



Contrat Doctoral CNRS au laboratoire GeoRessources (Nancy)

Titre : Caractérisation des effets hydromécaniques et électrocinétiques sur la migration de gaz dans une roche argileuse saturée aux échelles mésoscopiques

Contexte et Objectifs: Dans une installation de stockage géologique de déchets radioactifs, la corrosion des matériaux ferreux dans des conditions anoxiques, associée à la désintégration radioactive des déchets et à la radiolyse de l'eau, entraînera la formation d'hydrogène. Une bonne compréhension du comportement de migration de ce gaz est d'une importance fondamentale pour la fiabilité des scénarios de prédiction d'évolution à long terme d'un tel stockage. Si le taux de production de gaz dépasse le taux de diffusion du gaz dans les pores de la roche hôte, une phase gazeuse distincte se formera. Les forces de capillarité s'opposant au mouvement du gaz entraîneront une augmentation de la pression jusqu'à une valeur critique au-delà de laquelle il pourra pénétrer dans le matériau environnant et se déplacer par des processus advectifs. Différents mécanismes propres aux roches argileuses et à leur caractère nanoporeux pourraient toutefois influencer ces écoulements visco-capillaires.

Tout d'abord, compte tenu des fortes pressions générées, la percolation du gaz génère une dilation des chemins percolants, pouvant conduire à un déplacement localisée de l'eau loin de ces chemins, sous l'effet de la compression de la matrice argileuse [1]. Ces phénomènes d'ouverture des chemins percolants (micro fissuration) entraînent à leur tour un endommagement et une dégradation des propriétés mécaniques de la roche. Si la pression continue d'augmenter, des fractures en tension se développent de manière similaire à celles observées en fracturation hydraulique. En parallèle, dans les milieux argileux comme l'argilite du Callovo-Oxfordien (COx) l'eau porale contient des ions dissous et forme donc un électrolyte. Du fait des charges électriques présentes dans les feuillets d'argiles la densité de concentration des ions près des interfaces solide/liquide devient inhomogène et l'électrolyte n'est plus électriquement neutre (double couche électrique). Les écoulements sont dans ce cas plus complexes puisque des couplages apparaissent entre la dynamique du solvant et celle des ions. En effet, lorsque le fluide est soumis à un champ électrique, bien que le solvant soit neutre, on observe l'apparition d'un flux hydraulique. Ce mécanisme appelé électro-osmose est particulièrement important dans le cadre du stockage de déchets radioactifs à cause de l'introduction des radionucléides ioniques dans la couche géologique qui viendraient s'ajouter aux ions naturellement dissous dans l'eau porale.

L'objectif de cette thèse est de proposer des modèles mésoscopiques capables de prendre en compte les couplages HydroMécaniques (HM) et ElectroCinétiques (EC) lors de la simulation de l'écoulement et du transport dans des volumes élémentaires représentatifs (VER) de grandes tailles typiquement

hors de portée des méthodes moléculaires. Ceci permettra des analyses quantitatives des effets simultanés de la morphologie réelle des argiles et des couplages HM et EC sur les propriétés de transport.

Méthodologie proposée:

Les simulations numériques de drainage seront effectuées sur des images 3D haute résolution (images MET et FIB-SEM) de l'argilite du COx. Deux méthodes numériques, Lattice Boltzmann (LBM) et Smooth Hydrodynamics Particle (SPH), dont les codes ont été développés dans le cadre de précédents projets seront utilisés à cette fin. Les résultats obtenus seront validés à partir d'essais expérimentaux issus de la littérature ou menés au laboratoire.

