



**HAL**  
open science

## La dégradation chimique d'un matériau modèle : une application pour le grès de Fontainebleau

Kajetan Wojtacki, Loïc Daridon, Yann Monerie

### ► To cite this version:

Kajetan Wojtacki, Loïc Daridon, Yann Monerie. La dégradation chimique d'un matériau modèle : une application pour le grès de Fontainebleau. 12e Colloque National en Calcul des Structures , <https://csma2015.ec-nantes.fr/index.php?page=index.php>, May 2015, Giens, France. hal-01289415

**HAL Id: hal-01289415**

**<https://hal.science/hal-01289415v1>**

Submitted on 16 Mar 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# La dégradation chimique d'un matériau modèle : une application pour le grès de Fontainebleau

Kajetan Wojtacki<sup>1</sup>, Loïc Daridon<sup>1,2</sup>, Yann Monerie<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>LMGC, Université Montpellier, France, email: kajetan.wojtacki@univ-montp2.fr

<sup>2</sup>MIST, IRSN, CNRS, Université Montpellier France

---

**Résumé** — Cet article présente une méthodologie pour prédire le comportement mécanique de la roche au cours du processus d'érosion chimique lors du stockage profond du CO<sub>2</sub> dans les aquifères salins. Une méthode permettant d'obtenir des échantillons statistiquement équivalents à des échantillons de roche naturelles, comportant 3 phases, a été développée. Nous avons, ensuite, appliqué et étudié deux scénarii d'érosion numérique à ce matériau modèle et à un échantillon réel. Pour chaque scénario, nous avons étudié l'évolution des descripteurs statistiques et des propriétés mécaniques des échantillons. Les erreurs dues au biais numérique (discrétisation, effets d'échelle, fluctuations statistiques), qui ont eu une influence sur les résultats, sont également analysées et estimées dans ce travail.

**Mots clés** — matériau modèle, homogénéisation périodique, érosion.

---

## 1 Introduction

Le stockage géologique du CO<sub>2</sub> est intensivement étudiée comme une solution pour réduire les émissions de CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère. Ce type de stockage du dioxyde de carbone (CCS) consiste à capter le CO<sub>2</sub> à la source et à l'injecter dans l'état supercritique dans un aquifère salin. Ce sont des couches très poreuses et saturées en eau trop salée pour être exploitable. La dissolution du dioxyde de carbone s'accompagne d'une acidification de l'eau, engendrant des réactions chimiques et une altération de la roche constituant le réservoir. Les réactions chimiques provoquent des changements importants et irréversibles sur les propriétés et la morphologie de la roche [1].

L'objectif principal de ce travail est de faire le lien entre l'évolution de la microstructure, sous l'effet de l'érosion chimique, et le comportement macroscopique observé. Un matériau modèle, statistiquement similaire aux échantillons réels, associé aux techniques d'homogénéisation, dont l'efficacité ne fait plus de doute, seront utilisés pour mener à bien cet objectif. Afin de modéliser la dégradation chimique deux hypothèses principales ont été faites : l'hypothèse du long terme et celle des conditions de champ lointain. Selon ces hypothèses la dissolution peut être considérée comme uniforme à l'échelle de l'échantillon [2]. Deux scénarii de dissolution sont étudiés.

## 2 Microstructure et méthode de reconstruction

### 2.1 Informations morphologiques

Les propriétés macroscopiques de la roche sont directement liées à la morphologie du réseau de pores et du squelette solide (Figure 1). C'est pourquoi, la modélisation à l'échelle micro des matériaux hétérogènes aléatoires (type roche ou milieux poreux) doit se baser sur des caractérisations morphologiques et statistiques de la microstructure ad hoc. Aussi, afin de qualifier statistiquement le matériau réel et les matériaux modèles, les caractérisations morphologiques suivantes sont utilisées [3] :

- **les mesures de base** : la fraction volumique et les surfaces de phases
- **les statistiques sur les pores et leurs géométries** : la distribution des tailles des pores ou des grains, l'orientation et la distribution spatiale des pores. La covariance (Figure 4) de l'échantillon est utilisé afin d'estimer sa longueur caractéristique, sa dispersion géométrique ou l'anisotropie de l'échantillon
- **la connectivité du réseau** : elle influe fortement la perméabilité du milieu.

