

ECOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

UMR CNRS 7641

91128 PALAISEAU CEDEX (FRANCE). Tél: 01 69 33 41 50. Fax: 01 69 33 30 11

<http://www.cmap.polytechnique.fr/>

**Modélisations 2D et 3D des transferts en milieux
fracturés (site de Äspö, Suède) par une approche
Smearred Fractures**

A. FOURNO

R.I. 579

juin 2005

Resumé

Dans le cadre des travaux de recherche et de développement des laboratoires souterrains dédiés à la problématique du stockage des déchets radioactifs en milieux géologiques profonds, l'étude des transferts dans les milieux fracturés nécessitent des outils de modélisation performants. Ces outils permettent d'analyser la phénoménologie du transport et de la rétention des radionucléides à l'échelle des expérimentations et de contribuer à la construction des modèles conceptuels de sûreté du stockage sur plusieurs centaines de milliers d'années.

La complexité géométrique des milieux fracturés a conduit à la mise au point de deux principaux types d'approches pour modéliser l'écoulement et le transport. Une première famille connue sous le nom "d'approches discrètes" limite la résolution des transferts aux réseaux de fractures. Dans le cadre de ces approches, différents outils de génération du maillage ont été mis au point (maillage des fractures déterministes et/ou maillages stochastiques de fractures de différentes échelles). Une seconde classe, appartenant à la famille des approches continues, s'appuie sur la notion de volume élémentaire représentatif (VER) et repose sur des processus d'homogénéisation pouvant comporter différents continua. L'inconvénient de ces approches est que, pour les approches discrètes, la modélisation de la diffusion matricielle conduit à des coûts informatiques élevés tandis que, pour les approches continues, la géométrie des fractures n'est pas prise en compte. Ainsi, des approches hybrides ont été mises au point. Les approches hybrides combinent la représentation en différents continua des fractures secondaires avec une représentation discrète des principales fractures. Néanmoins, bien qu'étant efficaces pour la résolution de l'écoulement, les approches hybrides n'ont pas été étendues à la résolution du transport. Les approches Smeared fractures appartiennent à cette dernière classe d'approches. Elles consistent à représenter les caractéristiques du milieu fracturé par un champ continu hétérogène sur un maillage régulier. Les fractures principales sont directement prises en compte grâce à l'affectation de propriétés corrigées aux mailles les représentant, les autres mailles pouvant faire l'objet de différents processus d'homogénéisation prenant en compte les fractures de moindre importance ou représentant uniquement le bloc sain aussi appelé "matrice".

L'approche Smeared Fractures, utilisée pour les différentes modélisations présentées dans ce document, se distingue des autres approches Smeared Fractures par l'obtention d'un flux exact lors de la résolution de l'écoulement dans une fracture unique. La modélisation du transport, non abordée jusqu'à présent pour ce type d'approche, est effectuée de manière continue dans les fractures ainsi que dans les blocs de roches saines.

La mise au point et la validation de l'approche résultent d'un travail de thèse financée

par l'ANDRA, [Fournio 2005]. Ayant donné de bons résultats en termes de précision des calculs, facilité de génération du maillage et ce pour des temps de calcul inférieurs, l'approche Smeared Fracture constitue un nouvel outil intéressant de modélisation des transferts en milieux fracturés à l'échelle d'un bloc, partiellement homogénéisé, ne possédant qu'un nombre limité de fractures.

A partir des différents tests de validation, les domaines d'application de l'approche ont pu être mis en évidence. L'utilisation optimale de l'approche correspond, d'une part, aux simulations de l'écoulement et du transport avec une diffusion matricielle ne jouant aucun rôle, (les transferts sont modélisés uniquement dans les fractures) et, d'autre part, pour des simulations pour lesquelles la diffusion dans les zones matricielles est importante et se traduit par une forte profondeur de pénétration de la matière dans la matrice et un retard dans les temps de sortie de la matière (simulation au temps longs). Ces conditions sont celles rencontrées dans la Tâche 6 définie au sein du laboratoire expérimental souterrain du site de Äspö en Suède et sur laquelle porte les différentes applications présentées dans ce rapport.

- ★ Dans un premier temps, on présentera les résultats d'une étude 2D. La géométrie considérée est obtenue à partir d'une coupe effectuée sur un bloc fracturé de 200x200x200 m. L'influence de différents types de fractures ainsi que celle de deux types de matrice ont été étudiées.
- ★ Dans un second temps, une modélisation 3D a consisté en la calibration d'un modèle d'écoulement et de transport sur les données d'un test de traçage à plusieurs traceurs. Les vitesses d'écoulement des tests de traçage étant très rapides, la profondeur de pénétration du traceur dans la matrice est faible et, par conséquent, la modélisation du transport s'est révélée inabordable par l'approche Smeared Fractures. Néanmoins, les résultats obtenus pour l'écoulement par l'approche Smeared Fractures ont été utilisés afin de servir de conditions aux limites, lors de la résolution du transport, à un second modèle utilisant un maillage dédié. Les résultats des différents traceurs ont parfaitement pu être calés par rapport aux courbes expérimentales.
- ★ Enfin une troisième application a abordé les points suivants :
 - ⇒ l'influence du nombre de fractures sur l'écoulement a été testée.
Pour des conditions aux limites identiques, on s'est intéressé à la variation du flux hydrique sortant du domaine en fonction du nombre de fractures présentes dans le réseau. Ces fractures ont été, au préalable, classées suivant leur extension. A partir des résultats obtenus, il a été facile de comprendre l'augmentation brutale du flux sortant en présence de certaines fractures.
 - ⇒ A partir d'un réseau de cinquante fractures, une modélisation du transport de différents traceurs a été effectuée.
Les principales fractures, parcourues par le traceur, ont pu être identifiées et les temps de sortie ainsi que les courbes de flux des différents traceurs

évalués en différentes positions.



Table des matières

1	Introduction	11
1.1	Présentation du site de Äspö	11
1.2	Tâche 6	13
1.3	Phénomènes physiques rencontrés en milieux fracturés	15
1.4	Etude pédagogique d'une fracture 1D : influence de la diffusion matricielle	16
1.4.1	Etude analytique	18
1.4.2	Etude numérique	19
2	L'approche Smeared Fractures	21
2.1	Principes de base de l'approche Smeared Fractures	23
2.1.1	Formulation EFMH et applications	24
2.1.2	Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente	26
2.1.3	Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien	28
2.2	Propriétés équivalentes utilisées pour le 2D	30
2.3	Propriétés équivalentes utilisées pour le 3D	31
2.4	Critères d'utilisation de l'approche Smeared Fracture 2D	31
3	Modélisation des transferts dans le cadre de la tâche 6	35
3.1	Etude d'un réseau 2D de fractures	35
3.2	Modélisation 3D : Tâche 6D	52
3.3	Modélisation 3D : Tâche 6E	57
3.3.1	Sensibilité au nombre de fractures	58
3.3.2	Modélisation du transport	59

4 Conclusions

69

Table des figures

1.1	Localisation de l'île de Äspö	12
1.2	Le laboratoire expérimental de Äspö	12
1.3	Illustration du problème de la fracture unique.	18
1.4	Evolution de la concentration à la sortie de la fracture : influence de la diffusion matricielle.	20
2.1	Représentation des fractures par une approche S.F.	22
2.2	Illustration de la terminologie "Smearé"	22
2.3	Maille X et ses conditions aux limites	26
2.4	Maille Y et ses conditions aux limites	26
3.1	Création du maillage Smearé Fractures	36
3.2	Caractéristiques des fractures de type 1	38
3.3	Caractéristiques des fractures de type 2	39
3.4	Evolution de la masse totale présente dans le bloc et du flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle)	41
3.5	Evolution du flux massique dans différentes fractures du réseau de 11 fractures	43
3.6	Evolution de la masse dans différentes fractures du réseau de 11 fractures .	44
3.7	Etude des différents types de fracturation : courbes de flux massique pris sur tout le contour du bloc	46
3.8	Etude des différents types de fracturation : courbes de masse	47
3.9	Etude des différents types de fracturation : champs de concentrations . . .	50
3.10	Etude des différents types de matrice : courbes de flux massique et de masse	51
3.11	Tâche 6D : condition en charges	53
3.12	Tâche 6D : charges et vitesse dans les 11 fractures	54

3.13	Tâche 6D : maillage du modèle discret	54
3.14	Tâche 6D : résultats S.F. et du modèle discret pour les 4 fractures	55
3.15	Tâche 6D : résultats de calibration	56
3.16	Tâche 6E : sensibilité du flux sortant au nombre de fractures	59
3.17	Tâche 6E : connectivité des fractures 7S et 2292B	60
3.18	Tâche 6E : évolution de la masse et du flux massique	62
3.19	Tâche 6E : évolution du flux massique	63
3.20	Tâche 6E : évolution de la concentration dans le bloc	65
3.21	Tâche 6E : cheminement du traceur et les fractures importantes	66
4.1	Paul Klee, 1927 : Flora on Sand	71

Liste des tableaux

1.1	Les différentes Tâches effectuées à Äspö	14
1.2	Expression des paramètres de transport pour la fracture et la matrice . . .	17
1.3	Valeur du coefficient de retard : sensibilité au gradient de charge ($e = 2.6.10^{-2}$ m)	19
1.4	Valeur du coefficient de retard : sensibilité à l'ouverture de fracture ($\nabla h = 10^{-2}$)	19
2.1	Expression des propriétés équivalentes pour le 2D	31
2.2	Expression des propriétés équivalentes pour le 3D	32
3.1	Caractéristiques géométriques des fractures	37
3.2	Caractéristiques physiques des fractures	40
3.3	Caractéristiques physiques de la matrice	45
3.4	Tâche 6D : Transmissivité, épaisseur initiale et calibrée des fractures	56
3.5	Tâche 6D : Propriétés de la matrice	57
3.6	Tâche 6E : localisation de la source d'injection	60
3.7	Tâche 6E : coefficient d'adsorption, $m^3.kg^{-1}$	60
3.8	Tâche 6E : plan X=1920 m	61
3.9	Tâche 6E : plan X=1880 m	64
3.10	Tâche 6E : plan X=1800 m	64
4.1	Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures	70

Chapitre 1

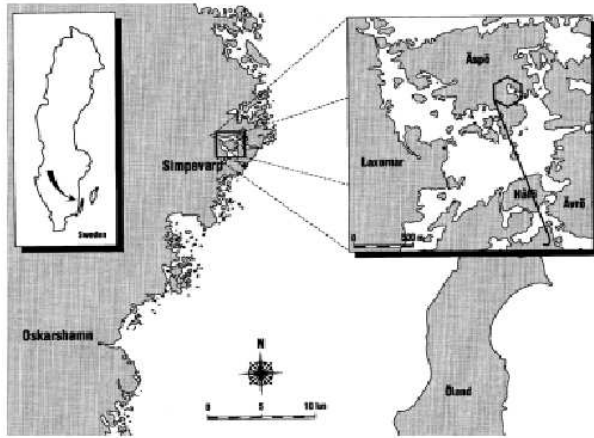
Introduction

1.1 Présentation du site de Äspö

Dans le cadre de la problématique du stockage de produits radioactifs à vie longue, différents sites expérimentaux ont été créés afin de caractériser des milieux susceptibles d'accueillir un entreposage de déchets nucléaires, d'établir une base de données nécessaires à la compréhension des phénomènes physiques présents, de fournir aux modélisateurs les informations nécessaires au conditionnement des modèles ou encore de tester en grandeur réelle les prototypes pouvant être utilisés sur le site. La prédiction des sorties d'éléments radioactifs d'un site de stockage repose, en effet sur la modélisation et nécessite de gros efforts de caractérisation de site. La France ne disposant pas de laboratoire implanté en milieu granitique, l'ANDRA collabore pour ce type de roche encaissante avec des laboratoires étrangers, entre autres le SKB (Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, SKB) sur le site d'Äspö en Suède.

Après des investigations géologiques autour de l'île de Äspö commencées en 1986, celle-ci fut choisie en 1988 pour accueillir le futur laboratoire souterrain. L'île de Äspö se situe à proximité de Oskarshamn dans le sud-est de la Suède (fig. 1.1). Le laboratoire, dont la construction s'échelonna d'octobre 1990 à l'été 1995, comprend des bureaux, un espace public et un tunnel souterrain atteignant la profondeur de 460 m (fig. 1.1). Il fut construit dans le but de constituer un site réaliste, pour la recherche, le développement et informer la population sur la problématique des sites de stockage de déchets radioactifs. Dans un but expérimental, ce site a été choisi pour son aspect fracturé et ses vitesses d'écoulements rapides, permettant de limiter la durée des différentes expériences. Un grand nombre d'expériences sont conduites dans les branches du tunnel avec l'objectif de comprendre l'action des différentes barrières (enveloppe de cuivre entourant les déchets, bouchon d'argile, barrière géologique) sur la rétention des substances radioactives (fig. 1.2).

SKB, qui gère ce site, propose un accès à différentes organisations nationales travaillant sur le thème du stockage des déchets nucléaires (ANDRA pour la France, JNC pour le Japon, POSIVA pour la Finlande, NAGRA pour la Suisse...). Ainsi, les résultats, les

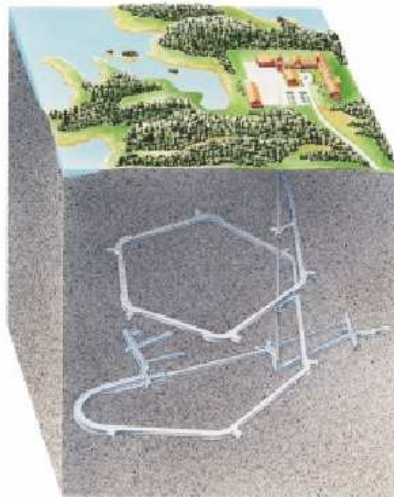


(a) Position géographique de Äspö.

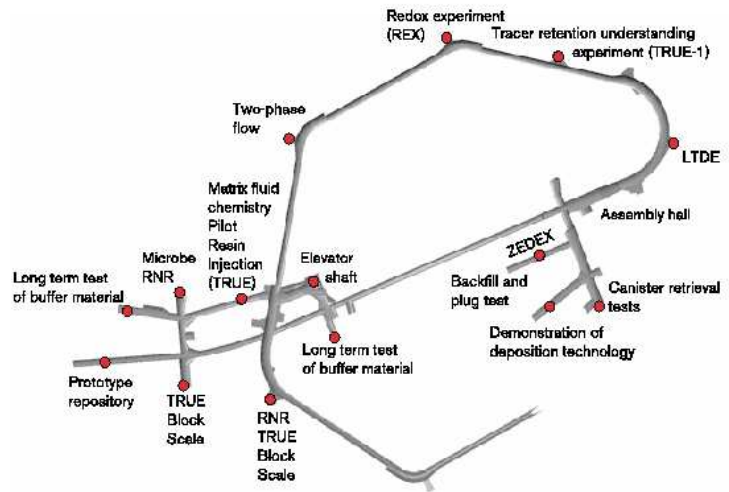


(b) Village scientifique de Äspö.

FIG. 1.1 – Localisation de l'île de Äspö



(a) Le 'Äspö Hard Rock Laboratory' : tunnel de 3.600 m de long et de profondeur maximale de 460 m.



(b) Localisation de différentes expériences.

FIG. 1.2 – Le laboratoire expérimental de Äspö

différentes approches de calcul et d'analyse de chaque équipe, peuvent être confrontés.

Différentes Tâches successives se sont échelonnées tout au long de l'exploitation du site. Chaque organisation propose une ou plusieurs équipes de modélisation suivant l'intérêt porté à la Tâche en cours. Actuellement, ces Tâches sont au nombre de six et couvrent différents aspects des problèmes rencontrés en milieux fracturés (tab. 1.1). On peut par

exemple citer la Tâche 4 qui portait sur la modélisation de l'expérience TRUE-1, à l'échelle d'une fracture ou la Tâche 6 qui s'appuie sur les données de TRUE-BLOCK-SCALE à l'échelle d'un bloc fracturé de 200x200x200 m pour différentes échelles de temps, (temps courts : test de traçage et temps longs : condition de fermeture de site). D'autres Tâches ont aussi été lancées afin de traiter des aspects hydrogéochimiques, Tâche 5, de l'influence de la construction d'un tunnel sur l'hydraulique du site, Tâche 3. Aujourd'hui, seule la tâche 6 est encore active. Le choix des approches de modélisation reste à l'initiative des différentes équipes. Il existe, ainsi, une large représentation des différentes approches de modélisation des transferts en milieux fracturés, [Selroos et al. 2002]. Ces approches et les résultats obtenus sont discutés, commentés et comparés par les membres de la TASK-FORCE, nom donné à l'ensemble des équipes travaillant sur Äspö. Cette TASK-FORCE constitue un des meilleurs forums d'intercomparaison et de discussion des approches de modélisation des milieux fracturés.

L'approche Smeared Fractures fait partie de ces approches et sera donc utilisée et confrontée aux autres approches dans le cadre de la Tâche 6. Des modélisations de l'écoulement et du transport dans un bloc fracturé sont effectuées pour des géométries 2D et 3D.







1.2 Tâche 6

La Tâche 6 intitulée "Performance Assessment Modeling Using Site Characterisation Data (PASC)" est entreprise dans le but de prédire le transport d'un contaminant dans un bloc fracturé à l'échelle hectométrique. Plusieurs objectifs sont visés, [Benabderrahmane et al. 2000] :

- ⇒ Déterminer quelles simplifications peuvent être apportées au modèle de caractérisation de site, (modèle de caractérisation de site, SC), afin de construire le modèle utilisé pour la prédiction, (modèle de performance, PA).
- ⇒ Evaluer l'intérêt des informations issues de tests de traçage (écoulements rapides), lorsque l'on se place dans les conditions de fermeture de site (écoulements lents).
- ⇒ Déterminer les données nécessaires à l'utilisation du modèle PA.
- ⇒ Comprendre l'écoulement et le transport du site grâce au modèle SC.

Les conditions de travail de cette Tâche peuvent être de deux types : des conditions d'écoulements forcés (test de traçage) ou des conditions dites 'de fermeture de site', c'est à dire des conditions d'écoulements peu rapides dans lesquelles se trouveront les déchets nucléaires après fermeture du site de stockage. Après avoir entreposé les déchets radioactifs, le site de stockage est en effet rebouché. Les conditions hydrauliques du site de stockage redeviennent alors celles imposées par le milieu naturel. En conditions naturelles, les processus sont beaucoup plus lents et les tests de traçage ne sont plus envisageables (temps beaucoup trop longs). L'idée retenue est donc de :

- ★ caractériser, dans un premier temps, l'environnement des déchets par des tests de traçage en écoulement forcé

	<p>Tâche 1 : Tests de pompage, de traçage et de dilution à l'échelle kilométrique et évaluation des modélisations</p>	<p>Tâche finie (1992-1994)</p>
	<p>Tâche 2 : Expériences de traçage à l'échelle métrique</p>	<p>Tâche finie (1992-1994)</p>
	<p>Tâche 3 : Impact de la construction du tunnel sur l'hydraulique du site</p>	<p>tâche finie (1994-1996)</p>
	<p>Tâche 4 : Expérience TRUE-1 (Tracer Retention and Understanding Experiments)</p>	<p>Tâche finie (1996-1998)</p>
	<p>Tâche 5 : Intégration de l'hydrogéologie et hydrogéochimie dans l'étude de l'impact de la construction du tunnel sur le site de Äspö</p>	<p>Tâche finie (1998-2002)</p>
	<p>Tâche 6 : Construction d'un modèle d'évaluation de performance de confinement (modèles PA) utilisant les données de caractérisations du site</p>	<p>En cours</p>

TAB. 1.1 – Les différentes Tâches effectuées à Äspö

- ★ construire, dans un second temps, les modèles d'évaluation de site (modèles PA), afin de prédire les sorties des produits radioactifs.

Les expériences de traçages en écoulement rapide ne sont pas (ou peu) sensibles aux processus lents éventuellement présents en écoulement naturel. Par conséquent, l'apport de ces tests, pour la modélisation en conditions naturelles, reste donc à démontrer. Plus largement, la Tâche 6 vise à faire le pont entre les modèles de caractérisation de site (SC) utilisés pour les conditions expérimentales et les modèles d'évaluation de site (PA) utilisés pour les conditions naturelles. De fait, il faut évaluer les simplifications utilisées dans les modèles PA, évaluer les contraintes imposées par les tests de traçage, fournir les données nécessaires dans le but d'une évaluation de performance d'un site. Les simulations effectuées portent sur le bloc fracturé (Tâche 6C, 6D et 6E) du site de l'expérience TRUE-BLOCK-SCALE, figure 1.2b. Il fait 200 m de côté et regroupe 11 fractures déterministes, 25 fractures synthétiques et 5660 fractures de fond. Il a été construit à partir d'une combinaison de fractures réelles et de fractures générées de manière stochastique, après analyse de différents tests de traçage effectués sur le site de TRUE-BLOCK-SCALE. La géométrie, les propriétés hydrauliques et de transport sont fournies, [Dershowitz et al. 2003].

1.3 Phénomènes physiques rencontrés en milieux fracturés

Les mécanismes de transferts en milieux fracturés sont variés et de cinétiques très différentes. Ils font intervenir différentes disciplines scientifiques, [De Marsily 1981]. Ces mécanismes peuvent être classés en deux catégories :

- ★ Les phénomènes convectifs et dispersifs.
Ces phénomènes sont aussi les plus rapides. Ils se composent principalement des phénomènes de convection et de dispersion dans les fractures circulantes (certaines fractures peuvent être bouchées). Le traceur, sur lequel ils agissent, se propage rapidement des fractures vers l'extérieur.

- Ecoulement :

Pour un fluide homogène incompressible, évoluant dans un milieu poreux saturé, l'écoulement du fluide peut se ramener à un système de deux équations [De Marsily 1981] : l'équation de Darcy dont l'article [Brown 2002] retrace l'historique et l'équation de conservation de masse.

$$\begin{cases} \vec{q} = -\bar{K} * \text{grad}h & \text{(équation de Darcy)} \\ \text{div}(\vec{q}) = s & \text{(équation de conservation de masse)} \end{cases}$$

Où \vec{q} est la vitesse de Darcy, \bar{K} le tenseur de perméabilité, h la charge et s le terme puit-source.

- Transport :

L'équation du transport est l'équation de convection-dispersion suivante :

$$\omega.R.\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(\omega.\bar{\bar{D}}^*.\vec{\text{grad}}C - C.\vec{q}) \quad (1.1)$$

$$\text{avec} \begin{cases} C \text{ la concentration } (kg.m^3) \\ \bar{\bar{D}}^* \text{ le tenseur de dispersion } (m^2.s^{-1}) \\ \omega \text{ la porosité } (-) \\ \vec{q} \text{ la vitesse de Darcy } (m.s^{-1}) \\ R \text{ le coefficient de retard dû à l'adsorption } (-) \end{cases} .$$

- ★ Les phénomènes de rétention.