Couplage Hydromécanique : Nous étudierons tout d'abord la prise en compte des couplages géomécaniques pour reproduire certaines caractéristiques du comportement du gaz à long terme, et plus particulièrement du développement de voies de dilatation avec migration de gaz à travers des fractures localisées. Plusieurs stratégies avec différents niveaux de complexité pour décrire ces effets poromécaniques seront envisagées et implémentées dans les modèles LBM et SPH. Les résultats obtenus seront comparés et des diagrammes de régime seront établis afin d'évaluer l'approche la plus pertinente en fonction des contraintes hydrodynamiques (e.g., pression maximale de gaz) et du degré de précision requis. Dans le cadre du modèle SPH on partira de la représentation du milieu argileux par une matrice solide élastique linéaire avec des inclusions rigides isolées tandis qu'un modèle d'endommagement poromécanique décrira la dégradation des propriétés mécaniques sous l'effet de l'état de contrainte local [3]. Ce modèle sera enrichi par la prise en compte de la plasticité. Au niveau du modèle LBM [4], deux stratégies seront considérées. Tout d'abord, des méthodes de conditions aux limites immergées ou de conditions aux limites interpolées [2] seront implémentées dans le modèle pour faire évoluer la géométrie à l'échelle des pores sous l'effet de l'augmentation de la pression interstitielle. Une seconde approche plus complexe et donc plus coûteuse consistera à coupler le modèle LBM avec la méthode des éléments discrets (LBM-DEM) afin de décrire précisément le comportement mécanique du squelette solide et la création de nouveaux chemins percolants. Le DEM modélisera la phase particulaire solide en traitant chaque particule comme un corps rigide distinct tandis que le LBM résoudra les équations incompressibles de Navier Stokes. L'interaction à l'interface fluide/solide sera résolue par un schéma de type conditions aux limites immergées.

Couplage électrocinétique : Nous nous limiterons pour la simulation des couplages électrocinétiques, dont notamment l'électro-osmose, à l'utilisation des méthodes de type LBM qui ont fait l'objet de travaux [5] mais uniquement pour des géométries simplifiées où des solutions analytiques existent et pour des conditions saturées. Pour un électrolyte confiné dans un milieu poreux chargé avec des tailles de pores mésoscopiques les couplages électrocinétiques sont incorporés par l'ajout dans l'équation de l'hydrodynamique d'un terme de force locale auquel est soumis le fluide du fait de l'écrantage électrostatique des charges de surfaces par les ions dissous dans le solvant. Ce terme de couplage est donc dépendant de la dynamique des ions qui est en retour couplée à la dynamique du fluide par le biais de l'advection. Enfin, les ions sont soumis au champ électrique local qui est calculé à partir du potentiel électrostatique qui vérifie l'équation de Poisson. En résumé, la dynamique du système obéit à un système d'équations couplées constitué de l'équation de Navier-Stokes pour le solvant, des équations de Nernst-Planck (diffusion-advection-migration) pour les ions et de l'équation de Poisson pour le potentiel électrostatique. Il est important de rappeler que cette description de la dynamique

couplée des ions et du solvant correspond à des pores mésoscopiques ($d > 2 \text{ nm}$) où les équations de l'hydrodynamique sont valides et où les aspects moléculaires des ions tels que les effets de solvatation ou les effets de type volume exclu sont négligeables.

Nous envisageons d'utiliser ici une approche dite "intégrale" [6] qui résout toutes les dynamiques par la méthode LB mais qui n'a été pour le moment utilisé que pour des cas bidimensionnels. Cette utilisation exclusive des équations LBM devrait permettre une parallélisation efficace du schéma numérique, et donc, l'accès à des volumes de grandes tailles. En pratique, l'implémentation de la méthode intégrale généralisée au cas tridimensionnel sera réalisée dans le code de simulation LB parallélisé développé et maintenu au laboratoire GeoRessources. Techniquement, il suffit de résoudre non pas une mais quatre équations de LB avec une discrétisation en vitesse d'ordre moins élevée (D3Q7) pour les ions et le potentiel électrostatique que pour l'hydrodynamique (D3Q19). Bien que l'algorithme proposé ici utilise un temps de relaxation unique pour chacune des équations, il est possible de généraliser la méthode pour l'utilisation de multiples temps de relaxation comme dans [4] afin d'améliorer la stabilité générale de l'algorithme. Par construction, le schéma numérique proposé ici pourra s'adapter simplement au cas diphasique en traitant en première approximation la phase gaz comme isolante. En pratique, la seule modification substantielle à apporter (hormis la gestion de conditions initiales) serait l'introduction de conditions aux bords supplémentaires pour la dynamique des ions et du potentiel électrostatique à l'interface liquide/gaz (champ électrique et flux d'ions nuls).

