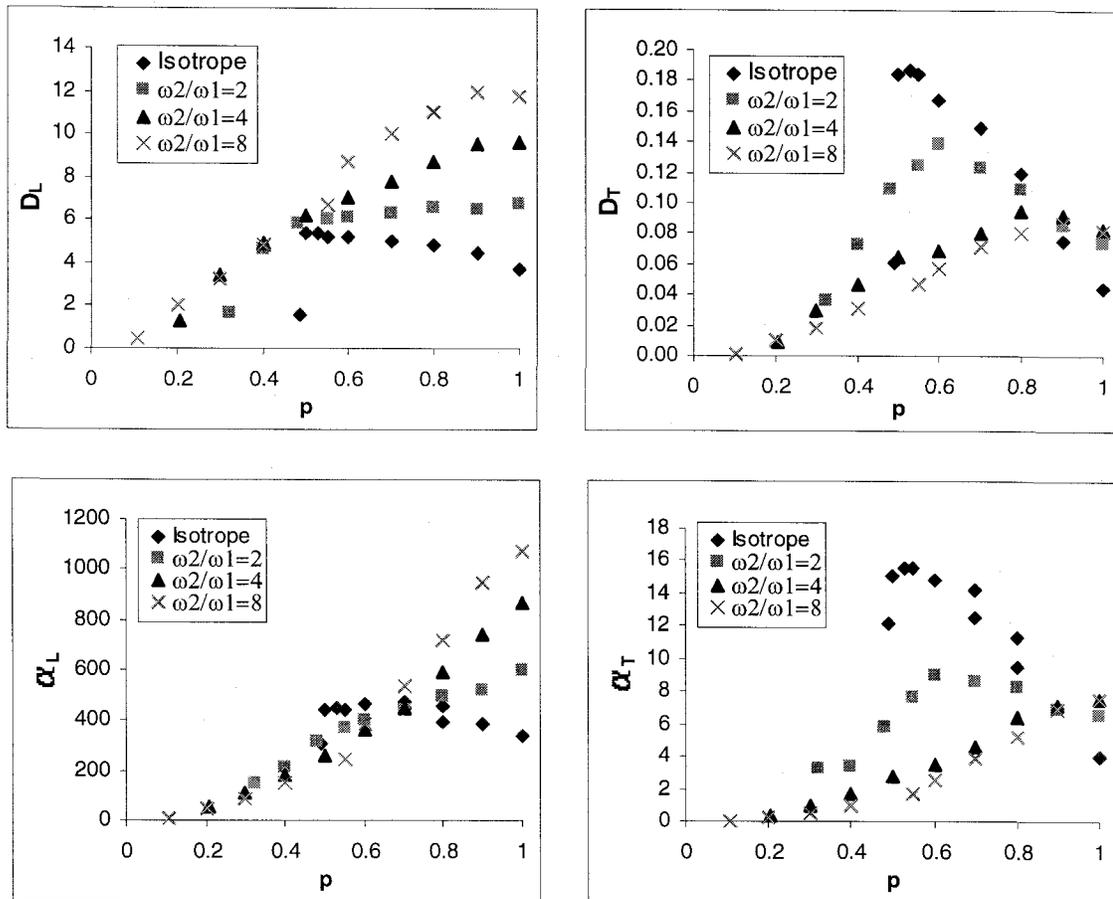


Figure 6.14 : Comportement de D_L , D_T , α_L et α_T en fonction de p pour des réseaux 100×100 à $H=0,7$

Les valeurs de α_L en fonction de la distance parcourue obtenues avec $H=0,7$ ont été comparées aux valeurs recueillies dans la littérature à propos des essais de traçage. Comme les valeurs de α_L sont de plus en plus faibles à mesure que l'anisotropie augmente, l'adéquation des valeurs de terrain avec celles des valeurs correspondant à $\omega_2/\omega_1=2$ est très bonne, mais les valeurs obtenues avec $\omega_2/\omega_1=4$ et 8 sont trop faibles. Ceci suggère que l'anisotropie de nombreux aquifères pourrait être faible ou moyenne. Cependant, dans les informations collectées, peu d'essais de traçage ont été réalisés dans les milieux fracturés où l'anisotropie serait susceptible d'être élevée.

6.7 Discussion

Le processus fBm engendre des réseaux dont les valeurs de conductivité hydraulique sont corrélées à toutes les échelles et dont la structure est par conséquent très

compacte. Dès que $H > 0,1$, les valeurs de dimension fractale de l'amas et du squelette sont maximales ($d_f = d_B = 2$, correspondant à $\beta = \beta_B = 0$), indiquant que la structure fractale est perdue. Les coefficients de dispersion perdent également rapidement leur comportement fractal pour devenir proportionnel à la taille des réseaux ($D_L \sim D_T \sim L$). L'obtention d'exposants χ non entiers pour l'intervalle $0 < H < 1/2$ serait attribuable au fait que le regroupement spatial des valeurs de conductivité hydraulique serait plus lent que le regroupement géométrique des liens (acquisition de la compacité). En effet, même si le squelette n'est plus fractal, l'écoulement y reste très chenalisé (donc tortueux), entraînant une dispersion pseudo fractale (dû à l'utilisation de la méthode basée sur les distributions temporelles donnant beaucoup de poids au temps de parcours).

L'utilisation d'une limite l_{co} pour générer des champs ayant dès lors une longueur de corrélation finie a permis de déterminer les exposants des différents paramètres en fonction de la longueur de corrélation. Seules les tendances avaient pu être cernées avec les champs simulés par géostatistique, probablement à cause de la plus grande variabilité de ces champs pour une même longueur de corrélation. Ceci laisse d'ailleurs sous-entendre que les résultats des champs fBm pourraient ne pas représenter les extrêmes, dont l'importance est parfois cruciale (par exemple lors de la prévision des risques de fuite d'un site de stockage de déchets radioactifs). Les exposants β_B/ν et e/ν (associés à X^B et K_e) diminuent avec l'augmentation de la longueur de corrélation λ tandis que χ ($D_L \sim L^\chi$) augmente et ceux-ci tendent bien vers les valeurs trouvées avec les champs ayant une longueur de corrélation infinie à mesure que λ augmente.

L'introduction d'une anisotropie diminue significativement à la fois α_L et α_T puisqu'elle entraîne la formation de strates parallèles à l'écoulement qui permettent aux particules de sortir du système rapidement. La dispersion transversale est plus sensible que la dispersion longitudinale au rapport ω_2/ω_1 étant donné que les strates forment des barrières qui empêchent les particules de circuler latéralement. Nos simulations ont confirmé que le rapport $\alpha_T/\alpha_L = 0,1$ couramment utilisé dans la pratique est plutôt adéquat dans le cas de sites isotropes puisque l'ensemble de nos résultats pour ce rapport variait entre 0,01 et 0,1, mais nettement trop élevé dans le cas de sites anisotropes.

La comparaison des résultats de dispersivité obtenus avec les résultats des essais de traçage répertoriés par Gelhar *et al.* (1992) a montré que les champs générés avec un processus fBm, quelle que soit la valeur du coefficient de Hurst, ont un comportement dispersif cohérent avec l'observation. Les réseaux au seuil de percolation et avec $H \geq 0,7$ sont ceux qui se rapprochent le plus de la relation empirique largement utilisée $\alpha_L = 0,1 * L$. Enfin, la comparaison des résultats obtenus avec des champs anisotropes montrerait que la majorité des aquifères seraient faiblement anisotropes, au moins en milieu poreux. La faible quantité d'information recueillie sur les aquifères fracturés ne permet toutefois pas de se prononcer.

Un des défauts majeurs de la méthode utilisée pour générer les champs fBm est qu'il est impossible de les conditionner sur des données. Pour générer des champs conditionnés corrélés sur de longues distances, il faudrait en conséquence utiliser la méthode des simulations séquentielles gaussiennes avec un variogramme de puissance, mais cette procédure est plus lourde puisque le temps de calcul est nettement plus élevé. De plus, les champs fBm semblent être beaucoup moins variables que ceux issus d'une méthode géostatistique, ce qui représente un inconvénient lorsque l'objectif d'une étude consiste à déterminer stochastiquement les propriétés hydrauliques de réseaux ayant une structure spatiale donnée.



7 UTILISATION DU MODÈLE DE PERCOLATION POUR INTERPRÉTER LES ESSAIS DE TRAÇAGE

Afin d'étudier l'influence des caractéristiques des essais de traçage réalisés sur la valeur du coefficient de dispersion estimée, trois types d'essais de traçage ont été simulés pour différentes conditions dans des réseaux théoriques spatialement corrélés. Ces essais de traçage sont réalisés soit à partir d'une source sans débit d'injection avec des puits d'observation (type 1, souvent appelé « traceur environnemental »), soit à partir d'un puits d'injection avec des puits d'observation (type 2) ou soit à partir d'un puits d'injection et un puits de pompage (type 3, appelé « doublet »). Leurs résultats ont été comparés en fonction de la longueur de corrélation des champs utilisés, de la fraction des liens ouverts et des débits choisis, et également avec ceux obtenus lorsque le système correspond à un perméamètre (injections à tous les nœuds ouverts de la première rangée). Ces travaux se veulent un pas dans la direction de l'applicabilité de la théorie de percolation aux cas pratiques, car les conditions habituelles d'utilisation de cette théorie en hydrogéologie sont généralement celles de problèmes synthétiques qui sont assez éloignés des cas réels.

Les simulations ont été réalisées avec des champs générés avec un processus fBm ayant des longueurs de corrélation infinies et finies. La raison de ce choix est que les champs fBm sont beaucoup plus rapides à générer que ceux obtenus par simulations séquentielles gaussiennes. Des réseaux de différentes tailles pour toute la gamme $p_c \leq p \leq 1$ ont été étudiés. Les essais ont tous été réalisés sur des réseaux à hétérogénéité moyenne ($\sigma_{ln k}=1$) avec un gradient régional très faible ($i=0,0001$, soit deux ordres de grandeur inférieur à celui précédemment utilisé) pour que le flux régional n'ait aucune influence sur l'écoulement engendré par le ou les puits. Dès que $p < 1$, il se peut que la localisation du puits imposée *a priori* ne soit pas située sur un lien ouvert et cette éventualité augmente rapidement lorsque p tend vers le seuil de percolation. Le modèle a

donc été modifié pour que le ou les puits soient toujours repositionnés sur le lien le plus proche de l'emplacement imposé initialement. Dans un premier temps, présupposant une influence néfaste de ce changement de localisation sur les résultats, les réseaux possédant des puits ayant bougés de plus de 10 liens horizontalement ou verticalement ont été éliminés (ces puits pouvaient être trop proches des frontières nord et sud ou ne plus avoir assez de distance entre eux). Cependant, à l'usage, la comparaison des résultats avec et sans élimination a montré que l'influence était très faible. Par conséquent l'ensemble des réseaux a toujours été conservé afin d'améliorer la représentativité statistique des résultats obtenus.

L'injection et le pompage sont incorporés dans l'équation d'écoulement via le terme d'apport (ou de perte) de l'équation 2.1. Les champs de charges hydrauliques sont en conséquence complètement modifiés par rapport à ceux obtenus jusqu'à maintenant. Le débit d'injection correspond à un terme positif (+Q) et le débit de pompage à un terme négatif (-Q). Si les unités de mètres et de secondes sont utilisées pour définir la taille des liens et les conductivités hydrauliques, les unités du débit sont en m^2/s (puisque l'épaisseur de l'aquifère est considérée négligeable). La limite sud de chaque réseau est subdivisée en sous-zones régulières afin de discriminer les particules qui y sont récupérées. Ceci permet à la fois de simuler la récupération des particules à des puits d'observation fictifs et de juger des effets transverses à l'écoulement principal sur le transport. Seuls les intervalles qui reçoivent plus de 30 particules servent aux calculs car en dessous de ce nombre, une valeur représentative de la dispersion ne pourrait pas être obtenue pour cet intervalle.

La section 7.1 décrit les essais réalisés et leurs résultats sont présentés à la section 7.2. Une comparaison des valeurs de dispersivités obtenues avec le modèle de percolation et avec différentes relations théoriques et empiriques trouvées dans la littérature est effectuée à la section 7.3.

7.1 Description des essais de traçage simulés

7.1.1 Type 1 : Traceur environnemental

L'essai de type « traceur environnemental » correspond au cas d'une contamination ponctuelle dont la source a un débit négligeable par rapport à celui présent sur le site (régional). Les particules sont injectées en un seul endroit, en amont du site, et celles-ci sont récupérées à la sortie des réseaux. La figure 7.1 illustre ce type d'essai. La base des réseaux est divisée en intervalles (entre 25 et 30) de façon à simuler une rangée de puits d'observation qui permettraient de prélever des échantillons après un temps donné. Un coefficient de dispersion longitudinale peut alors être calculé pour chacun des intervalles. Ceci correspond en fait au calcul du coefficient de dispersion entre deux points, le point de sortie des particules étant toutefois représenté par un intervalle constitué de 3 ou 4 liens. Un coefficient de dispersion transversale a également été déterminé pour chaque réseau en calculant la moyenne pondérée des valeurs de D_T pour chacun des intervalles. La distance transversale moyenne utilisée dans le calcul correspond à la distance entre le milieu des intervalles et le puits d'injection et la pondération est au prorata du nombre de particules récupérées dans chacun des intervalles. À proximité du seuil de percolation, peu de chemins sont disponibles et les particules se retrouvent presque toutes dans les mêmes intervalles. Dès lors pour un intervalle donné, les résultats de D_L sont obtenus avec beaucoup moins de réseaux et le D_T n'a pas été calculé. Les médianes des populations de D_L et de D_T sont supposées représentatives de la dispersion expérimentée par les particules sur les réseaux.

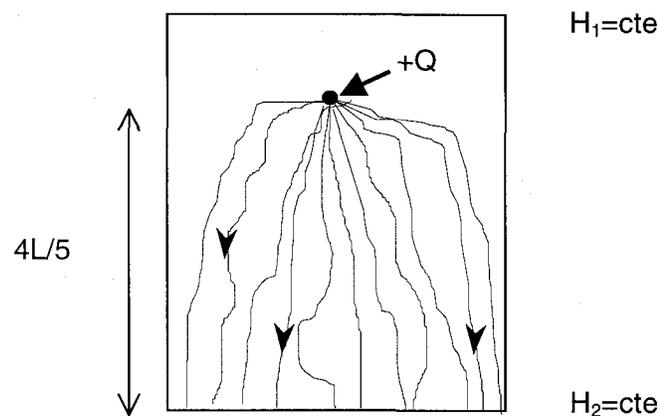


Figure 7.1 : Essai de traçage de type 1 ou 2 (type 1 : $Q=0$; type 2 : $Q>0$)

7.1.2 Type 2 : Injection avec puits d'observation

Cet essai est similaire au type 1, hormis le fait que la source sans débit est remplacée par un puits d'injection dont le débit est non négligeable par rapport au flux régional. Il est nécessaire pour éviter de subir les influences des frontières d'éloigner le puits de la limite nord. L'emplacement du puits d'injection a donc été imposé à $L/5$ (L représentant la longueur des réseaux) de cette frontière. Le coefficient de dispersion longitudinal est ainsi calculé sur la distance $4 \cdot L/5$. Comme dans le cas du traceur environnemental, la récupération des particules se fait au bas des réseaux et des valeurs de D_L et de D_T sont obtenues pour chaque réseau.

7.1.3 Type 3 : Doublet

L'essai de type « doublet » comporte un puits d'injection et un puits de pompage, situés respectivement en amont et en aval des réseaux. Seules les particules qui ressortent par le puits de pompage sont prises en compte pour le calcul de D_L . La quantité récupérée croît évidemment à mesure que le débit augmente. Un débit égal pour les puits d'injection et de pompage a été utilisé et leur position initiale selon l'axe est-ouest est la même (celle-ci peut toutefois varier légèrement dès que $p < 1$ en raison du repositionnement évoqué plus haut). Les puits d'injection et de pompage sont situés chacun à $L/5$ des frontières nord et sud des réseaux de façon à ce que les cônes d'injection et de rabattement ne soient pas trop importants aux frontières du réseau. Le coefficient de dispersion longitudinal est donc calculé sur la distance $3 \cdot L/5$ (voir figure 7.2). Le coefficient de dispersion transversale n'a pas été calculé.

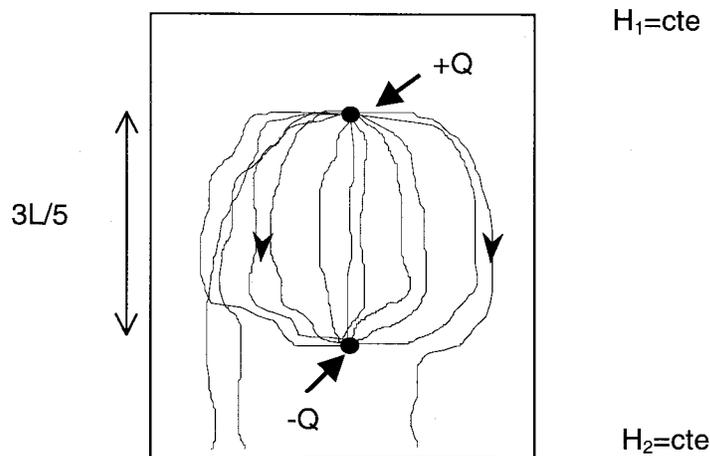


Figure 7.2 : Type 3 : Doublet

7.2 Résultats des essais de traçage

Les simulations ont été effectuées sur des réseaux ayant des longueurs de corrélation de 20, 40, 60 et infinie, pour plusieurs fractions de liens ouverts p . De plus, quatre débits ont été utilisés : 0,01; 0,1; 0,2 et 0,3. Tous les résultats présentés ont été obtenus avec des réseaux 100x100 et la méthode des logarithmes (la méthode des percentiles fournit toutefois des résultats très semblables). Les résultats obtenus à $p=1$ sont présentés séparément, étant donné que lorsque tous les liens sont ouverts les tendances sont particulièrement bien définies et ceux-ci constituent une base de référence pour les cas de réseaux à $p<1$.

7.2.1 $p=1$

Les simulations réalisées avec tous les liens ouverts ($p=1$) ont montré que les valeurs de D_L calculées dans les différents intervalles (où le nombre de particules est supérieur à 30) sont très similaires. Étant donné que nos tests ont indiqué que les différences due à l'emplacement des puits étaient également faibles, les résultats présentés ont été obtenus avec le ou les puits placés dans l'intervalle du centre et seul cet intervalle a servi à calculer D_L .

Pour le calcul de la dispersivité ($\alpha=D/\langle u \rangle$), la moyenne arithmétique des vitesses a encore une fois été utilisée pour les trois types d'essais même si des tests ont montré que la distribution des vitesses dans le cas des doublets est légèrement asymétrique et que cette tendance s'accroît avec l'augmentation du débit. Cette procédure permet toutefois de conserver une homogénéité dans la méthode de calcul de la dispersivité et comme cette asymétrie n'est jamais trop prononcée, la moyenne arithmétique continue de caractériser assez bien les vitesses globales.

Les résultats de D_L et α_L obtenus pour les trois différents types d'essais en fonction du débit pour des réseaux 100x100 ayant une longueur de corrélation de 20 sont présentés à la figure 7.3. Deux caractéristiques sont remarquables : le type d'essai réalisé a une influence majeure sur les valeurs de D_L et α_L estimées et ces valeurs, pour un même type d'essai, augmentent rapidement avec le débit. Sauf exception (cas de l'essai de type 2 avec $Q=0,3$), les trois types d'essais de traçage fournissent des valeurs de D_L et α_L plus

faibles que celles obtenues dans les cas de perméamètres des chapitres précédents. Ceci est facilement compréhensible puisque dans le perméamètre, la quasi totalité des liens est visitée alors que pour une contamination ponctuelle, seule une partie des réseaux est visitée par les particules. Les valeurs obtenues ne peuvent nécessairement pas être représentatives de l'ensemble des liens des réseaux. Les valeurs obtenues avec le type 3 sont plus élevées que celles obtenues avec le type 2 car comme l'écoulement est fortement contraint par le doublet de puits, les particules recueillies au puits de pompage ont échantillonné une beaucoup plus grande portion du réseau. En effet, lorsque des puits d'observation sont utilisés (types 1 et 2), ceux-ci ne recueillent, statistiquement parlant, que les particules ayant parcouru un seul chemin. Sur les figures, les cas des essais de type 1 et type 2 sont regroupés puisque le type 1 n'est qu'un cas particulier (à débit nul) du type 2.