Aux phénomènes rapides précédents sont associés d'autres plus lents. Ces derniers tendent à ralentir le cheminement de la matière. Parmi eux, un des plus influant est le phénomène de diffusion dans la matrice. Son action se traduit par la rétention d'une partie de la matière, entraînant des temps de sorties beaucoup plus longs, [Neretnieks 1980]. A ce phénomène, s'ajoutent des phénomènes physicochimiques comme l'adsorption, la précipitation, et autres réactions chimiques diverses. Le problème de transport de colloïdes n'est pas considéré.

1.4 Etude pédagogique d'une fracture 1D : influence de la diffusion matricielle

Afin d'illustrer les actions du phénomène de diffusion, exposons le problème classique du transport dans une fracture unique (fig. 1.3). L'équation générale de transport peut s'écrire sous deux formes, suivant que le milieu fracturé est considéré en globalité ou en deux continua. En considérant le milieu dans sa globalité, l'équation de transport s'écrit classiquement sous la forme :

$$\omega.R.\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(\omega.\bar{\bar{D}}^*.\vec{\text{grad}}C - C.\vec{q}) \quad (1.2)$$

Suivant que la zone considérée sera la fracture ou la matrice, les indices *fr* ou *m* seront affectés aux paramètres de l'équation 1.2, comme indiqué dans le tableau 1.2. Les expressions des coefficients de retards sont déterminées avec l'hypothèse que la concentration massique, représentant la masse d'éléments absorbés par unité de masse solide, est proportionnelle à la concentration du milieu ($F = K_d.C$), [De Marsily 1981].

	Fracture	Matrice									
ω	ω_{fr}	ω_m									
$\bar{\bar{D}}^*$	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"> <tr> <td>D_L^*</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>0</td> <td>D_T^*</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>D_T^*</td> </tr> </table>	D_L^*	0	0	0	D_T^*	0	0	0	D_T^*	$\omega_m * d$
D_L^*	0	0									
0	D_T^*	0									
0	0	D_T^*									
\vec{q}	\vec{q}	$\vec{0}$									
R	$R_a = 1 + \frac{2}{e} K_a$	$R_d = 1 + \frac{1-\omega_m}{\omega_m} \rho_s K_d$									

TAB. 1.2 – Expression des paramètres de transport pour la fracture et la matrice

avec

- C la concentration ($kg.m^3$)
- $\bar{\bar{D}}^*$ le tenseur de dispersion ($m^2.s^{-1}$)
- ω la porosité (-)
- e l'ouverture (m)
- \vec{q} la vitesse de Darcy ($m.s^{-1}$)
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore ($m^2.s^{-1}$)
- $D_L^* = d_p^{fr} + \alpha_L * \frac{q}{\omega_{fr}}$ le coefficient de diffusion longitudinale ($m^2.s^{-1}$) .
- $D_T^* = d_p^{fr} + \alpha_T * \frac{q}{\omega_{fr}}$ le coefficient de diffusion transverse ($m^2.s^{-1}$)
- α le coefficient de dispersivité : T transverse L longitudinal (m)
- R le coefficient de retard dû à l'adsorption (-)
- K_a le coefficient d'adsorption surfacique (m)
- K_d le coefficient d'adsorption matricielle ($m^3.kg^{-1}$)
- ρ_s la masse volumique $kg.m^{-3}$

Si le bloc fracturé est modélisé par deux continua, (matrice et fracture), un terme de couplage, $S = \frac{2}{e} \omega_m d \frac{\partial C_m}{\partial z} |_{z=0}$, doit être rajouté dans l'équation de transport de la fracture, [Bear et al. 1993]. Les équations de transport deviennent alors :

- pour la fracture (suite à l'homogénéisation verticale sur e)

$$\omega_{fr} R_a \frac{\partial C_{fr}}{\partial t} = \omega_{fr} D_L^* \frac{\partial^2 C_{fr}}{\partial x^2} - q \frac{\partial C_{fr}}{\partial x} + \frac{2}{e} \omega_m d \frac{\partial C_m}{\partial z} |_{z=0} \quad (1.3)$$

- pour la matrice

$$R_d \frac{\partial C_m}{\partial t} = d \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} \quad (1.4)$$

avec comme condition à l'interface fracture-matrice $C_m = C_f$

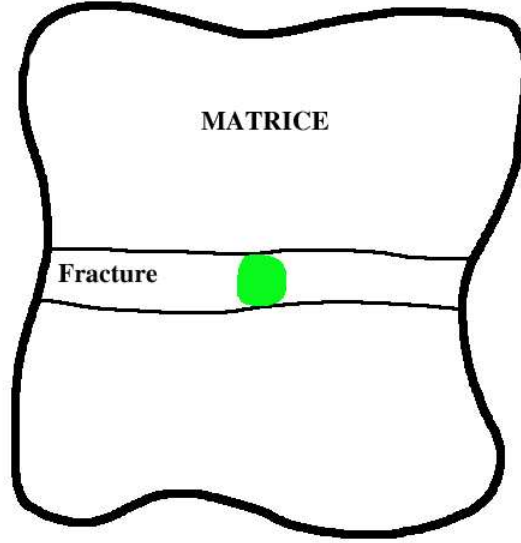


FIG. 1.3 – Illustration du problème de la fracture unique.

1.4.1 Etude analytique

[Neretnieks 1982] propose une solution analytique au problème 1.3 et 1.4, en réponse à une injection continue de concentration C_0 , en se plaçant en convection pure dans une fracture unique et pour une matrice infinie.

$$\frac{C}{C_0} = \operatorname{erfc}\left(\frac{\omega_m \cdot d \cdot \tau_w}{e\omega_{fr} \sqrt{D_a \cdot (t - \tau_w \cdot R_a)}}\right) \quad (1.5)$$

où $D_a = \frac{d}{R_a}$.

A partir de cette solution, il est possible de déterminer la solution en réponse à un créneau de taille t_0 .

$$\frac{C}{C_0} = \operatorname{erfc}\left(\frac{\omega_m \cdot d \cdot \tau_w}{e\omega_{fr} \sqrt{D_a \cdot (t - \tau_w \cdot R_a)}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{\omega_m \cdot d \cdot \tau_w}{e\omega_{fr} \sqrt{D_a \cdot (t - t_0 - \tau_w \cdot R_a)}}\right) \quad (1.6)$$

Le but de cette étude est de déterminer une expression du temps du maximum de concentration, τ_{max} , c'est à dire le temps annulant la dérivée de la solution 1.6 en réponse à un Dirac de concentration. Ce temps peut être exprimé en fonction d'un coefficient de retard du pic, R_p et du temps de sortie convectif, τ_w , après avoir effectué un développement limité en considérant t_0 petit.

∇h	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}
R_p	1.2	3.4	25.

TAB. 1.3 – Valeur du coefficient de retard : sensibilité au gradient de charge ($e = 2.6.10^{-2}$ m)

e (m)	$2.6.10^{-2}$	10^{-2}	5.10^{-3}
R_p	1.2	1.6	2.3

TAB. 1.4 – Valeur du coefficient de retard : sensibilité à l'ouverture de fracture ($\nabla h = 10^{-2}$)

$$\tau_{max} = R_p \cdot \tau_w \quad (1.7)$$

$$R_p = R_a + \frac{2 \omega_m^2 \cdot d \cdot R_d}{3 \omega_{fr}^2 \cdot e^2} \tau_w \quad (1.8)$$

Cette étude du maximum de la solution de [Neretnieks 1982] ne fournit pas d'information sur la forme de la courbe mais permet d'établir une estimation du temps de sortie du maximum de concentration. Dans le cas du problème simple du transport dans une fracture unique, de transmissivité $10^{-7} m^2 \cdot s^{-1}$ et de porosité $2.1.10^{-1}$, le coefficient de retard, R_p , peut être calculé en considérant différentes vitesses d'écoulement et différentes ouvertures de fracture. La matrice considérée est de porosité 6.10^{-3} et de coefficient de diffusion de pore, $d = 5.10^{-11} m^2 \cdot s^{-1}$. Les tableaux 1.3 et 1.4 présentent les valeurs obtenues pour une longueur de parcours de 230 m. Dans les deux cas, les effets d'adsorption sont négligés. L'ouverture importante de la fracture est due à la prise en compte de différentes zones entourant celle-ci et qui ont fait l'objet d'un processus d'homogénéisation, expliquant ainsi la porosité de fracture différente de 1. Les valeurs utilisées sont celles du site expérimental de Äspö, dont le gradient de charge, en écoulement naturel, est estimé à 0.1%.

Les résultats des tableaux 1.3 et 1.4 indiquent que le temps de sortie est d'autant plus grand que l'ouverture de la fracture ou la vitesse d'écoulement sera faible. La diffusion matricielle joue, par conséquent, un rôle d'autant plus important lorsque la fracture est de faible ouverture ou lorsque l'écoulement est lent. Un phénomène de diffusion matricielle important est caractérisé par un temps de sortie beaucoup plus important. Ainsi, la modélisation du transport dans un milieu fracturé nécessite la prise en compte du phénomène de diffusion matricielle.

1.4.2 Etude numérique

Après l'étude des solutions analytiques, une analyse des résultats d'une modélisation numérique du transport d'un traceur dans une fracture unique est maintenant effectuée. Seuls les phénomènes de convection dispersion et de diffusion matricielle sont ici considérés. L'étude de la sensibilité des résultats à la variation du coefficient de diffusion de

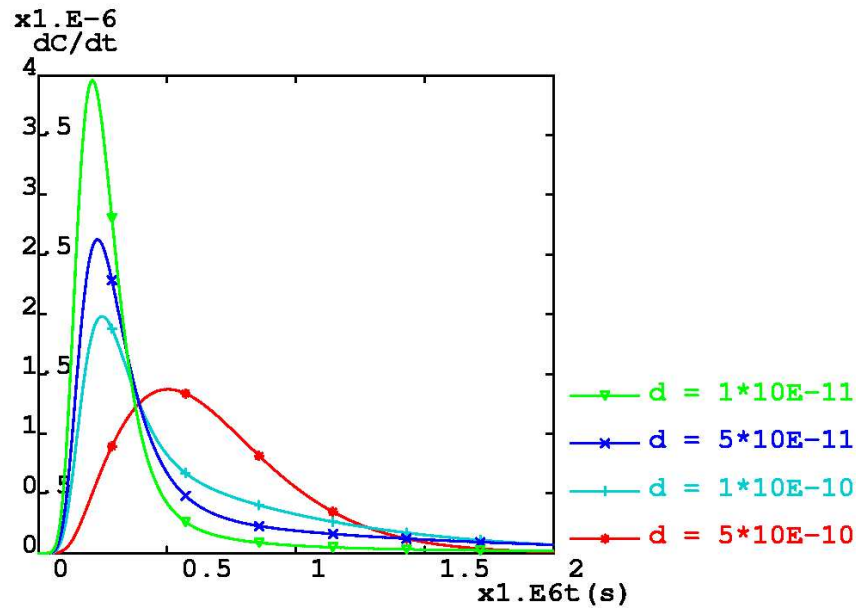


FIG. 1.4 – Evolution de la concentration à la sortie de la fracture : influence de la diffusion matricielle.

la matrice permet de caractériser l'action plus ou moins importante de la matrice. Plus le coefficient de diffusion de la matrice est élevé, plus le terme source, $\frac{2}{e}\omega_m d \frac{\partial C_m}{\partial z} \Big|_{z=0}$, de l'équation 1.3 est important. La masse prélevée à la fracture est, par conséquent, d'autant plus importante que le coefficient de diffusion matricielle est important. L'influence de la diffusion matricielle, d , sur le transport est illustrée par les courbes figure 1.4.

Les résultats indiquent que la diffusion matricielle influe sur la hauteur du pic des flux massiques. Plus la diffusion matricielle joue un rôle important, moins le maximum de concentration est élevé. Cette baisse du maximum de concentration s'accompagne d'une faible pente de la queue de la courbe. La décroissance de la valeur de la pente s'explique facilement par la faible cinétique du phénomène de diffusion matricielle. Le traceur, ayant pénétré dans la matrice, est restitué par celle-ci avec une cinétique très faible, par rapport à sa vitesse de propagation dans la fracture. Plus la diffusion matricielle est importante, plus la profondeur de pénétration de matière est importante et plus la restitution de la matière par la matrice s'effectue sur des temps longs. Le maximum de concentration est, lui aussi, influencé par la diffusion. Étant donné que de la masse séjourne dans les zones matricielles, le maximum de concentration est d'autant plus faible que la diffusion matricielle est importante. Si la diffusion est vraiment très importante, un retard dans les temps de sortie de la matière est obtenu (fig. 1.4). Pour une étude plus poussée des effets de la diffusion matricielle, il est possible de se référer à [Carrera et al. 1998].

Dans la problématique du stockage de déchets radioactifs, (écoulements naturels), la diffusion matricielle joue donc un rôle essentiel dans les processus de rétention. Son action, loin d'être négligeable, devra donc être prise en compte.

Chapitre 2

L'approche Smeared Fractures

Le principe des approches smeared fractures consiste à modéliser les milieux fracturés à l'aide d'un maillage régulier afin de représenter à la fois les fractures et les zones matricielles. Les différentes zones constituant le milieu sont représentées par un champ hétérogène de propriétés. Une fracture (ou une zone fracturée) est représentée, pour des approches Smeared Fractures, par un chenal coudé de section carrée pour le 2D ou par des strates successives d'épaisseur Δ pour le 3D (fig. 2.1) de fortes perméabilités. Cette représentation géométrique particulière des fractures est une conséquence directe de l'utilisation d'un maillage régulier. En effet, pour le 2D, si une fracture est alignée suivant une direction principale du maillage, elle sera représentée par une ligne de mailles sinon des groupes de deux mailles formant des coudes apparaîtront rendant compte de l'inclinaison de la fracture tout en assurant la connection des mailles. De la même manière pour le 3D, si une fracture est parallèle à un plan principal du maillage, elle sera représentée par un plan de mailles (ou strate) sinon des mailles apparaîtront afin de modéliser correctement l'inclinaison de la fracture en assurant la connectivité de différentes strates. La matrice correspond quant à elle aux zones les moins perméables dont les propriétés peuvent faire l'objet de différents choix : il est en effet possible d'affecter les propriétés réelles des blocs sains ou de prendre en compte une fracturation de petite échelle par un travail d'homogénéisation. Le choix de la discrétisation est directement lié à l'échelle de travail.

Le maillage des zones matricielles correspond au complémentaire du maillage des fractures sur le maillage régulier. Ces deux maillages obtenus à partir du maillage régulier de base, sont composés de mailles carrées ou cubiques de côté Δ . Ainsi le maillage associé aux fractures a une épaisseur de Δ avec Δ supérieur aux ouvertures des fractures ou des zones fracturées. Cette représentation géométrique des fractures impose au préalable la détermination de propriétés équivalentes et conduit à des champs de concentration plus étalés (fig. 2.2) pouvant être comparé à un tracé à l'encre sur une papier buvard. C'est cette caractéristique qu'illustre le mot 'SMEARED' signifiant "étalé dans l'espace" en anglais.

L'approche Smeared Fractures, développée dans un code de calcul du Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), CAST3M, pour des problèmes 2D, se différencie des autres approches de type Smeared Fractures présentes dans la littérature ([Svensson 2001],

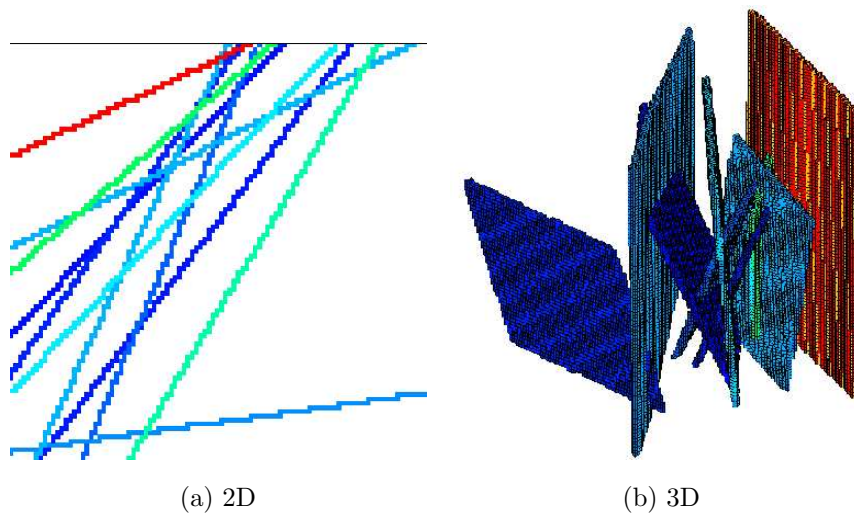


FIG. 2.1 – Représentation des fractures par une approche S.F.

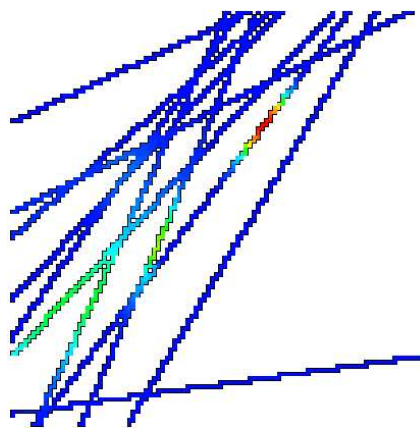


FIG. 2.2 – Illustration de la terminologie “Smeared”

[Svensson 1999a], [Tanaka et al. 1996] et [Gomez-Hernandez et al. 1999]) par le schéma numérique utilisé lors de la résolution de l'équation de Darcy. Ce code utilise les éléments finis mixtes hybrides, EFMH, dont l'avantage est d'avoir un bilan de flux exact par maille. De cette manière, les flux sont parfaitement contrôlés et, pour une maille carrée ou cubique, il est possible de déterminer leur expression pour une direction d'écoulement donnée. Ce schéma constitue une innovation par rapport à ces différentes approches en permettant l'obtention des flux réels pour le 2D et une bonne estimation pour le 3D. La résolution, toujours en éléments finis mixtes hybrides (EFMH), de l'équation de transport par l'approche Smeared Fractures constitue un apport supplémentaire à ce type d'approches, jusqu'à présent uniquement destinées à la résolution de l'écoulement. Précédemment amorcée par [Thouvenin et Grenier 2000], l'approche a été remaniée et étendue pour l'écoulement et le transport eulérien pour des géométries 2D et 3D en tenant compte des phénomènes de diffusion, dispersion dans les fractures ainsi que de la diffusion matricielle.

2.1 Principes de base de l'approche Smeared Fractures

L'approche Smeared Fractures fait partie des approches dites hybrides. Avec ce type de concepts, le milieu fracturé n'est pas maillé de façon dédié mais les fractures sont représentées par un champ continu hétérogène de propriétés sur un maillage régulier. Pour cela, différentes étapes sont nécessaires afin de conserver :

1. la géométrie du milieu lors de la génération du maillage
La première étape consistera à identifier, à partir d'un maillage régulier, les mailles à associer aux fractures.
2. les flux
Cette deuxième étape nécessite de s'intéresser aux EFMH. Les grandeurs équivalentes seront établies de manière à obtenir les bons flux (débits et flux massiques de l'élément transporté) à l'échelle de la fracture. Ces grandeurs sont le tenseur de perméabilité pour l'écoulement, la porosité et le tenseur de diffusion-dispersion pour le transport eulérien.

L'article [Fournio et al. 2002] introduit ces principes pour le 2D. Cet article a été présenté en juin 2002 à la XIV International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR2002) à Delft en Hollande. Néanmoins afin de fournir une idée plus précise de la manière dont sont déterminées ces propriétés équivalentes, intéressons nous au cas 2D, (pour le 3D, les étapes suivies pour déterminer les propriétés équivalentes sont décrites dans la thèse de [Fournio 2005]).

2.1.1 Formulation EFMH et applications

L'écoulement du fluide est régi par un système de deux équations :

★ équation de Darcy

$$\vec{q} = -\bar{\bar{K}} \cdot \vec{\nabla} h \quad (2.1)$$

★ équation de conservation de la masse (fluide incompressible et régime permanent)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{q} = 0 \quad (2.2)$$

où \vec{q} est la vitesse de Darcy, $\bar{\bar{K}}$ le tenseur de perméabilité, h la charge.

De forts contrastes existent entre les fractures (zone d'écoulements rapides) et la matrice (zone d'écoulements faibles). Ainsi, l'écoulement s'effectue toujours préférentiellement dans la direction de la fracture. La composante transverse de l'écoulement est, par conséquent, négligeable. Si le tenseur de perméabilité est assimilé à une grandeur scalaire, l'écoulement n'est possible que dans une seule direction. Par la suite, le tenseur de perméabilité peut donc être remplacé par une perméabilité scalaire.

1. Formulation EFMH

Les éléments finis mixtes hybrides permettent la formulation d'une approximation simultanée de la charge et de la vitesse de Darcy, [Mosé et al. 1994]. L'approximation du champ de vitesse et de la charge est exprimée sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions d'interpolation définies en différents points de Gauss [Dabbene 1995]. En deux dimensions, pour un élément carré Ω ces points sont au nombre de 4 et sont situés au centre de chacune des faces. Deux degrés de liberté sont affectés à chaque point et correspondent d'une part au flux total Q_i traversant la face i , et d'autre part à la charge Th_i moyenne sur cette face. En outre, l'élément possède un dernier degré de liberté en son centre correspondant à la valeur de la charge moyenne \bar{h} sur cet élément, soit un total de 9 inconnues par élément. La continuité des flux aux interfaces des mailles est aussi imposée lors de la résolution de l'équation de Darcy dans l'espace de Raviart-Thomas.

A partir de la formulation variationnelle faible discrète, [Dabbene et Dada 1995] montrent que le problème d'écoulement de type Darcy en régime permanent se traduit par un système de 5 équations :

$$Q_i^\Omega = \bar{h}_\Omega \left(\sum_j M_{ij}^{\Omega^{-1}} \right) - \sum_j \left(M_{ij}^{\Omega^{-1}} \cdot Th_j^{\Omega^{-1}} \right) \text{ pour } i = 1..4 \quad (2.3)$$

$$\bar{h}_\Omega = \frac{\sum_i (\alpha_i^\Omega Th_i)}{\sum_i (\alpha_i^\Omega)} \quad (2.4)$$

avec $\alpha_i^\Omega = \sum_j M_{ji}^{\Omega^{-1}}$, M^Ω étant la matrice de masse hybride définie par :

$$M_{ij}^\Omega = \int_\Omega (\vec{w}_i)^t \bar{K}^{-1} \vec{w}_j d\Omega$$

avec \vec{w}_i les fonctions d'interpolation telles que :

$$\int_{F_j} \vec{w}_i \cdot \vec{n} dF_j = \delta_{ij}$$

Ces 5 équations sont complétées par les conditions aux limites du problème et les conditions de continuité entre les éléments du maillage (continuité des flux et des traces de charges sur chaque face).