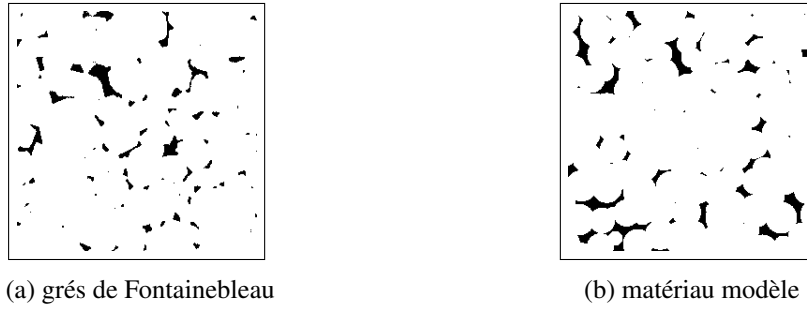


FIGURE 1 – Une tranche de la microstructure dans le plan  $XY$ .

## 2.2 Génération numérique d'échantillons

Le grès est le produit d'une série de processus géologiques et hydrodynamiques complexes. D'une manière simplifiée, la formation du grès peut être décrite par des processus de transport de grains, de dépôts, de compactage et de diagenèse. Dans cet article, la géométrie 3D modèle du grès est obtenue en modélisant 3 phases de son processus de formation [4] à l'aide du logiciel LMG90 :

- **la sédimentation** : nous utilisons des grains monodisperses qui sont déposés initialement dans une boîte 3D selon un algorithme de minimisation de potentiel gravitationnel
- **le compactage** : un compactage de type hydrostatique est appliqué pour minimiser l'anisotropie et la porosité initiale de l'échantillon
- **la diagenèse** : ce processus consiste à sélectionner aléatoirement des grains dans l'échantillon à en incrémenter le rayon et itérer ce processus jusqu'à obtenir la valeur de porosité cible. Ici, l'incrément de rayon est choisi constant.

Les échantillons ainsi générés sont validés a posteriori en comparant leurs données statistiques et morphologiques à celles observées par l'analyse d'image d'un grès de Fontainebleau. La Figure 2 montre une bonne adéquation entre le réseau percolé du matériau modèle et celui d'un grès de Fontainebleau.

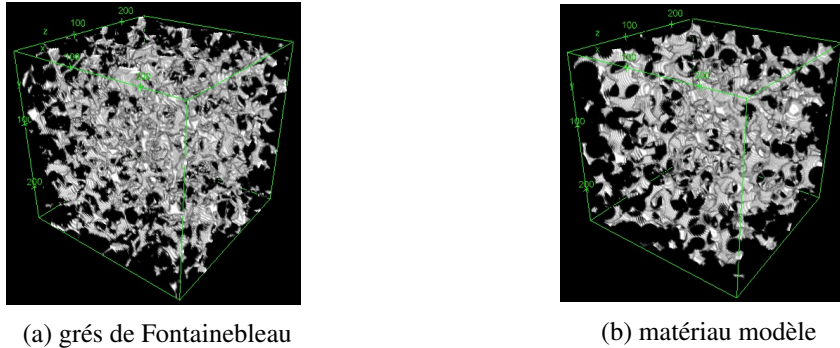


FIGURE 2 – Réseau de pores.

## 2.3 Érosion de la matière

La dégradation chimique de la matière est simulée par l'érosion numérique de la microstructure. À chaque étape de la dissolution le voisinage de tous les voxel appartenants au fluide sont dissous. Dans le cas 3-D, le motif de la dissolution correspond à un voxel dans les 26 directions à partir du voxel initial. Une étape de dissolution dans le cas 2-D est présentée sur la Figure 3.