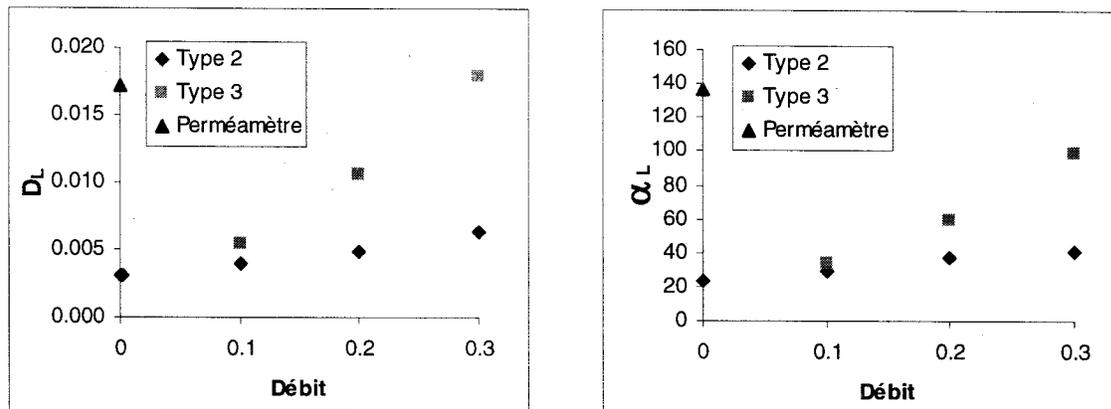


Figure 7.3 : Valeurs de D_L et α_L en fonction du débit utilisé pour trois types d'essais avec $\lambda=20$ à $p=1$

L'accroissement du débit provoque une augmentation des valeurs des coefficients de dispersion car il engendre des temps de parcours pour une même distance beaucoup plus courts (encore une fois à cause du facteur $\langle t \rangle^3$ au dénominateur de l'équation 4.8). L'augmentation du débit a également pour conséquence de faire sortir plus de particules par le puits de pompage : en moyenne, nous avons trouvé que 70% des particules sortent au puits lorsque $Q=0,2$, 85% lorsque $Q=0,3$ et 90% lorsque $Q=0,4$. Cependant, l'influence du pompage et de l'injection est trop importante à $Q=0,4$ pour la distance employée entre les puits et les frontières et donc ce débit n'a pas été retenu.

Des réseaux de plus grande taille ($n>100$) ont été simulés pour vérifier que l'augmentation des valeurs de D_L et α_L n'était pas due à la taille des réseaux. Les mêmes

tendances ont été observées. Toutefois, les réseaux dont la taille est supérieure à 100x100 montrent des valeurs de D_L et α_L obtenues pour les essais de type 2 qui augmentent un peu plus lentement (courbes convexes) que celles trouvées pour les réseaux de taille inférieure. Les courbes correspondant aux essais de type 3 restent concaves.

Les valeurs du coefficient de dispersion obtenues avec les réseaux ayant des longueurs de corrélation de 40 et de 60 sont présentées à la figure 7.4. Elles sont presque identiques à celles obtenues avec $\lambda=20$. Ceci provient certainement du fait que l'analyse le long d'un seul axe (ou presque) ne permet pas d'échantillonner la totalité de la variance.

Les figures 7.3 et 7.4 mettent en évidence qu'il serait important lors de la modélisation de sites réels de tenir compte d'une fourchette de valeurs assez large pour pouvoir englober des valeurs nettement supérieures à celles prédites par les essais réalisés sur le terrain (même si la prédiction est faite pour la même distance que celle sur laquelle s'est déroulé l'essai de traçage), entre autres si le type d'essai utilisé est de type 1 ou même pour les essais de types 2 et 3 puisqu'il pourrait s'avérer être difficile de déterminer *a priori* le débit qui permettrait de fournir la valeur maximale possible de la dispersion. Ceci permettrait de prédire avec un intervalle de confiance les temps d'arrivée des solutés sur une distance plus grande que celle échantillonnée lors de l'essai.

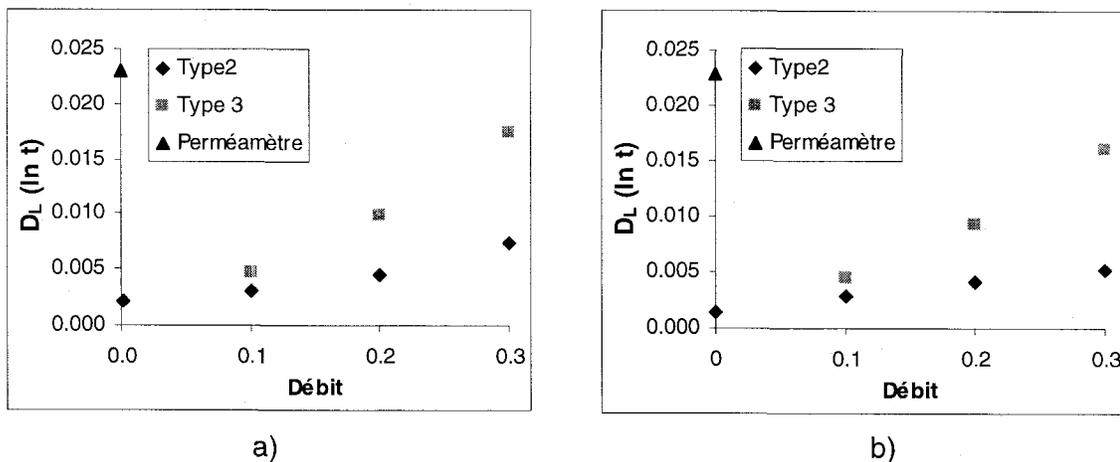


Figure 7.4 : Valeurs de D_L et α_L en fonction du débit utilisé pour trois types d'essais à $p=1$
 a) $\lambda=40$ et b) $\lambda=60$

La figure 7.5 permet de comparer les valeurs des coefficients de dispersion transversale et longitudinale estimées avec les essais de type 2 ainsi que leur rapport. Le rapport D_T/D_L augmente rapidement avec le débit utilisé, de 3 à 8% pour des débits allant de 0,1 à 0,3. À titre de comparaison, le rapport D_T/D_L (ou α_T/α_L) lorsque les réseaux sont utilisés comme des perméamètres (également à $\sigma_{lnK}=1$) varie entre 1 et 10%.

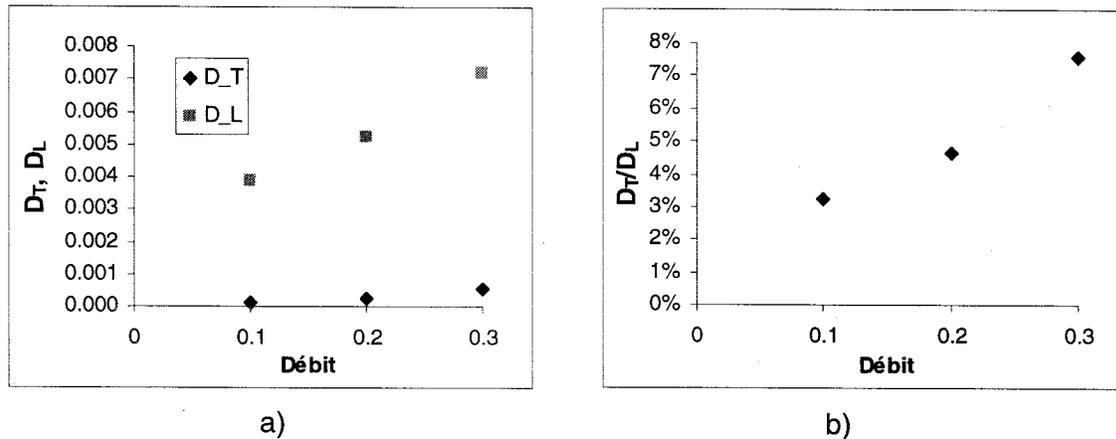


Figure 7.5 : Comportement de D_L et D_T en fonction du débit pour les essais de type 2 à $p=1$ a) Valeurs de D_T et de D_L et b) Rapport D_T/D_L

Les simulations réalisées avec une longueur de corrélation infinie montrent que les valeurs de D_L et α_L diminuent avec l'augmentation du coefficient de Hurst (H) (comme ce qui avait été observé au chapitre 6 pour les réseaux analogues à des perméamètres), mais augmentent linéairement avec l'augmentation du débit pour un même H pour les trois types d'essais de traçage. La figure 7.6 présente le comportement de D_L en fonction du débit dans le cas des essais de type 2 et 3. L'augmentation de la compacité des squelettes avec H permet de trouver des chemins de plus en plus rapides qui varient assez peu d'une particule à l'autre d'autant que chaque chemin démarre du même point d'injection. Les essais de type 3 fournissent encore une fois des valeurs de D_L et α_L plus élevées que celles de type 2. Les valeurs trouvées sont du même ordre de grandeur que celles obtenues avec les réseaux ayant des longueurs de corrélation finies. Les valeurs obtenues pour les différents coefficients H avec le type 3 sont très similaires, vraisemblablement parce que le puits de pompage limite le nombre de liens visités.

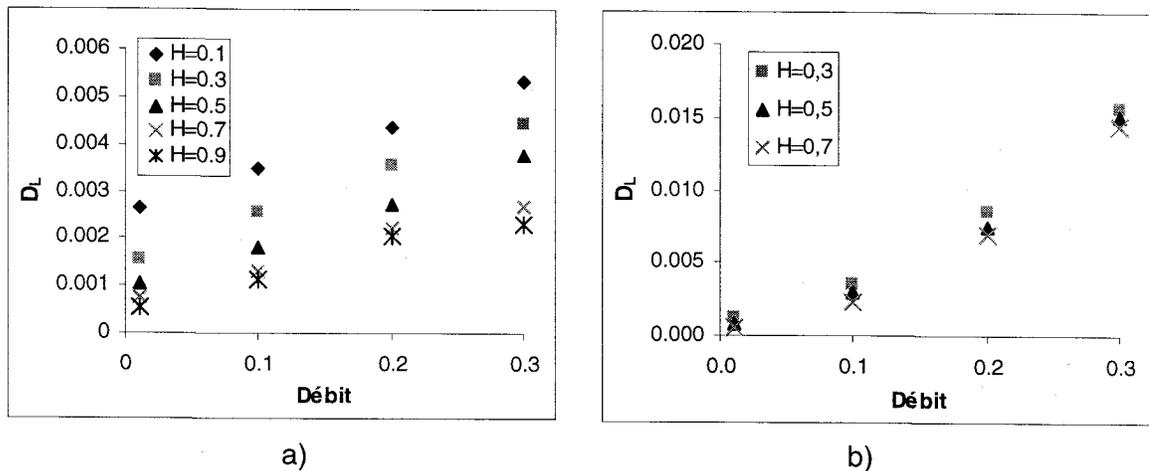


Figure 7.6 : Comportement de D_L en fonction du débit pour différents coefficients de Hurst à $p=1$ a) Essais de type 2 et b) Essais de type 3

7.2.2 $p < 1$

Le nombre de réseaux pouvant être utilisé pour calculer les valeurs de D_L et α_L diminue à mesure que p tend vers p_c car le nombre de chemins disponibles diminuant, de moins en moins d'intervalles collationnent un nombre significatif de particules (minimum de 30). En moyenne, plus de 70% des réseaux simulés ont servi aux calculs lorsque $p \geq 0,75$ pour des longueurs de corrélation infinies et finies et environ 10 à 20% des réseaux seulement lorsque p est à proximité du seuil de percolation. Le nombre de réseaux « utiles » ne semble pas affecté par la longueur de corrélation.

Afin de vérifier l'influence de l'emplacement des puits sur les résultats lorsque p est inférieur à 1, les puits ont été localisés à différents endroits sur l'axe est-ouest pour différents débits, types d'essais et longueurs de corrélation (ou coefficients de Hurst). Les simulations ont indiqué que les résultats de D_L obtenus sont toujours assez semblables (différences calculées en erreur relative inférieures à $\pm 20\%$), sauf à proximité du seuil de percolation. Les écarts ne semblent affectés ni par le débit, ni par la longueur de corrélation (ou le coefficient de Hurst). Les essais de type 3 entraînent cependant des écarts plus faibles que ceux du type 2. Les grandes différences observées à proximité de p_c (variant de 25 à 70%) proviennent du manque d'homogénéisation ; comme très peu de chemins sont disponibles, seuls quelques réseaux peuvent servir au calcul (entre 20 et 40) et aucune valeur représentative ne peut être obtenue. De fait, les comparaisons ont

toujours été effectuées entre des valeurs calculées pour un même intervalle (généralement celui du centre) afin de limiter les biais.

Dans le cas des essais de type 1 et 2, le comportement de D_L et α_L en fonction de la fraction de liens ouverts est semblable à celui décrit dans les chapitres précédents quelle que soit la longueur de corrélation : les valeurs augmentent à mesure que p diminue, puis chutent brusquement à proximité de p_c . La figure 7.7 présente le comportement de D_L en fonction de p pour deux longueurs de corrélation à $Q=0,2$ et pour deux débits à $\lambda=20$. La figure 7.7a permet de constater que les valeurs de D_L et α_L diminuent avec l'augmentation de λ pour une même fraction de liens ouverts p . Aucune différence n'était apparue avec $p=1$ et l'utilisation en perméamètre des réseaux provoquait la tendance inverse (quoique beaucoup moins marquée). Les graphiques de $\langle t \rangle^3$ et de σ_t^2 présentés à l'annexe D (figure D-1) révèlent que les temps de parcours moyens (même élevés au cube) sont quasiment identiques pour les deux longueurs de corrélation (sauf au seuil de percolation) et que la variance est à peine plus élevée lorsque $p \leq 0,7$ pour $\lambda=20$, provoquant des valeurs de D_L plus élevées dans ce cas. L'injection en un seul point favorise l'emprunt de seulement quelques liens et ce processus est probablement facilité à mesure que la longueur de corrélation augmente puisque les valeurs similaires de conductivité hydraulique se regroupent. La figure 7.7b montre qu'encore une fois, D_L et α_L augmentent avec le débit. Les écarts entre les valeurs (pour un même p) s'accroissent à mesure que p diminue, à l'exception de $p=p_c$ où les valeurs redeviennent assez semblables.

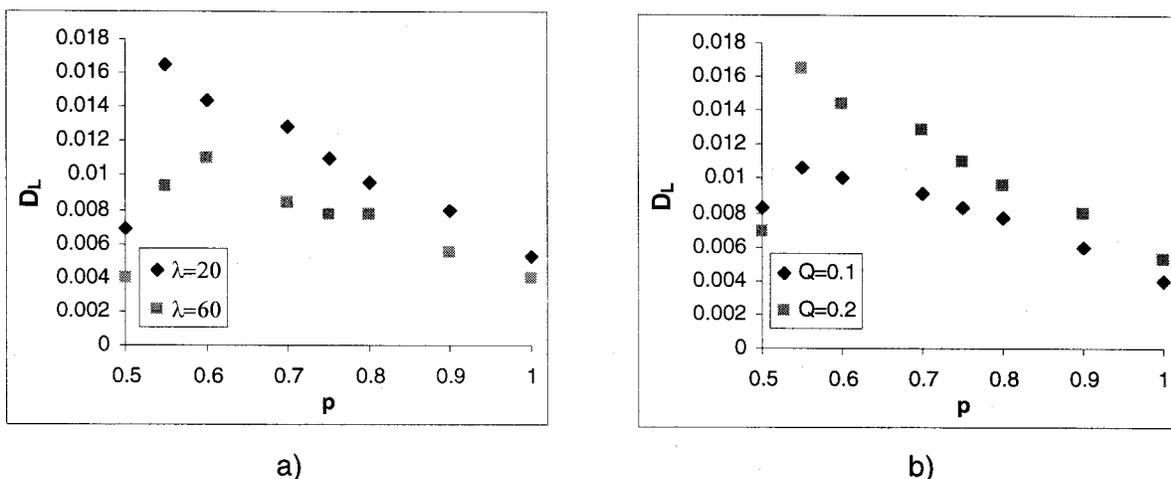


Figure 7.7 : Comportement de D_L en fonction de p pour les essais de type 2 (λ finies) a) Pour deux longueurs de corrélation à $Q=0,2$ et b) Pour deux débits à $\lambda=20$

Pour les essais de type 3 (doublet), les mêmes tendances sont observées que pour les types 1 et 2 (augmentation de D_L à mesure que la fraction de liens ouverts diminue, que le débit augmente et que la longueur de corrélation diminue), sauf à proximité du seuil de percolation. En effet, lorsque le débit et la longueur de corrélation sont assez grands ($Q > 0,1$ et $\lambda > 20$), D_L et α_L continuent d'augmenter sans chuter à proximité de p_c . La figure 7.8 présente le comportement de D_L en fonction de p pour trois longueurs de corrélation à $Q=0,2$ (a) et pour deux débits à $\lambda=40$ (b). Le comportement de la dispersivité à $Q=0,2$ est illustré à la figure 7.11. Ce comportement distinct à $p=p_c$ est provoqué par le nombre limité de chemins suivis par les particules (σ_t faible), mais ces dernières ont également des temps de séjour très courts (contrairement aux essais de types 1 et 2 et aux perméamètres) étant donné que le puits de pompage « aspire » les particules (le facteur $\langle t \rangle^3$ reste donc faible par rapport à σ_t^2).

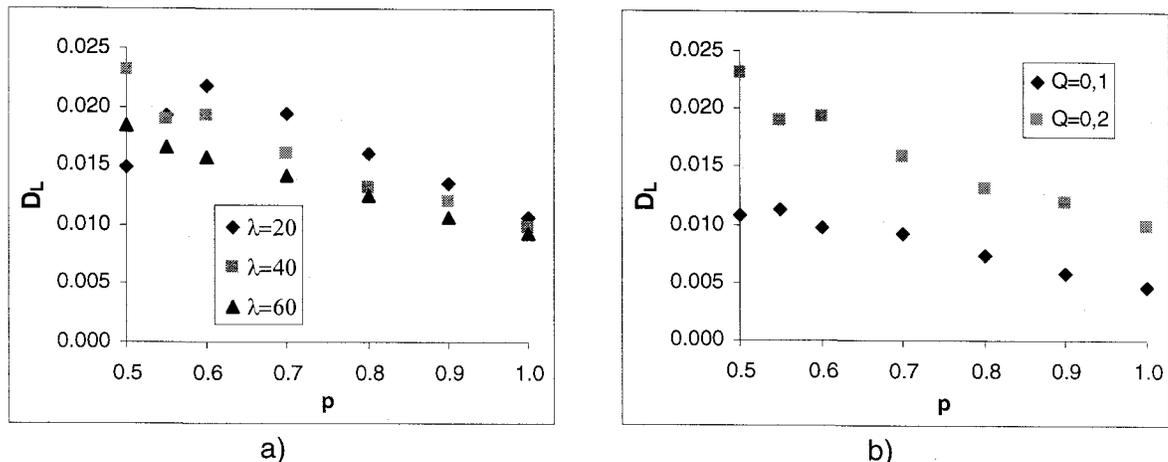


Figure 7.8 : Comportement de D_L en fonction de p pour les essais de type 3 a) Pour trois longueurs de corrélation à $Q=0,2$ et b) Pour deux débits à $\lambda=40$

Les graphiques des percentiles du nombre de particules arrivées au bas des réseaux dans l'intervalle central (équivalents aux courbes de concentration relative C/C_0 qu'on pourrait obtenir sur le terrain à un puits d'observation) ou au puits de pompage en fonction du temps correspondant à des essais de types 2 et 3 réalisés avec un débit d'injection de 0,2 et des réseaux ayant une longueur de corrélation de 20, pour $p=0,7$ et $p=1$, sont également présentés à l'annexe D (figures D-2 et D-3). Ces graphiques illustrent les valeurs médianes, minimales et maximales des temps de parcours obtenues avec 200 réseaux. On constate qu'à mesure que p augmente, les temps de parcours moyens, leur variabilité ainsi que les écarts entre les valeurs extrêmes pour un percentile donné diminuent. Les temps de parcours sont évidemment plus courts pour le type 3 que

pour le type 2, et les valeurs extrêmes (minimale et maximale) pour un percentile donné sont plus faibles.

Les réseaux ayant des longueurs de corrélation infinies présentent les mêmes tendances pour D_L et α_L en fonction de p et Q que celles décrites pour les réseaux ayant des longueurs de corrélation finies. Les valeurs obtenues avec les essais de type 2 sont toutefois notablement plus faibles que celles trouvées avec $\lambda=20, 40$ et 60 . Comme dans le cas de $p=1$, les valeurs diminuent avec l'augmentation de H . L'augmentation de la compacité des réseaux avec l'accroissement du coefficient de Hurst explique les valeurs plus faibles obtenues et le fait que D_L diminue avec H dans les essais de traçage. La figure 7.9 illustre les comportements de D_L en fonction de p pour $H=0,3, 0,5$ et $0,7$ obtenus avec $Q=0,2$ pour les essais de types 2 (a) et de type 3 (b). Les écarts entre les valeurs de D_L et α_L obtenus pour les essais de types 2 et 3 restent plutôt constants en fonction de la fraction de liens ouverts.