2. Application

Pour un élément carré de côté Δ , centré sur l'origine, les fonctions d'interpolations sont :

$$\vec{w}_1 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_2 = \begin{vmatrix} \frac{(x+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \\ 0 \end{vmatrix} \quad \vec{w}_3 = \begin{vmatrix} 0 \\ \frac{(y+\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \end{vmatrix} \quad \vec{w}_4 = \begin{vmatrix} \frac{(x-\frac{\Delta}{2})}{\Delta^2} \\ 0 \end{vmatrix}$$

Dans le cas où la perméabilité des fractures est isotrope, les expressions de la matrice hybride, de son inverse et des différents coefficients α_i^Ω sont relativement simples.

$$M^\Omega = \frac{1}{6K} \begin{vmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 \end{vmatrix} \quad M^{\Omega^{-1}} = K \begin{vmatrix} 4 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \end{vmatrix} \quad \alpha_i^\Omega = 6K$$

L'expression du flux pour les deux types de mailles X et Y formant le maillage associé à une fracture peut alors être déterminé.

- Cas 1 : Maille X , deux faces opposées sont traversées par le fluide.

Dans le cadre uniquement convectif (convection dans la fracture vitesse nulle dans la matrice) les conditions aux limites d'une maille X sont telles que :

$$Th_1^X = h_1, Th_3^X = h_2 \text{ et } Q_2^X = Q_4^X = 0 \text{ (fig. 2.3).}$$

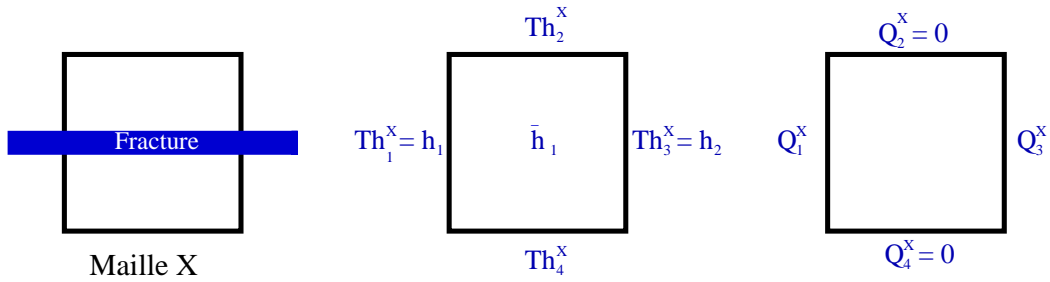
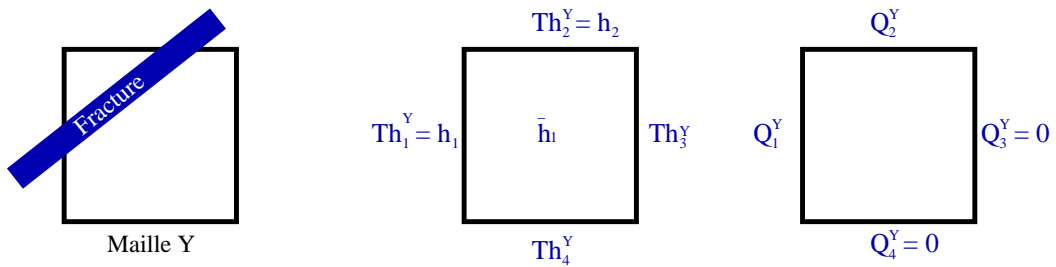
En utilisant la formule 2.3, on en déduit que :

$$Q_1^X = -Q_3^X = -K\Delta h$$

- Cas 2 : Maille Y , deux faces voisines sont traversées par le fluide.

Les conditions aux limites d'une maille Y sont telles que :

$$Th_1^Y = h_1, Th_2^Y = h_2 \text{ et } Q_3^Y = Q_4^Y = 0 \text{ (fig. 2.4).}$$


 FIG. 2.3 – Maille X et ses conditions aux limites

 FIG. 2.4 – Maille Y et ses conditions aux limites

De la même manière que pour la maille X on obtient :

$$Q_1^Y = -Q_2^Y = -\frac{3}{2}K\Delta h$$

3. Bilan.

L'expression du flux a pu être exprimée à la fois pour le type de maille Y et pour le type de maille X . Ainsi, pour une représentation d'une fracture par un chenal coudé correspondant à une combinaison de ces mailles, l'expression du flux peut être établie. Il est, de plus, possible d'exprimer le flux d'une fracture unique par une solution analytique classique. Ces deux expressions (flux analytique et flux obtenu par la discrétisation EFMH) étant connues, leur égalité va nous fournir les expressions des propriétés équivalentes à affecter aux mailles associées à la fracture. C'est cette détermination des paramètres équivalents qui fait l'objet des paragraphes suivants.

2.1.2 Approche Smeared Fractures pour l'écoulement : perméabilité équivalente

Pour chaque type de maille, les flux entrant et sortant sont de signes opposés. Ceci est vrai par construction du schéma en EFMH. Pour un chenal constitué de mailles carrées, l'expression du flux sortant peut être exprimée en fonction de la différence de charge Δh , du nombre de mailles X et du nombre de mailles Y notés respectivement N_X et N_Y .

$$\Delta h = \sum_{i=1..(N_X+N_Y)} \Delta h_i \quad (2.5)$$

$$= \sum_{i=1..N_X} \Delta h_i + \sum_{i=1..N_Y} \Delta h_i \quad (2.6)$$

or il a été établi que :

$$\Delta h_i = \frac{Q_{sf}}{K_{sf}} \text{ pour une maille } X \quad (2.7)$$

$$\Delta h_i = \frac{2Q_{sf}}{3K_{sf}} \text{ pour une maille } Y \quad (2.8)$$

Le flux d'une fracture Q_{sf} , dans le cadre d'une modélisation par une approche Smeared Fractures, est alors obtenu, relation 2.9, à partir des équations 2.5 à 2.8.

$$Q_{sf} = \frac{3K_{sf}\Delta h}{3N_X + 2N_Y} \quad (2.9)$$

De plus, l'expression analytique du flux, Q_r , pour une fracture unique est donnée par l'expression 2.10.

$$Q_r = \frac{eK_r\Delta h}{L_r} \quad (2.10)$$

L'objectif de conserver un flux exact lors de simulations de l'écoulement dans une fracture unique par une approche Smeared Fractures impose l'égalité des flux Q_{sf} et Q_r . Cette contrainte permet de déterminer la perméabilité équivalente, K_{sf} , avec :

$$K_{sf} = \frac{(3.N_X + 2.N_Y)e}{3.L_r}.K_r \quad (2.11)$$

où e , L_r et K_r sont respectivement l'ouverture, la longueur et la perméabilité de la fracture.

Une bonne approximation de la perméabilité équivalente peut être obtenue en fonction de l'inclinaison $0 < \theta < 45^\circ$ de la fracture. En effet, il est tout à fait possible de déterminer de façon approchée les nombres N_X et N_Y par :

$$N_Y = \frac{2.L_r.\sin\theta}{\Delta} \quad (2.12)$$

$$N_X = \frac{L_r.\cos\theta}{\Delta} - \frac{N_Y}{2} \quad (2.13)$$

On en déduit que :

$$K_{sf} = \frac{e}{\Delta} \cdot \frac{3 \cos \theta + \sin \theta}{3} \cdot K_r \quad (2.14)$$

Ainsi, pour une inclinaison nulle le rapport correctif $\frac{e}{\Delta}$ est obtenu assurant la conservation des flux lorsqu'une fracture d'ouverture e est modélisée avec une ouverture Δ .

Ce raisonnement nous a conduit à déterminer une perméabilité équivalente pour le modèle Smeared Fractures directement conditionnée par la conservation des flux. Cette approche permet un bon contrôle des flux, ce que ne peuvent pas faire les autres modèles Smeared Fracture pour lesquels la perméabilité est estimée à partir de moyennes pondérées des perméabilités des fractures et de la matrice [Svensson 2001] et où la précision sur les flux est vérifiée à posteriori [Svensson 1999a].

La perméabilité ainsi déterminée est une grandeur équivalente à l'échelle de la fracture. Elle présuppose que la transmissivité est constante tout le long de la fracture. En outre, la perméabilité équivalente calculée est une grandeur scalaire et non pas tensorielle. Ce point ne pose pas de problème car les applications envisagées ne considèrent que le cas de forts contrastes de perméabilité entre les fractures et les blocs matriciels. La géométrie du système impose alors la direction de l'écoulement.

2.1.3 Approche Smeared Fractures pour le transport eulérien

L'équation générale traduisant le transport d'un champ de concentration peut se mettre sous la forme :

$$\omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\omega_r \cdot \bar{\bar{D}}_r^* \cdot \vec{\nabla} C_r - C_r \cdot \vec{q}) \quad (2.15)$$

Où C_r représente la concentration dans la fracture, $\bar{\bar{D}}_r^* = \begin{vmatrix} D_L^* & 0 \\ 0 & D_T^* \end{vmatrix}$ son tenseur de dispersion. Les coefficients de dispersion longitudinale et transversale, D_L^* et D_T^* , sont donnés par les relations $D_L^* = d + \alpha_L \cdot \frac{|\vec{q}|}{\omega_r}$ et $D_T^* = d + \alpha_T \cdot \frac{|\vec{q}|}{\omega_r}$. On notera ω_r la porosité de la fracture, d la diffusion de pore et respectivement α_L et α_T les coefficients de dispersivité longitudinale et transversale. \vec{q} étant la vitesse de Darcy.

De la même manière qu'il a fallu déterminer une perméabilité équivalente, des propriétés équivalentes pour la porosité et pour les coefficients de diffusion-dispersion vont être établies. Pour cela, on utilisera les notations, $\bar{\bar{D}} = \omega \cdot \bar{\bar{D}}^*$, $D_L = \omega \cdot D_L^*$, $D_T = \omega \cdot D_T^*$. L'indice "*" indique de cette manière que les définitions classiques sont utilisées tandis que sa suppression indique la multiplication par ω .

Le tenseur de dispersion comporte des composantes longitudinales et transverses traduisant la possibilité d'échanges de masse entre la fracture et la matrice. Cependant,

étant donnés les forts contrastes de propriétés existant entre la fracture et la matrice, la composante transverse du flux dispersif est faible. Ainsi, approcher le tenseur de dispersion par une grandeur scalaire semble être envisageable.

Tenseur de dispersion équivalent

L'observation de l'équation du transport 2.15 permet de constater la similitude entre les expressions des flux massiques dispersif Q_d et convectif Q_m et celle du flux hydrique Q :

$$Q_d = \iiint_{V_r} \vec{\nabla} \cdot (\bar{D} \cdot \vec{\nabla} C_r) dv \quad (2.16)$$

$$\iff Q = \iiint_{V_r} \vec{\nabla} \cdot (\bar{K} \cdot \vec{\nabla} h) dv \quad (2.17)$$

$$Q_m = \iiint_{V_r} \vec{\nabla} \cdot (C_r \bar{K} \cdot \vec{\nabla} h) dv \quad (2.18)$$

Le coefficient de dispersion équivalent D_{sf} peut donc être obtenu de la même manière que le coefficient de perméabilité équivalent K_{sf} . Pour le flux massique convectif, la correction a déjà été appliquée au coefficient de perméabilité K_{sf} lors de la résolution de l'écoulement.

$$D_{sf} = \frac{(3.N_X + 2.N_Y)e}{3.L_r} . D_r \quad (2.19)$$

où e , L_r et D_r sont respectivement l'ouverture, la longueur et le coefficient de dispersion de la fracture.

Détermination de la porosité équivalente

En s'appuyant sur l'équation de transport 2.15 la conservation de la masse nous conduit à considérer son intégrale sur le volume de la fracture :

$$\iiint_{V_r} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t} dv = Q_d + Q_m \quad (2.20)$$

La détermination des coefficients équivalents est établie à partir de la conservation du flux massique dispersif Q_d et du flux massique convectif Q_m . Dans le cadre de la résolution de l'équation de transport avec le modèle Smeared Fractures le second membre de l'équation 2.20 est donc correctement évalué. Il ne nous reste donc plus qu'à nous intéresser au premier membre de cette équation.

Soit ω_{sf} et ω_r respectivement la porosité équivalente et réelle de la fracture. On va rechercher la relation entre ω_{sf} et ω_r afin d'établir l'égalité suivante :

$$\iint_{V_{sf}} \omega_{sf} \frac{\partial C_r}{\partial t} = \iint_{V_r} \omega_r \frac{\partial C_r}{\partial t}$$

On obtient immédiatement :

$$\omega_{sf} = \frac{V_r}{V_{sf}} \cdot \omega_r \quad (2.21)$$

$$\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta} \frac{L_r}{(N_X + N_Y)\Delta} \omega_r \quad (2.22)$$

ou en l'exprimant en fonction de l'angle d'inclinaison de la fracture, θ :

$$\omega_{sf} = \frac{e}{\Delta} \frac{1}{\cos \theta + \sin \theta} \omega_r \quad (2.23)$$

Les propriétés équivalentes de K_{sf} , relation 2.11, de D_{sf} , relation 2.19 et de ω_{sf} , relation 2.22, sont obtenues en conservant d'une part les flux et d'autre part en considérant la conservation de la masse.

2.2 Propriétés équivalentes utilisées pour le 2D

Les grandeurs équivalentes ont été établies pour une fracture unique. Le tableau 2.1 récapitule leurs expressions ainsi que les contraintes dont elles découlent. L'établissement de ces grandeurs est basé sur le schéma discret en éléments finis mixtes hybrides de manière à obtenir les flux exacts, pour une fracture unique. Ceci constitue un des apports importants de cette approche ; les autres approches ne vérifient pas cette propriété. Un second apport important est l'extension de l'approche à la résolution du transport.

Ces propriétés sont à affecter à chaque maille de la fracture. Avant cela, il est, cependant, nécessaire de s'intéresser à quelques détails :

⇒ Propriétés à affecter aux intersections.

Dans le cas de deux fractures qui s'intersectent, il faut affecter aux éléments communs des propriétés tenant compte des informations liées à chacune de ces fractures. D'une manière générale, lorsqu'une fracture intersecte une autre fracture, l'écoulement dans cette fracture va être peu perturbé au niveau de l'intersection et tout va se passer comme si la fracture la moins transmissive n'était pas connectée. Notre choix a été d'affecter au niveau des intersections les propriétés de la fracture la plus transmissive.

	Contrainte	Expression
Perméabilité	Conservation du flux	$K_{sf} = \frac{(3.N_X+2.N_Y)e}{3.L_r}.K_r$
Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_{sf} = \frac{(3.N_X+2.N_Y)e}{3.L_r}.D_r$
Porosité	Conservation du bilan de masse	$\omega_{sf} = \frac{V^r}{V_{sf}}.\omega_r$

TAB. 2.1 – Expression des propriétés équivalentes pour le 2D

⇒ Propriétés à affecter aux blocs matriciels.

La résolution de l'écoulement est uniquement effectuée dans le maillage des fractures. L'écoulement dans les blocs matriciels est toujours considéré comme négligeable. Pour le transport, par contre, de la matière peut diffuser dans ces blocs. Les propriétés affectées à ces blocs sont les propriétés réelles du bloc.

⇒ Temps de sortie en convection pure.

Les propriétés équivalentes ont été établies de manière à conserver les flux, d'une part, et le bilan de masse, d'autre part. Le temps de sortie en convection pure est, par conséquent, correctement estimé.

2.3 Propriétés équivalentes utilisées pour le 3D

Les tenseurs équivalents ont été établis pour une fracture unique. Le tableau 2.2 récapitule leurs expressions ainsi que les contraintes dont elles découlent. Ces grandeurs ont été établies à partir du schéma en éléments finis mixtes hybrides de manière à obtenir les flux exacts, pour une fracture unique, suivant deux directions principales.

Comme pour le 2D, les propriétés affectées aux intersections sont celles de la fracture la plus transmissive et pour la matrice les propriétés réelles du bloc.

2.4 Critères d'utilisation de l'approche Smeared Fracture 2D

Dans les études de qualifications, [Fournio 2005], [Fournio et al. 2004a] et [Fournio et al. 2004b], deux critères ont été établis afin de conserver la monotonie

Ensemble	Propriété	Contrainte	Expression
X	Perméabilité	Conservation du flux	$K_2^{sf,X} = K_3^{sf,X} = \frac{e \cos \beta}{\Delta \cos \theta} K_2^r$ $K_1^{sf,X} = \frac{e \cos \theta}{\Delta \cos \beta} K_1^r$
Y	Perméabilité	Conservation du flux	$K_2^{sf,Y} = K_3^{sf,Y} = \frac{4}{3} \frac{e \cos \beta}{\Delta \cos \theta} K^r$ $K_1^{sf,Y} = \frac{e \cos \theta}{\Delta \cos \beta} \frac{(1 + \frac{1}{3} \frac{\tan \theta}{\tan \beta})}{(2 - \frac{\sin^2 \theta}{\sin^2 \beta})} K^r$
X	Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_2^{sf,X} = D_3^{sf,X} = \frac{e \cos \beta}{\Delta \cos \theta} D_2^{r'}$ $D_1^{sf,X} = \frac{e \cos \theta}{\Delta \cos \beta} D_1^{r'}$
Y	Dispersion	Conservation du flux diffusif	$D_2^{sf,Y} = D_3^{sf,Y} = \frac{4}{3} \frac{e \cos \beta}{\Delta \cos \theta} D_2^{r'}$ $D_1^{sf,Y} = \frac{e \cos \theta}{\Delta \cos \beta} \frac{(1 + \frac{1}{3} \frac{\tan \theta}{\tan \beta})}{(2D_2^{r'} - \frac{\sin^2 \theta}{\sin^2 \beta} D_1^{r'})} D_2^{r'} D_1^{r'}$
X et Y	Porosité	Bilan de masse	$\omega_{sf} = \frac{V^r}{V^{sf}} \cdot \omega_r$

TAB. 2.2 – Expression des propriétés équivalentes pour le 3D

lors de la résolution du transport avec le schéma numérique en EFMH et de pouvoir modéliser correctement les phénomènes physiques. Ainsi :

★ pour la résolution du transport dans le réseau de fractures seul : $\Delta < 2\alpha$

★ pour la résolution du transport dans les fractures et la matrice : $\Delta < \sqrt{\frac{3}{10}d.R_p.\tau_w}$

avec

- α le coefficient de dispersivité (m)
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore ($m^2.s^{-1}$)
- R_p le coefficient de retard lié à la diffusion matricielle ($-$)
- $\tau_w = \frac{L_{traj}\omega_{fr}}{q}$ le temps d'arrivée du pic pour un écoulement purement convectif (s) .
- L_{traj} la longueur estimée de parcours du soluté (m)
- ω_{fr} la porosité de la fracture ($-$)
- q la vitesse de Darcy ($m.s^{-1}$)

Chapitre 3

Modélisation des transferts dans le cadre de la tâche 6

3.1 Etude d'un réseau 2D de fractures

L'objectif de cette étude est de démontrer, d'une part, les possibilités d'utilisation de l'approche Smearred Fractures, appliquée à un bloc fracturé composé des 11 fractures déterministes, de propriétés et de géométries réalistes. On regardera d'autre part, les influences de deux types de fractures ainsi qu'une comparaison entre l'action d'une matrice altérée et non altérée. Deux difficultés vont donc être abordées :

- ⇒ difficultés géométriques liées au milieu modélisé
- ⇒ difficultés liées à l'hétérogénéité du milieu

La géométrie 2D de cette simulation est obtenue à partir d'une coupe de la géométrie 3D du bloc fracturé, figures 3.1a et b, fournie par la Tâche 6C. Étant donné qu'en 3D, les fractures sont connectées, une connectivité maximale, obtenue en étendant les longueurs des fractures jusqu'aux limites du domaine, est considérée, figures 3.1c et d.

A partir de cette géométrie, un maillage Smearred Fractures et un maillage dédié sont générés. Ce dernier permettra de réaliser des calculs servant de référence. [Dershowitz et al. 2003] fournissent les caractéristiques des fractures classées en deux types (fig. 3.2 et 3.3). Ces deux types de fracture se différencient par les matériaux entourant les fractures. Quatre matériaux différents entourent les fractures de types I (fracture coating, fault gouge, cataclasite, granite altéré), alors que deux matériaux seulement sont présents autour des fractures de type II (fracture coating et granite altéré). La différence entre ces deux types de fracturation est liée à leur mode de formation : les fractures de type I se classent plutôt dans la catégorie des fractures de cisaillement, tandis que les fractures de type II plutôt comme des fractures dilatées. Ainsi, à chaque fracture est associé un facteur de complexité traduisant la répartition des différents types de fracturation la composant. Lors de cette modélisation, différentes configurations vont être étudiées pour lesquelles toutes les fractures vont être prises de type I puis de type II constituant les

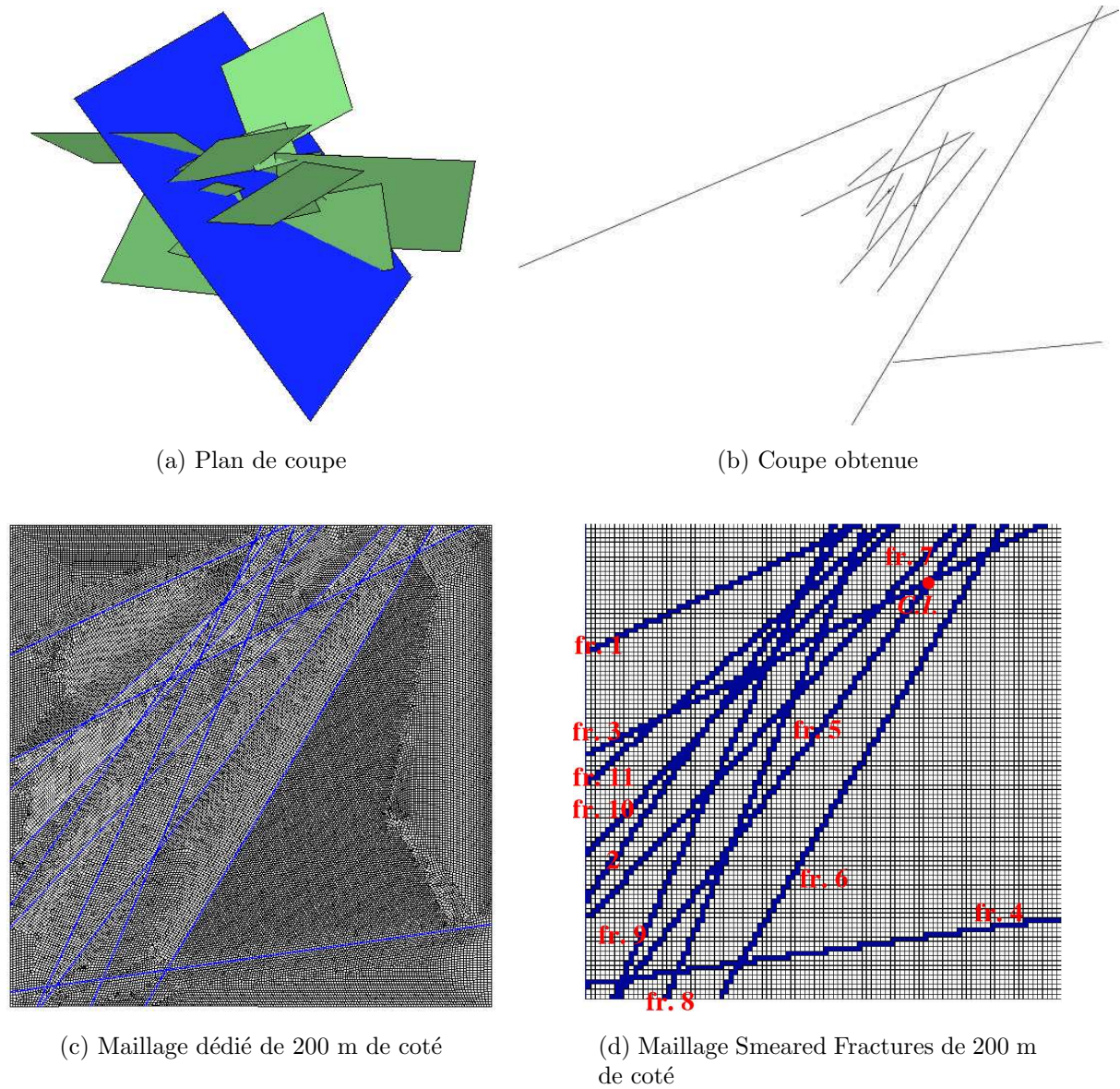


FIG. 3.1 – Création du maillage Smeared Fractures

Fracture	angle	longueur	centre	ouverture (réelle)	ouverture (type I)	ouverture (type II)
1	25.	127.74	57.88 173.	$2.917 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
11	41	167.12	63. 145.	$2.010 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
3	27.	215.22	96. 151.	$1.437 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
2	55.	193.2	55. 121.	$7.941 \cdot 10^{-5}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
10	47.	191.1	65. 130.	$5.404 \cdot 10^{-5}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
9	65.	220.68	58. 100.	$1.469 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
7	47.	228.62	78. 116.	$1.740 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
8	67.	217.24	76. 100.	$1.129 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
5	53.	250.44	88. 100.	$6.807 \cdot 10^{-5}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
6	59.	233.32	116. 100.	$1.874 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$
4	8.	201.96	100. 20.	$1.342 \cdot 10^{-4}$	0.026	$6 \cdot 10^{-4}$