Profil recherché: Le candidat doit être une personne très motivée et autonome, titulaire d'un diplôme universitaire de master récent (ou d'un diplôme équivalent) en mécanique, ingénierie des réservoirs, mathématiques appliquées, génie civil ou dans un autre domaine pertinent. Il ou elle doit démontrer une connaissance fondamentale des principes de la mécanique des fluides régissant le comportement des milieux poreux. Une expérience dans le développement de méthodes numériques, en particulier les méthodes LBM serait un atout. Le candidat devra maîtriser l'anglais et le français (ou montrer une volonté d'apprendre le français).

Financement: La thèse proposée est financée par un contrat doctoral du CNRS et s'inscrit dans le cadre d'un projet plus vaste du programme [NEEDS](#) qui vise à mobiliser une recherche académique sur les grandes questions liées au nucléaire.

Ce projet de thèse est financé pour 3 ans à compter idéalement du 1er octobre 2020 (salaire brut : ~ 2135€ /mois). Ce travail de thèse sera réalisé au sein du laboratoire [GeoRessources](#) (équipe «Hydro-Géomécanique Multi-Echelles», Université de Lorraine/CNRS) à Nancy, en collaboration avec le [LFCR](#) (Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs – UPPA/TOTAL/CNRS) et l'[IRSN](#) (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire).

Contacts et documents à fournir : Les candidat(e)s sont invités à soumettre leur CV, relevés de notes de master et lettre de motivation à l'adresse suivante : <https://bit.ly/2W2NFhI>

Merci d'envoyer aussi une copie des candidatures par mail à

Fabrice Golfier (GeoRessources) : fabrice.golfier@univ-lorraine.fr

Amaël Obliger (LFCR) : amael.obliger@univ-pau.fr

Magdalena Dymitrowska (IRSN) : magdalena.dymitrowska@irsn.fr

Anne-Julie Tinet (GeoRessources) : anne-julie.tinet@univ-lorraine.fr

Références :

- [1] Cuss R., Harrington J., Giot R., Auvray C. (2014), *Experimental observations of mechanical dilation at the onset of gas flow in Callovo-Oxfordian claystone*, Geological Society, London, Special Publications, vol. 400, no. 1, pp. 507–519.
- [2] Benioug M., Golfier F., Tinet A.J., Buès M.A., Oltéan C. (2015) Numerical efficiency assessment of IB-LB method for 3D pore-scale modeling of flow and transport, *Transport in Porous Media* 109(1): 1-23.
- [3] Pazdniakou, A.; Dymitrowska, M. Migration of Gas in Water Saturated Clays by Coupled Hydraulic-Mechanical Model. *Geofluids* 2018, 2018, 1–25. <https://doi.org/10.1155/2018/6873298>.
- [4] Pazdniakou, A.; Tinet, A.-J.; Golfier, F.; Kalo, K.; Gaboreau, S.; Gaire, P. Numerical Efficiency Assessment of the Lattice Boltzmann Model for Digital Nano-Porous Rock Applications. *Advances in Water Resources* 2018, 121, 44–56. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2018.08.001>.
- [5] Obliger, A.; Duvail, M.; Jardat, M.; Coelho, D.; Békri, S.; Rotenberg, B. Numerical Homogenization of Electrokinetic Equations in Porous Media Using Lattice-Boltzmann Simulations. *Physical Review E* 2013, 88 (1), 013019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.88.013019>.
- [6] Yoshida, H.; Kinjo, T.; Washizu, H. Coupled Lattice Boltzmann Method for Simulating Electrokinetic Flows: A Localized Scheme for the Nernst–Planck Model. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 2014, 19 (10), 3570–3590. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2014.03.005>.