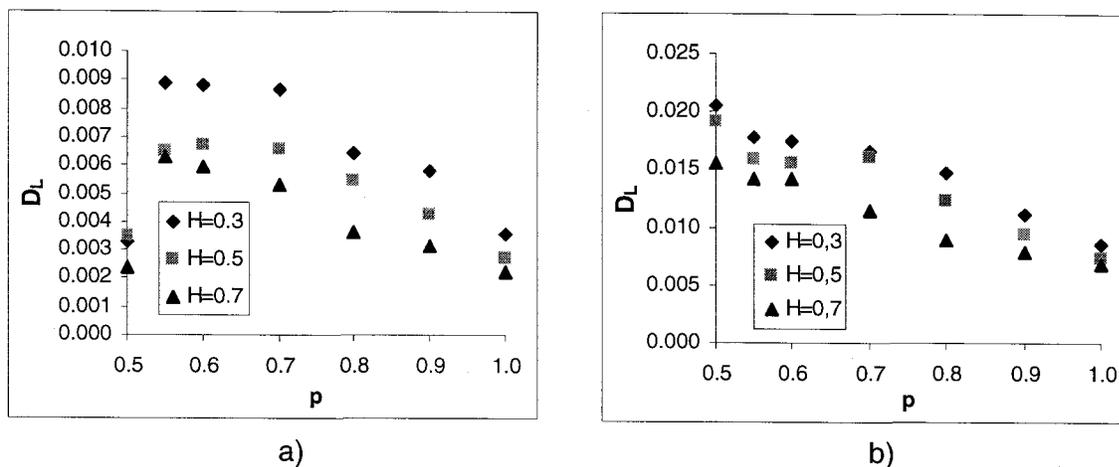


Figure 7.9 : Comportement de D_L en fonction de p pour λ infinies et $Q=0,2$ a) Essais de type 2 et b) Essais de type 3

Les rapports D_T/D_L augmentent avec la diminution de la fraction de liens ouverts p et continuent d'augmenter en fonction du débit pour une même fraction de liens ouverts. Il est cependant difficile de quantifier ce rapport pour des fractions de liens ouverts proches du seuil de percolation étant donné que très peu d'intervalles reçoivent des particules en nombre suffisant. À titre d'exemple, entre $p=1$ et $p=0,75$, les rapports avaient environ doublé.

7.3 Comparaison avec les équations théoriques et empiriques

Les coefficients de dispersion et les dispersivités obtenus avec le modèle de percolation pour un seul passage dans les réseaux sont, comme nous l'avons fait remarquer au chapitre 4, des valeurs pré-asymptotiques. Les valeurs de dispersivité longitudinale obtenues pour les trois différents types d'essais de traçage ont été comparées avec les valeurs de α_L déduites d'équations théoriques et de lois de puissance développées à partir des essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde. Les résultats de α_L obtenus pour des réseaux moyennement hétérogènes 100x100 avec un débit moyen de 0,2 et ayant des longueurs de corrélations finies et infinies sont résumées aux figures 7.10 et 7.11. Les longueurs des liens pour ces simulations sont considérées être fournies en m ($l_v=20$ m), les conductivités hydrauliques en m/s et les débits en m^2/s . Les unités des valeurs de α_L estimées sont ainsi fournies en mètres. Le tableau 7.1 qui suit présente les valeurs de dispersivité longitudinale obtenues à partir des diverses relations théoriques et empiriques en utilisant $\sigma_{ln K}=1$ et $L=1600$ m. Seule l'équation de Gelhar et Axness (1983) propose une valeur asymptotique. Elle devrait donc normalement être nettement plus élevée que celles obtenues après un seul passage dans les réseaux de percolation de taille finie.

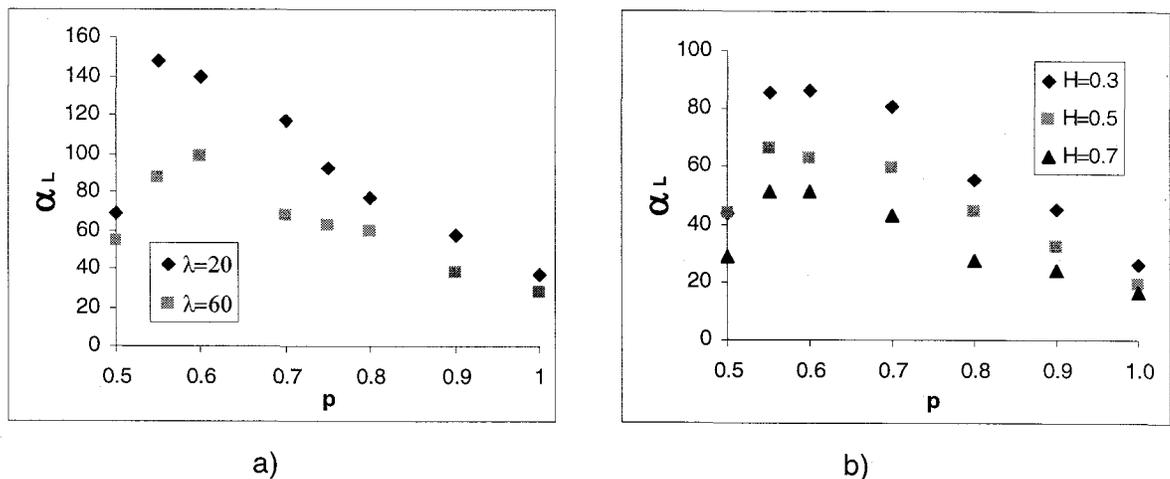


Figure 7.10 : Essais de type 2 : comportement de α_L en fonction de p à $Q=0,2$ a) Pour $\lambda=20$ et 60 et b) Pour $H=0,3$; 0,5 et 0,7

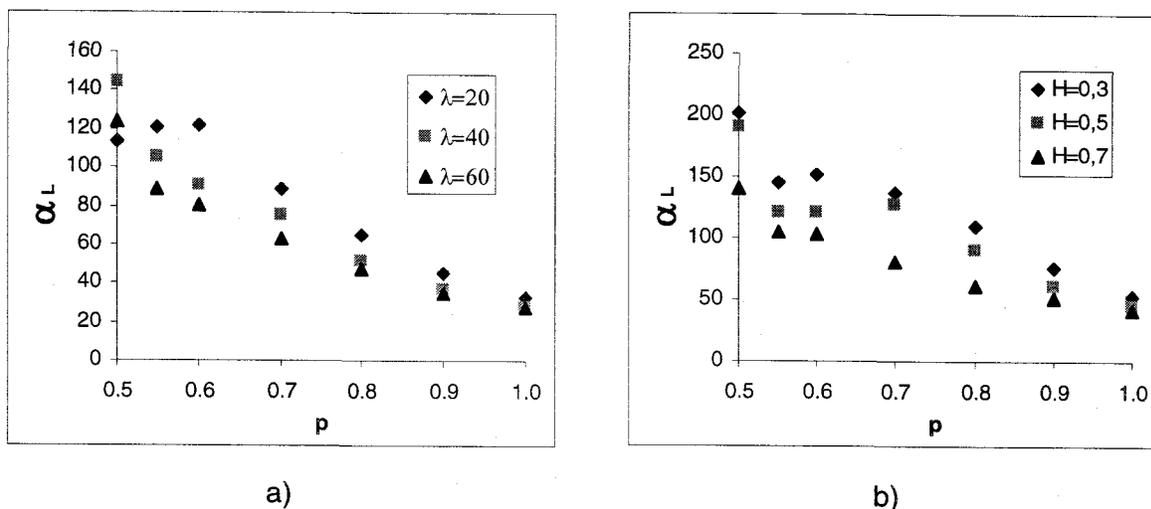


Figure 7.11 : Essais de type 3 : comportement de α_L en fonction de p à $Q=0,2$ a) Pour $\lambda=20$ et 60 et b) Pour $H=0,3; 0,5$ et $0,7$

Tableau 7.1 : Résumé des relations théoriques et empiriques pour α_L

Auteur(s)	Équation ²	α_L (m)
Anderson (1984)	$\alpha_L = 0,1 \cdot L$	160
Arya <i>et al.</i> (1988)	$\alpha_L = 0,229 \cdot L^{0,755}$	60
Neuman (1990)	$\alpha_L = 0,32 \cdot L^{0,83}$	146
Xu et Eckstein (1995)	$\alpha_L = 0,83 \log_{10} \cdot L^{2,414}$	6
Gelhar et Axness (1983)	$\alpha_L^\infty = \frac{\sigma_{\ln K}^2 \cdot \lambda}{(1 + \sigma_{\ln K}^2 / 6)}$	300
Neuman et Zhang (1990) et Neuman (1990)	$\alpha_L = c_o \cdot L \cdot \sigma_{\ln K}^2$	800
Abadou et Gelhar (1990) pour $\zeta_u=10$	$\alpha_L = \frac{\sigma_{\ln K}^2 \cdot (L - \zeta_u)}{2 \cdot \ln(L / \zeta_u)}$	156

Les figures 7.10 et 7.11 montrent que les valeurs de α_L estimées avec le modèle de percolation pour $p_c \leq p \leq 1$, $Q=0,2$ et différentes longueurs de corrélation (ou coefficients de Hurst) avec les trois types d'essais varient de 16 à 200 m. Celles du tableau 7.1 varient entre 6 et 300 m (en excluant celle de Neuman et Zhang (1990)). Toutefois, les simulations réalisées avec les combinaisons de conditions réunies pour fournir les valeurs extrêmes de dispersivité (min : $p=1$; $Q_{inj}=0,01$; $H=0,9$; $\sigma_{\ln K}=0,5$ et max : $p=0,55$; $Q_{inj}=0,3$;

² Les différents paramètres sont identifiés au chapitre 2.

$\lambda=20$; $\sigma_{\ln k}=1,5$) ont fourni des valeurs de 2 et 250 m. Les gammes de valeurs sont donc très semblables. La valeur de 800 m obtenue avec l'équation de Neuman et Zhang (1990) est étrangement élevée, surtout que cette valeur a été développée pour le régime pré-asymptotique et qu'elle est près de trois fois plus élevée que la valeur asymptotique fournie par Gelhar et Axness (1983). Il faut cependant souligner que la valeur issue de l'équation Gelhar et Axness (1983) fournit des valeurs assez faibles dans bon nombre de cas, entre autres dans le cas de doublets [communication personnelle, F. Delay].

Les équations développées pour les milieux fortement hétérogènes sont le plus souvent données sous forme de lois de proportionnalité en utilisant le coefficient de Hurst. Par exemple, Neuman (1990) et Di Federico et Neuman (1998) ont obtenu $\alpha_L \sim C_0 \cdot L^{2H+1}$, Tyler et Wheatcraft (1992) ont trouvé $\alpha_L \sim L^{3-2H}$ et Dagan (1994) croit que la dispersion ne peut pas augmenter plus rapidement que linéairement avec la distance ($\alpha_L \sim L$). Les deux premières équations ont toujours un exposant global de la longueur du système L supérieur à 1, mais généralement très différent selon la relation choisie pour un coefficient H donné (sauf à $H=1/2$). Neuman (1990) propose pour la constante C_0 une valeur de 0,0175, ce qui engendre des valeurs extrêmement grandes pour $H>0,5$. Toutefois, cette équation n'est valide que pour de courtes distances (probablement inférieures à 100 m). Tyler et Wheatcraft (1992) et Dagan (1994) ne s'avancent sur aucune valeur de la constante. Aucune valeur de ces lois n'a pu être récupérée à des fins de comparaison.

Les valeurs présentées aux figures 7.10 et 7.11, obtenues à partir d'un réseau moyennement hétérogène et d'un débit moyen ($Q=0,2$), correspondent bien aux valeurs « moyennes » trouvées à l'aide des nombreux essais de traçage répertoriés. Une fois la variabilité spatiale des conductivités hydrauliques connue, les valeurs de α_L obtenues avec $Q=0,01$ et $Q=0,3$ formeraient vraisemblablement une courbe enveloppe appropriée (pour des distances parcourues données) permettant de déterminer de façon adéquate la gamme de dispersivité dont il faudrait tenir compte pour le transport de soluté.

7.4 Discussion

La vitesse de l'eau souterraine étant lente, les essais de traçage sont longs à exécuter et généralement onéreux. Ils sont donc souvent réalisés en injectant le traceur en un seul endroit et parfois à l'aide de puits d'injection et de pompage pour accélérer l'obtention des résultats. Or, les simulations réalisées à l'aide du modèle de percolation ont montré que l'utilisation d'une source (injection du soluté en un seul point) a un impact majeur sur l'estimation des valeurs de D_L et α_L . En effet, ces paramètres sont généralement sous-évalués dans ce cas comparativement à la valeur obtenue lorsque le réseau est considéré comme un perméamètre (injection en de nombreux endroits) puisque les essais de traçage ne couvrent qu'une portion du site et donc ne fournissent pas une valeur de D_L représentative de l'ensemble du terrain.

Nos simulations ont également montré que D_L et α_L augmentent si le débit augmente ou si la fraction de liens ouverts, la longueur de corrélation et le coefficient de Hurst diminuent. L'augmentation des deux paramètres de transport à mesure que λ diminue correspond à la tendance inverse observée lorsque les réseaux sont utilisés en tant que perméamètres. Le fait que l'injection se fasse seulement en un point dans les essais de traçage implique que les particules prennent un nombre de chemins limité (comparativement au nombre possible dans le cas du perméamètre), et ce nombre diminue à mesure que λ augmente, c'est-à-dire à mesure que les valeurs de K se regroupent. Les essais en doublet de puits (type 3) modifient notablement la distribution spatiale des particules en ce sens que leurs trajets convergent nécessairement vers le puits de pompage sans trop s'éloigner de l'axe du doublet de puits. Pour des débits moyens à élevés, les valeurs de D_L et α_L continuent ainsi d'augmenter à proximité du seuil de percolation (contrairement à la chute systématiquement observée pour les essais de types 1 et 2 et pour les perméamètres) car les temps de parcours entre les deux puits sont très rapides et l'hétérogénéité locale des vitesses du fluide est forte.

Ainsi pour déterminer les valeurs des coefficients de dispersion (et par conséquent de la dispersivité) dans les milieux hétérogènes, il faudrait simuler les réseaux pour l'intervalle $p_c \leq p \leq 1$ et pour différents débits de façon à obtenir des prédictions fiables puisqu'en employant $p=1$ et/ou un débit faible, les paramètres seront vraisemblablement sous-estimés et ceci pourrait entraîner de graves conséquences lors de la prédiction de

l'avancée d'un panache de pollution. Dans le cas où aucun essai de traçage ne peut être réalisé, soit parce que l'eau est pompée pour l'embouteillage ou encore pour des raisons de coût, il serait avantageux d'utiliser les valeurs minimale (généralement obtenue à $p=1$) et maximale (estimée avec $p_c \leq p \leq 0,6$) du coefficient de dispersion combinées avec des débits faible et élevé pour obtenir une fourchette de valeurs représentatives. Nos simulations ont également montré que la gamme de valeurs obtenues à partir des équations présentées au tableau 7.1 (en excluant celle de Neuman et Zhang, 1990) peuvent fournir un ordre de grandeur approprié.

Étant donné que les essais de traçage sur le terrain ne peuvent le plus souvent être réalisés que sur un domaine très limité de l'aquifère exploité, et donc fournir des valeurs de dispersion *a priori* peu représentatives du processus dans les milieux hétérogènes, nous émettons l'hypothèse que l'essai de traçage peut être nettement moins rentable en termes de connaissance du milieu qu'une collecte soignée de données de conductivité hydraulique. Cette dernière permet d'améliorer la connaissance du milieu et notamment celle du champ d'écoulement et de ses vitesses. En utilisant ensuite un modèle de percolation, l'accès à des valeurs probables de D_L et α_L est rendue possible à moindre coût.



8 CONCLUSION

Les milieux hétérogènes, généralement difficiles à reproduire adéquatement à l'aide de modèles représentant des milieux poreux équivalents à cause de la chenalisation importante et de l'instabilité numérique (ou de lissage excessif) provoquée par les forts contrastes de conductivités hydrauliques, peuvent être avantageusement simulés à l'aide de réseaux de percolation. En effet, ceux-ci permettent de reproduire les chemins préférentiels des réseaux d'écoulement à partir de données généralement disponibles comme des résultats d'essais de pompage et de simuler tant les milieux continus que discontinus (généralement mieux adaptés à l'étude de milieux hétérogènes). De plus, la théorie de percolation permet de tenir compte de l'effet d'échelle de la dispersion (ou de la dispersivité) observé par de nombreux auteurs puisque les résultats se présentent sous forme de lois de puissance ($D_L \sim L^x$). Néanmoins, très peu de recherche a été réalisée dans le domaine de la dispersion dans les réseaux percolants et de surcroît dans des milieux corrélés spatialement.

Dans les réseaux percolants réguliers, chaque lien représente une fracture ou une zone homogène. Les liens peuvent être éliminés de façon aléatoire (théorie de percolation classique) ou en fonction de la valeur de conductivité hydraulique qui leur est associée de façon à retrouver les chemins (préférentiels) les plus susceptibles d'être empruntés par l'eau et les solutés. À une certaine fraction de liens ouverts, appelée seuil de percolation (p_c), l'eau peut s'écouler d'une extrémité à l'autre du domaine. Par contre sous ce seuil ($p < p_c$), il existe des amas de liens perméables, mais la perméabilité globale du système est nulle et un VER (volume élémentaire représentatif) ne peut être défini peu importe l'échelle d'observation. Plusieurs auteurs croient ou ont montré que des aquifères fracturés pris à grande échelle peuvent être très mal connectés et donc proches du seuil de percolation [Wilke *et al.*, 1985 ; Long et Billaux, 1987 ; Sahimi, 1995]. De plus, l'analyse du chemin critique a montré qu'un système dont la distribution des conductivités hydrauliques est étendue, même bien connecté, peut être remplacé par un réseau percolant équivalent. Ceci montre l'énorme potentiel des réseaux de percolation.

Un modèle 2-D régulier a été choisi pour simuler l'écoulement et le transport de solutés non réactifs dans des aquifères hétérogènes à nappe captive. Ce choix se justifie à la fois par le fait que l'épaisseur de l'aquifère peut généralement être considérée négligeable à l'échelle locale (> 1km) ou régionale, et que la caractérisation détaillée des fractures ou des pores (ou grains) est impossible à cette échelle. Le modèle de percolation développé pourrait ainsi servir d'outil de gestion pour les nappes souterraines en permettant de prédire l'arrivée de solutés à une source de façon à pouvoir, par exemple, aviser les propriétaires des puits ou les municipalités et mettre en œuvre les démarches nécessaires pour empêcher l'intoxication d'une communauté. Le modèle pourrait éventuellement aussi permettre de retracer un pollueur si la qualité d'une source se détériore. Rappelons que cette méthode n'est pas adaptée aux procédures de décontamination puisque cette théorie ne prend pas en compte la partie « résiduelle » des solutés (particules emprisonnées dans les culs-de-sac ou qui ont emprunté des chemins particulièrement lents), ni le retard des particules dû aux processus d'adsorption. La modélisation d'un fluide dont la densité est différente de celle de l'eau n'est pas non plus possible avec ce modèle.

Le modèle de percolation a d'abord été testé sur des réseaux standard et ayant des conductivités hydrauliques à distribution continue (log-normale). Cette validation a montré que les lois universelles de la théorie de percolation (de type $A \sim L^x$) pour les paramètres d'écoulement (p_c , X^A , X^B et K_e) étaient bien reproduites au seuil de percolation. Les simulations réalisées ont également permis de mettre en évidence le comportement particulier du coefficient de dispersion (D_L) à proximité du seuil de percolation. En effet, les populations de valeurs de D_L pour toutes les tailles de réseaux sont log-normalement distribuées à $p=p_c$ indiquant que, contrairement aux paramètres d'écoulement, la moyenne arithmétique ne peut caractériser adéquatement ce paramètre. Les valeurs médianes ont en conséquence été utilisées pour fournir une valeur représentative de la dispersion. De plus, la variance de ces distributions ne diminue pas avec la taille des réseaux. À notre connaissance, ce problème n'avait jamais été soulevé et s'avère être un résultat important à cause de ses implications pratiques puisque, peu importe la taille des réseaux (et même pour des réseaux infinis), D_L est toujours dépendant de la distance et du temps. L'asymétrie des populations de D_L s'estompe cependant rapidement lorsque p s'éloigne du seuil de percolation.

Même dans le cas de solutés non-réactifs en régime permanent, la méthode de calcul de la dispersion n'est pas sans conséquence dans les milieux hétérogènes puisqu'elle influence grandement les résultats. Le coefficient de dispersion a donc été calculé à partir de trois méthodes différentes, dont deux utilisent des distributions temporelles et l'autre une distribution spatiale des particules de solutés. Étant donné que durant les essais de traçage, seuls les temps d'arrivée du traceur (avec leurs concentrations) à des endroits précis peuvent être obtenus, nous nous sommes intéressés tout particulièrement aux méthodes de calcul de D_L utilisant les distributions temporelles (l'une à partir des logarithmes et l'autre à partir des percentiles des temps de parcours). En simulant un seul passage dans les réseaux, les deux méthodes fournissent des valeurs de D_L pré-asymptotiques semblables et dont la valeur des exposants χ ($D_L \sim L^\chi$) est plus élevée que les prédictions théoriques de Sahimi et Imdakm (1988) pour la dispersion dans le squelette (0,6 plutôt que 0,4). Cependant, la simulation de quelques très grands réseaux (1000x1000) nous porte à croire que la valeur de l'exposant de la loi de puissance reliant D_L à L devrait diminuer et tendre vers les prédictions théoriques à mesure que la taille des réseaux tend vers l'infini. La valeur théorique de 0,39 a par ailleurs été retrouvée en utilisant les distributions spatiales des particules et en simulant de nombreux passages dans les réseaux. La simulation de nombreux passages a également montré qu'un régime asymptotique, au moins temporaire, pouvait être atteint dans les squelettes montrant une morphologie statistiquement fractale.