TAB. 3.1 – Caractéristiques géométriques des fractures

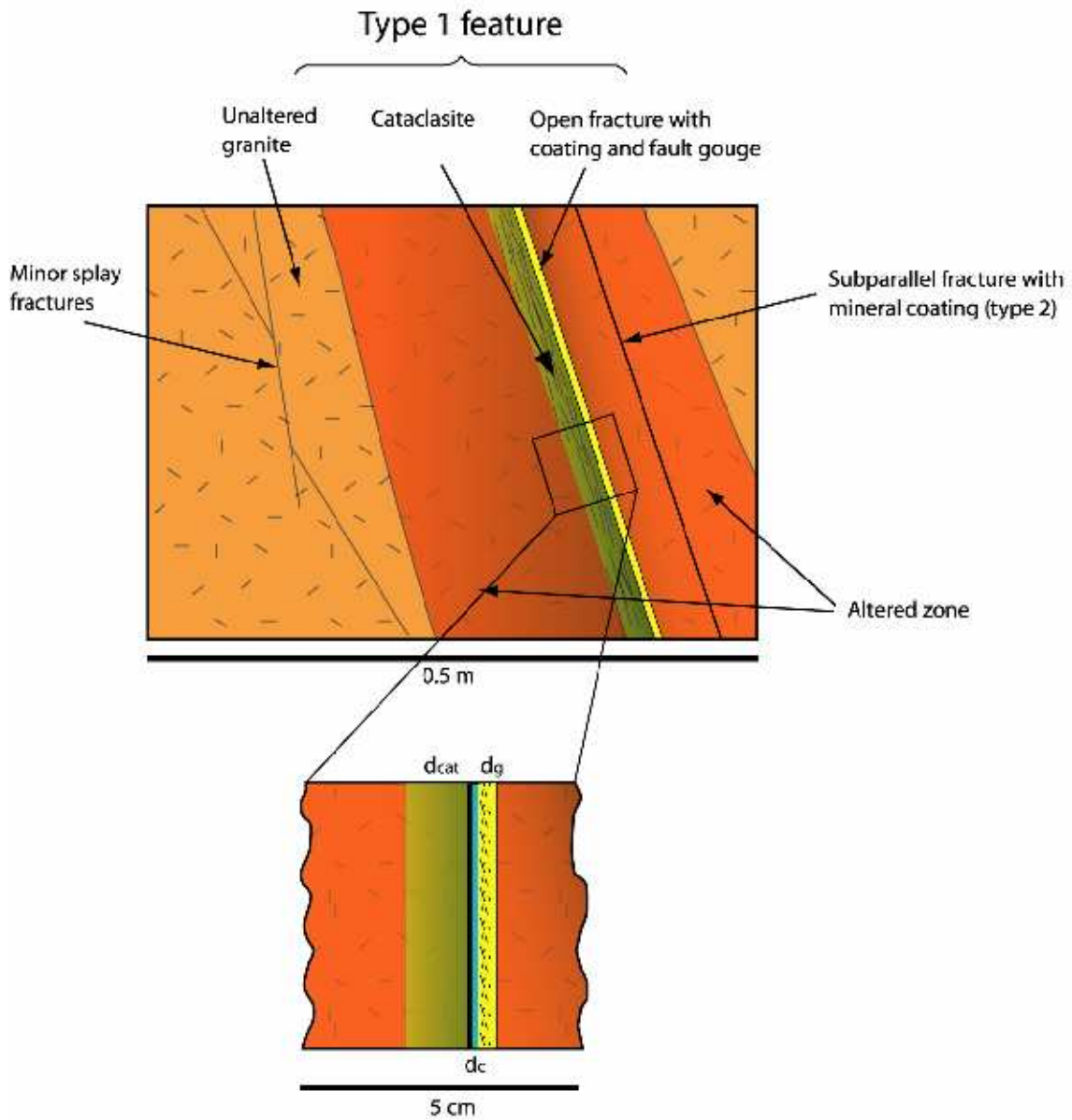
cas extrêmes de répartition des différents types de fracturation. Suivant le type de fracturation, la diffusion dans la matrice va être plus ou moins favorisée. Cette étude va donc permettre de déterminer la rétention minimale et maximale des différentes zones voisines des fractures.

A partir des caractéristiques des différentes zones constituant les types de fractures, une homogénéisation incorporant les zones de cataclasite, gouge et fracture coating, va être effectuée. En écoulement lent, le traceur envahit immédiatement ces différentes zones. Ces zones ont, par conséquent, le même comportement que la fracture, justifiant ainsi cette homogénéisation. Pour l'écoulement, la conservation du flux hydrique implique la conservation de la transmissivité $T_{eq} = T_{fr}$. Pour le transport, la variation du volume de la fracture va être corrigée en affectant une porosité équivalente $\omega_{eq} = \frac{e\omega_{fr} + \sum_i e_i \omega_i}{e_{eq}}$ avec e_{eq} l'ouverture équivalente, $e_{eq} = \sum e_i$. Les ouvertures varient peu d'une fracture à l'autre, une ouverture équivalente moyenne est affectée à l'ensemble des fractures, $e_{eq} = 0.026$ pour le type I et $e_{eq} = 6 \cdot 10^{-4}$ m pour le type II. Ainsi, suivant le type de fractures considéré, deux jeux de paramètres vont être utilisés. Les tableaux 3.1b et 3.2b présentent les caractéristiques des fractures suivant le type modélisé. Les caractéristiques des différents matériaux proches des fractures sont présentées par les tableaux des figures 3.2b et 3.3b.

Les conditions aux limites imposées sont :

- Masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.1d.
- Concentration nulle sur tout le contour du bloc.
- Gradient de charge variable, 10^{-3} ou $5 \cdot 10^{-4}$: vitesses lentes typiques des écoulements après fermeture du site de Äspö.

Afin de mieux comprendre le comportement du traceur dans le bloc fracturé, deux études ont été menées, avec ou sans la prise en compte de la diffusion dans la matrice.

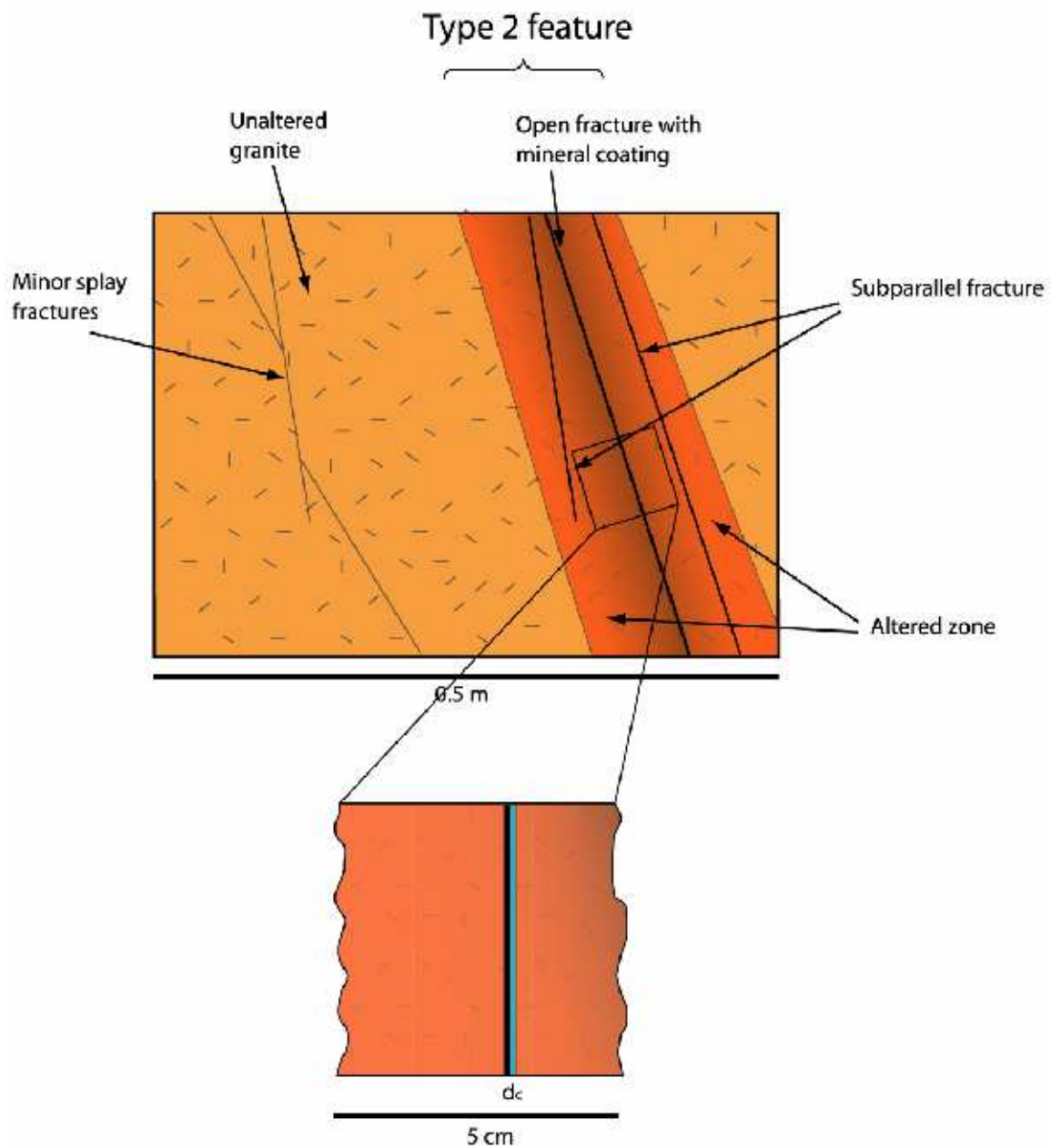


(a) Fracture de type 1

Rock type	Extent (cm)	Porosity (%)	Formation factor ()
Intact wall rock		0.3	7.E-5
Altered zone	20	0.6	2.E-4
Cataclasite d_{cat}	2	1	5.E-4
Fault gouge d_g	0.5	20	5.E-2
Fracture coating d_c	0.05	5	6.E-3

(b) Propriétés de la fracture de type 1

FIG. 3.2 – Caractéristiques des fractures de type 1



(a) Fracture de type 2

Rock type	Extent (cm)	Porosity (%)	Formation factor ()
Intact wall rock		0.3	7.E-5
Altered zone	10	0.6	2.E-4
Fracture coating d_c	0.05	5	6.E-3

(b) Propriétés de la fracture de type 2

FIG. 3.3 – Caractéristiques des fractures de type 2

Fracture	transmissivité	porosité (type I)	porosité (type II)
1	$4.02.10^{-7}$	0.059	0.21
11	$1.91.10^{-7}$	0.056	0.21
3	$9.76.10^{-8}$	0.053	0.21
2	$2.98.10^{-8}$	0.051	0.21
10	$1.38.10^{-8}$	0.05	0.21
9	$1.02.10^{-7}$	0.054	0.21
7	$1.43.10^{-7}$	0.055	0.21
8	$6.02.10^{-8}$	0.052	0.21
5	$2.19.10^{-8}$	0.051	0.21
6	$1.66.10^{-7}$	0.055	0.21
4	$8.51.10^{-8}$	0.053	0.21

TAB. 3.2 – Caractéristiques physiques des fractures

Transport sans diffusion matricielle

- Objectif : étude du comportement d'un traceur dans un réseau de 11 fractures.
- Géométrie : 11 fractures Type I sans matrice, se référer aux tableaux 3.1 et 3.2 pour les caractéristiques des fractures. Coefficient de dispersion de l'ordre du mètre.
- Condition initiale : Masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.1d.
- Conditions aux limites : gradient de charge de, 10^{-3} , concentration nulle sur tout le contour du bloc.

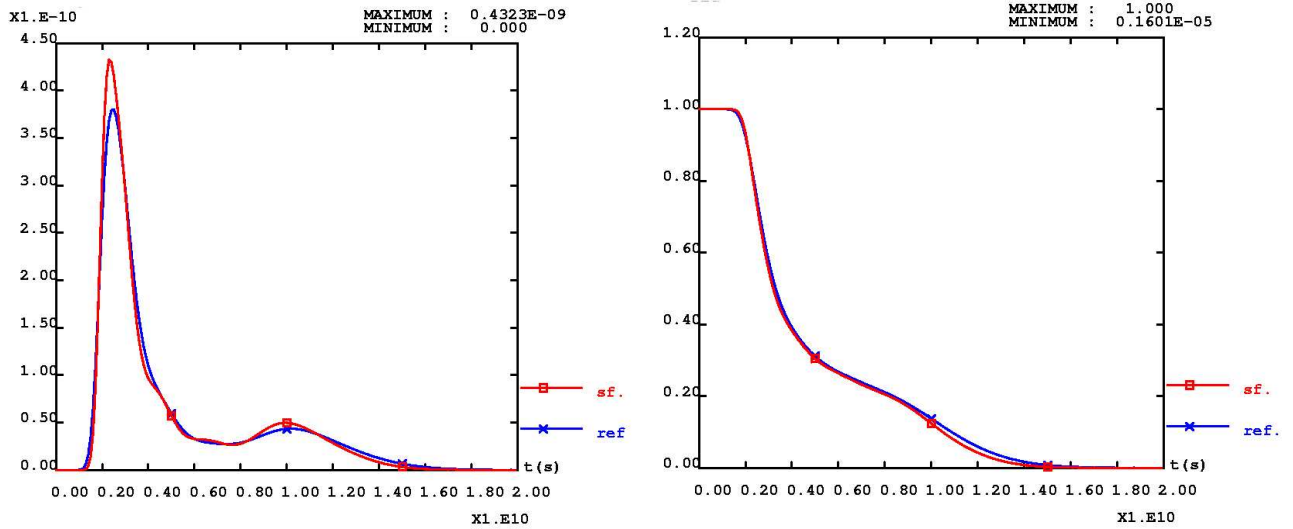
La discrétisation a été établie à partir du critère I.

1. Dans un premier temps, les résultats de l'étude du comportement d'un traceur dans le réseau de 11 fractures vont être commentés.
Les commentaires s'appuieront sur les résultats du modèle associé à l'approche Smeared Fractures.

2. Dans un second temps, le bon comportement de l'approche à un niveau de détail inférieur, (bonne précision sur les courbes de flux massiques sortant pour chaque fracture), sera établi. Cette analyse sera effectuée par la comparaison des courbes issues de le l'approche SF et celles obtenues en référence sur le maillage dédié.

1. Etude du comportement d'un traceur dans le réseau de 11 fractures.

La courbe de sortie du flux massique, pris sur tout le contour du domaine, possède deux pics (courbes 3.4a). Le plus important des deux pics est aussi celui qui arrive le premier. Une analyse plus poussée montre que ce premier pic est en fait la combinaison de différents pics arrivant par différentes fractures autour de 2.10^9 secondes (63 années). Cette même analyse permet d'identifier les principales



(a) Flux massique sortant du contour du bloc

(b) Evolution de la masse présente dans le bloc

FIG. 3.4 – Evolution de la masse totale présente dans le bloc et du flux massique pour un réseau de 11 fractures (sans diffusion matricielle)

fractures entrant en jeu pour le transport du traceur. Une simplification du modèle à ces seules fractures pourrait, par exemple, constituer une première étape dans la construction d'un modèle PA. En se référant toujours à la figure 3.1d, les fractures contribuant à la formation du premier pic sont par ordre d'importance :

- la fracture 7 : maximum de 74% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 3.5b).
- la fracture 9 : maximum de 17% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 3.5e).
- la fracture 4 : maximum de 16% du maximum du premier pic du flux massique total (courbes 3.5a).
- les fractures 11, 5 et 3 : maximum de 8% du maximum du premier pic du flux massique total.

Le second pic correspondant à une série de temps de séjours plus longs (1.10^{10} secondes, 317 ans) correspond quant à lui aux contributions suivantes :

- fracture 8 : maximum de 40% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 3.5c),
- fracture 9 : maximum de 27% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 3.5d),
- fracture 4 : maximum de 13% du maximum du deuxième pic du flux massique total (courbes 3.5a),

- fractures 5 et 10 : maximum de 13% et 6% du maximum du deuxième pic du flux massique total.

Les arrivées de ces pics se traduisent, sur la courbe de sortie en masse (courbes 3.4b), par une augmentation des pentes des courbes. Cette augmentation de la pente indique une sortie importante de soluté.

A partir de ces résultats, différents chemins d'écoulement peuvent être déterminés. Ceci illustre le degré d'information que l'on peut obtenir avec l'approche Smeared Fractures. Introduisons la notation [3,4,9] pour indiquer par exemple que le traceur circule dans la fracture 3 puis 4 pour enfin sortir par la fracture 9. Les principaux parcours pour le premier pic sont :

- [3, 7], [3, 8, 7], et [3, 9, 7] pour la sortie fracture 7
- [3, 9] pour la sortie fracture 9
- [3, 9, 4] pour la sortie fracture 4.

et pour le second pic :

- [5, 8] pour la sortie fracture 8,
- [5, 4, 9] pour la sortie fracture 9,
- [5, 4] pour la sortie fracture 4,
- [5] pour la sortie fracture 5.

Ainsi, les deux différents temps de sortie pour les deux pics sont directement liés à la différence de vitesse d'écoulement entre la fracture 3 (vitesse élevée) et la fracture 5 (vitesse lente). Pour cette position d'injection (intersection fracture 3 et 5) seules les fractures 3, 4, 5, 7, 8 et 9 jouent un rôle important.

2. Apports des résultats obtenus avec le maillage explicite de la géométrie, (courbes en bleu sur les figures concernées).

Les courbes obtenues avec le maillage de références illustrent le bon comportement de l'approche Smeared Fractures. Les validations de l'approche Smeared Fractures, effectuées précédemment, ont montré un bon comportement général de l'approche. Les courbes du modèle de référence montrent, ici, que le comportement de l'approche est aussi bon à un niveau de détail inférieur, correspondant à la modélisation du transport dans chaque fracture. Il est intéressant de constater que les similitudes entre l'approche Smeared Fractures et le calcul sur maillage dédié sont obtenues que ce soit pour les valeurs du flux massique total ou les valeurs des flux massiques locaux (sortant de fractures particulières), (courbes 3.5 et 3.6). Ainsi, pour les fractures 4, 7, 8 et 9, les temps d'arrivée des différents pics sont similaires suivant l'approche Smeared Fractures (courbes rouges) ou l'approche de référence (courbes Bleues),

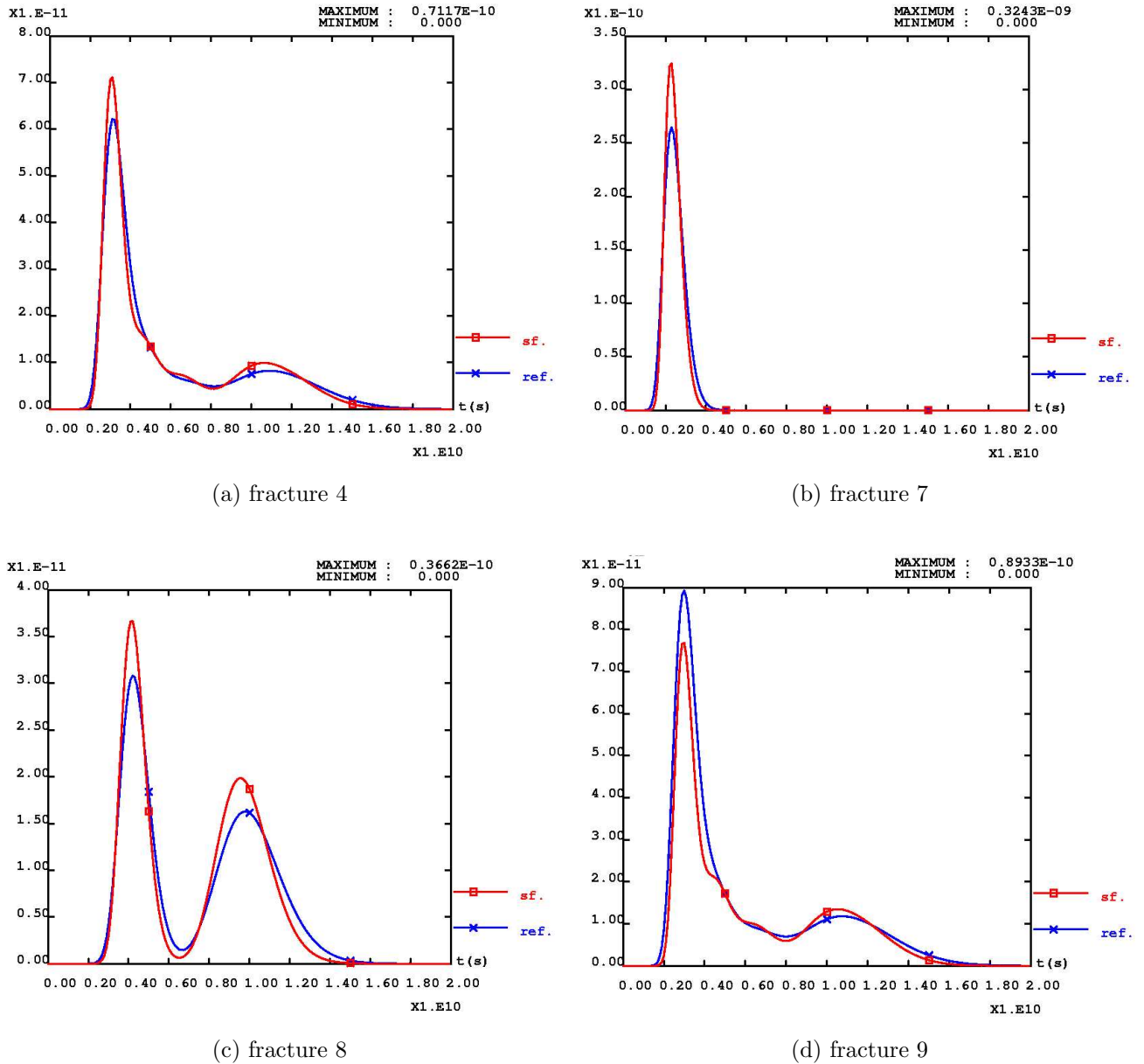
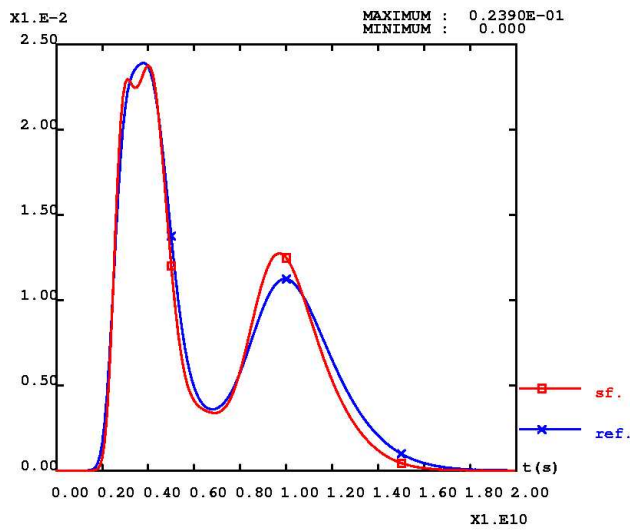


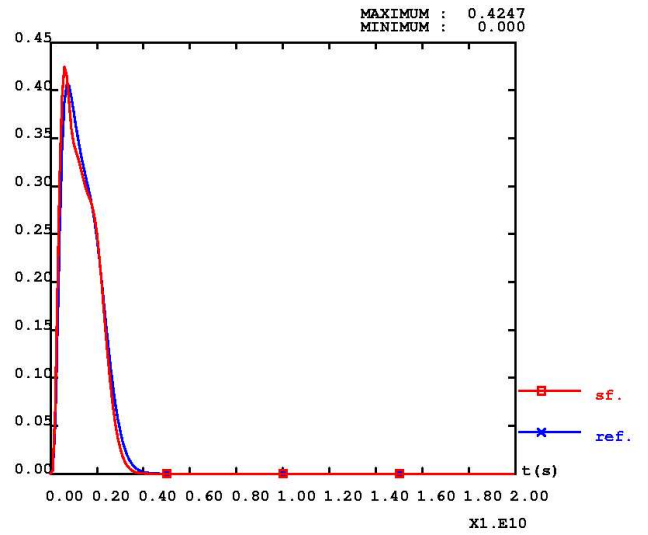
FIG. 3.5 – Evolution du flux massique dans différentes fractures du réseau de 11 fractures

figures 3.5 et 3.6. Les valeurs des maximums de flux massique ou de masse sont obtenus avec une erreur de quelques pour cent.