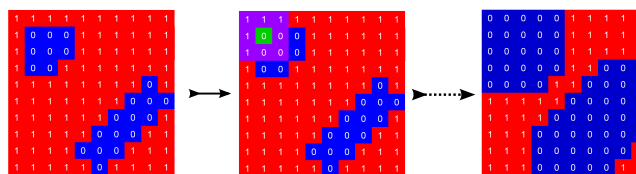
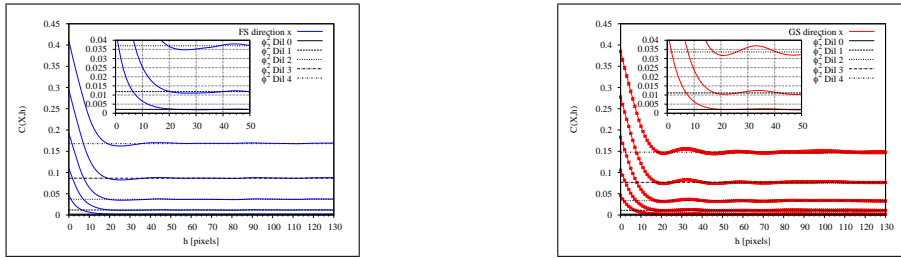


FIGURE 3 – Le motif de la dissolution en 2-D (la dilatation morphologique).

Deux scénarii de dissolution sont proposés :

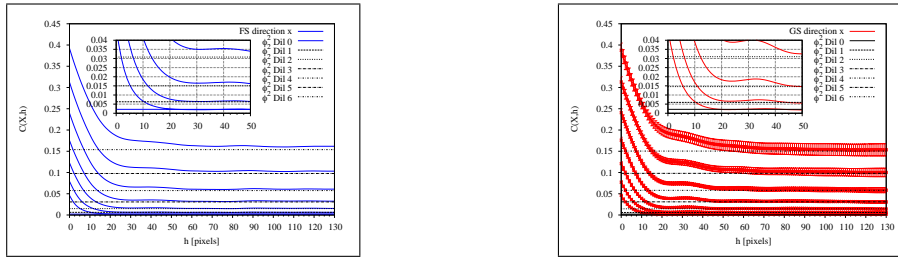
- **la dissolution isotrope** : consiste à appliquer la dissolution dans toutes les pores même celles qui ne sont pas connectés
- **la dissolution du réseau** : consiste à appliquer la dissolution uniquement aux pores du réseau percolé.

Afin de montrer l'influence des scénarii de dissolution sur l'évolution des échantillons, nous présentons sur la Figure 4, pour des raisons de clarté, uniquement l'évolution de la covariance dans la direction x pour le matériau modèle et le grès de Fontainebleau. La Figure 4 montre que chacune des courbes converge vers sa valeur asymptotique. Les deux scénarii induisent une augmentation de la valeur initiale et de fait de la valeur asymptotique. Pour chaque étape de la dissolution, la première valeur,  $Cov(0)$ , de la fonction de covariance se réfère à la porosité de l'échantillon. Nous pouvons voir que la valeur de la porosité varie de environ 4.6 à 40%. On observe que les augmentations sont semblables pour le matériau modèle et pour le matériau réel. Ce qui tend à montrer le caractère réaliste de ce matériau modèle. Pour le scénario de la dissolution isotrope la taille de VER reste constante tandis que pour la dissolution du réseau la taille augmente de presque cinq fois lors de la dernière étape.



(a) Grès de Fontainebleau - dissolution isotropique

(c) Matériau modèle - dissolution isotropique



(b) Grès de Fontainebleau - dissolution du réseau

(d) Matériau modèle - dissolution du réseau

FIGURE 4 – L'évolution de la covariance pour deux matériaux au cours de la dissolution.

### 3 Méthodes numériques

Lorsque l'on cherche à estimer les propriétés équivalentes d'un milieu élastique hétérogène, on peut résoudre les équations locales d'élasticité en utilisant un code d'éléments finis sur la géométrie d'un VER. L'estimation des propriétés élastiques est alors basée sur la méthode d'homogénéisation périodique [5]. Ici, le code d'éléments finis CAST3M est utilisé afin de mettre en œuvre cette méthode. La matrice de rigidité effective, obtenue en résolvant les six problèmes élémentaires correspondants aux six différents cas de chargements généralisés, est donnée par :

$$C_{ijkh} = \left\langle c_{ijpq} \left[ I_{pq}^{kh} + \varepsilon_{pq} \left( u'^{kh} \right) \right] \right\rangle, \quad (1)$$

où  $u'_{kh}$  est la solution du problème d'élasticité et  $I_{pq}^{kh}$  est le tenseur identité d'ordre quatre qui permet de définir les six chargements généralisés.