Les simulations réalisées avec différentes fractions de liens ouverts (p) ont montré que D_L et α_L augmentent à mesure que p diminue jusqu'à un certain point (puisque les chemins deviennent de plus en plus tortueux à mesure que le nombre de liens ouverts diminuent), puis chutent à proximité du seuil de percolation. Cette chute est attribuable à l'accroissement considérable du temps de parcours des particules lorsque les quelques chemins disponibles pour les particules deviennent très tortueux qui ne peut pas être compensé par l'augmentation de la variance ($D_L = (\sigma_t^2 L) / \langle t \rangle^3$). Il est à noter que dans les réseaux à distribution continue de conductivités hydrauliques, D_L augmente avec l'hétérogénéité ($\sigma_{ln K}$), sauf à proximité du seuil de percolation où la tendance s'inverse, également à cause de l'augmentation du temps de parcours total (due à l'utilisation de la loi log-normale). En effet, les distributions des temps de parcours à proximité du seuil de percolation sont de plus en plus étalées et ont de moins en moins de temps courts à mesure que $\sigma_{ln K}$ augmente.

Les deux méthodes utilisant des distributions temporelles fournissent généralement des valeurs très similaires peu importe la fraction de liens ouverts. Ceci prouve que l'utilisation de la courbe de fuite (concentration en fonction du temps) pour le calcul du coefficient de dispersion ($D_L = \sigma_t^2 L^2 / \langle t \rangle^3$ où $\sigma_t = (t_{84} - t_{16})/2$ et $\langle t \rangle = t_{50}$) à partir des résultats des essais de traçage est pertinente. Les simulations ont toutefois montré clairement que les valeurs obtenues à partir des deux types d'approches pour le calcul de D_L (σ_x et σ_t) ne peuvent pas être comparées entre elles, au moins à proximité du seuil de percolation, vraisemblablement à cause du manque d'homogénéisation des champs de vitesses des réseaux. En conséquence, l'universalité de la loi $D_L \sim L^\chi$ est restreinte : la méthode utilisée pour calculer D_L doit être spécifiée.

De nombreuses études ayant indiqué que les formations géologiques sont généralement très hétérogènes et leurs propriétés corrélées sur de plus ou moins longues distances, des champs de conductivité hydraulique ont été générés à l'aide de simulations séquentielles gaussiennes (une méthode géostatistique) et d'un processus fBm (une approche fractale). Ces méthodes ont été sélectionnées car elles permettent une étude stochastique des paramètres, c'est-à-dire que de nombreux champs avec la même structure spatiale peuvent être générés puis simulés avec une approche Monte Carlo.

Les simulations réalisées au seuil de percolation avec des longueurs de corrélation finies ont indiqué que les valeurs des paramètres d'écoulement (X^A , X^B et K_e) augmentent avec la longueur de corrélation λ car les valeurs de conductivité hydraulique semblables se regroupent, tandis que leurs exposants diminuent. Le coefficient de dispersion augmente également au départ avec λ étant donné que les temps de parcours et leurs variances diminuent rapidement, mais une fois que le rapport λ/L devient supérieur à un tiers, les particules empruntent un nombre restreint de chemins préférentiels et la dispersion reste plus ou moins stable. Son exposant χ augmente avec λ jusqu'à une valeur proche de 1 ($D_L \sim L$), puis reste stable, indiquant que la dispersion ne pourrait pas augmenter plus rapidement que linéairement. La dispersion augmente aussi avec l'hétérogénéité des réseaux ($\sigma_{ln K}$) et leur taille.

Les simulations effectuées avec des longueurs de corrélation infinies à $p = p_c$ ont indiqué que les réseaux fBm avec $0 < H < 1$ sont toujours très compacts (peu de culs-de-sac, X^B est

très proche de X^A), même lorsque $H=0,1$. En fait, dès que $H>0,1$, la dimension fractale du squelette est maximale (et donc $\beta_B=0$), ce qui nous mène à croire que le fait de corrélérer les conductivités hydrauliques sur de longues distances et d'éliminer les liens dont les valeurs sont les plus faibles fait perdre le caractère fractal du squelette, vraisemblablement parce que le désordre nécessaire pour obtenir une structure fractale n'est plus présent. L'écoulement à l'intérieur des squelettes reste par contre chenalisé dans l'intervalle $0<H<1/2$ dû au regroupement progressif des valeurs de conductivité hydraulique des liens, entraînant une dispersion pseudo fractale. La tortuosité des trajets s'estompe toutefois rapidement avec l'augmentation de H et D_L devient proportionnel à L , comme dans les milieux continus. Les exposants des coefficients de dispersion longitudinale et transversale varient ainsi entre 0,6 et 1. Les rapports α_T/α_L estimés à $p=p_c$ varient entre 0,05 et 0,1, confirmant que la valeur de 0,1 couramment utilisée dans la pratique ($\alpha_T=0,1*\alpha_L$) pourrait effectivement être adéquate pour bon nombre de sites (isotropes). L'introduction de l'anisotropie diminue significativement à la fois α_L et α_T car elle entraîne la formation de strates parallèles à l'écoulement qui permettent aux particules de sortir rapidement du système. La dispersion transversale est plus sensible que celle longitudinale au rapport d'anisotropie utilisé étant donné que ces strates forment des barrières qui empêchent les particules de circuler latéralement.

Pour tous les réseaux corrélés, le même comportement du coefficient de dispersion en fonction de p que celui des réseaux non corrélés est observé : D_L augmente à mesure que la fraction de liens ouverts (p) diminue puis chute abruptement à proximité de p_c . Cette dernière constatation représente d'ailleurs un problème potentiel puisque les modèles sont généralement simulés en conservant tous les éléments (soit à $p=1$, correspondant à des milieux continus) alors que les aquifères fracturés ou poreux très hétérogènes sont généralement assez mal connectés et donc mieux représentés par les milieux discontinus ($p<1$). Les valeurs de D_L obtenues avec les modèles conventionnels ($p=1$) seraient en conséquence systématiquement sous-estimées.

Les exposants de la dispersivité longitudinale calculés pour les réseaux corrélés et non corrélés fournissent des valeurs variant entre 1,26 et 1,58 ($\alpha_L \sim L^{1,26-1,58}$). Ces valeurs sont à l'extrémité supérieure de l'intervalle défini par les différentes lois de puissance obtenues à partir des essais de traçage réalisés un peu partout dans le monde. Toutefois, comme la dispersion des valeurs répertoriées est grande, les valeurs obtenues tant pour les

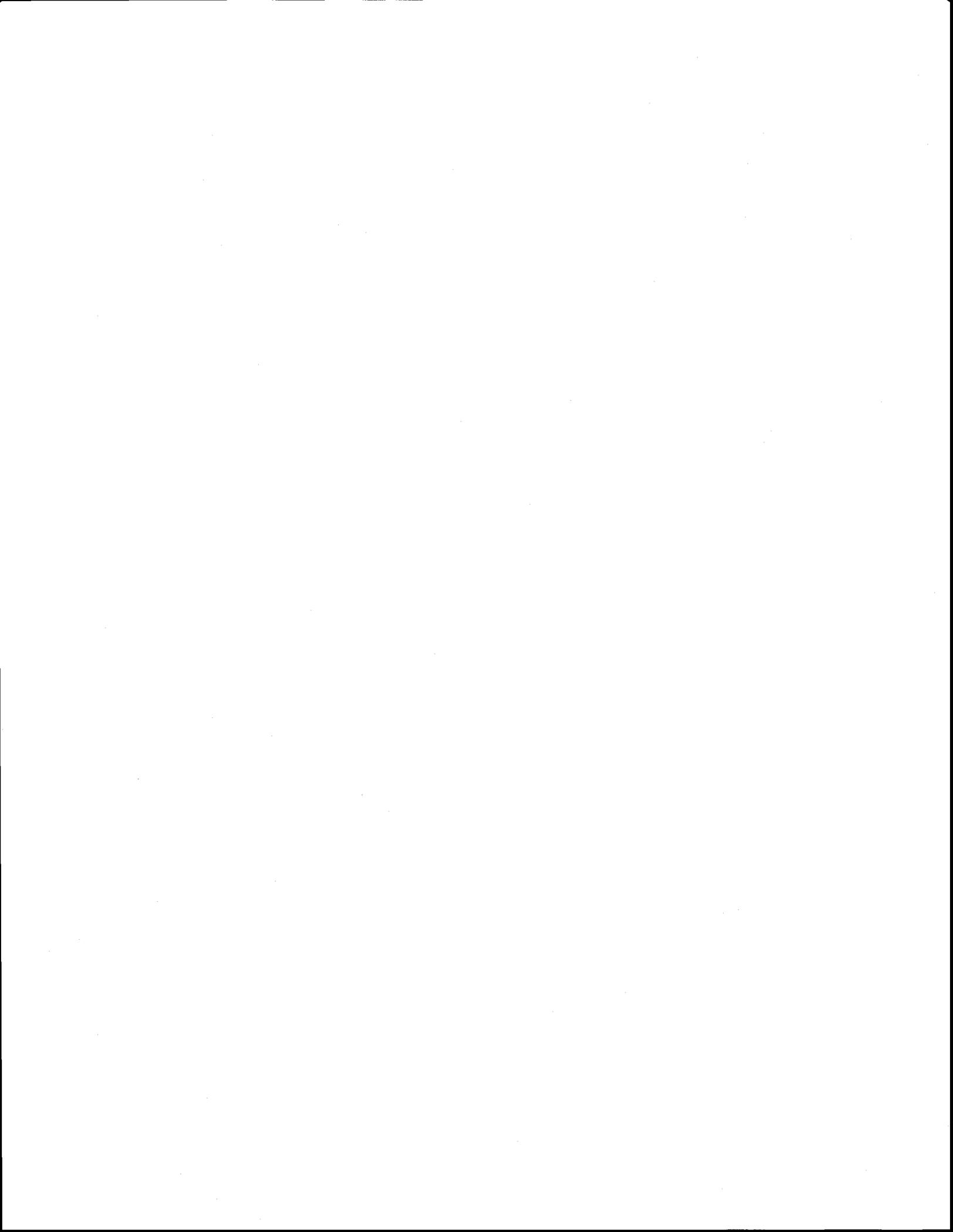
réseaux corrélés que non corrélés se comparent assez bien avec les graphiques de Gelhar *et al.* (1992), ce qui nous empêche de conclure sur la pertinence de l'utilisation d'un type de réseau en particulier.

Trois types d'essais de traçage ont été simulés à l'aide du modèle de percolation avec des champs fBm ayant des longueurs de corrélation finies et infinies. Les simulations ont confirmé que la manière de réaliser les essais de traçage a une grande influence sur les valeurs obtenues et que ceux-ci peuvent facilement sous-estimer la dispersion « réelle » d'un site. En effet, tous les essais fournissent des valeurs nettement plus faibles que celles trouvées lorsque les réseaux sont utilisés en perméamètres et les essais réalisés en utilisant un puits de pompage produisent des valeurs plus élevées que celles des essais utilisant seulement des puits d'observations. De plus, les valeurs de D_L et α_L (pour tous les essais) augmentent rapidement avec le débit utilisé pour l'essai et diminuent avec l'augmentation de la fraction de liens ouverts imposée. En conséquence pour un terrain hétérogène, il serait important de tenir compte d'une gamme de valeurs de D_L et de α_L puisque la fraction de liens ouverts (p) peut alors être considérée faible (chenalisation importante). Étant donné que des essais de traçage ne peuvent pas toujours être réalisés ou que ceux-ci peuvent rarement être effectués sur de grandes distances, il serait avantageux d'utiliser le modèle de percolation pour obtenir une fourchette de valeurs représentative pour ces paramètres.

Ainsi, dans une perspective plus générale, nous aimerions souligner que ce projet a permis de développer un nouvel outil mathématique rendant possible la simulation du transport de solutés conservatifs dans les aquifères hétérogènes (ayant des champs de conductivité hydraulique corrélés ou non) à une échelle de plusieurs mètres ou kilomètres en se servant de données de terrain généralement disponibles et en tenant compte de l'effet d'échelle de la dispersion. Les réseaux de percolation permettent de donner rapidement une idée de l'avancement du panache de contamination de façon à pouvoir gérer la ressource et planifier une éventuelle restauration du site. L'ensemble du projet a d'ailleurs été réalisé en conservant comme objectif l'évaluation de l'applicabilité de cette approche prometteuse, ce qui n'avait jamais été fait auparavant. Les résultats de ce travail se distinguent en effet par le fait qu'ils laissent entrevoir la possibilité d'une utilisation plus appliquée des concepts de percolation. Il est difficile de savoir si un réseau percolant peut honorablement représenter un milieu fracturé réel. Confronter certains

résultats obtenus, par exemple au seuil de percolation ou lorsque tous les liens sont ouverts ($p=1$), à ceux de la littérature pourrait peut-être apporter la réponse.

Enfinement dans une perspective d'avenir, nous croyions qu'il serait intéressant et relativement facile d'intégrer dans le modèle de percolation développé la troisième dimension. Ainsi, les lois de puissance des coefficients de dispersion pourraient être comparées à celles théoriques et à celles obtenues en 2-D de façon à voir si la taille des réseaux affecte autant les réseaux 3-D que ceux en 2-D. De plus, il serait impératif pour la poursuite de l'étude de l'applicabilité des réseaux percolants à des cas pratiques de pouvoir comparer des résultats d'essais de traçage réels avec ceux issus des simulations. Afin de pouvoir tenir compte de la structure spatiale des conductivités hydrauliques du site, il faudrait utiliser cette fois pour les simulations des champs générés avec la méthode des simulations séquentielles gaussiennes. Cette analyse pourrait s'accompagner de la modélisation du site à l'aide d'un autre logiciel tel que Modflow, de façon à pouvoir étudier les différences entre les réponses des différents modèles ainsi que les forces et les faiblesses de l'approche développée dans ce projet. Enfin, un point à éclaircir serait celui de savoir si la longueur des réseaux (L) est la dimension pertinente à utiliser dans les lois de puissance lorsque les valeurs de conductivités hydrauliques sont corrélées puisque la taille des trous (ξ_p) à l'intérieur des squelettes diminue avec la longueur de corrélation et c'est en fait cette dimension qui représente la « vraie » longueur caractéristique des réseaux. Pour cela, la taille des trous devrait être étudiée en fonction de la taille des réseaux, de façon à voir si celle-ci augmente plus rapidement que L .



9 BIBLIOGRAPHIE

- Abadou, R. et L. W. Gelhar (1990). Self-similar randomness and spectral conditioning : Analysis of scale effects in subsurface hydrology. Dans : *Dynamics of fluids in hierarchical porous media*, édité par J. H. Cushman, San Diego, Academic Press: 393-462.
- Alon, U., A. Drory et I. Balberg (1990). Systematic derivation of percolation thresholds in continuum systems. *Phys. Rev. A*, 42 (8): 4634-4638.
- Ambegaokar, V., B. I. Halperin et J. S. Langer (1971). Hopping conductivity in disordered systems. *Phys. Rev. B.*, 4 (8): 2612-2620.
- Anderson, M. P. (1984). Movement of contaminants in groundwater : Groundwater transport - Advection and dispersion. *Groundwater contamination*, DC, National Academy Press: 37-45.
- Andersson, J. et B. Dverstorp (1987). Conditional simulations of fluid flow in three-dimensional networks of discrete fractures. *Water Resources Research*, 23 (10): 1876-1886.
- Arya, A., T. A. Hewett, R. G. Larson et L. W. Lake (1988). Dispersion and reservoir heterogeneity. *SPE Reservoir Engineering*, 3: 139-148.
- Balberg, I., C. H. Anderson, S. Alexander et N. Wagner (1984). Excluded volume and its relation to the onset of percolation. *Phys. Rev. B*, 30 (7): 3933-3943.
- Balberg., I., B. Berkowitz et G. E. Drachsler. (1991). Application of a percolation model to flow in fractured hard rocks. *J. Geophys. Res.*, 96 (B6): 10 015-10 021.
- Banton, O. et J.-P. Bangoy (1997). *Hydrogéologie - Multiscience environnementale des eaux souterraines*. Québec, Presses de l'université du Québec/AUPELF, 460 p.
- Banton. O., F. Delay et G. Porel (1997). A new time domain random-walk method for solute transport in 1-D heterogeneous media. *Ground Water*, 35 (6): 1008-1013.

Barenblatt, G. I., I. P. Zheltov et I. N. Kochina (1960). Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks. *J. Appl. Math. Mech.*, 24: 1286-1303.

Barton, C. C. et P. R. La Pointe (1995). *Fractals in Petroleum and Geology and Earth Processes*. New York, Plenum Press, 317 p.

Bellin, A., M. A. Pannone et A. Rinaldo (1996). On transport in porous formations characterized by heterogeneity of evolving scales. *Water Resources Research*, 32 (12): 3485-3496.

Beran, J. (1994). *Statistics for Long Memory Processes*. Monographs on statistics and applied probability, New York, Chapman & Hall, International Thomson Publishing Company, 315 p.

Berkowitz, B. (1995). Analysis of fracture network connectivity using percolation theory. *Mathematical Geology*, 27 (4): 467-483.

Berkowitz, B. et I. Balberg (1992). Percolation approach to the problem of hydraulic conductivity in porous media. *Transport in Porous Media*, 9 (3): 275-286.

Berkowitz, B. et I. Balberg (1993). Percolation theory and its application to groundwater hydrology. *Water Resources Research*, 29 (4): 775-794.

Berkowitz, B., J. Bear et C. Braester (1988). Continuum models for contaminant transport in fractured porous formations. *Water Resources Research*, 24 (8): 1225-1236.

Berkowitz, B. et C. Braester (1991). Dispersion in sub representative elementary volume fracture networks: Percolation theory and random walk approaches. *Water Resources Research*, 27 (12): 3159-3164.

Berkowitz, B., C. Naumann et L. Smith (1994). Mass transfer at fracture intersections : An evaluation of mixing models. *Water Resources Research*, 30 (6): 1765-1773.

Berkowitz, B. et H. Scher (1995). On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media. *Water Resources Research*, 31 (6): 1461-1466.

Berkowitz, B. et H. Scher (1998). Theory of anomalous chemical transport in retom fracture networks. *Physical review. E*, 57 (5B): 5858-5869.

Bernabé, Y. et C. Bruderer (1998). Effect of the variance of pore size distribution on the transport properties of heterogeneous networks, *J. Geophys. Res.*, 103 (B1): 513-525.

- Broadbent S. R. et J. M. Hammersley (1957). Percolation processes, crystals and mazes, *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 53 : 629-641.
- Bruderer, C. et Y. Bernabé (2001). Network modeling of dispersion: Transition from Taylor dispersion in homogeneous networks to mechanical dispersion in very heterogeneous ones. *Water Resources Research*, 37 (4): 897-908.
- Bour, O. et P. Davy (1997). Connectivity of random fault networks following a power law fault length distribution. *Water Resources Research*, 33 (7): 1567-1583.
- Bour, O. et P. Davy (1998). On the connectivity of three dimensional fault networks. *Water Resources Research*, 34 (10): 2611-2622.
- Cacas, M. C., E. Ledoux, G. De Marsily, B. Tillie et A. Barbreau (1990a). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: Calibration and validation: 1. The Flow Model. *Water Resources Research*, 26 (3): 479-489.
- Cacas, M. C., E. Ledoux, G. de Marsily, A. Barbreau et P. Calmels (1990b). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: Calibration and validation: 2. The transport model. *Water Resources Research*, 26 (3): 491-500.
- Charlaix, E. et H. Gayvallet (1991). Hydrodynamic dispersion in networks of capillaries of random permeability. *Europhysics Letters*, 16 (3): 259-264.
- Charlaix, E., E. Guyon et N. Rivier (1984). A criterion for percolation threshold in a random array of plates. *Solid State Communications*, 50 (11): 999-1002.
- Charlaix, E., E. Guyon et S. Roux (1987). Permeability of a random array of fractures of widely varying apertures. *Transport in Porous Media*, 2: 31-43.
- Charlaix, E., J.-P. Hulin, C. Leroy et C. Zarcone (1988). Experimental study of tracer dispersion in flow through two-dimensional networks of etched capillaries. *J. Phys. D.*, 21: 1727-1732.
- Clemo, T. et L. Smith (1997). A hierarchical model for solute transport in fractured media. *Water Resources Research*, 33 (8): 1763-1783.
- Cushman, J. H. (1991). On diffusion in fractal porous media. *Water Resources Research*, 27 (4): 643-644.
- Dagan, G. (1990). Transport in heterogeneous porous formations : Spatial moments, ergodicity, and effective dispersion. *Water Resources Research*, 26 (6): 1281-1290.