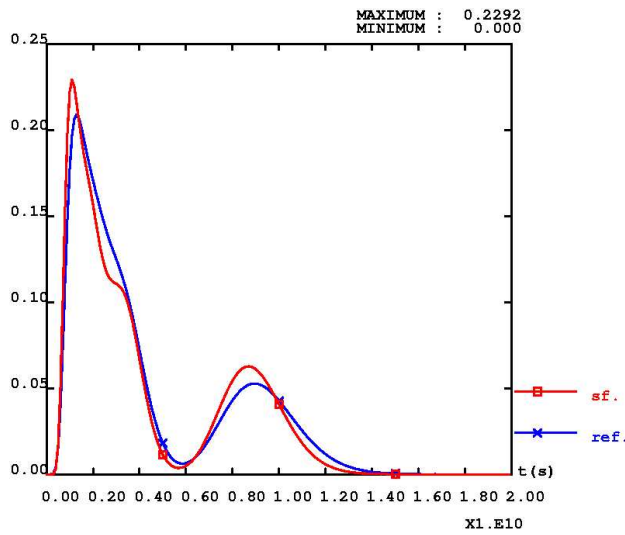
Le bon comportement général de l'approche Smeared Fractures permet de calculer à moindre coup un scénario de transport sur plusieurs fractures et ainsi d'identifier : le comportement du traceur dans le réseau de fractures, les exutoires principaux ainsi que les fractures parcourues par le traceur.



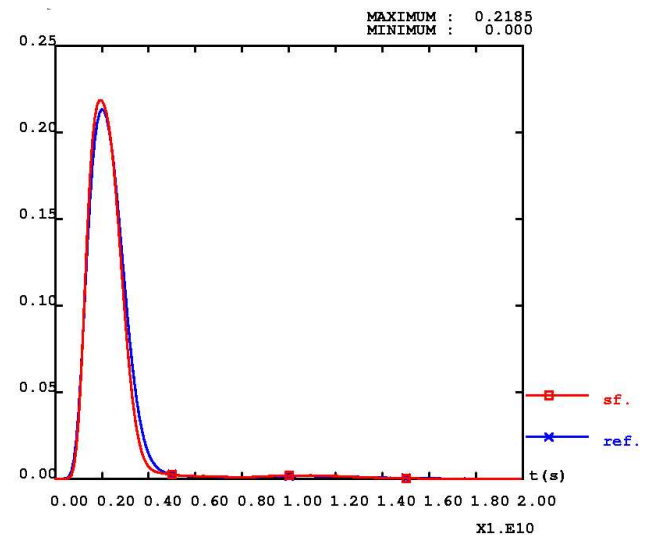
(a) fracture 4



(b) fracture 7



(c) fracture 8



(d) fracture 9

FIG. 3.6 – Evolution de la masse dans différentes fractures du réseau de 11 fractures

	porosité	coefficient de diffusion, $D = \omega.d m^2.s^{-1}$
Granite altéré	0.6%	3.10^{-13}
Granite non-altéré	0.3%	10^{-13}

TAB. 3.3 – Caractéristiques physiques de la matrice

Transport avec diffusion matricielle

La prise en compte de l'action de la matrice va modifier les écoulements dans le bloc. Aussi, deux études sont menées.

- ★ Dans un premier temps, on étudie l'influence du type de fracture (I ou II).
- ★ Dans un second temps, on regarde l'influence du matériau, granite altéré ou granite non-altéré, constituant la matrice. Les caractéristiques de ces deux matériaux sont données dans le tableau 3.3.

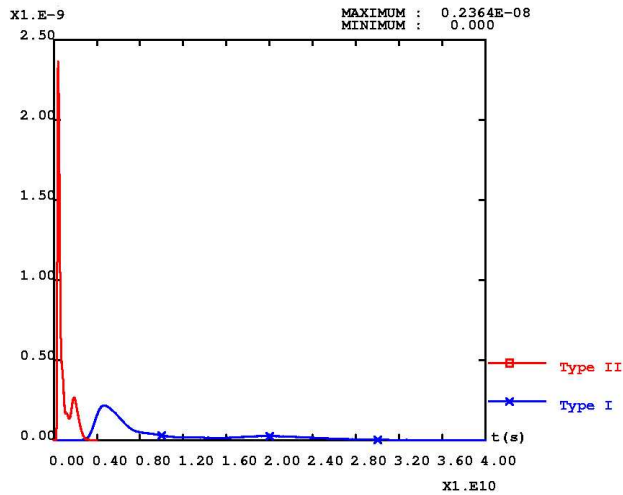
L'approche Smeared Fractures ayant été suffisamment validée, les études suivantes sont effectuées uniquement avec cette approche sans être comparées à des calculs effectués sur un maillage dédié du milieu.

- ★ Comportement des différents types de fractures.
 - Objectif : étude de l'influence des différents types de fracturation.
 - Géométrie : 11 fractures Type I et II avec sa matrice (granite altéré), se référer aux tableaux 3.1 et 3.2 pour les caractéristiques des fractures. Les caractéristiques de la matrice sont données dans le tableau 3.3.
 - Condition initiale : Masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.1d.
 - Conditions aux limites : gradient de charge de, 5.10^{-4} , concentration nulle sur tout le contour du bloc.

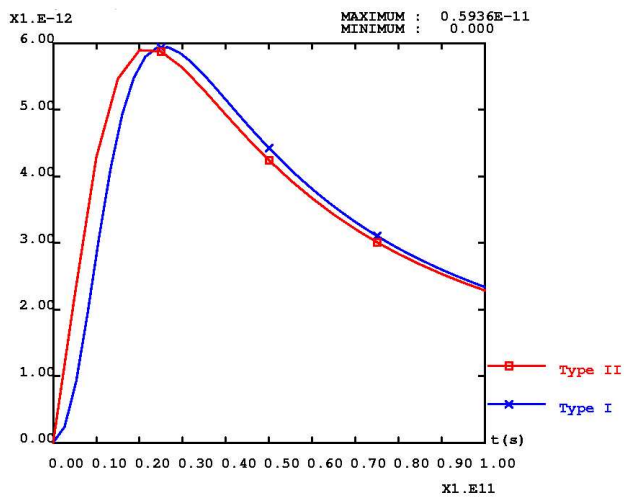
La modélisation va s'appuyer sur la géométrie précédente en considérant toutes les fractures de type I puis toutes les fractures de type II (figures 3.2 et 3.3). Les caractéristiques retenues pour la matrice sont celles du granite altéré, constituant le matériau directement au contact des zones homogénéisées. La modélisation de l'écoulement et du transport est effectuée pour un gradient de charge de 5.10^{-4} .

Les vitesses d'écoulement obtenues dans le réseau de fractures sont très différentes suivant le type de fractures considéré.

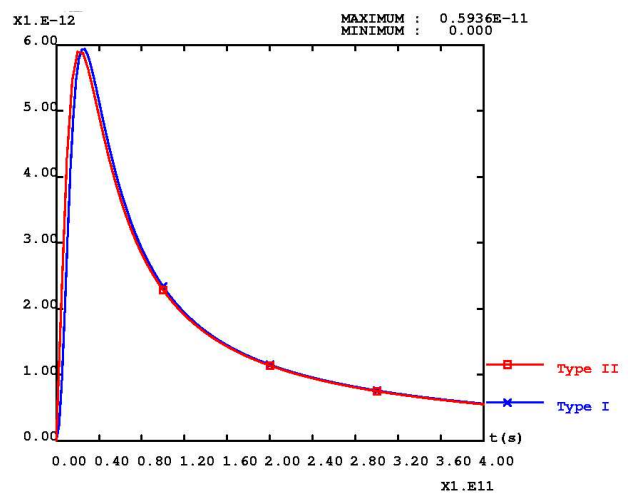
⇒ Ainsi, pour une modélisation du transport, sans diffusion matricielle et avec des fractures de type II, le pic principal arrive au temps $4.6.10^8$ secondes (14 ans) tandis que pour des fractures de type I ce temps est multiplié par un facteur 10 soit $4.7.10^9$ secondes (150 ans) (courbes 3.7a). Les fractures de type II sont donc les plus rapides.



(a) Sans diffusion matricielle



(b) Avec diffusion matricielle (Zoom)



(c) Avec diffusion matricielle

FIG. 3.7 – Etude des différents types de fracturation : courbes de flux massique pris sur tout le contour du bloc

⇒ Néanmoins, lorsque la diffusion matricielle est prise en compte, un coefficient de retard peut être évalué pour chaque type de fractures. Une estimation de la longueur moyenne de parcours du traceur dans le réseau de fracture fournit une valeur de 230 m. Pour des fractures de type I, le coefficient de retard est voisin de 5, tandis que pour des fractures de type II, il est proche de 40. Entre ces deux coefficients de retard, il existe de nouveau un facteur 10. La fracture de type II, la plus rapide, est aussi la plus retardée.

Ainsi, lors de la prise en compte de la diffusion matricielle, les temps de sortie sont similaires : $2 \cdot 10^{10}$ secondes (634 ans) pour le type II et $2.5 \cdot 10^{10}$ secondes (793 ans)

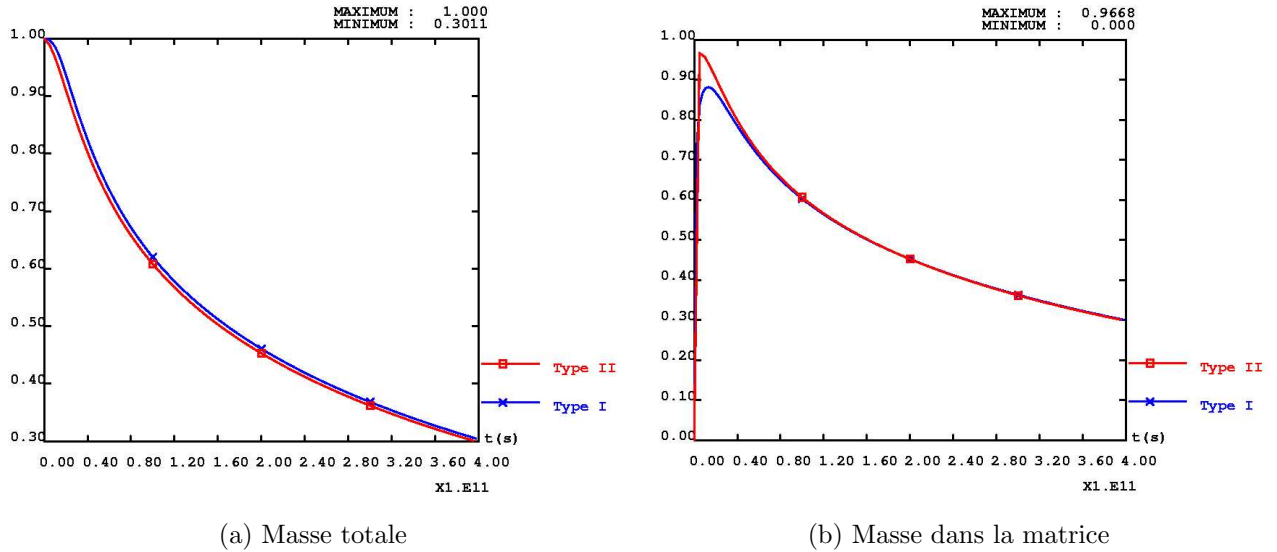


FIG. 3.8 – Etude des différents types de fracturation : courbes de masse

pour le type I (courbes 3.7b et c). Ces temps sont comparables à ceux obtenus à partir de l'expression du temps de sortie, équation 3.1, pour une longueur de parcours de 230 mètres (distance entre le point d'injection et le bord inférieur du bloc).

$$\tau_s = R_p \cdot \tau_w \quad (3.1)$$

$$R_p = R_a + \frac{2 \omega_m^2 \cdot d \cdot R_d}{3 \omega_{fr}^2 \cdot e^2} \tau_w \quad (3.2)$$

avec

- R_p coefficient de retard lié à la diffusion matricielle (–)
- τ_w le temps de sortie convectif (s)
- ω_m la porosité de la matrice(–)
- ω_{fr} la porosité de la fracture(–)
- e l'ouverture (m)
- d le coefficient de diffusion matricielle de pore ($m^2 \cdot s^{-1}$)
- R_a le coefficient de retard dû à l'adsorption (–)

Ainsi, pour les fractures de type II, la rétention due à la diffusion matricielle est plus importante que pour les fractures de type I, se traduisant par une diffusion plus importante dans les zones matricielles (courbes 3.8b) et un temps de sortie supérieur à celui obtenu pour la modélisation du transport dans les fractures seules (courbes 3.7).

Dans cette étude, les deux types de fracturation ont un rôle comparable dans le transport de soluté. Pour un écoulement quelconque, l'action de ces différents types de fracturation dépend des vitesses d'écoulement. Ainsi, pour des écoulements lents (gradients de charge de $5 \cdot 10^{-4}$), les deux types de fracturation jouent des rôles équivalents, comme l'illustrent les champs de concentrations figure 3.9, avec des temps de sortie similaires. Si l'on considère un écoulement plus rapide leurs rôles peuvent alors être différents. Si l'équation 3.1, est exprimée en fonction du gradient de charge alors :

$$\tau_s = \frac{1}{\nabla h^2} \left[\frac{\omega_{fr} L_{traj}}{K_{fr}} (\nabla h + \frac{2}{3} \frac{\omega_m \cdot D_m \cdot L_{traj}}{\omega_{fr} \cdot e^2 \cdot K_{fr}}) \right] \quad (3.3)$$

avec

$$\left(\begin{array}{l} \nabla h \text{ le gradient de charge } (-) \\ L_{traj} \text{ la longueur de parcours du soluté } (m) \\ K_{fr} \text{ la perméabilité de la fracture } (m \cdot s^{-1}) \\ \omega_m \text{ la porosité de la matrice } (-) \\ \omega_{fr} \text{ la porosité de la fracture } (-) \\ e \text{ l'ouverture } (m) \\ D_m \text{ le coefficient de diffusion matricielle efficace } (m^2 \cdot s^{-1}) \end{array} \right)$$

Le temps de sortie peut alors être mis sous la forme $\tau_s = \frac{C_1}{\nabla h^2} (\nabla h + C_2)$ avec :

- le coefficient $C_1 = \frac{\omega_{fr} L_{traj}}{K_{fr}}$. Ce coefficient traduit l'influence du transport dans les fractures.
- le coefficient $C_2 = \frac{2}{3} \frac{\omega_m \cdot D_m \cdot L_{traj}}{\omega_{fr} \cdot e^2 \cdot K_{fr}}$. Ce deuxième coefficient traduit, quant à lui, l'action de la diffusion matricielle.

Grâce à ces deux coefficients, il devient possible de déterminer pour quel gradient de charge les temps de sortie du maximum de concentration sont similaires. Une application numérique permet de constater que, entre le type I et le type II, le coefficient C_1 varie d'un facteur 10^{-1} tandis que le coefficient C_2 varie d'un facteur 10. Ainsi, pour un gradient de charge inférieur à la valeur du minimum du coefficient C_2 des deux types de fracturation, les deux facteurs existant entre les constantes C_1 et C_2 se compensent. Ces considérations ne fournissent, cependant, pas d'indication sur la forme des courbes. Pour un tel gradient de charge (dans notre application voisin de $C_2 = 10^{-3}$) le temps τ_s^{typII} représente 65% du temps τ_s^{typI} . Pour un gradient de charge de $5 \cdot 10^{-4}$, correspondant à la situation étudiée, le temps τ_s^{typII} représente 78% du temps τ_s^{typI} . En écoulement lent, une simplification intéressante du problème serait de considérer que l'ensemble des fractures sont de type II. Bien que risquant de sous-évaluer quelque peu les temps de sortie du soluté, cette simplification permettrait d'obtenir une estimation correcte de ce

temps de sortie.

★ Blocs sains et blocs altérés : influence sur la diffusion matricielle.

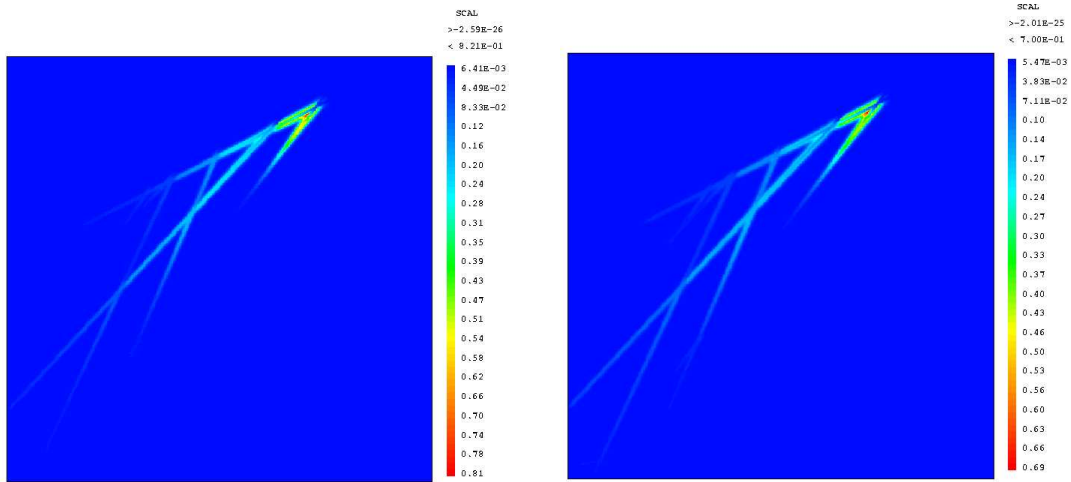
- Objectif : étude de l'influence de la constitution de matrice.
- Géométrie : 11 fractures Type I avec matrice, se référer aux tableaux 3.1 et 3.2 pour les caractéristiques des fractures. Les caractéristiques de la matrice sont données dans le tableau 3.3.
- Condition initiale : Masse unitaire stockée à l'intersection de la fracture 3 et de la fracture 5, figure 3.1d.
- Conditions aux limites : gradient de charge de, 10^{-3} (condition d'écoulement du site de Äspö), concentration nulle sur tout le contour du bloc.

Les deux types de fracturation sont en contact avec de la roche altérée et de la roche saine. Dans notre modèle, seul un type de matrice est pris en compte. Aussi, l'influence des différents matériaux constituant la matrice va maintenant être étudiée. Pour cela, la modélisation du transport va être effectuée en affectant, dans un premier temps, les propriétés de la roche altérée, puis dans un second temps, celles de la roche saine. Les fractures sont toutes de type I et le gradient de charge considéré est de 10^{-3} .

Comme prévu, la roche altérée se révèle être celle pour laquelle la diffusion matricielle joue un rôle plus important et engendre un retard sur le déplacement du soluté, (courbes 3.10a). Le coefficient de retard, obtenu à partir de la relation 1.8, est, en effet, de 2.4 pour la roche altérée tandis qu'il n'est que de 1.07 pour la roche saine. Le temps de sortie du pic maximum est ainsi de 3.10^9 secondes (95 ans) pour la roche saine tandis qu'il atteint 7.10^9 secondes (221 ans) pour la roche altérée. L'importance de la diffusion dans la matrice est aussi mise en évidence par les courbes de masse. Pour la roche altérée, la masse totale présente dans le système décroît plus faiblement que dans le cas de la roche saine, indiquant l'existence d'un phénomène important qui ralentit la sortie du soluté, (courbes 3.10b). Dans le même temps, la masse présente dans la matrice est deux fois plus importante pour de la roche altérée comparée à celle de la roche saine (courbes 3.10c). La roche saine a peu d'influence sur les temps de sorties, contrairement à la roche altérée dont la modélisation mérite par conséquent d'être soignée.