Cependant en extrayant un VER à partir d'une image naturelle de roche ou d'un matériau modèle les hypothèses de périodicité ne sont généralement pas vérifiées. Pour résoudre ce problème, le VER est inclus dans une couche de matériau homogène (Figure 5) dont le comportement sera in-fine celui recherché. Pour ce faire, la méthode du point fixe est utilisée. Initialement, le tenseur de rigidité de la couche est supposé être égal à celui du squelette du milieu poreux. À chaque itération les propriétés

élastiques de la couche sont décrites par le tenseur de rigidité homogénéisé du système à l'itération précédente :

$$c_{ijkh}^{layer}[i] = C_{ijkh}^{hom}[i-1], \quad (2)$$

où  $i$  désigne le nombre d'itération et  $c_{ijkh}^{layer}$  – le tenseur de rigidité microscopique de la couche.

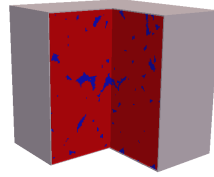


FIGURE 5 – La géométrie du grès de Fontainebleau inclus dans une couche de matériau homogène.

### 3.1 Incertitudes des calculs

La qualité des résultats des calculs éléments finis sur des milieux hétérogènes aléatoires dépend fortement de trois sources d'erreurs : l'effet d'échelle, la discrétisation et les fluctuations statistiques. Dans l'article de Kanit et al. [6], une méthodologie afin d'estimer l'effet conjoint de la taille et des fluctuations statistiques est présentée. Selon l'auteur, la taille de VER peut être estimée comme suit :

$$V_{RVE} = \left( \frac{4}{N \varepsilon_{abs}^2} V_f (1 - V_f) (Z_1 - Z_2)^2 \right)^{1/\alpha} A_d, \quad (3)$$

où  $V_f$  désigne la fraction volumique, les deux termes  $Z_1, Z_2$  représentant respectivement les valeurs des propriétés élastiques de la phase 1 et 2. Le terme  $A_d$  est la portée intégrale,  $N$  est le nombre de réalisations et  $\alpha \in \mathbb{R}_+ \setminus \{1\}$ .

L'erreur de discrétisation se réfère à la représentation d'objets géométriques par des voxels et peut être alors estimée par la formule phénoménologique [7] :

$$E_{FEM} \approx E_0 + \frac{a}{T}, \quad (4)$$

où  $E_{FEM}$  est le module d'Young calculé,  $T$  désigne le nombre de voxels par rapport à la longueur du bord du cube d'un VER et  $E_0$  est la valeur qui correspond au cas  $T \rightarrow \infty$ . Pour estimer cette valeur ( $E_0$ ) nous devons calculer les propriétés élastiques, au moins, pour trois valeurs de  $T$  différentes et ensuite extrapoler les résultats.

### Références

- [1] S. Bachu, D. Bonijoly, J. Bradshaw, R. Burruss, S. Holloway, N.P. Christensen, O.M. Mathiassen, *CO<sub>2</sub> storage capacity estimation : Methodology and gaps*, International Journal of Greenhouse Gas Control, Elsevier, 430-443, 2007.
- [2] J. Bemer, J.M. Lombard. *From injectivity to integrity studies of CO<sub>2</sub> geological storage. Chemical alteration effects on carbonates petrophysical and geomechanical properties*, Oil & Gas Science and Technology, IFP Energies nouvelles, 445-459, 2009.
- [3] D. Jeulin. *Random texture models for material structures*, Statistics and Computing, Springer, 121-132, 2001.
- [4] S. Bakke, P.E. Oren. *3-D pore-scale simulation modelling of sandstone and flow simulations in the pore network*, SPE Journal, Society of Petroleum Engineers, 136-149, 1997.
- [5] M. Bornet, T. Bretheau, P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux I : matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*, Hermes Science, 2001.
- [6] T. Kanit, S. Forest, I. Gaillet, V. Mounoury, D. Jeulin. *Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach*, International Journal of Solids and Structures, Springer, 3647-3679, 2003.
- [7] A.P. Roberts, E. Garboczi. *Elastic Moduli of Model Random Three-Dimensional Closed-Cell Cellular Solids*, Journal of the American Ceramic Society, Wiley, 189-197, 2001.