Dagan, G. (1994). The significance of heterogeneous of evolving scales to transport in porous formations. *Water Resources Research*, 30 (12): 3327-3336.

De Arcangelis, L., J. Koplik, S. Redner et D. Wilkinson (1986). Hydrodynamic dispersion in network models of porous media. *Physical Review Letters*, 57 (8) 996-999.

De Gennes, P. G. (1983). Hydrodynamic dispersion in unsaturated porous media. *J. Phys. Mech.*, 136: 189-200.

Delay, F. et J. L. Lamotte (1997). On the stability of 2D-interpolation algorithms with uncertain data. *Math. And Comput. In Simulations*, 43 (2): 183-201.

Delay, F., et J. L. Lamotte (2000). Numerical simulations of random fields to solve inverse problems: How to improve their conditioning on available data. *Math. Comput.*, 52 (3-4): 311-331.

De Marsily, G. (1985). Flow and transport in fractured rocks : connectivity and scale effect. *Mem. Int. Assoc. Hydrogeol.*, 17 (2): 267-277.

Di Federico, V. et S. P. Neuman (1998a). Flow in multiscale log conductivity fields with truncated power variograms. *Water Resources Research*, 34 (5): 975-987.

Di Federico, V. et S. P. Neuman (1998b). Transport in multiscale log conductivity fields with truncated power variograms. *Water Resources Research*, 34 (50): 963-973.

Domenico, P. A. et F. W. Schwartz (1990). *Physical and Chemical Hydrogeology*. New York, John Wiley & Sons, 810 p.

Dverstorp, B., J. Andersson et W. Nordqvist (1992). Discrete fracture network interpretation of field tracer migration in sparsely fractured rock. *Water Resources Research*, 28 (9): 2327-2343.

Endo, H. K., J. C. S. Long, C. R. Wilson, et P. A. Witherspoon (1984). A model for investigating mechanical transport in fracture networks. *Water Resources Research*, 20 (10): 1390-1400.

Englman, R., Y. Gur et Z. Jaeger (1983). Fluid flow through a crack network in rocks. *J. Appl. Mech.*, 50: 707-711.

Feder, J. (1988). *Fractals*, New York, Plenum Press Inc, 283 p.

- Feng, S., B. I. Halperin et P. N. Sen (1987). Transport properties of continuum systems near the percolation threshold. *Phys. Rev. B*, 35 (1): 197-214.
- Fetter, C. W. (1993). *Contaminant Hydrogeology*, New York, Macmillan Publishing Company, 452 p.
- Freeze, R. A. et J. A. Cherry (1979). *Groundwater*. New York, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 604 p.
- Gavrilenko, P. et Y. Guéguen (1998). Flow in fractured media: A modified renormalization method. *Water Resources Research*, 34 (2): 177-191.
- Gelhar, L. E. et C. L. Axness (1983). Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19 (1): 161-180.
- Gelhar, L. W., A. L. Gutjahr et R. L. Naff (1979). Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer. *Water Resources Research*, 15 (6): 1387-1397.
- Gelhar, L. W., A. Mantoglou, C. Welty et K. R. Rehfeldt (1985). *A review of field-scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media*. EA-4190, projet de recherche 2485-5, Norris, EPRI.
- Gelhar, L. W., C. Welty et K. R. Rehfeldt (1992). A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 28 (7): 1955-1974.
- Gerke, H. H. et M. T. Van Genuchten (1993). A dual porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resources Research*, 29 (20): 305-319.
- Gist, G. A., A. H. Thompson, A. J. Katz et R. L. Higgins (1990). Hydrodynamic dispersion and pore geometry in consolidated rock. *Phys. Fluids A*, 2 (9): 1533-1544.
- Glimm, J., B. Lindquist, F. Pereira et Q. Zhang (1993). A theory of macrodispersion for the scale-up problem. *Transport in Porous Media*, 13: 97-122.
- Gouyet, J.-F. (1996). *Physics and Fractal Structures*, Paris, Masson, 234 p.
- Goovaerts, P. (1997). *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. Applied Geostatistics Series, Oxford University Press, 483 p.
- Halperin, B. I., S. Feng et P. N. Sen (1985). Differences between lattice and continuum percolation transport exponents. *Phys. Rev. Lett.*, 54 (22): 2391-2394.

Hamm, S.-Y. et P. Bidaux (1996). Dual porosity fractal models for transient flow analysis in fissured rocks. *Water Resources Research*, 32 (9): 2733-2745.

Hassan, A. E., J. H. Cushman et J. W. Delleur (1997). Monte Carlo studies of flow and transport in fractal conductivity fields : Comparison with stochastic perturbation theory. *Water Resources Research*, 33 (11): 2519-2534.

Hestir, K. et J. C. S. Long (1990). Analytical expressions for the permeability of random two-dimensional Poisson fracture networks based on regular lattice percolation and equivalent media theories, *J. Geophysic. Res.*, 95 (B13): 21 565-21 581.

Hewett, T. A. (1986). *Fractal distribution of reservoir heterogeneity and their influence on fluid transport*. Society of Petroleum Engineers, SPE 15386, 16 p.

Huseby, O., J.-F. Thovert et P. M. Adler (2001). Dispersion in three-dimensional fracture networks, *Physics of Fluids*, 13 (3): 594-615.

Isaaks, E. H. et R. M. Srivastasa (1989). *An Introduction to Applied Geostatistics*. New York, Oxford University Press, 561 p.

Isichenko, M. B. (1992). Percolation, statistical topography, and transport in random media, *Rev. Mod. Phys.*, 64 (4): 961-1043.

Jerauld, G. R., L. E. Scriven et H. T. Davis (1984). Percolation and conduction on the 3D Voronoi and regular networks : a second case study in topological disorder. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 17: 3429-3439.

Kirkpatrick, S. (1973). Percolation and conduction, *Reviews of Modern Physics*, 45 (4): 574-588.

Knackstedt, M. A., M. Sahimi et A. P. Sheppard (2000). Invasion percolation with long-range correlations: First-order phase transition and non-universal scaling properties. *Physical Review E*, 61 (5): 4920-4934.

Koch, D. L. et J. F. Brady (1988). Anomalous diffusion in heterogeneous porous media. *Phys. Fluids*, 31 (5): 965-973.

Koplik, J., S. Redner et D. Wilkinson (1988). Transport and dispersion in random networks with percolation disorder. *Phys. Rev. A*, 37 (7): 2619-2636.

Kupper, J.A., F. W. Schwartz et P. M. Steffler (1995). A comparison of fracture mixing models 2. Analysis of simulation trials. *Journal of Contaminant Hydrology*, 18: 33-58.

Lallemand-Barrès, A. et P. Peaudecerf (1978). Recherche des relations entre la valeur de la dispersivité macroscopique d'un milieu aquifère, ses autres caractéristiques et les conditions de mesure. *Bulletin du B.R.G.M.* (deuxième série), section III, n° 4-1978: 277-284.

Lee, C. H., B. S. Lin et J. L. Yu (1994). Dispersion and connectivity in flow through fractured networks. *Journal of the Chinese Institute of Engineers*, 17 (4): 521-535.

Lin, B.-S., et C.-H. Lee (1998). An explanation of distance-dependent dispersion of mass transport in fractured rock. *Journal of the Chinese Institute of Engineers*, 21 (3): 365-372.

Liu, H. H. et F. J. Molz (1996). Discrimination of fractional Brownian movement and fractional Gaussian noise structures in permeability and related property distributions with range analyses. *Water Resources Research*, 32 (8): 2601-2605.

Liu, H. H. et F. J. Molz (1997). Multifractal analyses of hydraulic conductivity distributions, *Water Resources Research*, 33 (11): 2483-2488.

Loaiciga, H. A. (1988). Hydrodynamic dispersion : Estimation and prediction. *Hydr. Eng. Proc.*, ASCE: 1176-1181.

Long, J. C. S. et D. M. Billaux (1987). From field data to fracture network modeling: An example incorporating spatial structure. *Water Resources Research*, 23 (7): 1201-1216.

Long, J., P. Gilmour et P. A. Witherspoon (1985). A model for steady state fluid flow in random, three dimensional networks of disk shaped fractures. *Water Resources Research*, 21 (8): 1105-1115.

Long, J. C. S., K. Karasaki, A. Davey, J. Peterson, M. Landsfield, J. Kemeny and S. Martel (1991). An inverse approach to construction of fracture hydrology models conditioned by geophysical data: An example from the validation exercises at the Stripa mine. *International Journal of Rock Mechanics and Mineral Sciences & Geomechanics Abstracts*, 28 (2/3): 121-142.

Long, J. C. S., J. S. Remer, C. R. Wilson et P. A. Witherspoon (1982). Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research*, 18 (3): 645-658.

Long, J. C. S. et P. A. Witherspoon (1985). The relationship of the degree of interconnection to permeability in fracture networks. *J. Geophys. Res.*, 90 (B4): 3087-3098.

Makse, H. A., Andrade, J. S. and H. E. Stanley (2000). Tracer dispersion in a percolation network with spatial correlations. *Physical Review E*, 61 (1): 583-586.

Matheron, G. et G. De Marsily (1980). Is transport in porous media always diffusive ? A counterexample. *Water Resources Research*, 16 (5): 901-917.

Mercado, A. (1967). The spreading pattern of injected water in a permeability stratified aquifer. Symposium of Haifa, Artificial recharge and management of aquifers, *IASH publ.* 72: 23-36.

Minkowycz, W. J., E. M. Sparrow, G. E. Schneider et R. H. Pletcher (1988). *Handbook of Numerical Heat Transfer*, New York, John Wiley & Sons Inc, 1040 p.

Moench, A. F. (1984). Double porosity models for a fissured groundwater reservoir with fracture skin. *Water Resources Research*, 20 (7): 831-846.

Molz, F. J. et G. K. Boman (1993). A stochastic interpolation scheme in subsurface hydrology. *Water Resources Research*, 29 (11): 3769-3774.

Molz, F. J., O. Guven et J. G. Melville (1983). An examination of scale-dependent dispersion coefficients. *Ground Water*, 21 (6): 715-725.

Molz, F. J., H. H. Liu et J. Szulga (1997). Fractional Brownian motion and fractional Gaussian noise in subsurface hydrology: A review, presentation of fundamental properties, and extensions. *Water Resources Research*, 33 (10): 2273-2286.

Moreno, L., et I. Neretnieks (1993). Fluid flow and solute transport in a network of channels. *Journal of Contaminant Hydrology*, 14 (3-4): 163-192.

Moreno, L., Y. W. Tsang, C. F. Tsang, F. V. Hale et I. Neretnieks (1988). Flow and tracer transport in a single fracture: A stochastic model and its relation to some field observations. *Water Resources Research*, 24 (12): 2033-2048.

Moreno, L., Y. W. Tsang, C. F. Tsang et I. Neretnieks (1990). Some anomalous features of flow and solute transport arising from fracture aperture variability. *Water Resources Research*, 26 (10): 2377-2391.

Mukhopadhyay, S. et J.H. Cushman (1998). Monte Carlo simulation of contaminant transport : 1. Long-range correlations in fracture conductivity. *Transport in Porous Media*, 31 (2): 145-181.

- Neretnieks, I. (1983). A note on fracture flow dispersion mechanisms in the ground. *Water Resources Research*, 19 (2): 364-370.
- Neuman, S. P. (1990). Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. *Water Resources Research*, 26 (8): 1749-1758.
- Neuman, S. P. (1993). Comment on «A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers» par L. W. Gelhar, C. Welty et K. R. Rehfeldt. *Water Resources Research*, 29 (6): 1863-1865.
- Neuman, S. P. (1994). Generalized scaling of permeabilities : Validation and effect of support scale. *Geophysical Research Letters*, 21 (5): 349-352.
- Neuman, S. P. (1995). On advective transport in fractal permeability and velocity fields. *Water Resources Research*, 31 (6): 1455-1460.
- Neuman, S. P. et Y.-K. Zhang (1990). A quasi-linear theory of non-fickian and fickian subsurface dispersion 1. Theoretical analysis with application to isotropic media. *Water Resources Research*, 26 (5): 887-902.
- Nordqvist, A. W., Y. W. Tsang, C. F. Tsang, B. Dverstorp et J. Andersson (1992). A variable aperture fracture network model for flow and transport in fractured rocks. *Water Resources Research*, 28 (6): 1703-1713.
- Painter, S. (1996). Evidence for non-Gaussian scaling behavior in heterogeneous sedimentary formations. *Water Resources Research*, 32 (5): 1183-1195.
- Pankow, J. F., R. L. Johnson, J. P. Hewetson et L. A. Cherry (1986). An evaluation of contaminant migration patterns at two waste disposal sites on fractured porous media in terms of the equivalent porous medium (EPM) model. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1: 65-76.
- Park, Y. J. et K. K. Lee (1999). Analytical solutions for solute transfer characteristics at continuous fracture junctions. *Water resources research*, 35 (5): 1531-1537.
- Park, Y.-J., K. K. Lee et B. Berkowitz (2001). Effects of junction transfer characteristics on transport in fracture networks. *Water Resources Research*, 37 (4): 909-924.
- Parney, R. et L. Smith (1995). Fluid velocity and path length in fractured media. *Geophysical Research Letters*, 22 (11): 1437-1440.

Philip, J. R. (1986). Issues in flow and transport in heterogeneous media. *Transport in Porous Media*, 1: 319-338.

Pickens, J. F. et G. E. Grisak (1981). Scale-dependent dispersion in a stratified granular aquifer. *Water Resources Research*, 17 (4): 1191-1211.

Prakash, S., S. Havlin, M. Schwartz et H. E. Stanley (1992). Structural and dynamical properties of long-range correlated percolation. *Phys. Rev. A*, 46 (4): R1724-R1727.

Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling (1992). *Numerical Recipes in Pascal*. Cambridge University Press, 759 p.

Rajaram, H. et L. W. Gelhar (1995). Plume-scale dependent dispersion in aquifers with a wide range of scales of heterogeneity. *Water Resources Research*, 31 (10): 2469-2482.

Renault, P. (1991). The effect of spatially correlated blocking-up of some bonds or nodes of a network on the percolation threshold. *Transport in Porous Media*, 6: 451-468.

Robinson, P. C. (1984). Numerical calculations of critical densities for lines and planes. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 17: 2823-2830.

Ross, B. (1986). Dispersion in fractal fracture networks. *Water Resources Research*, 22 (5): 823-827.

Rouleau, A. (1984). *Statistical characterization and numerical simulation of a fracture system – Application to groundwater flow in the Stripa granite*. Thèse, Université de Waterloo, 416 p.

Rouleau, A. et J. E. Gale (1987). Stochastic discrete fracture simulation of groundwater flow into an underground excavation in granite. *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 24 (2): 99-112.

Roux, S., C. Mitescu, E. Charlaix et C. Baudet (1986). Transfer matrix algorithm for convection-biased diffusion. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 19: L687-L692.

Sahimi, M. (1987). Hydrodynamic dispersion near the percolation threshold : Scaling and probability densities. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 20 (18): L1293-L1298.

Sahimi, M. (1993). Fractal and superdiffusive transport and hydrodynamic dispersion in heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, 13 (1): 3-40.

Sahimi, M. (1994). *Applications of Percolation Theory*. London, Taylor & Francis, 258 p.

- Sahimi, M. (1995). *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock* : From Classical Methods to Modern Approaches. Weinheim, publications VCH, 482 p.
- Sahimi, M. (2000). Characterization of geology of, and flow and transport in, field-scale porous media. Dans: *Handbook of Porous Media*, édité par K. Vafai, New York, Mercel Dekker: 113-170.
- Sahimi, M., B. D. Hughes, L. E. Scriven et H. T. Davis (1986). Dispersion in flow through porous media – 1. One-phase flow. *Chemical Engineering Science*, 41 (8): 2103-2122.
- Sahimi, M. et A. O. Imdakm (1988). The effect of morphological disorder on hydrodynamic dispersion in flow through porous media. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 21 (19): 3833-3870.
- Sahimi, M. et S. Mukhopadhyay (1996). Scaling properties of a percolation model with long-range correlations. *Phys. Rev. E*, 54 (4): 3870-3880.
- Schwartz, F. W. et L. Smith (1988). Continuum approach for modeling mass transport in fractured media. *Water Resources Research*, 24 (8): 1360-1372.
- Schwartz, F. W., L. Smith et A. S. Crowe (1983). A stochastic analysis of macroscopic dispersion in fractured media. *Water Resources Research*, 19 (5): 1253-1265.
- Shante, V. K. S. (1977). Hopping conduction in quasi-one-dimensional disordered compounds. *Phys. Rev. B*, 16 (6): 2597-2612.
- Shapiro, A. M. et J. Andersson (1983). Steady-state fluid response in fractured rock : A boundary element solution for a coupled discrete fracture continuum model. *Water Resources Research*, 19 (4): 959-969.
- Silliman, S. E. (1990). The influence of grid discretization on the percolation probability within discrete random fields. *Journal of Hydrology*, 113 (1/4): 177-191.
- Silliman, S. E. et A. L. Wright (1988). Stochastic analysis of paths of high hydraulic conductivity in porous media. *Water Resources Research*, 24 (11): 1901-1910.
- Smith, L. et F. W. Schwartz (1980). Mass transport 1. A stochastic analysis of macroscopic dispersion. *Water Resources Research*, 16 (2): 303-313.
- Smith, L. et F. W. Schwartz (1984). An analysis of the influence of fracture geometry on mass transport in fractured media. *Water Resources Research*, 20 (9): 1241-1252.

- Snow, D. T. (1969). Anisotropic permeability of fractured media. *Water Resources Research*, 5 (6) : 1273-1289.
- Sposito, G., W. A. Jury et V. K. Gupta (1986). Fundamental problems in the stochastic convection-dispersion model of solute transport in aquifers and field soils. *Water Resources Research*, 22 (1): 77-88.
- Stauffer, D. et A. Aharony (1992). *Introduction to Percolation Theory*. seconde édition, Londres, Taylor & Francis, 181 p.
- Taylor S. R., G. L. Moltyaner, K. W. F. Howard et R. W. D. Killey (1987). A comparison of field and laboratory methods for determining contaminant flow parameters. *Ground Water*, 25 (3): 321-330.
- Therrien, R. et E. A. Sudicky (1996). Three-dimensional analysis of variably-saturated flow and solute transport in discretely-fractured porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23 (1-2), 1-44.
- Tsang, C. F., L. Gelhar, G. De Marsily et J. Andersson (1994). Solute transport in heterogeneous media : A discussion of technical issue coupling site characterization and predictive assessment. *Advances in Water Resources*, 17: 259-264.
- Tsang, Y. W. et C. F. Tsang (1987). Channel model of flow through fractured media. *Water Resources Research*, 23 (3): 467-479.
- Tsang, C. F., Y. W. Tsang et F. V. Hale (1991). Tracer transport in fractures : Analysis of field data based on a variable-aperture channel model. *Water Resources Research*, 27 (12): 3095-3106.
- Tsang, Y. W., C. F. Tsang, F. V. Hale et B. Dverstorp (1996). Tracer transport in a stochastic continuum model of fractured media. *Water Resources Research*, 32 (10): 3077-3092.
- Tyler, S. W. et S. W. Wheatcraft (1992). Réponse à un commentaire de J. R. Philip au sujet de l'article «An explanation of scale-dependent dispersivity in heterogeneous aquifers using concepts of fractal geometry» par Wheatcraft et Tyler. *Water Resources Research*, 28 (5): 1487-1490.
- Warren, J. E. et P. J. Root (1963). The behavior of naturally fractured reservoirs, *Trans. Soc. Pet. Eng. AIME*, 228 (3): 245-255.
- Weinrib, A. (1984). Long-range correlated percolation. *Phys. Rev. B*, 29 (1): 387-395.

- Weinrib, A. et B. I. Halperin (1983). Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B*, 27 (1): 413-425.
- Wels, C. et L. Smith (1994). Retardation of sorbing solutes in fractured media, *Water Resources Research*, 30 (9): 2547-2563.
- Wheatcraft, S.W. et S. W. Tyler (1988). An explanation of scale-dependent dispersivity in heterogeneous aquifers using concepts of fractal geometry. *Water Resources Research*, 24 (4): 566-578.
- Wilke, S., E. Guyon et G. De Marsily (1985). Water penetration through fractured rocks : Test of a tridimensional percolation description. *Mathematical Geology*, 17 (1): 17-27.
- Xu, M. et Y. Eckstein (1995). Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and field scale. *Ground Water*, 33 (6): 905-908.
- Yanuka, M. (1992). Percolation theory approach to transport phenomena in porous media. *Transport in Porous Media*, 7: 265-282.
- Yanuka, M. et R. Engelman (1990). Bond-site percolation : Empirical representation of critical probabilities. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 23: L339-L345.
- Zhan, H. et S. W. Wheatcraft (1996). Macrodispersivity tensor for nonreactive solute transport in isotropic and anisotropic fractal porous media : Analytical solutions. *Water Resources Research*, 32 (12): 3461-3474.