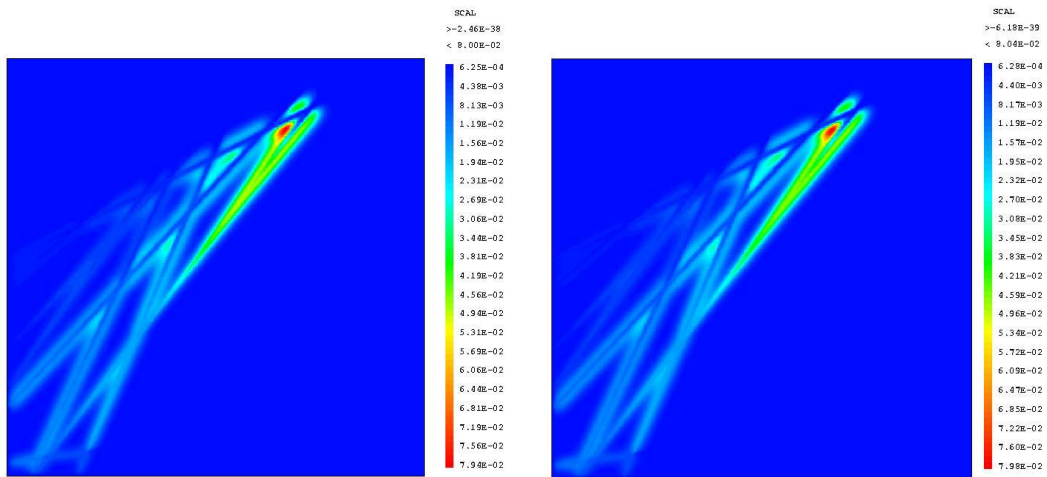
De ces études 2D, les bilans suivants peuvent être tirés :

⇒ La répartition des différents types de fracture doit être bien modélisée. Bien que les plus rapides, les fractures de type II sont, aussi, les plus influencées par la matrice. Selon les vitesses d'écoulement, le rôle joué par chaque type de fractures est différent. Dans notre étude, le rôle de la matrice est dominant.



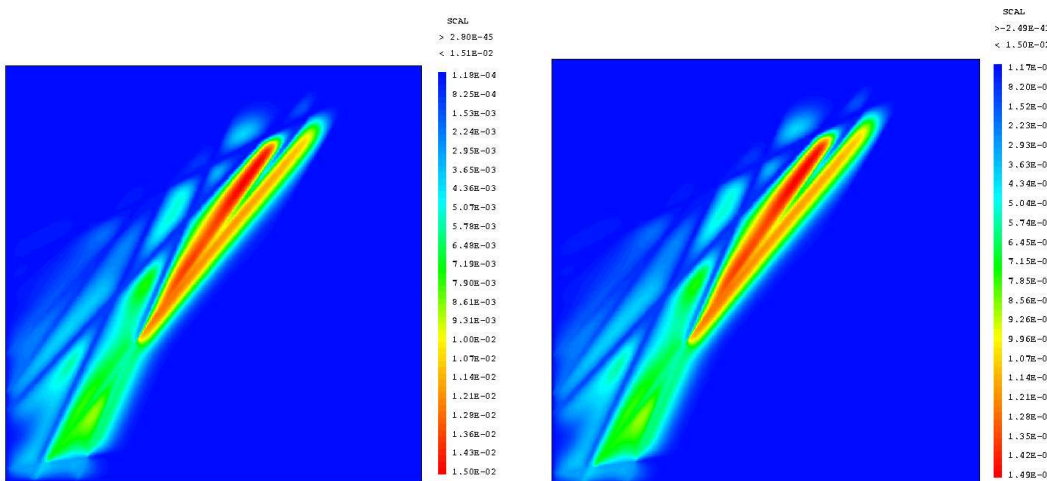
(a) Type I : temps 317 ans

(b) Type II : temps 317 ans



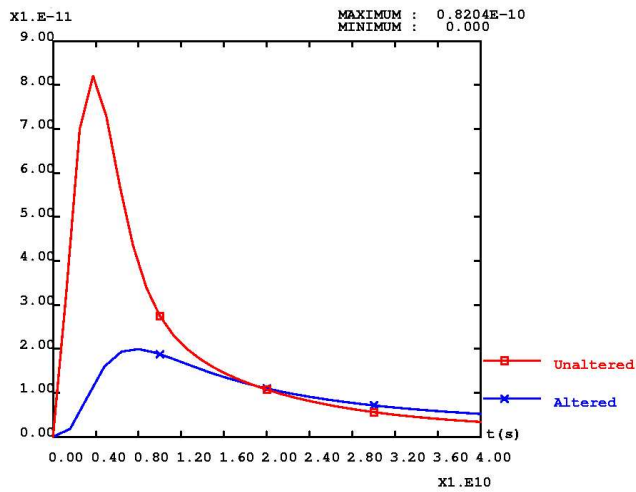
(c) Type I : temps 3170 ans

(d) Type II : temps 3170 ans

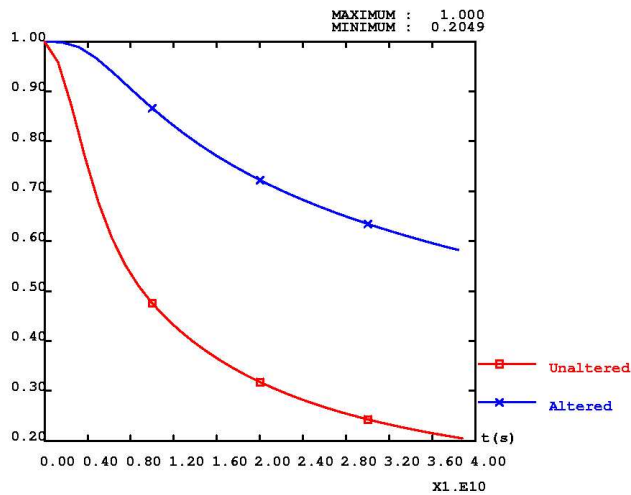


(e) Type I : temps 12700 ans

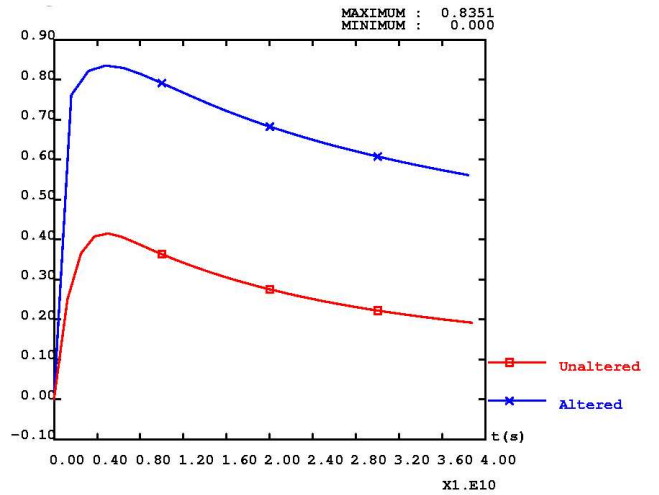
(f) Type II : temps 12700 ans



(a) Flux massique total



(b) Masse présente dans le bloc



(c) Masse présente dans la matrice

FIG. 3.10 – Etude des différents types de matrice : courbes de flux massique et de masse

- ⇒ L'action de la roche altérée comparée à la celle de la roche non-altérée est, comme attendu, beaucoup plus importante.

- ⇒ La modélisation de la matrice non-altérée nécessite de gros efforts de discrétisation. Il est, cependant, envisageable de modéliser son influence par un couplage avec une solution analytique pour le traitement de la diffusion (modèle double porosité). De cette manière, l'approche Smeared Fractures couvrirait l'ensemble des configurations rencontrées lors de la modélisation de la diffusion matricielle, en étant moins pénalisée en termes de coûts de calcul.

- ⇒ L'approche Smeared Fractures fournit de bons résultats globaux mais permet aussi de comprendre, en détail, l'écoulement et le transport dans des fractures particulières.

3.2 Modélisation 3D : Tâche 6D

Le but de la Tâche 6D est d'identifier les zones d'écoulement ainsi que les paramètres de transport associés aux principales fractures composant le bloc fracturé à l'échelle de 200 m. L'identification de ces paramètres s'appuie sur un test de traçage (le test C2).

L'écoulement est donc forcé (débit de pompage de $3.25.10^{-5} \text{ m}^3.s^{-1}$) et les vitesses d'écoulement dans les fractures importantes (gradient de charge estimé à 30%). Les conditions en charge autour du bloc sont fournies sur un maillage régulier, figure 3.11. Ces conditions d'écoulement sont très éloignées de celles rencontrées en écoulement naturel (gradient de charge voisin de 0.1%). Seules quatre fractures sont vues par le traceur, formant un chemin direct entre le point d'injection et le point de pompage. La stratégie de modélisation proposée est, [Grenier et al. 2004] :

1. de modéliser l'écoulement en condition de pompage dans les 11 fractures par l'approche Smeared Fractures (figures 3.12). Pour l'écoulement, un raffinement important n'est pas nécessaire.

2. Ensuite, les quatre fractures intervenant dans le test de traçage sont modélisées grâce à un maillage dédié avec une faible épaisseur de zones matricielles (figure 3.13). La matrice est composée d'une zone unique étant donné que l'information fournit par le test porte sur une moyenne des propriétés des différents matériaux la formant. La carte de charge obtenue précédemment avec l'approche Smeared Fractures pour le réseau de 11 fractures sert de conditions aux limites à ce modèle de quatre fractures lors de la modélisation du transport des solutés.

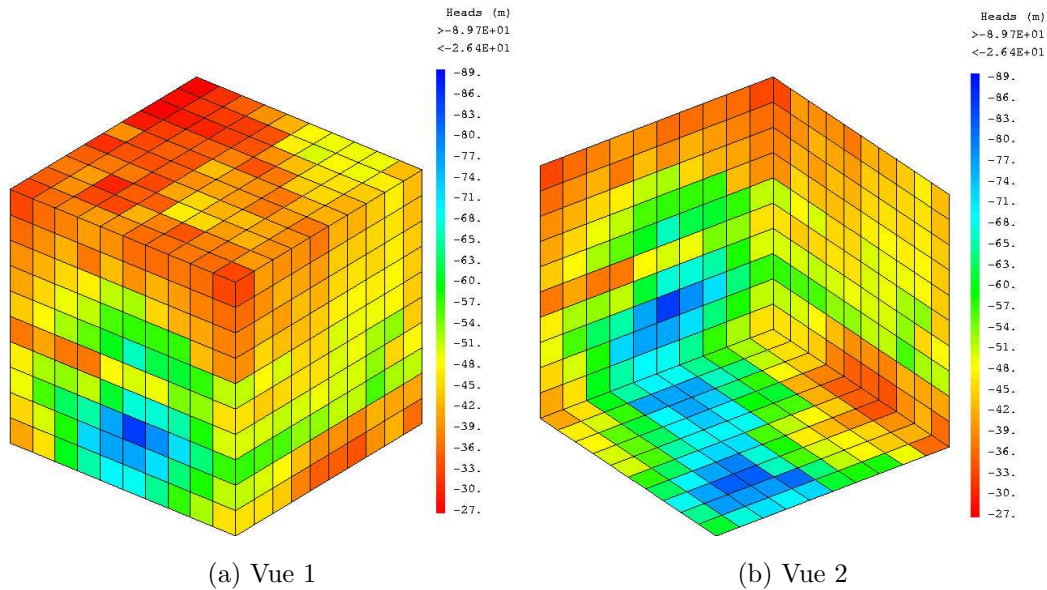


FIG. 3.11 – Tâche 6D : condition en charges

La raison pour laquelle cette modélisation n’est pas uniquement effectuée avec l’approche Smeared Fractures réside dans le fait que, pour ce test, la diffusion matricielle ne joue pas un rôle dominant. La pénétration dans la matrice est faible ce qui nécessite, pour une approche Smeared Fractures, une discrétisation fine et un coût informatique important, [Fournio 2005]. La prise en compte de la matrice avec l’approche Smeared Fracture n’est donc pas possible.

Néanmoins, les résultats obtenus par l’approche Smeared Fractures pour l’écoulement peuvent servir de conditions aux limites à la modélisation du transport et être appliquées aux quatre fractures modélisées de façons déterministes (figures 3.14). La modélisation de l’écoulement permet d’obtenir une charge au puits de -243 m.

La modélisation du transport peut alors être effectuée sur le second modèle, avec comme conditions aux limites, les charges obtenues par l’approche Smeared Fractures. Les paramètres considérés pour la calibration des courbes sont les quatre ouvertures des fractures ainsi que le coefficient de diffusion de pore et la porosité de la matrice. La profondeur de pénétration du traceur dans la matrice est suffisamment importante pour que la diffusion du traceur dans la matrice ne soit pas influencée par les conditions aux limites. Dans un premier temps, la calibration est effectuée en jouant sur le coefficient de diffusion de pore et la porosité de la matrice, puis, dans un second temps, sur le coefficient de retard traduisant le caractère plus ou moins sorbant des traceurs. Les résultats de cette calibration sont fournis par la figure 3.15 ainsi que par les tableaux 3.4 et 3.5.

Les résultats de calibration sont tout à fait acceptables (courbes 3.15), [Grenier et al. 2004]. Les valeurs calibrées des propriétés de la matrice sont proches de celles associées aux matériaux de remplissage (“gouge”). Ce résultat n’est pas surprenant

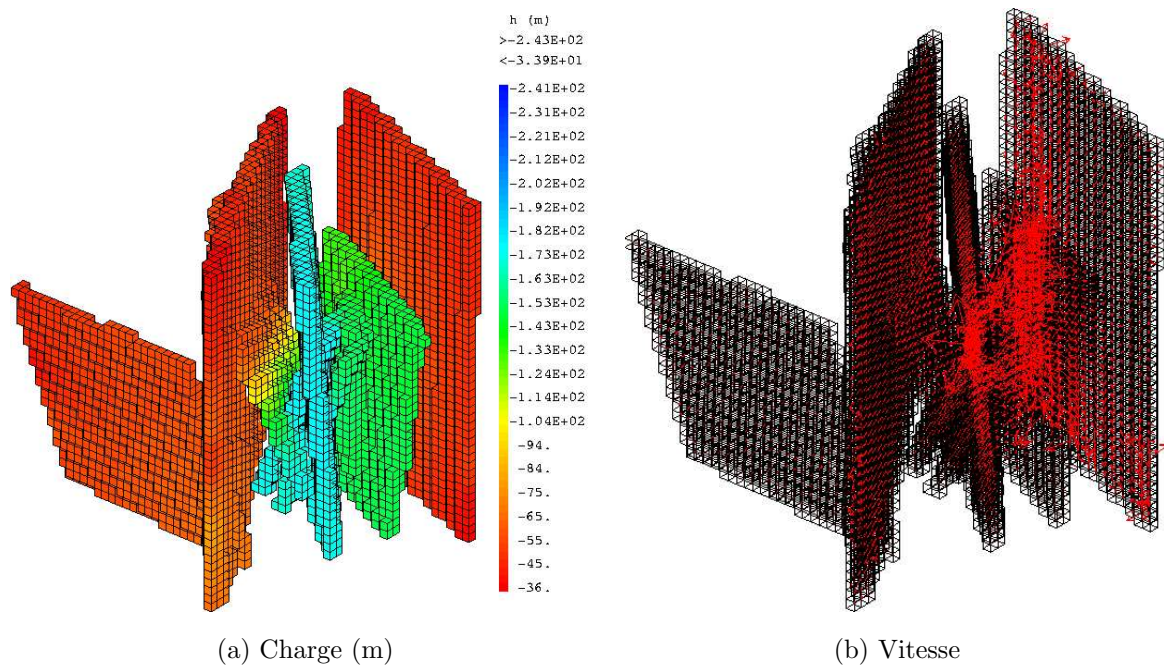


FIG. 3.12 – Tâche 6D : charges et vitesse dans les 11 fractures

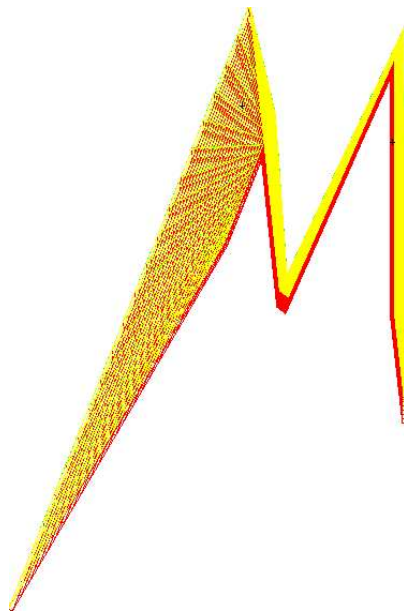


FIG. 3.13 – Tâche 6D : maillage du modèle discret

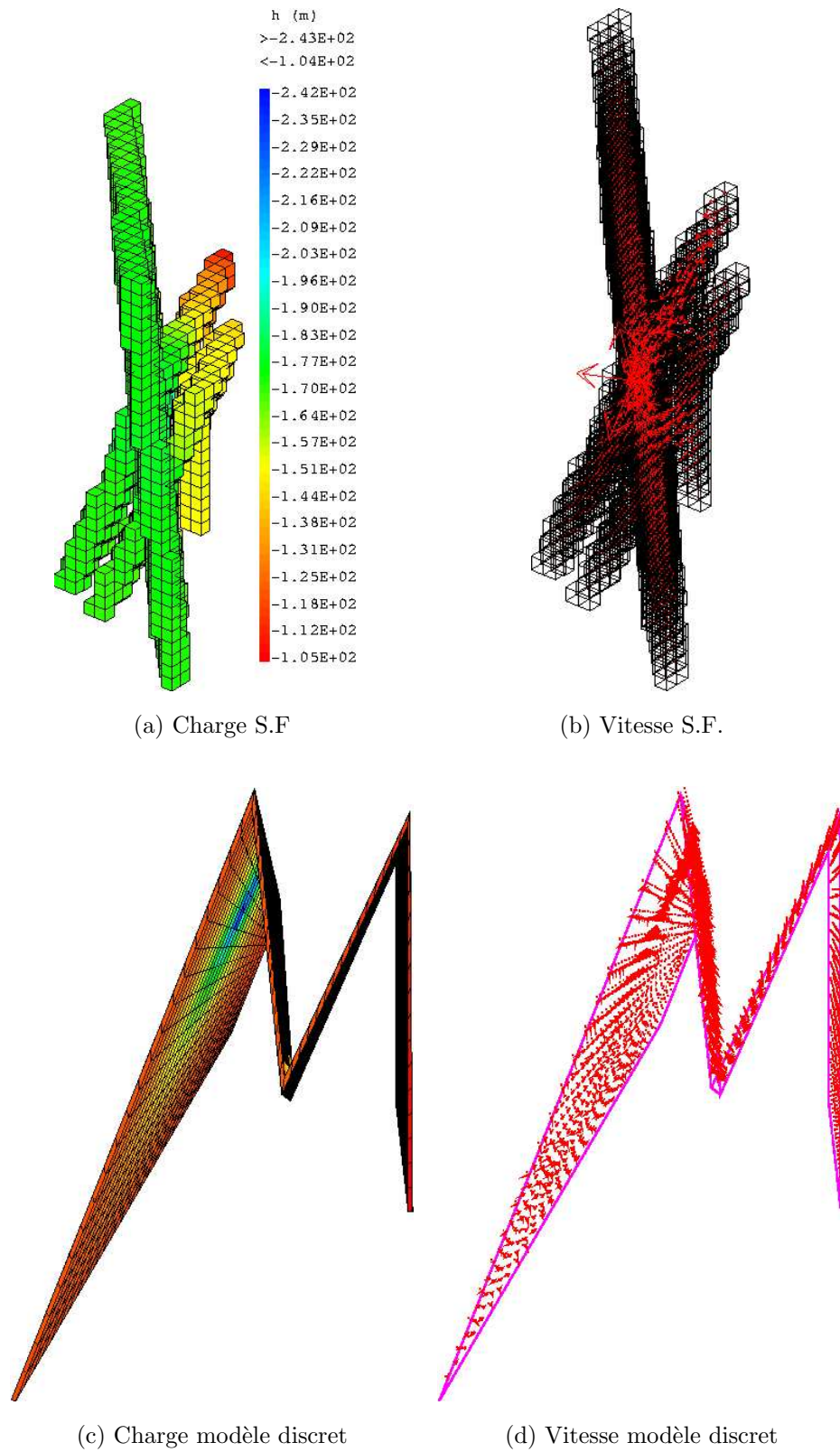


FIG. 3.14 – Tâche 6D : résultats S.F. et du modèle discret pour les 4 fractures

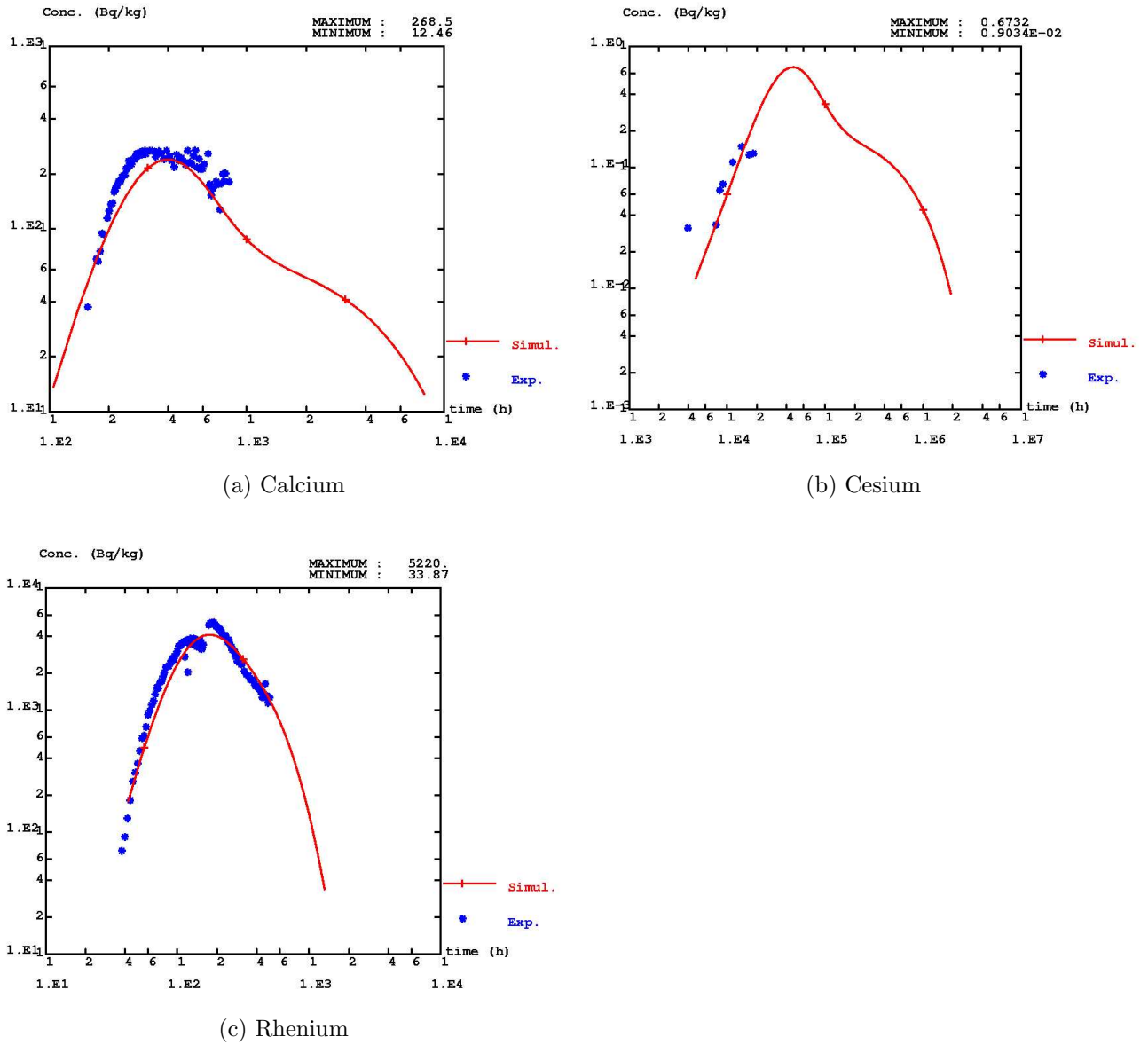


FIG. 3.15 – Tâche 6D : résultats de calibration

Nom de la fracture	Transmissivité ($m^2.s^{-1}$)	Épaisseur initiale	Épaisseur calibrée
20	$1.43.10^{-7}$	$1.74.10^{-4}$	id.
21	$6.02.10^{-8}$	$1.129.10^{-4}$	id.
22	$2.19.10^{-8}$	$6.807.10^{-5}$	(x2.5)
23	$1.66.10^{-7}$	$1.874.10^{-4}$	(x2.5)

TAB. 3.4 – Tâche 6D : Transmissivité, épaisseur initiale et calibrée des fractures

	Coefficient de diffusion de pore ($m^2.s^{-1}$)	Porosité
Calibration	2.10^{-10}	2%

TAB. 3.5 – Tâche 6D : Propriétés de la matrice

étant donné que c'est le matériau le plus proche des zones ouvertes de la fracture à écoulement libre. Les points expérimentaux fournis pour le Cesium ne sont, cependant, pas suffisants pour contraindre la calibration.