ANNEXE A – CALCUL DES CHARGES HYDRAULIQUES AUX NŒUDS

A-1 Rappel sur les différences finies

Par la loi de Darcy, nous avons pour un réseau régulier :

$$\sum_{i=1}^{N \times N} Q_i = K_i \frac{\Delta h_i}{\Delta L} A = K_i \Delta h_i = 0 \quad (\text{A.1})$$

puisque ΔL et A sont identiques partout dans le domaine. Si on utilise $(h_{\text{nœud.}} - h_i)$ pour représenter la différence de charge entre deux nœuds et si on numérote les directions (Nord-Est-Sud-Ouest) de 1 à 4, on trouve la charge à chacun des nœuds avec:

$$h_{\text{moyenne}} = \frac{K_1 h_1 + K_2 h_2 + K_3 h_3 + K_4 h_4}{(K_1 + K_2 + K_3 + K_4)} \quad (\text{A.2})$$

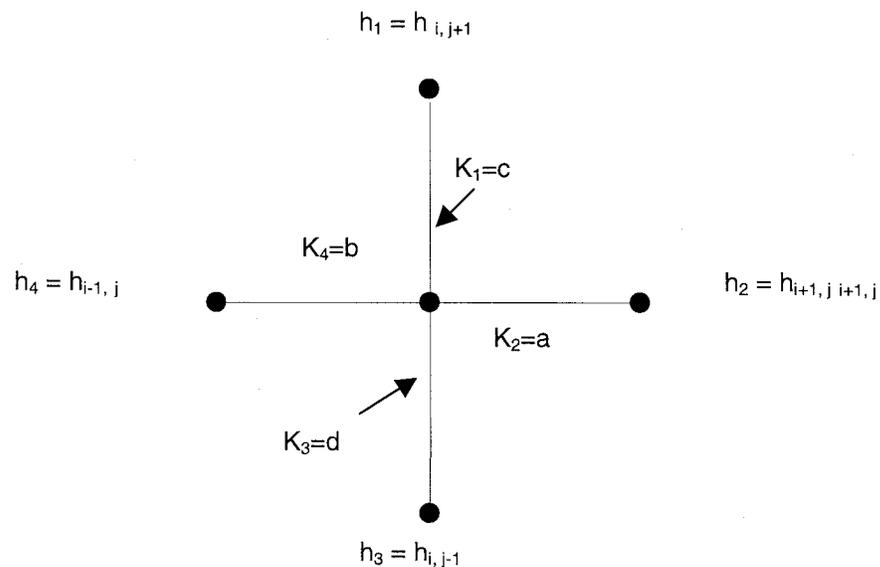


Figure A-1 : Schéma des quatre nœuds entourant la charge à l'étude

A-2 Méthode de Gauss-Seidel

La méthode Gauss-Seidel, aussi appelée méthode des déplacements successifs, utilise les charges calculées au temps $t-1$ mais aussi celles déjà calculées au temps t pour calculer la charge à un nœud. Le système $A \cdot X = B$ est résolu en séparant la matrice A en trois parties : la matrice triangulaire supérieure (U pour upper), la diagonale (D) et la matrice triangulaire inférieure (L pour lower). Le calcul de la charge à un temps t inclue les charges des matrices D et U calculées au temps $t-1$ et celles de la matrice L au temps t qui ont déjà été calculées.

Si on isole les inconnus, on obtient pour chaque nœud i, j :

$$h_{i,j} = \frac{1}{e_{i,j}} (a_{i,j} \cdot h_{i+1,j} + b_{i,j} \cdot h_{i-1,j} + c_{i,j} \cdot h_{i,j+1} + d_{i,j} \cdot h_{i,j-1} + f_{i,j}) \quad (\text{A-3})$$

où a, b, c et d représentent les conductivité hydraulique (K) des liens entourant le nœud à l'étude. Par exemple dans les réseaux à $0-90^\circ$, a correspond à la K du lien à droite, b celle de gauche, c celle au-dessus, d celle en dessous, $e=(a+b+c+d)$ et $f_{i,j}$ constitue un élément de la matrice B . Il s'agit donc de construire des matrices pour les inconnus h ainsi que pour les coefficients a, b, c, d, e et f en fonction de la charge à calculer. Les charges se rapportent donc aux nœuds, tandis que les conductivités hydrauliques sont associées aux liens. Dans notre cas à cause des conditions périodiques utilisées, il existe des exceptions à l'équation A-3 pour la première colonne de nœuds (la dernière n'étant pas calculée).

Les charges $h_{i,j-1}$ et $h_{i-1,j}$ correspondent au temps t , tandis que les autres charges sont au temps $t-1$. Sous forme matricielle, on a :

$$D \cdot h^t = B - L \cdot h^t - U \cdot h^{t-1}$$

si les éléments non nuls des matrices a, b, c et d sont négatifs. Si on divise par la matrice D pour isoler h^t et on additionne de chaque côté de l'équation $-D^{-1} \cdot D \cdot h^{t-1}$, on obtient :

$$h^t = D^{-1} \cdot D \cdot h^{t-1} + D^{-1} [B - L \cdot h^t - U \cdot h^{t-1} - D \cdot h^{t-1}]$$

$$h^t = h^{t-1} + D^{-1} [B - L \cdot h^t - (U + D) \cdot h^{t-1}].$$

La valeur $[B - L \cdot h^t - (U + D) \cdot h^{t-1}]$ est une « réactualisation » de $[B - A \cdot X] = \varepsilon$, où ε est le résidu. La méthode SOR apporte le paramètre de relaxation ψ , qui permet d'accélérer le processus en ajustant le pas de calcul sur la direction de la descente. Cette méthode

peut être vue comme l'application d'une correction aux valeurs obtenues de Gauss-Seidel. La formule générale de relaxation est :

$$h^t = h^{t-1} + \psi D^{-1} [B - L \cdot h^t - (U + D) \cdot h^{t-1}] \quad (\text{A-4})$$

qui peut également s'écrire sous forme simplifiée :

$$h^t = h^{t-1} + \psi \cdot \frac{\varepsilon}{e_{i,j}} \quad (\text{A-5})$$

où $\varepsilon = [B - (b+d) \cdot h^t - (a+c+e) \cdot h^{t-1}]$.

La méthode est convergente seulement pour $0 < \psi < 2$. Si ω est compris entre 0 et 1, on parle de sous-relaxation. Ce paramètre permet alors de faire converger des systèmes qui ne convergeraient pas simplement avec la méthode de Gauss-Seidel. Si ψ est entre 1 et 2, la sur-relaxation permet alors d'accélérer la convergence, ce qui est notre cas. La méthode SOR avec un ψ optimal converge généralement avec N itérations, contrairement à N^2 pour Gauss-Seidel. Pour calculer le paramètre ψ dans le cas où $\Delta x = \Delta y$ et en présence de conditions périodiques, on peut utiliser [Minkowycz *et al.*, 1988 ; Press *et al.*, (1992)]:

$$\rho_{Jacobi} = \frac{\cos(2\pi/L) + \cos(2\pi/N)}{2} \quad \text{avec} \quad \psi = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_{Jacobi}^2}} \quad (\text{A-6})$$

où N est le nombre de liens dans une direction et L est la longueur du domaine (nombre de liens fois la taille de chaque lien). Pour les tailles de réseaux choisies (50×50 à 300×300), les valeurs de ψ calculées avec l'équation A-6 vont de 1,84 à 1,97.

Nous utilisons dans notre programmation une version légèrement modifiée de l'équation A-5. Nous ne construisons pas de matrices a, b, c, d, e et f, mais conservons simplement la moyenne pondérée des charges à chaque nœud. Un résidu déjà divisé par le coefficient rattaché à $h_{i,j}$ (correspondant à $e_{i,j}$) est alors calculé avec :

$$\varepsilon' = h_{moyenne} - h_{i,j} \quad (\text{A-7})$$

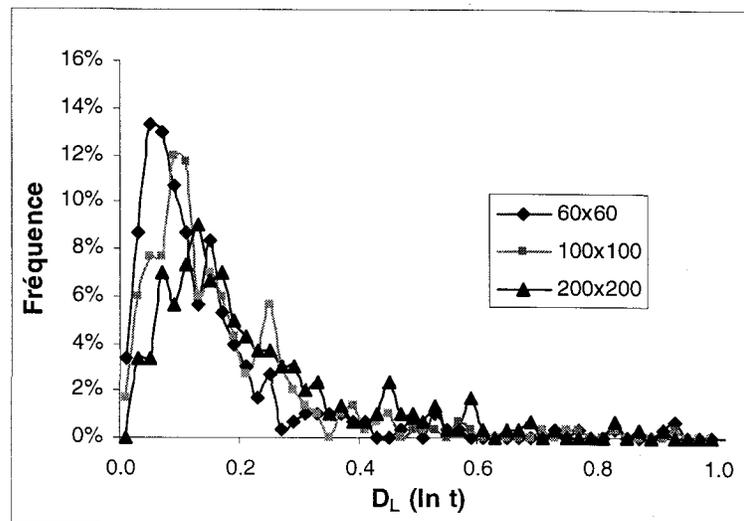
permettant de trouver le nouveau $h_{i,j}$ avec :

$$h^t_{i,j} = h^{t-1}_{i,j} + \psi \cdot \varepsilon' \quad (\text{A-8})$$

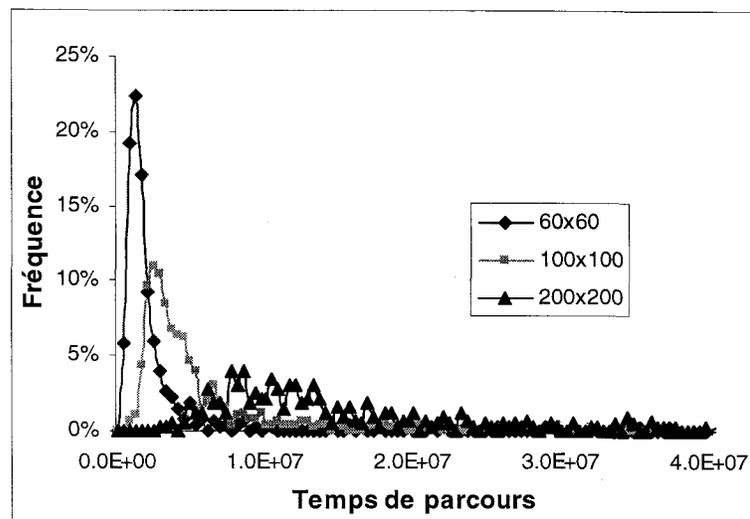
Le processus itératif se termine lorsque les différences entre les nouvelles charges calculées et les anciennes sont toutes inférieures à $(h_{\max} - h_{\min}) \cdot 10^{-\Omega}$, Ω étant la précision

désirée. Avec une précision de 10^{-10} , les débits de toutes les rangées de liens sont identiques et les résultats des charges convergent toutes vers les même valeurs quelle que soit la valeur de ψ . Toutefois, le choix de la valeur de ψ influence énormément le temps de calcul. La simulation de 50 réseaux de chaque taille a révélé que toutes les valeurs de ψ_{opt} correspondaient à une valeur très proche de 2, valeur maximale au-delà de laquelle le système devient instable. Plus ψ diminue sous cette valeur, plus le nombre d'itérations requis est élevé. Par exemple, les réseaux 100x100 nécessitent 30 fois moins d'itérations avec $\psi=1,99$ qu'avec $\psi=1,5$. L'utilisation du ψ_{opt} est donc extrêmement avantageuse.

ANNEXE B – RÉSEAUX NON CORRÉLÉS

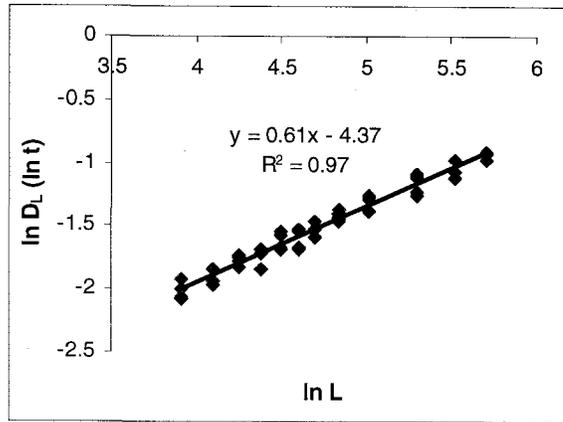


a)

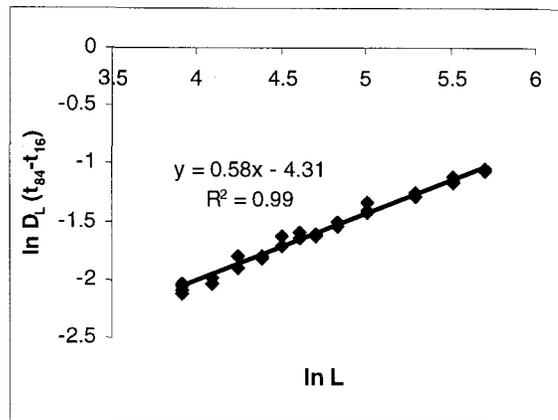


b)

Figure B-1 : Pour trois tailles de réseaux aléatoires au seuil de percolation ($p=p_c$) a) Distributions du coefficient de dispersion longitudinale et b) Distributions du temps de parcours

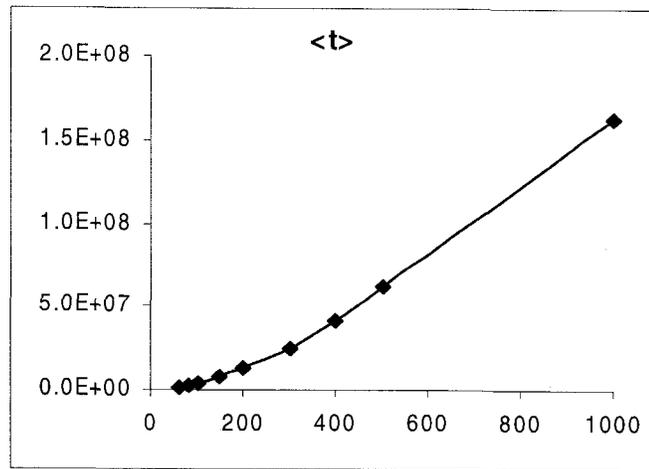


a)

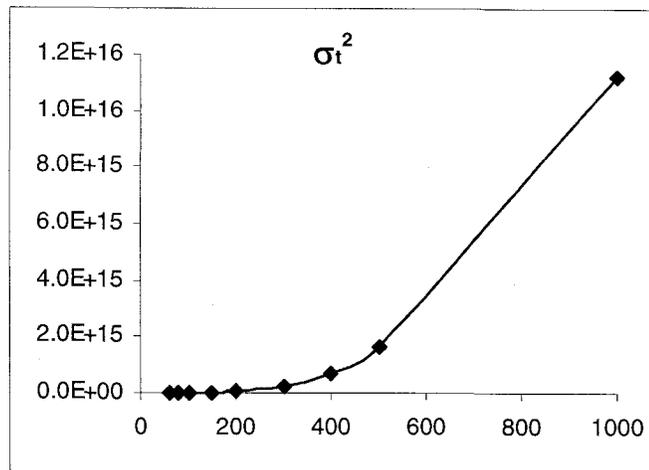


b)

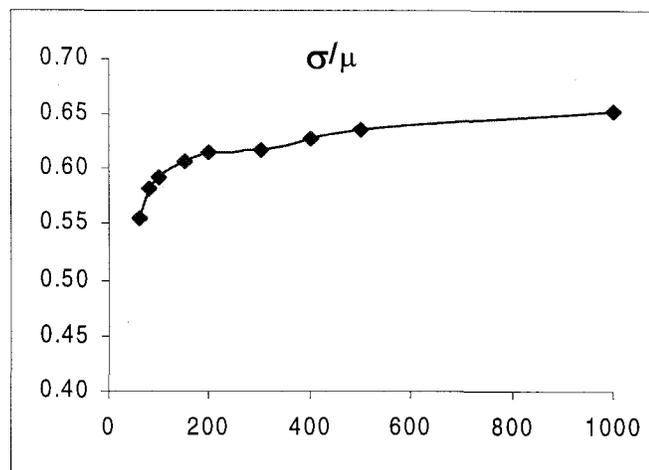
Figure B-2 : Graphiques log-log de DL en fonction de la taille des réseaux a) Pour la méthode utilisant les logarithmes des temps de parcours et b) Pour la méthode utilisant les percentiles des temps de parcours



a)



b)



c)

Figure B-3 : Temps de parcours, variances et coefficient de variation ($\sigma/\langle t \rangle$) en fonction de la taille des réseaux

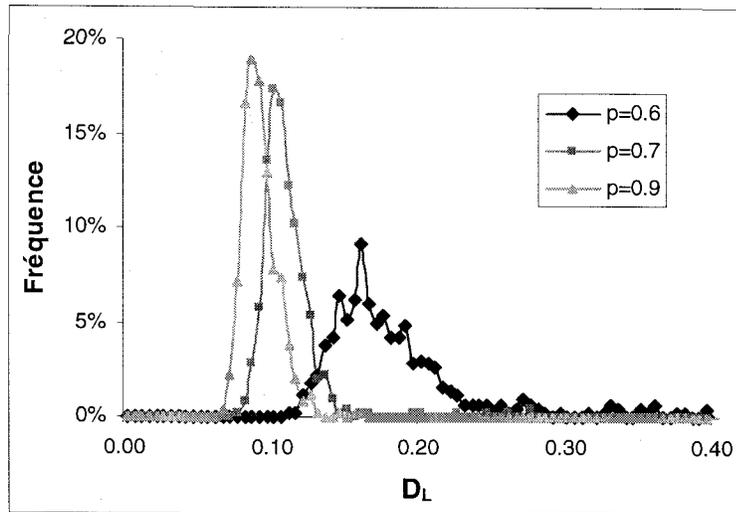


Figure B-4 : Distributions de DL pour $p=0,6, 0,7$ et $0,9$

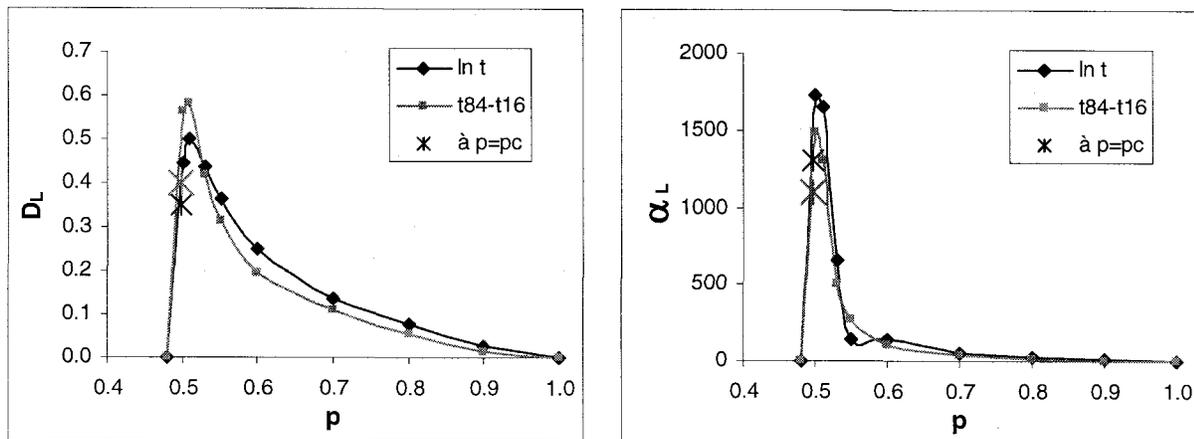


Figure B-5 : Comportement des réseaux 300x300 en fonction de la probabilité p a) Dispersion longitudinale et b) Dispensivité longitudinale

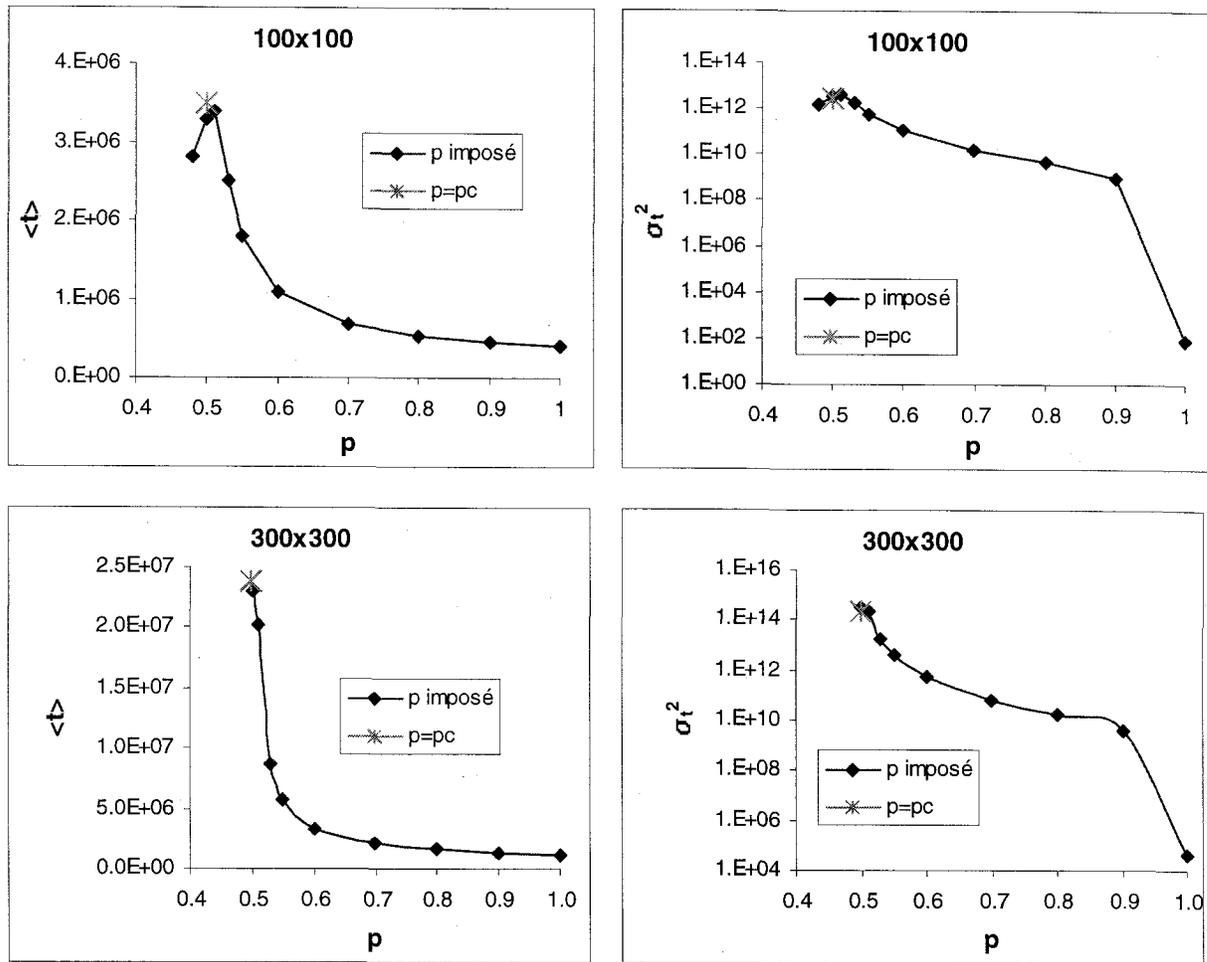


Figure B-6 : Temps de parcours moyens et variances moyennes pour différentes probabilités p (réseaux 100x100 et 300x300)

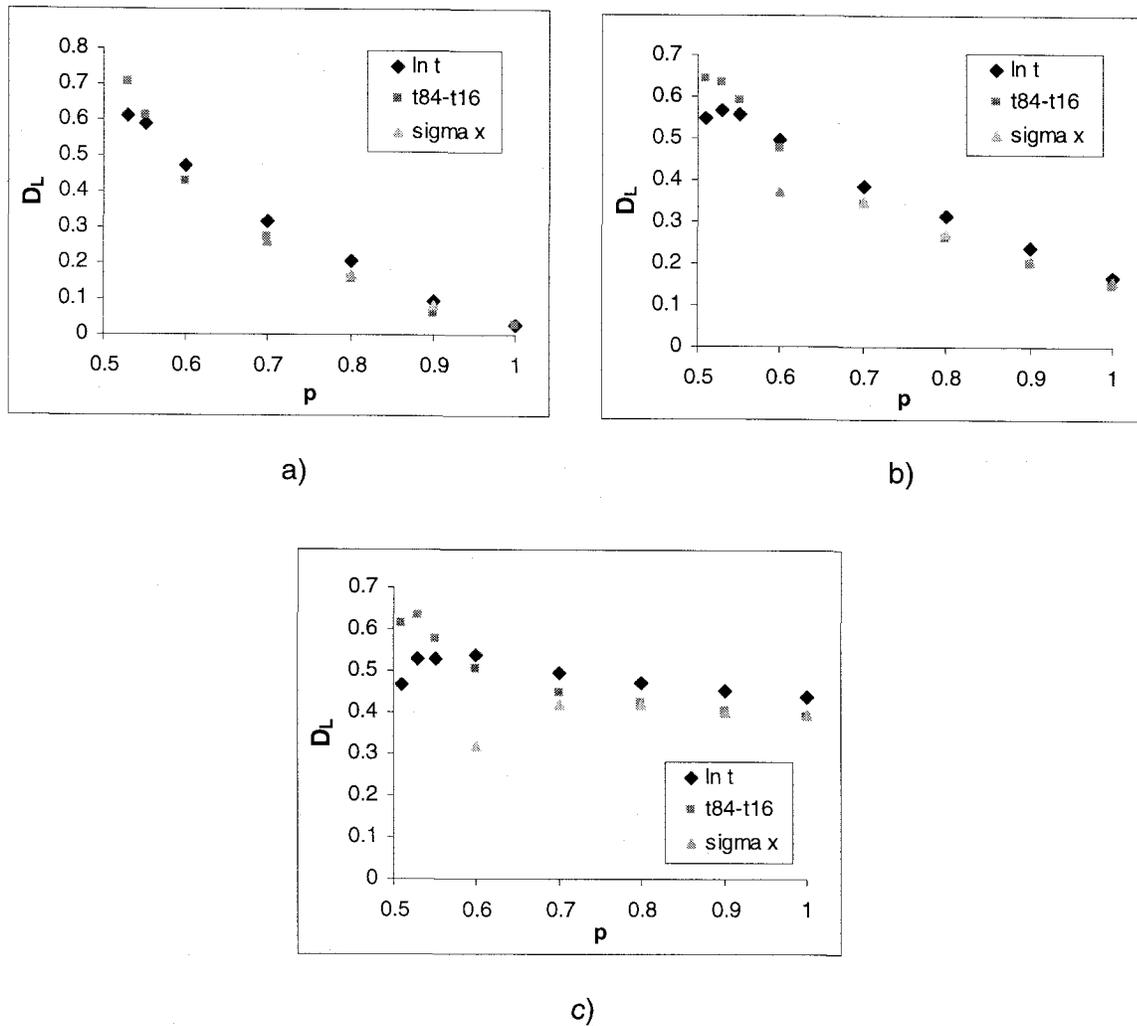


Figure B-7 : Comportement de D_L calculé avec les trois approches (distribution des logarithmes des temps de parcours, percentiles des temps de parcours et distribution des particules dans l'espace) en fonction de p pour les trois distributions log-normales de K a) $\sigma_{\ln K}=0,5$, b) $\sigma_{\ln K}=1,0$ et c) $\sigma_{\ln K}=1,5$

ANNEXE C – RÉSEAUX fBm

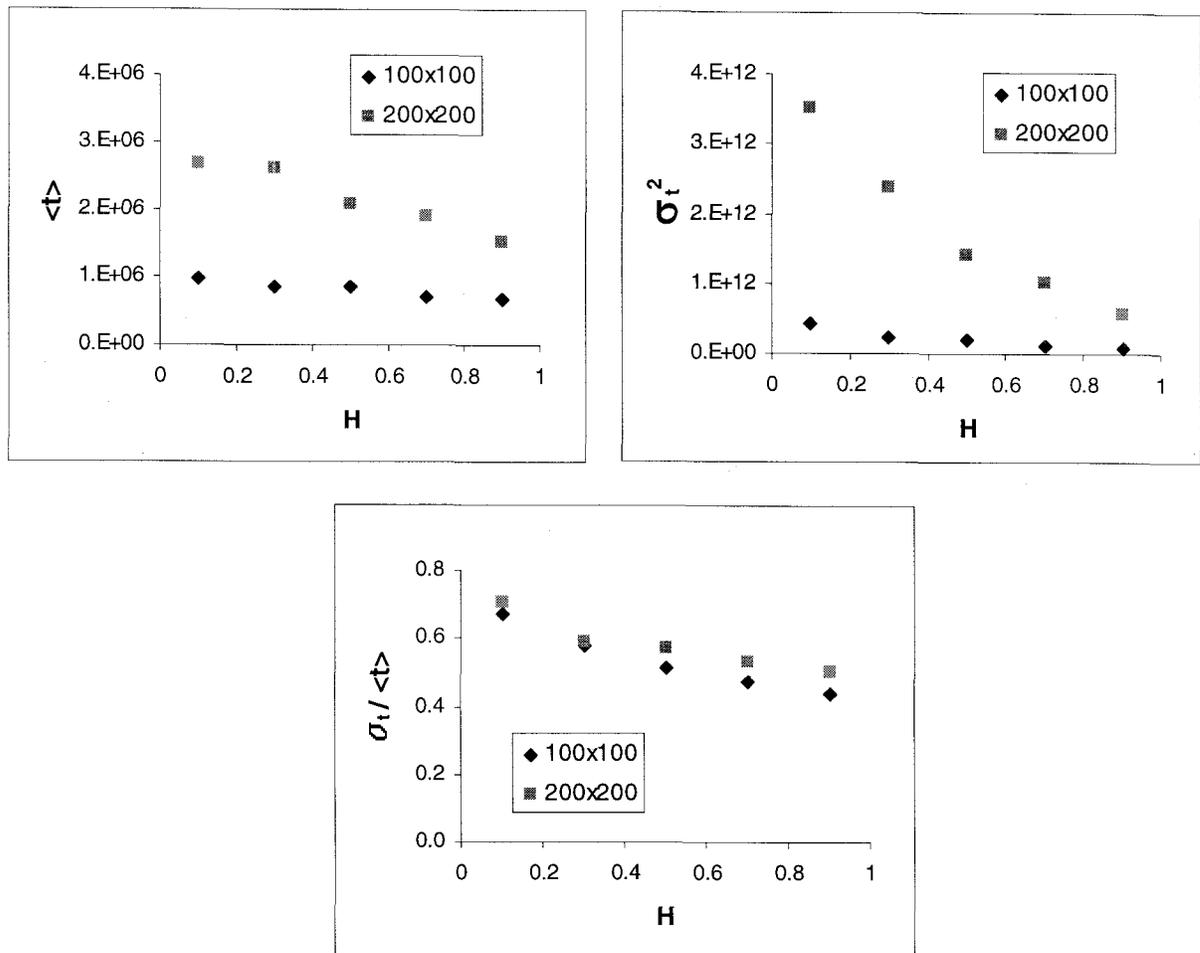


Figure C-1 : Temps de parcours, variance et coefficient de variation de réseaux fBm isotropes en fonction du coefficient de Hurst

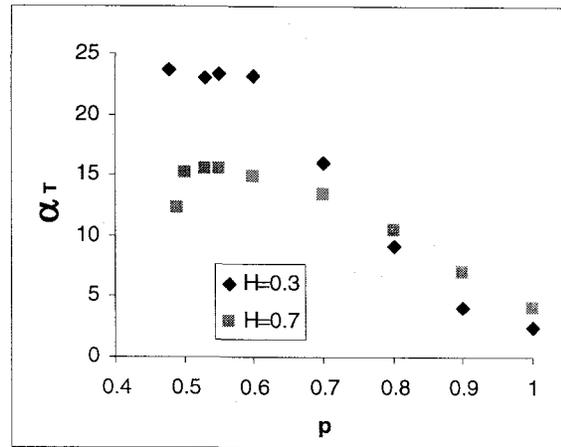
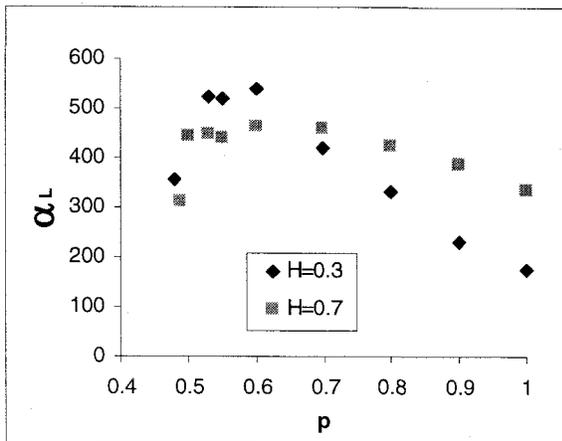
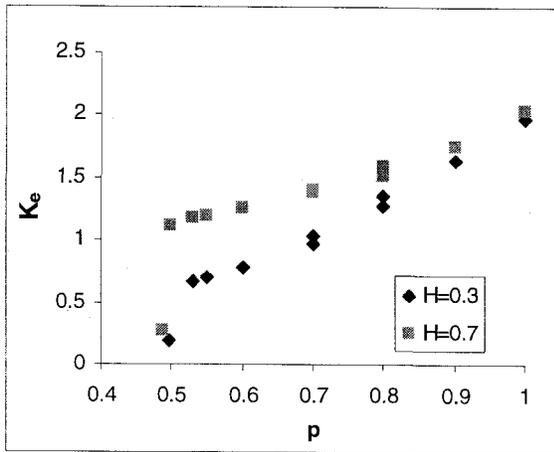


Figure C-2: K_e , α_L et α_T en fonction de p (réseaux 100x100 isotropes ayant une longueur de corrélation infinie, $\sigma_{in K}=1$)

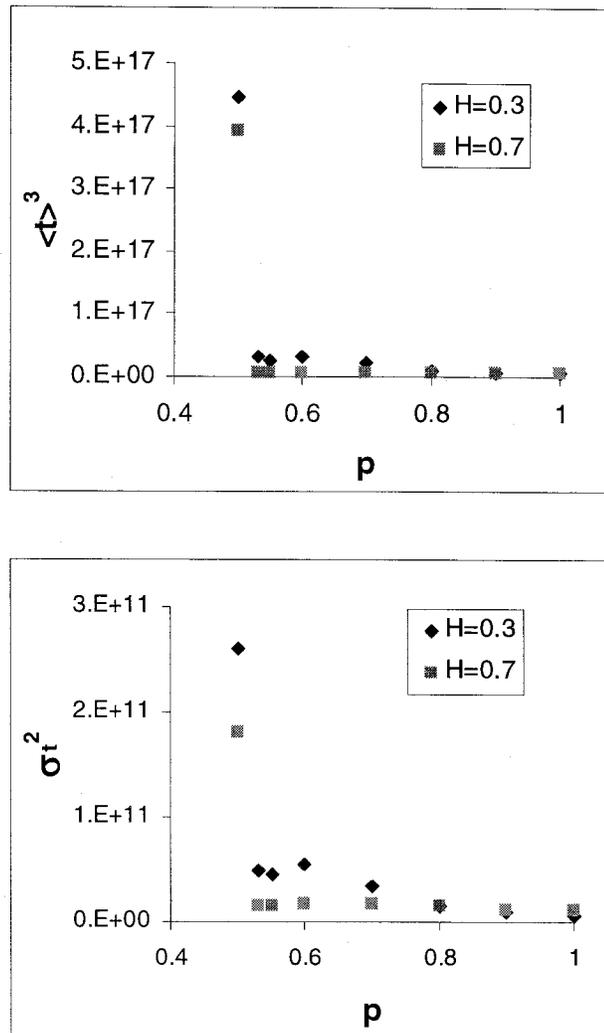


Figure C-3 : Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm isotropes ayant une longueur de corrélation infinie

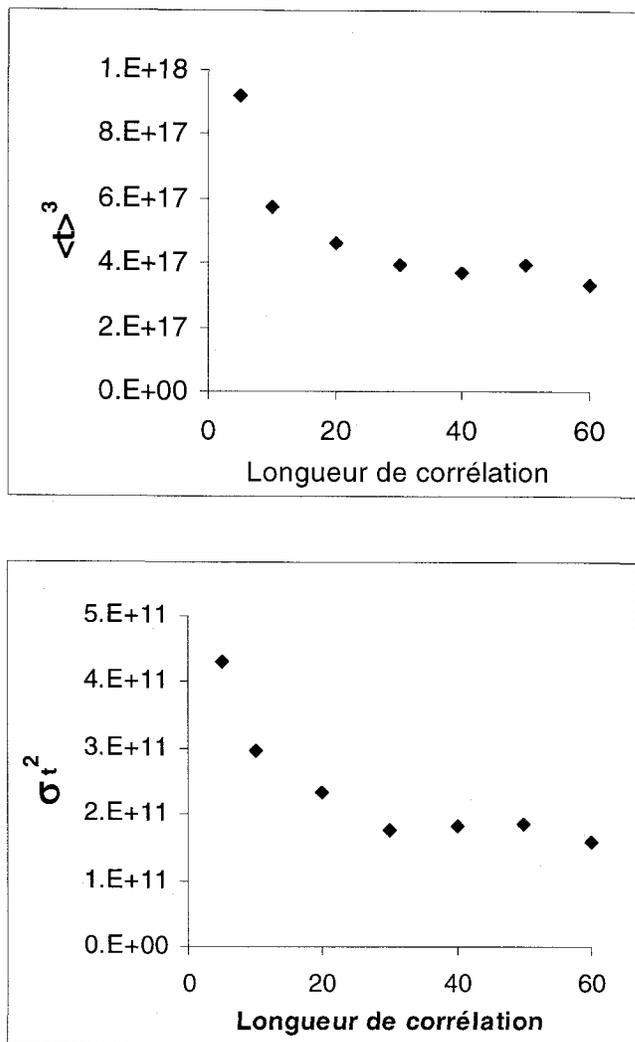


Figure C-4 : Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la longueurs de corrélation pour des réseaux fBm 100x100 ayant des longueurs de corrélation finies ($\sigma_{\ln k}=0,5$)

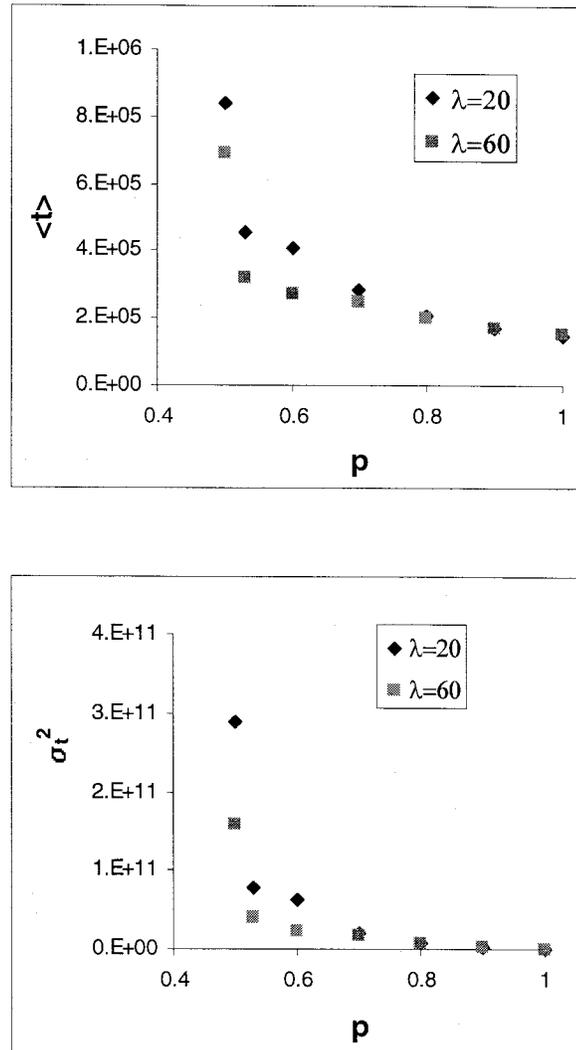


Figure C-5 : Temps de parcours moyen et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm 100x100 ayant des longueurs de corrélation finies ($\sigma_{\ln \kappa}=0,5$)