En ce qui concerne l'approche Smeared Fractures, quelques remarques peuvent être formulées :

- ⇒ La simulation de l'écoulement est tout à fait opérationnelle quelles qu'en soient les conditions générales.
- ⇒ Bien que non adaptée à la modélisation de tests de traçage, (vitesses élevées, dispersion numérique importante, discrétisation fine et par conséquent coûteuse de la matrice...), l'approche a permis de résoudre correctement l'écoulement de manière à fournir les conditions aux limites nécessaires à la résolution du transport sur un modèle à maillage dédié.
- ⇒ En perspective, l'extension à la résolution du transport dans les cas où la matrice joue un rôle peu important est à envisager. La résolution du transport dans les fractures seules et la prise en compte de l'action de la matrice via un terme source, évalué à partir d'une solution numérique de l'équation de diffusion 1D orthogonale, est tout à fait possible.

3.3 Modélisation 3D : Tâche 6E

L'objectif de la Tâche 6E est d'étendre les calculs de transport de la Tâche 6D aux échelles de temps et aux conditions rencontrées après fermeture du site. Le système étudié reste le bloc de $200 \times 200 \times 200$ m étudié précédemment. Aux 11 fractures déterministes de ce bloc sont associées 25 fractures synthétiques et 5660 fractures de fond, chapitre 1.2. Une charge de 1m est affectée au coté est du cube ($X=2000$ m) et une charge nulle au coté ouest ($X=1800$ m). Ces conditions de charge conduisent à créer un gradient de charge orienté est-ouest d'intensité 0.5%. La zone d'injection du traceur est identique à celle utilisée pour la Tâche 6D. Elle est située dans la fracture 23D, à proximité du centre du bloc. La modélisation de l'écoulement et du transport est effectuée dans ce bloc pour différents traceurs. Les équipes travaillant sur cette tâche doivent fournir les temps de sortie de ces traceurs ainsi que les courbes du flux massique à travers trois plans. Le but est de prédire les temps de sorties d'éléments radioactifs en écoulements naturels.

La stratégie de modélisation choisie est, dans un premier temps, de classer l'ensemble des fractures dans l'ordre croissant de surfaces. Une étude de sensibilité au nombre de fractures, pour l'écoulement, est alors effectuée afin de déterminer l'influence des fractures sur le flux hydrique sortant. Les principales fractures jouant un rôle dans l'écoulement vont être ainsi identifiées. Dans un deuxième temps, à partir des résultats de sensibilité, le réseau de fracture va être simplifié. Seules les fractures ayant une influence importante sur la variation du flux hydriques sortant sont conservées. Le calcul du transport est alors effectué sur ce réseau simplifié. Les études de sensibilité et de transport sont effectuées avec l'approche *Smeared Fractures* développée durant ce travail, le maillage régulier utilisé facilitant ce type d'exercice. Seules les 100 fractures les plus importantes sont considérées dans l'étude de sensibilité. Un nombre supérieur de fractures est, en effet, préjudiciable à la qualité des résultats. Pour une densité de fracturation trop importante, l'utilisation de mailles régulières induit une connection artificielle de fractures qui ne s'interceptent pas sur la géométrie réelle du réseau.

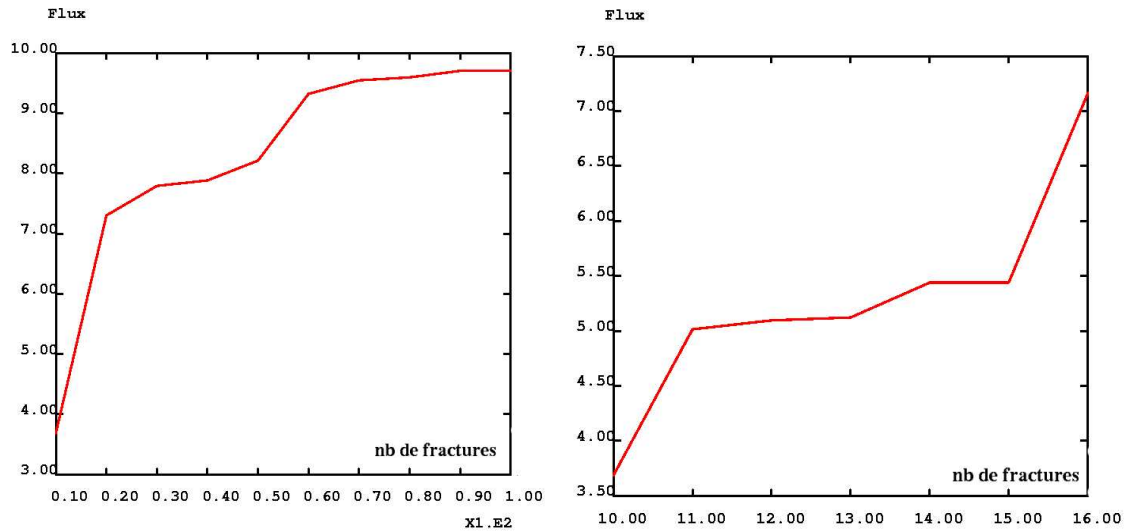
3.3.1 Sensibilité au nombre de fractures

L'étude de sensibilité au nombre de fractures est menée en faisant varier le nombre de fractures de 10 en 10. Le flux hydrique sortant par le coté ouest du bloc ($X=1800$ m) est calculé à chaque itération. La courbe du flux hydrique, tracée en fonction du nombre de fractures (courbes 3.16a), croît avec l'augmentation du nombres de fractures. Cette croissance est très importante lors de l'ajout des vingts plus grosses fractures (le flux hydrique passe de 3.7 à $7.2 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$) puis se fait plus régulière jusqu'à une valeur de flux hydrique proche de 9.5 atteinte pour une soixantaine de fractures. Cette croissance est liée à l'augmentation de la connectivité du réseau de fractures. Cette dernière valeur subit peu de variation lorsque les quarantes dernières fractures sont ajoutées (courbes 3.16a).

Une étude plus précise de l'évolution du flux hydrique pour les 20 premières fractures, courbes 3.16b, conduit à l'identification de deux fractures dont la présence fait croître fortement l'écoulement. Il s'agit des fractures $7S$ et $2292B$ respectivement à la 11 ième et 16 ième position. La présence de la fracture $7S$ induit une augmentation du flux hydrique de 3.7 à $5 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ tandis que la fracture $2292B$ le fait passer de 5.44 à $7.2 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ (courbe 3.16b). Ces fractures, en augmentant la connectivité du réseau de fractures, jouent par conséquent un rôle très important dans l'écoulement.

En étudiant leur position et leur connectivité avec le réseau, on s'aperçoit que :

⇒ la fracture $7S$ est à peu près parallèle aux cotés est et ouest du cube et met en relation les fractures, $5D$, $20D$ et $7D$, orientées est-ouest correspondant à la direction de l'écoulement (figure 3.17a). La fracture $5D$ est, de plus, une des fractures sur le coté de laquelle une charge de 1 m a été imposée. C'est donc une des fracture par l'intermédiaire de laquelle le fluide va pouvoir pénétrer dans le bloc, ce qui globalement augmente l'écoulement en créant de nouveaux chemins.



(a) Sensibilité aux 100 premières fractures

(b) Sensibilité aux 16 premières fractures

FIG. 3.16 – Tâche 6E : sensibilité du flux sortant au nombre de fractures

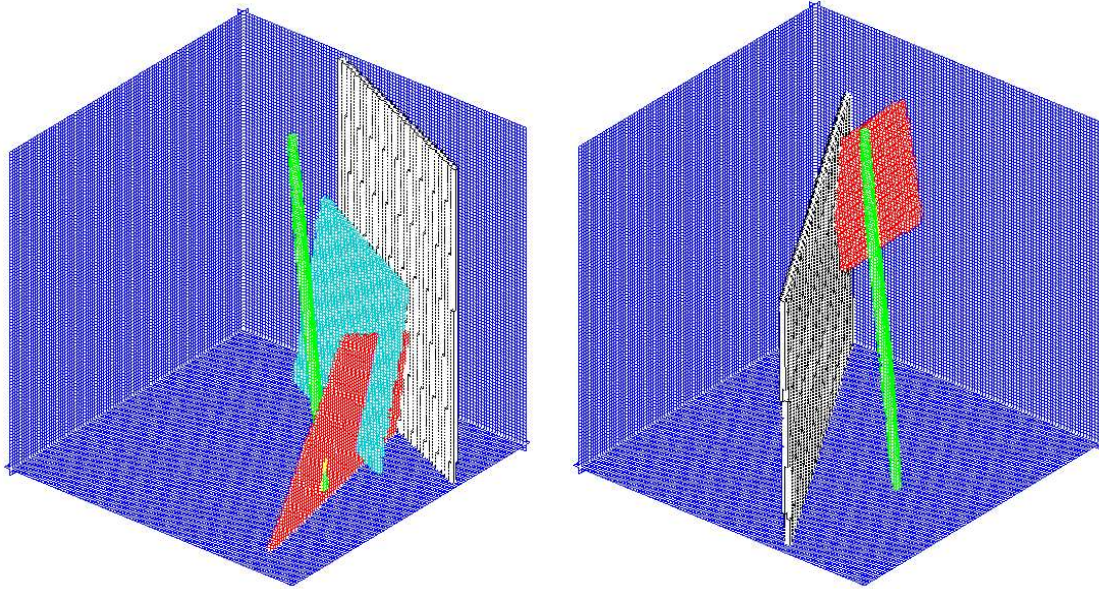
⇒ la fracture 2292B, orientée est-ouest, crée elle aussi un nouveau chemin d'écoulement, reliant les fractures 19D et 20D. Son orientation est parallèle à l'écoulement. Sa présence facilite, par conséquent, l'écoulement entre les faces est et ouest du bloc. Ceci se traduit à l'échelle du bloc par une augmentation des flux, (figure 3.17b).

Ainsi, pour un nombre de 50 fractures, le flux hydrique sortant représente près de 85% du flux hydrique total. Lors de la modélisation du transport, la stratégie choisie est de conserver les 50 plus grosses fractures pour lesquelles le flux hydrique marque un premier palier, figure 3.17a.

3.3.2 Modélisation du transport

A partir des 50 fractures précédemment identifiées, on simplifie tout d'abord légèrement le réseau en éliminant 6 fractures isolées. Parmi les 44 structures restantes, toutes les fractures déterministes sont présentes. La localisation de la zone d'injection du traceur correspond au point d'injection du test de traçage C2, il est localisé dans la fracture 23D et identique à celui de la tâche 6D, (tableau 3.6).

La quantité de traceur injectée est modélisée par un Dirac avec une masse totale injectée unitaire. Les différents traceurs considérés sont l'Iodine (I-129), le Calcium (Ca-47), le Cesium (Cs-137), le Radium (Ra-226), le Technetium (Tc-99) et l'Amercium (Am-241). Le tableau 3.7 présente les caractéristiques de ces traceurs au sein des différents matériaux entourant la fracture.



(a) Fracture 7S en rouge, fracture 5D en noir, fracture 20D en vert, fracture 7D en turquoise

(b) Fracture 2292B en rouge, fracture 19D en noir, fracture 20D en vert

FIG. 3.17 – Tâche 6E : connectivité des fractures 7S et 2292B

Paramètre	Point 1	Centre	Point 2
Est	1930.758	1929.741	1928.724
Nord	7193.742	7194.84	7195.938
Hauteur	-476.100	-476.100	-476.100

TAB. 3.6 – Tâche 6E : localisation de la source d'injection

Kd_i	I	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
Coating	0.	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$5.2 \cdot 10^{-2}$	$4.6 \cdot 10^{-2}$	0.2	0.5
Gouge	0.	$7.1 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-1}$	0.2	0.5
Cataclasite	0.	$6.7 \cdot 10^{-7}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	0.2	0.5

TAB. 3.7 – Tâche 6E : coefficient d'adsorption, $m^3 \cdot kg^{-1}$

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5	—	—	—	—	—	600.
t_{50}	0.9	3.	600.	600.	3000.	7200.
t_{95}	1.8	9.	2000.	1800.	9000.	25500.
Flux massique maximum	0.6	0.16	$8.4 \cdot 10^{-4}$	$9.4 \cdot 10^{-4}$	$2.25 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$

TAB. 3.8 – Tâche 6E : plan X=1920 m

La complexité des fractures (pourcentage de type I et de type II au sein d'une fracture) n'est pas intégrée. Une fracture est considérée soit de type I soit de type II suivant l'importance du type de fracturation indiqué au cahier des charges, [Dershowitz et al. 2003]. Les phénomènes physiques modélisés sont la convection-dispersion dans la fracture ainsi que l'adsorption. La décroissance radioactive n'est pas prise en compte. Afin de modéliser les actions des différents matériaux (bordure des fractures, matériau de remplissage, et cataclasite) proches des fractures, un processus d'homogénéisation va être effectué. Seuls l'influence de ces matériaux est modélisée, (la diffusion matricielle dans les blocs altérés et non-altérés n'est pas prise en compte). L'ouverture de la fracture homogénéisée correspond à la somme des épaisseurs :

$$e = \sum_i e_i \quad (3.4)$$

La variation du volume de la fracture est pris en compte par une porosité équivalente :

$$\omega = \frac{\sum_i \omega_i e_i}{\sum_i e_i} \quad (3.5)$$

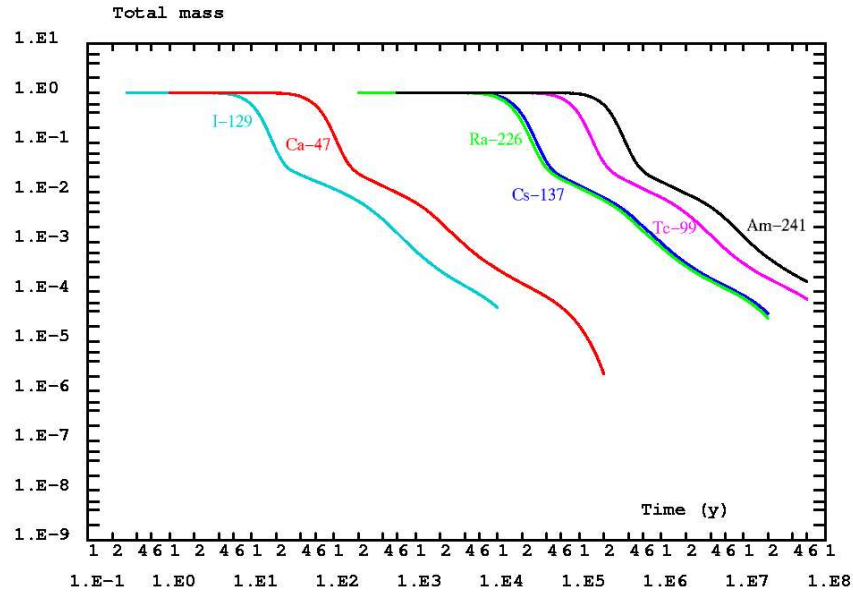
Le coefficient de retard équivalent dû, à l'adsorption instantanée des différents matériaux, a quant à lui l'expression suivante :

$$R = 1 + \frac{\sum_i \beta_i e_i}{\sum_i \omega_i e_i} \quad (3.6)$$

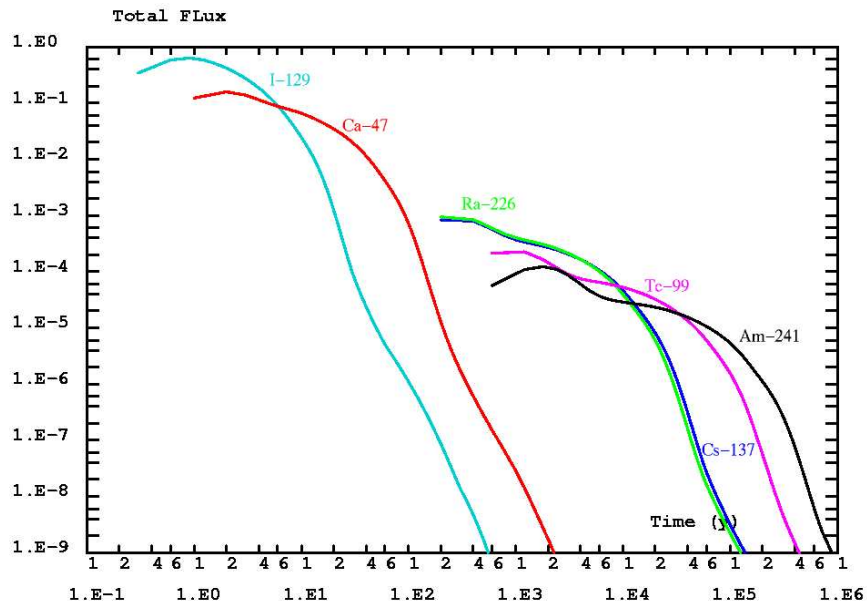
avec $\beta_i = (kd_i * \rho * (1 - \omega_i))$ et $\rho = 2600 \text{ kg.m}^{-3}$.

Les résultats obtenus sont illustrés par les courbes de masse et de flux massique des différents traceurs, figures 3.18 et 3.19. Les courbes de flux massique ont été déterminées en trois positions à l'intérieur du bloc (X=1920m, X=1880m, X=1880m). La valeur des temps de sortie de 5%, 50% et 95%, notés respectivement t_5 , t_{50} et t_{95} , sont fournis, (tableaux 3.8, 3.9 et 3.10).

Les temps d'arrivée des traceurs dépendent, selon toute attente, de leur caractère plus ou moins sorbant. Ainsi, l'Iode, dont les coefficients d'adsorption sont nuls, est le premier traceur à s'échapper du bloc au temps $t = 5$ ans (figure 3.18b). Il est suivi du Calcium, du Radium, du Cesium, du Technetium puis enfin de l'Amercium. Le comportement du Radium est similaire à celui du Cesium (temps de sortie et valeur des maximums proches, figures 3.18 et 3.19).