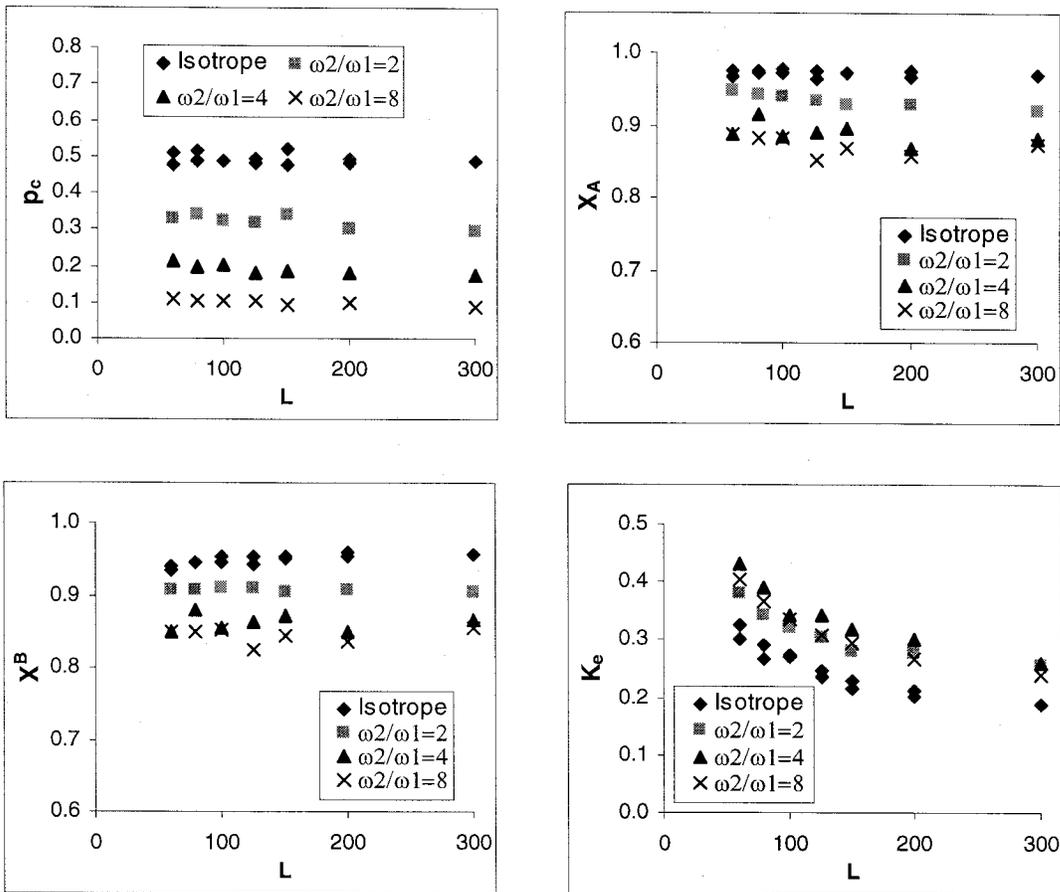


Figure C-6 : Comportement des paramètres p_c , X^A , X^B et K_e au seuil de percolation pour des réseaux à $H=0,7$ pour les trois rapports ω_2/ω_1 ($\sigma_{in K}=1$)

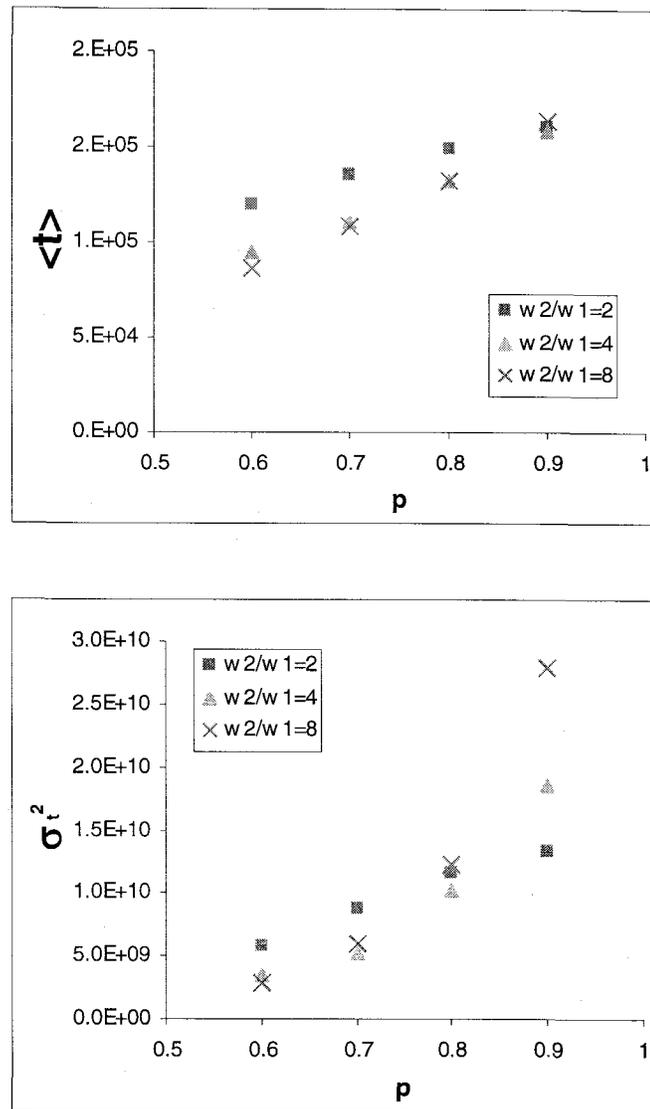


Figure C-7 : Temps de parcours moyen et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux fBm 100x100 anisotropes ayant des longueurs de corrélation infinies ($H=0,7$ $\sigma_{ln \kappa}=1$)



ANNEXE D – ESSAIS DE TRAÇAGE

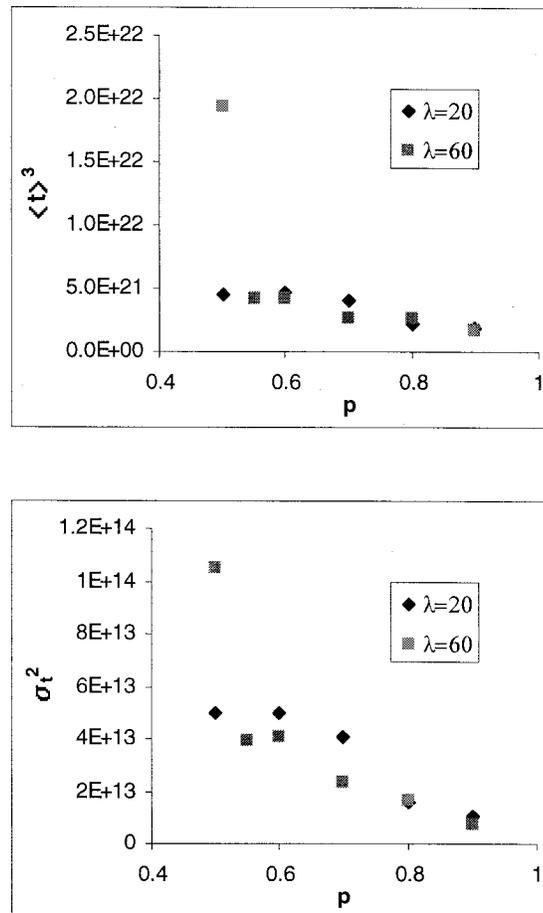
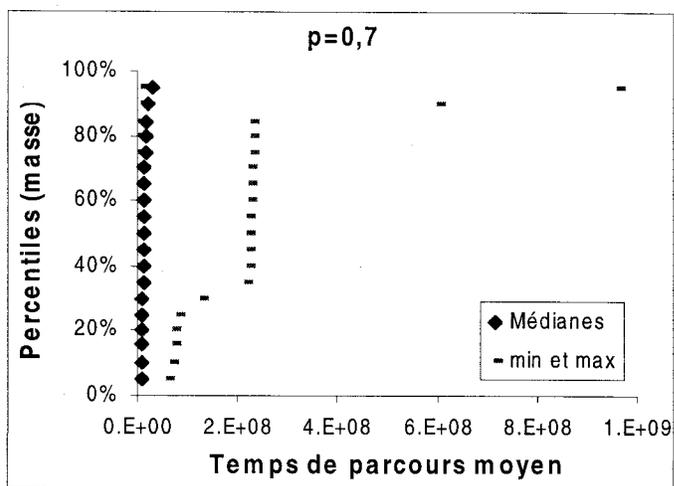
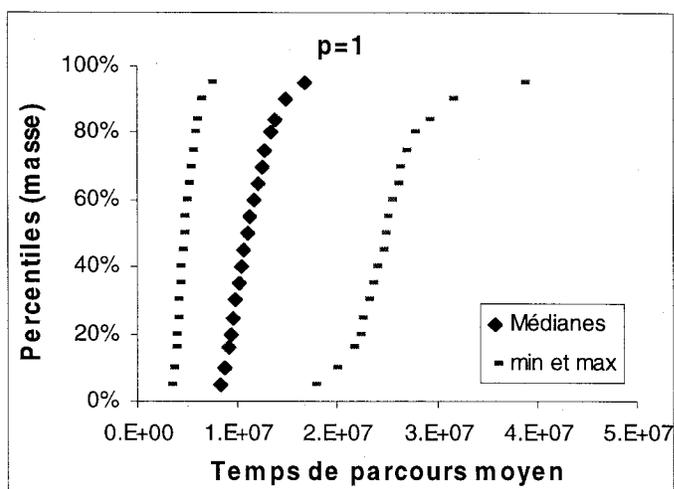


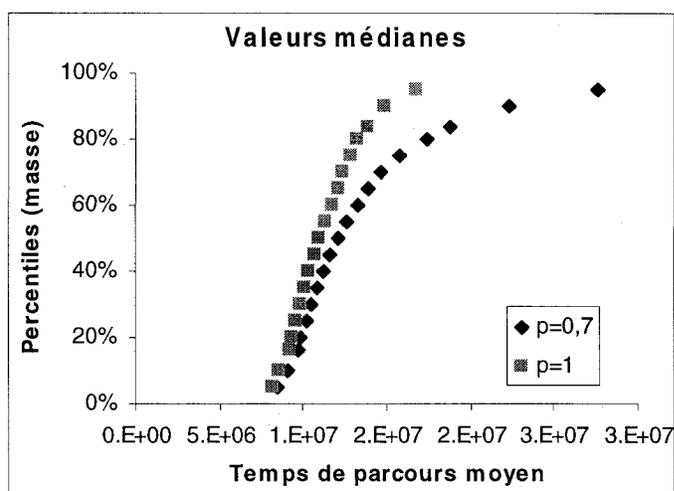
Figure D-1 : Temps de parcours moyen (élevés au cube) et leurs variances en fonction de la fraction de liens ouverts pour des réseaux pour différentes longueurs de corrélation infinies ($\sigma_{\ln \kappa}=1$) pour des essais de type 2



a)

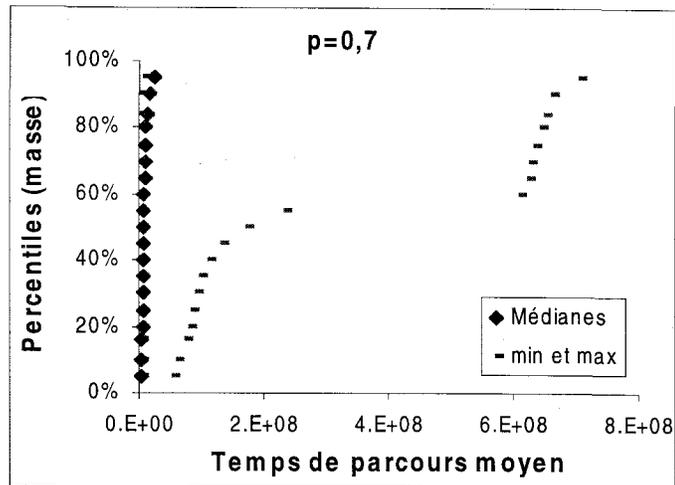


b)

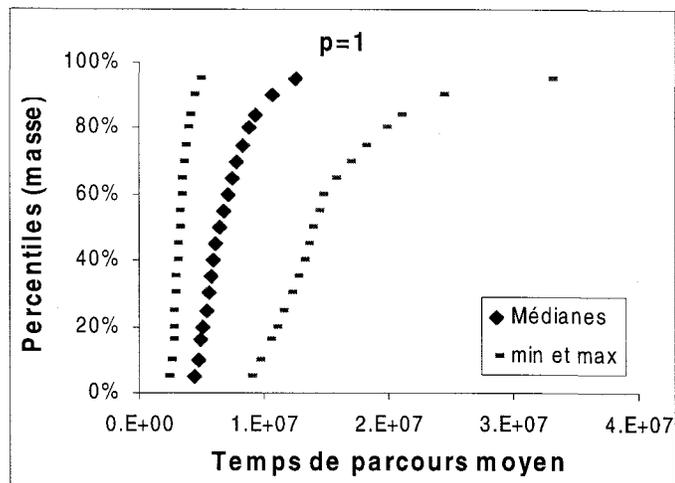


c)

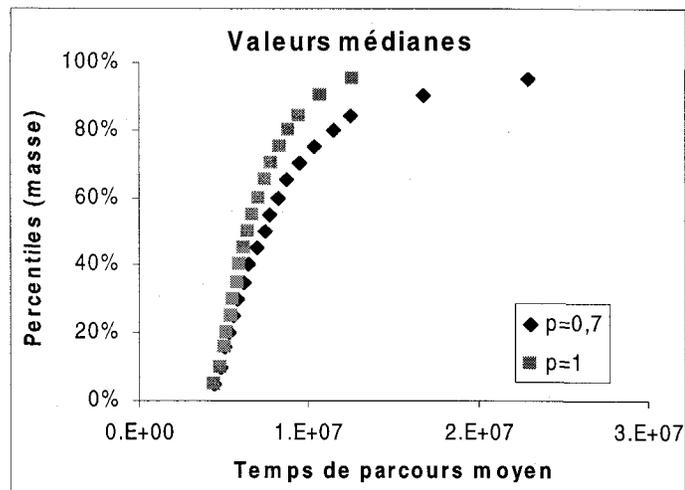
Figure D-2 : Type 2) Percentiles du nombre de particules en fonction de leurs temps de parcours a) Pour $p=0,7$ et b) Pour $p=1$ et c) Comparaison des médianes



a)



b)



c)

Figure D-3 : Type 3) Percentiles du nombre de particules en fonction de leurs temps de parcours a) Pour $p=0,7$ et b) Pour $p=1$ et c) Comparaison des médianes



ANNEXE E – INFORMATIONS ADDITIONNELLES SUR LES LOGICIELS UTILISÉS

Gauss.exe : Logiciel permettant la génération de champs de valeurs corrélées à l'aide de la méthode des simulations séquentielles gaussiennes (méthode géostatistique)

Langage : Borland C

Concepteur : M. Frédérick Delay, professeur à l'université de Poitiers, France.

SPÉCIFICATIONS ET QUESTIONS POSÉES PAR LE LOGICIEL :

1. Fournir les fichiers des points expérimentaux et du variogramme théorique sélectionné.
2. Définir un maillage (grille) pour les simulations.
3. Choisir le type de simulations :
 - Conditionnées
 - Non conditionnées.
4. Choisir le type de krigeage :
 - Simple
 - Ordinaire

⇒ Entrer la valeur de $E[Z(X)]$.
5. Choisir le type de calcul :
 - Grille plus grande
 - Importance des points expérimentaux.
6. Pour le voisinage glissant, choisir :
 - Rayon à utiliser

- Nombre maximal de points (expérimentaux + déjà simulés) en tout à prendre en compte dans ce rayon
 - Facteur multiplicatif de la grille (si l'option « Grille plus grande » a été sélectionnée). Des valeurs de 2, 3 ou 4 sont recommandées.
 - Nombre minimal de points expérimentaux à prendre en compte
 - Nombre maximal de points expérimentaux à prendre en compte.
7. Choisir le type d'estimation (a peu d'influence si le nombre de mailles est grand) :
- Ponctuelle
 - De surface
- ⇒ Déterminer le nombre de simulations à effectuer.

ALGORITHME SIMPLIFIÉ DES CALCULS :

Transformer les données afin d'obtenir une variable centrée réduite.

Définir un ordre aléatoire pour le traitement des points à simuler.

→ En chaque point, calculer par krigeage sur les données et les valeurs déjà simulées une moyenne et une variance de la fonction cumulative de distribution (fcd) locale. Pour le krigeage simple, on a³ :

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^n \varphi_i Z_i$$

$$\sigma_k^2 = \text{Var}[Z_0^* - Z_0] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i \varphi_j \text{Cov}_{ij} - 2 \sum \varphi_j \text{Cov}_{i0} + \text{Cov}(0)$$

Tirer un nombre aléatoire (d'une loi uniforme entre 0 et 1). Le seuil sur la fcd correspondant à ce nombre constitue la valeur locale simulée.

→ Ajouter la valeur simulée au jeu de points pouvant servir à l'estimation suivante.

Recommencer les 3 étapes précédentes avec tous les autres points.

Une fois tous les points simulés, appliquer la transformation inverse pour retrouver la forme initiale des données.

³ Pour la définition des paramètres, voir Chapitre 5, section 5.1

FBm2D.exe : Logiciel permettant la génération de champs de valeurs corrélées sur de longues distances à l'aide du mouvement fractionnel brownien (processus fBm, pour *fractional Brownian motion*),

Langage : Fortran

Concepteur : M. Mehrdad Hashemi : stagiaire post-doctoral du professeur Muhammad Sahimi, USC, Los Angeles, CA, É-U.

SPÉCIFICATIONS ET QUESTIONS POSÉES PAR LE LOGICIEL :

1. Déterminer le nombre de champs à simuler.
2. Spécifier le « seed point » (nombre aléatoire) de départ (exemple : 56443245).
3. Spécifier la valeur du coefficient de Hurst ($0 \leq H \leq 1$).
4. Spécifier la valeur de l_{co} permettant de limiter la longueur de corrélation des champs ($l_{co} = 1/\sqrt{f_{co}}$).
5. Spécifier le rapport ω_2/ω_1 permettant d'incorporer l'anisotropie.
6. Entrer la taille des champs à générer ($n < 512$).
7. Entrer la moyenne désirée pour les champs.
8. Entrer l'écart-type désiré pour les champs.

ALGORITHME SIMPLIFIÉ DES CALCULS :

Pour chaque lien du réseau :

→ Associer une valeur aléatoire et indépendante de conductivité hydraulique (K).

En utilisant la fonction de corrélation $C(r, H) = \frac{1}{2}(|r+1|^{2H} - 2|r|^{2H} + |r-1|^{2H})$,

calculer la transformée de Fourier en multipliant la valeur de K par la densité spectrale $S(\omega, f_{co})$. En 2-D, on a :

$$S(\omega, f_{co}) = \frac{1}{(f_{co} + [\omega_1^2 + \omega_2^2])^{H+1}}$$

→ Calculer la transformée de Fourier inverse.

Percolation.exe : Logiciel permettant la simulation de l'écoulement et du transport de solutés dans des réseaux percolants.

Langage : Borland C++

Conceptrice : Christine Rivard

Programmeurs : Sébastien Turgeon et Marc-André Gosselin

SPÉCIFICATIONS ET QUESTIONS POSÉES PAR LE LOGICIEL :

Modèle d'écoulement

1. Spécifier la longueur du réseau (nombre de liens dans le réseau fois la taille du lien).
2. Choisir le type de modèle
 - À 0-90° par rapport à la direction de l'écoulement
 - À 45° par rapport à la direction de l'écoulement
3. Spécifier les charges du haut et du bas des réseaux de façon à déterminer le gradient hydraulique.
4. Définir la fraction de liens ouverts (p en %).
5. Spécifier si les réseaux doivent être calculés au seuil de percolation ($p=p_c$).
6. Spécifier la conductivité hydraulique minimale (K_{\min}) à prendre en compte dans les réseaux. Si on met 0.4, alors tous les liens ayant des valeurs inférieures seront éliminés.
7. Spécifier la valeur du coefficient d'optimisation qui entre dans le calcul des charges hydrauliques ($1.96 < w < 2$).

8. Spécifier si les champs sont aléatoires (loi uniforme $0 \rightarrow 1$) ou pré-générés (avec une loi normale standard $N(0, 1)$). Ceci permet d'indiquer les valeurs extrêmes des valeurs de K (0 à 1 ou -4 à 4).
9. Spécifier la précision avec laquelle les charges hydrauliques doivent être calculées.
10. Spécifier le type de distribution des K :
 - Normale
 - Log-normale.
 - ⇒ Entrer les valeurs de moyenne et écart-type désirés.
11. Spécifier si des conditions périodiques nord-sud sont désirées (par défaut, seul un passage sera effectué par chacune des particules).
12. Spécifier le type de champ d'écoulement :
 - Sans puits
 - Avec puits (un puits d'injection ou un puits d'injection et un de pompage)
 - ⇒ Leur localisation et leur débit

Modèle de transport

1. Spécifier le nombre de particules à injecter.
2. Spécifier le nombre de passages à travers les réseaux (l'option « conditions périodiques nord-sud » doit être préalablement cochée).
3. Spécifier le pourcentage de troncature (0-100). Ainsi, $x\%$ des particules les plus lentes sera éliminé.
4. Spécifier la distance à laquelle le calcul de D_L doit être effectué pour le cas du calcul de D_L avec les distributions temporelles (par défaut : bas des réseaux).

ALGORITHME SIMPLIFIÉ DES CALCULS :

Pour chaque réseau :

- Attribuer des valeurs aléatoires aux liens ou utiliser un champ pré-généré.
- Calculer le seuil de percolation p_c (si nécessaire).
- Calculer l'amas traversant le réseau à l'aide d'une procédure récursive.
- Calculer le squelette à l'aide d'une procédure récursive.
- Calculer les charges hydrauliques aux nœuds à l'aide de la méthode Gauss-Seidel (processus itératif arrêté lorsque la précision désirée est atteinte).
- Éliminer les liens dans lesquels l'écoulement est impossible.
- Calculer la conductivité hydraulique équivalente (K_e) du réseau.
- Calculer les temps de parcours et leurs logarithmes dans chacun des liens et faire la somme. Classer les temps de parcours totaux.
- Calculer les distances parcourues par les particules à une vingtaine de temps différents, définis préalablement à partir de la vitesse moyenne ($v_{moy} = \langle K \rangle * (\Delta h / \Delta L)$).