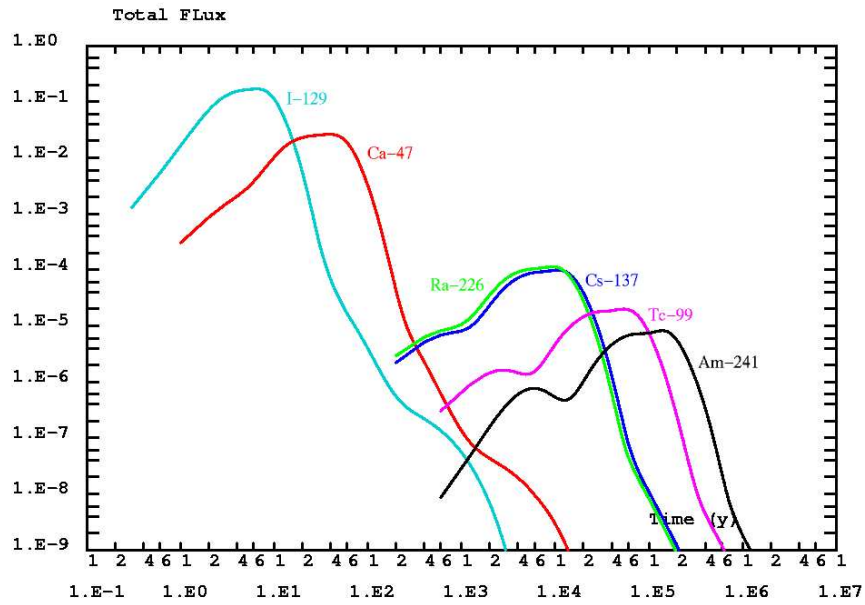


(a) Evolution de la masse présente dans le bloc

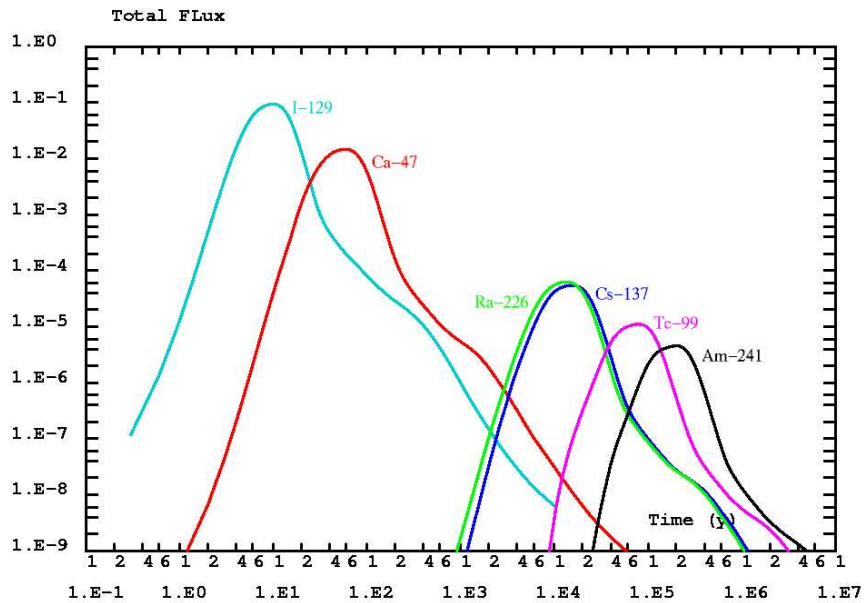


(b) Evolution du flux massique : plan X=1920m

FIG. 3.18 – Tâche 6E : évolution de la masse et du flux massique



(a) Evolution du flux massique : plan X=1880m



(b) Evolution du flux massique : plan X=1880m

FIG. 3.19 – Tâche 6E : évolution du flux massique

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5	1.8	10.	2600.	2400.	13500.	34500.
t_{50}	5.1	30.	8000.	7000.	39600.	1.10^5
t_{95}	7.8	48.	12000.	11000.	61200.	$1.6.10^5$
Flux massique maximum	0.17	$2.6.10^{-2}$	$9.96.10^{-5}$	$1.1.10^{-4}$	$1.99.10^{-5}$	$8.2.10^{-6}$

TAB. 3.9 – Tâche 6E : plan X=1880 m

	Iode	Ca	Cs	Ra	Tc	Am
t_5	5.1	27.	7500.	6500.	39600.	1.10^5
t_{50}	10.8	63.	16800.	14400.	86400.	$2.1.10^5$
t_{95}	22.2	135.	36000.	32400.	$1.8.10^5$	$4.5.10^5$
t_{max}	9.9	57.	15600.	13200.	79200.	$1.98.10^5$
Flux massique maximum	$9.4.10^{-02}$	$1.46778.10^{-2}$	$5.5.10^{-5}$	$6.3.10^{-5}$	$1.1.10^{-5}$	$4.6.10^{-6}$

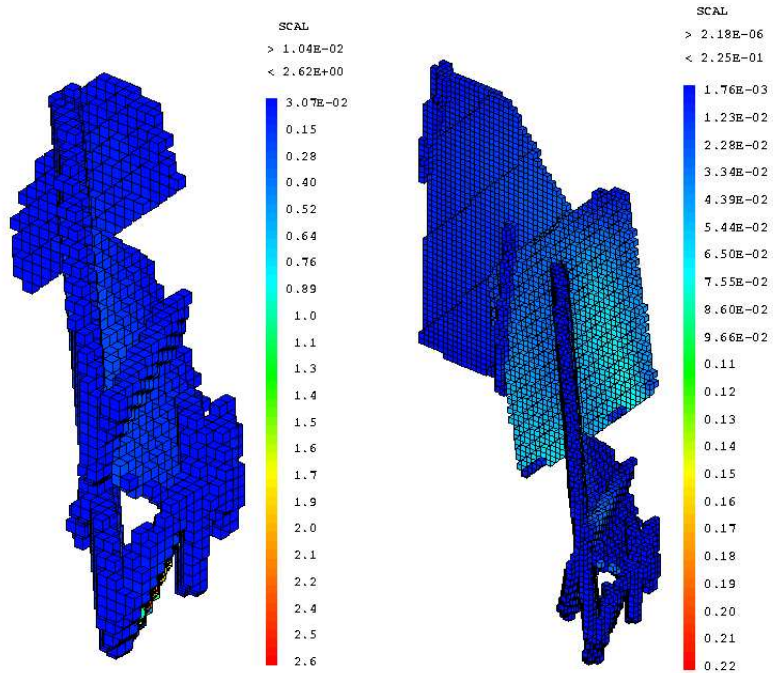
TAB. 3.10 – Tâche 6E : plan X=1800 m

En suivant le maximum de concentration au cours du temps, il est possible de déterminer les différentes fractures à travers lesquelles les traceurs vont circuler. Ainsi pour l'Iode, les champs de concentrations, figures 3.20, permettent d'évaluer le chemin d'écoulement. Le chemin suivi par le traceur est assez direct rejoignant rapidement le plan X=1800 par lequel il s'évacue.

Plus précisément, il est possible de déterminer le nom des fractures intervenant dans le transport. L'ensemble du milieu vu par le traceur est présenté, figure 3.21a. Ce milieu (mailles rouge figure 3.21b) ne représente qu'une infime partie du réseau fracturé total (mailles noires figure 3.21b). En effet, seules 16 fractures sont parcourues par le traceur. Ces fractures, présentées figure 3.21c, sont facilement identifiables et sont les fractures 19D, 20D, 13D, 17S, 21D, 6D, 25S, 2292B, 22D, 9S, 2107B, 1925B, 2460B, 1072B, 23D, 823B.

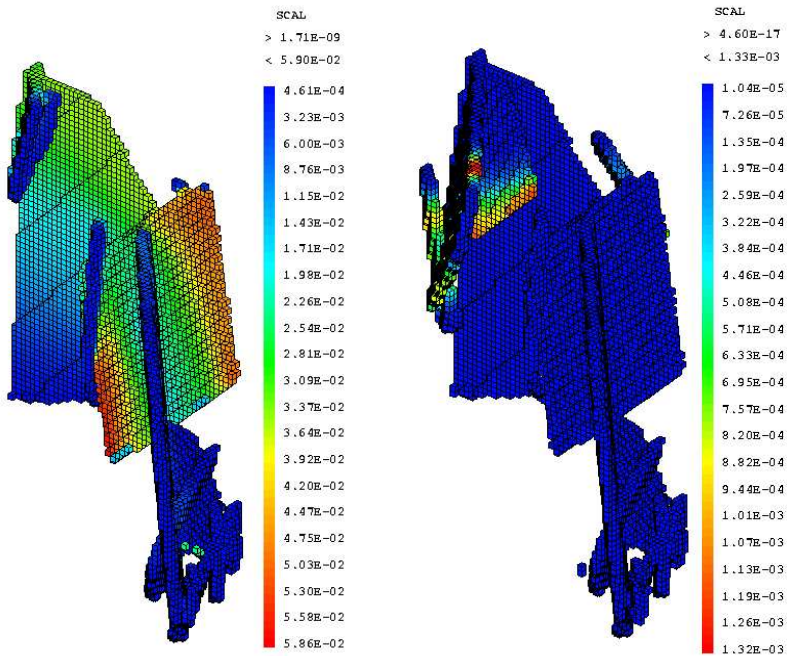
Le bilan de cette étude permet de tirer les conclusions suivantes :

- ⇒ l'approche Smeared Fractures facilite les études de sensibilité aux nombres de fractures.
- ⇒ le transport dans le réseau des 50 plus grosses fractures se réduit à un nombre de 16 fractures parcourues par le traceur, pour l'injection considérée. Une autre injection aurait certainement "vu" autre chose.
- ⇒ l'extension de l'approche à des traceurs sorbants n'a pas posé de difficultés. Les temps de sortie des différents traceurs traduisent leurs caractères plus ou moins sorbants.



(a) Concentration au temps : 1.8 années

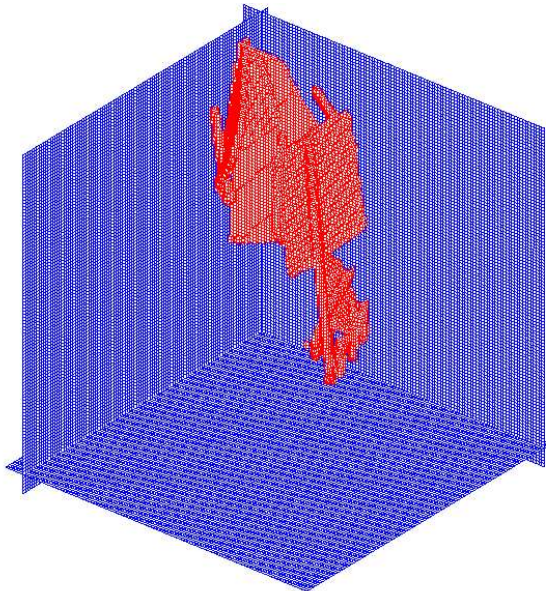
(b) Concentration au temps : 5.1 années



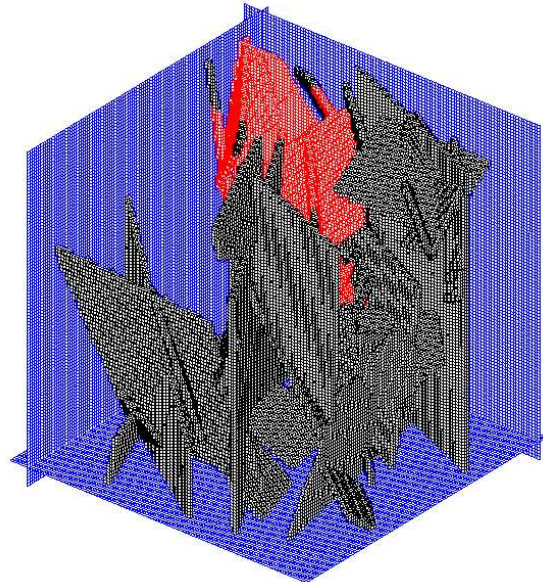
(c) Concentration au temps : 9.9 années

(d) Concentration au temps : 300 années

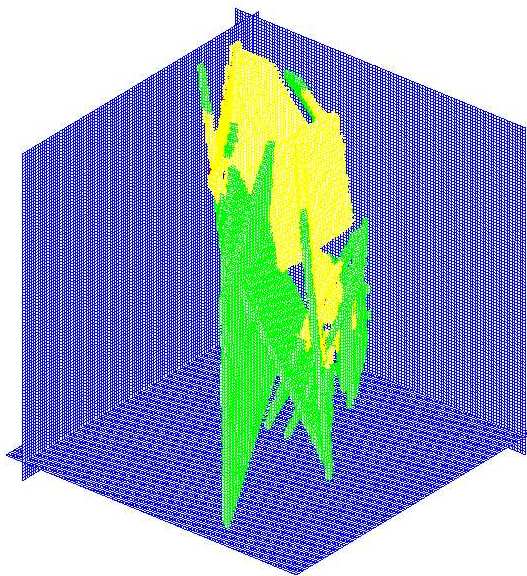
FIG. 3.20 – Tâche 6E : évolution de la concentration dans le bloc



(a) Milieu vu par le traceur (rouge)



(b) Réseau de fractures étudié et Milieu vu par le traceur (rouge)



(c) Les fractures participant au transport avec leurs extensions complètes (vert)

FIG. 3.21 – Tâche 6E : cheminement du traceur et les fractures importantes

⇒ il est possible d'envisager la prise en compte d'une fracturation inférieure conduisant à un écoulement dans la matrice. Cette fracturation ne devrait pas créer de nouveaux chemins principaux à l'échelle du bloc mais augmenterait le nombre d'itinéraires d'échelle inférieur de chaque chemin, favorisant ainsi la rétention.

Chapitre 4

Conclusions

A la différence des autres approches existantes et pour lesquelles les propriétés physiques équivalentes étaient estimées par des rapports de volumes (l'erreur sur les flux étant vérifiée à posteriori), l'approche Smeared fractures, utilisée,

- ★ garantit un bon contrôle des flux hydriques et massiques obtenu grâce à des propriétés équivalentes déterminées par comparaison de l'expression du flux analytique et du flux du modèle numérique, pour une fracture unique.

- ★ présente, de plus, l'avantage de travailler sur un maillage régulier. Cette caractéristique permet de pouvoir :
 - ⇒ modifier rapidement un maillage en changeant, par exemple, l'inclinaison de certaines fractures, en rajoutant ou en enlevant des fractures, en faisant varier les propriétés de différentes zones... Ainsi, différentes études de sensibilité aux nombres de fractures, aux propriétés physiques du milieu, sont tout à fait abordables sans pour autant monopoliser d'importantes ressources informatiques.
 - ⇒ de limiter le nombre de mailles. Une représentation discrète d'un milieu fracturé nécessite souvent un nombre de mailles important. Avec un maillage régulier, le nombre de mailles du système est facilement géré, ce qui est déterminant pour les temps de calcul d'une simulation. Souvent, un maillage régulier a un nombre de mailles inférieur à celui d'un maillage explicite et, par conséquent, des temps de calculs inférieurs, comme le montre le tableau 4.1 dans le cas d'un réseau de quatre fractures.
 - ⇒ Le pas de discrétisation choisi dépend directement de la géométrie du milieu et des phénomènes modélisés. Il peut être associé de manière naturelle au volume élémentaire représentatif du milieu pour peu qu'il n'entraîne pas une dispersion numérique trop importante.

Discrétisation	Maillage	Écoulement	Transport (temps par itération)
ref. $\Delta = 0.4$	15	0.8	2
sf. $\Delta = 0.5$	11	0.5	1.4
sf. $\Delta = 0.8$	3	0.2	0.8
sf. $\Delta = 1.$	2	0.15	0.6
sf. $\Delta = 2.$	0.5	0.06	0.3
sf. $\Delta = 3.$	0.3	0.03	0.2

TAB. 4.1 – Temps CPU pour la modélisation du transport dans un réseau de quatre fractures

★ a été étendue à la résolution du transport réactif et non-réactif.

Préalablement validée et qualifiée, [Fournio 2005], [Fournio et al. 2004a] et [Fournio et al. 2004b], différentes applications de cette approche ont été effectuées sur la base des données du laboratoire souterrain de Äspö (Suède) dans le cadre de la tâche 6 (échelle d'un bloc de 200m).

★ Une première modélisation a consisté en la calibration d'un modèle d'écoulement et de transport sur les données d'un test de traçage à plusieurs traceurs. Les vitesses d'écoulement des tests de traçage étant très rapides, la profondeur de pénétration du traceur dans la matrice est faible et, par conséquent, la modélisation du transport s'est révélée inabordable par l'approche Smeared Fractures. Néanmoins, les résultats obtenus pour l'écoulement par l'approche Smeared Fractures ont été utilisés afin de servir de conditions aux limites d'un modèle avec un maillage dédié. Les résultats des différents traceurs ont parfaitement pu être calés par rapport aux courbes expérimentales.

★ Une seconde application a abordé les points suivants :

⇒ l'influence du nombre de fractures sur l'écoulement a été testée.

Pour des conditions aux limites identiques, on s'est intéressé à la variation du flux hydrique sortant du domaine en fonction du nombre de fractures présentes dans le réseau. Ces fractures ont été, au préalable, classées suivant leur extension. A partir des résultats obtenus, il a été facile de comprendre l'augmentation brutale du flux sortant en présence de certaines fractures.

⇒ Enfin, à partir d'un réseau de cinquante fractures, une modélisation du transport de différents traceurs a été effectuée.

Les principales fractures, parcourues par le traceur, ont été identifiées. Les temps de sortie et les courbes de flux des différents traceurs, ont été évalués en différents points.

L'approche Smeared Fractures est un outil souple et parfaitement opérationnel pour la modélisation de l'écoulement et du transport dans un milieu fracturé. La modélisation

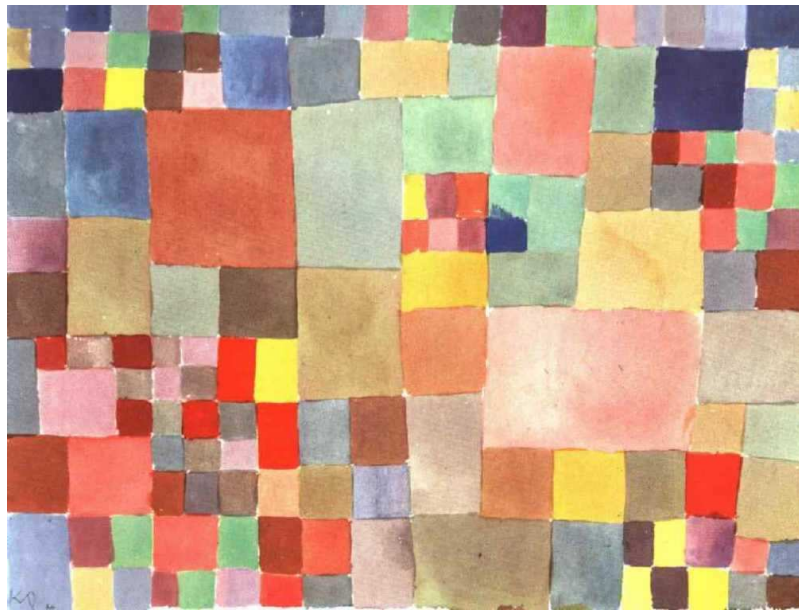


FIG. 4.1 – Paul Klee, 1927 : Flora on Sand

de l'écoulement et du transport par ce type d'approche peut être comparée au travail de Paul Klee (1879-1940) pour la peinture, figure 4.1. Il n'est pas forcément nécessaire de représenter à l'identique un objet pour le reconnaître, en comprendre son utilité.

D'autres modélisations appliquées au site Äspö sont en cours.

Bibliographie

- [Bear et al. 1993] J. Bear, C.-F. Tsang, G. de Marsily. Flow and contaminant transport in fractured rock. Academic Press, 1993.
- [Benabderrahmane et al. 2000] H. Benabderrahmane, B. Dershowitz, J. Selroos, Uchida, A. Winberg. Task 6 : 'Performance Assessment Modeling Using Site Characterisation Data (PASC). Disponible sur le site www.skb.se, 2000.
- [Brown 2002] G.O. Brown. Henry Darcy and the making of a law. Water Ressources Research, Vol. 38, No 7, pp 11 1-12, 2002.
- [Carrera et al. 1998] J.Carrera, X.Sanchez-Vila, I.Benet, A.Medina, G.Galarza, J.Guimera. On matrix diffusion : formulations, solution methods and qualitative effects. *Hydrogeology Journal*, 6, pp. 178-190, 1998.
- [Dabbene et Dada 1995] F. Dabbene, L. Dada. Résolution des équations de Darcy dans un massif fracturé par une méthode d'éléments finis mixtes hybrides. Rapport DMT 95/558, 1995.
- [Dabbene et al. 1998] F. Dabbene, H. Paillere et J.P. Magnaud. Mixed-hybrid finite elements for transport of pollutant by underground water. 10th Int. Conf. on Finite Elements in fluids, Tucson, Arizona, 1998.
- [Dabbene 1995] F. Dabbene. Schémas de diffusion-convection en éléments finis mixtes hybrides. Rapport DMT 95/613, 1995.
- [Dershowitz et al. 2003] B. Dershowitz, A. Winberg, J. Hermanson, J. Byegard, E. Tullborg, P. Anderson, M. Mazurek. Asemi-synthetic model of block scale conductive structures at the ÄspÖ hard rock laboratory. ÄspÖ task force IPR-03-13, 2003.
- [Fournio et al. 2002] André Fournio, Christophe Grenier. Qualification and validity of a Smeared Fractures modeling approach for flow and transport in fractured media. XIV international conference on computational methods in water resources, Delft, Hollande. Proceedings CMWR2002, pp. 319-326, 2002.
- [Fournio et al. 2004a] André Fournio, Christophe Grenier. "Qualification and validity of a Smeared Fractures modeling approach for transfers in fractured media". Proceedings du 'Second International Symposium on Dynamics of Fluids in Fractured Rock', Lawrence Berkeley National Laboratory. 2004.
- [Fournio et al. 2004b] André Fournio, Christophe Grenier. "Smeared fractures : a promising approach to model transfers in fractured media". XV international conference on computational methods in water resources, Chapel Hill, Caroline du Nord. Proceedings CMWR2004, 2004.

- [Fournou 2005] A. Fournou, Modélisation multi-échelle des transferts en milieux fracturé : application au site de Äspö, Suède. Thèse ANDRA, Université de Poitiers, 2005.
- [Gomez-Hernandez et al. 1999] J. Gomez-Hernandez, H. Henricks Franssen, A. Sahuquillo, J. Capilla. Calibration of 3D transient groundwater flow models in fractured rocks. Proceedings of the ModelCare'99 conference. Calibration and reliability in ground water modelling - coping with uncertainty, Zurich, pp. 20-23, 1999.
- [Grenier et al. 2004] C. Grenier, A. Fournou, E. Mouche, F. Delay, H. Benabderrahmane. Assessment of retention processes for transport in a fractured system at Äspö (Sweden) granitic site : from short-time experiments to long-time predictive models. 2004.
- [Maloszewski et Zuber 1985] P. Maloszewski, A. Zuber. On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix. *Journal of Hydrology*, 79 (1985) pp 333-358, 1985.
- [Maloszewski et Zuber 1990] P. Maloszewski, A. Zuber. Mathematical modeling of tracer behavior in short-term experiments in fissured rocks. *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 7, pp. 1517-1528, 1990.
- [De Marsily 1981] G. de Marsily. Hydrogéologie quantitative. Collection sciences édition Masson. 1981.
- [Mazurek et al. 1996] M. Mazurek, P. Bossart, T. Eliasson. Classification and characterization of water-conducting features at Äspö : results of investigations on the outcrop scale. SKB International Cooperation Report 97-01, 1996.
- [Mazurek et al. 2003] M. Mazurek, A. Jakob, P. Bossart. Solute transport in crystalline rocks at Äspö I : Geological basis and model calibration. *Journal of Contaminant Hydrology*, 61 (2003) pp. 157-174, 2003.
- [Mosé et al. 1994] R. Mosé, Ph. Ackerer, P. Siegel, G. Chavent. Application of the mixed hybrid finite element approximation in a groundwater flow model : Luxury or necessity ? *Water Resources Research*, Vol. 30, pp. 3001-3012, 1994.
- [Neretnieks 1980] I. Neretnieks. Diffusion in the rock matrix : an important factor in radionuclide retardation ? *Journal of Geophysical Research*, Vol. 85, No B8, pp4379-4397, 1980.
- [Neretnieks 1982] I. Neretnieks. Tracer movement in a single fissure in granitic rock : some experimental results and their interpretation. *Water Resources Research*, Vol. 18. No. 4, pp. 849-858. 1982.
- [Oda 1986] M. Oda. An equivalent continuum model for coupled stress and fluid flow analysis in jointed rock masses. *Water Resources Research*, Vol. 22, No. 13, pp. 1845-1856, 1986.
- [Renard 1997] Ph. Renard. Modélisation des écoulements en milieux poreux hétérogènes. Calcul des perméabilités équivalentes. Rapport de Thèse Ecole des Mines de Paris, Centre d'informatique Géologique. Numéro 32, 1997.
- [Selroos et al. 2002] J. Selroos, D.D. Walker, A. Ström, B. Gylling, S. Follin. Comparison of alternative modelling approaches for groundwater flow in fractured rock. *Journal of Hydrology*, 257, pp. 174-188, 2002.

- [Svensson 1999a] U. Svensson. Representation of fracture networks as grid cell conductivities. Technical report SKB. TR-99-25, 1999.
- [Svensson 1999b] U. Svensson. A laboratory scale analysis of groundwater flow and salinity distribution in the Aspo area. Technical report SKB. TR-99-24, 1999.
- [Svensson 2001] U. Svensson. A continuum representation of fracture networks. Part I : Method and basic test cases. Journal of Hydrology, 250, pp. 170-186, 2001.
- [Tanaka et al. 1996] Y. Tanaka, K. Minyakawa, T. Igarashi, Y. Shigeno. Application of three-dimensional smeared fracture model to the hydraulic impact of the Aspo tunnel. International cooperation report SKB. ICR 96-07, 1996.
- [Thouvenin et Grenier 2000] G. Thouvenin et C. Grenier. Representation des milieux fracturés naturels par des approches de types champs continus hétérogènes - modélisation des transports par une approche smeared fractures. Rapport DMT. SEMT/MTMS/RT/00-024/A, 2000.