



HAL
open science

Processus hydro-géophysiques et hydro-thermo-géochimiques dans les milieux poreux fracturés hétérogènes

Delphine Roubinet

► **To cite this version:**

Delphine Roubinet. Processus hydro-géophysiques et hydro-thermo-géochimiques dans les milieux poreux fracturés hétérogènes. Hydrologie. Université de Montpellier, 2023. tel-04247932

HAL Id: tel-04247932

<https://hal.science/tel-04247932v1>

Submitted on 18 Oct 2023

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.



UNIVERSITÉ DE
MONTPELLIER



Processus hydro-géophysiques et hydro-thermo-géochimiques dans les milieux poreux fracturés hétérogènes

Caractérisation et modélisation à plusieurs échelles

Delphine Roubinet

Habilitation à Diriger des Recherches

Université de Montpellier

Soutenue le 20/02/2023

Composition du jury

Benoit Noetinger	Ingénieur de recherche	IFP-EN	Examineur
Séverin Pistre	Professeur	Université de Montpellier	Examineur
Philippe Pezard	Directeur de recherche	CNRS	Président
Philippe Ackerer	Directeur de recherche	CNRS	Rapporteur
Delphine Lacanette	Maître de conférences	Université de Bordeaux	Rapporteur
Niklas Linde	Professeur	Université de Lausanne	Rapporteur

Table des matières

1	Préambule	1
2	Introduction	4
2.1	Contexte	4
2.2	Orientations de recherche	10
2.3	Parcours de recherche	11
3	Activités de recherche	13
3.1	Caractérisation hydro-géophysique	13
3.1.1	Modélisation de la propagation de courants électriques . . .	13
3.1.2	Propriétés topologiques, hydrauliques et électriques à plusieurs échelles	22
3.1.3	Caractérisation des fractures à l'échelle du site	31
3.2	Étude du transport de chaleur	36
3.2.1	Interprétation des mesures de température dans les puits . .	36
3.2.2	Modélisation du transport de chaleur dans les milieux fracturés	41
3.2.3	Inversion des propriétés statistiques des réseaux de fractures	49
3.3	Devenir des solutés à plusieurs échelles	52
3.3.1	Transport anormal dans les milieux fracturés	52
3.3.2	Réactions et changement d'échelle	56
3.3.3	Expériences de karstification en laboratoire	62
4	Projet de recherche	66
4.1	Méthodes de caractérisation sur sites	66
4.1.1	Interprétation des données de résistivité électrique	66
4.1.2	Extension des modèles pour les expériences thermiques . .	68
4.2	Transport (réactif) et upscaling	70
4.2.1	Développement théorique et analyse	70
4.2.2	Reproduction des expériences en laboratoire	70
4.2.3	Couplage des processus hydro-biogéochimiques	72
4.3	Stratégie intégrée pour les sites	75
5	Curriculum vitae	94
6	Articles sélectionnés	108

1 Préambule

Mes travaux de recherche s'inscrivent dans le cadre de l'usage du sous-sol aussi bien en termes d'exploitation et de protection des ressources souterraines, que de stockage d'éléments toxiques. Je me concentre en particulier sur le développement des outils de modélisation qui sont nécessaires aux différentes étapes de la caractérisation des milieux souterrains et de la compréhension des processus qui s'y déroulent. Cela inclut (i) l'extraction d'informations à partir de données in-situ acquises sur le terrain et en laboratoire par différentes méthodes de caractérisation et (ii) la mise en oeuvre de modèles prédictifs permettant de proposer des scénarios d'exploitation, de stockage, de pollution et de remédiation, mais aussi de formation des milieux. Je travaille plus particulièrement sur les environnements fortement hétérogènes de type milieux fracturés ou karstiques pour lesquels la modélisation des propriétés structurales et des processus présente des défis de conceptualisation mathématique et de ressources numériques. Les processus considérés vont de la propagation de courant électrique pour l'interprétation de données géophysiques, aux écoulements de fluides pour l'imagerie des flux dans les puits ; en passant par le transport de chaleur pour la caractérisation par traçage thermique et l'optimisation géothermique, et par le transport de solutés avec des réactions géochimiques pour établir des scénarios de contamination et remédiation, mais aussi pour comprendre la formation de certains milieux tels que les milieux karstiques. Les objectifs principaux sont de (i) faire le lien entre les données de l'échelle du laboratoire à l'échelle du terrain, et les modèles numériques qui peuvent y être associés, et (ii) mettre à disposition des modèles prédictifs de scénarios de contamination et remédiation. De par ce fait, les problématiques de changement d'échelles, d'hétérogénéités des structures, d'inversion des données, d'optimisation numérique, et de variabilité et sensibilité des milieux, sont au coeur de mes travaux de recherche. La difficulté d'appliquer des modèles physiques complexes à des cas et données réels est aussi un élément déterminant dans l'orientation de mes travaux scientifiques.

Ces travaux ont été développés en collaboration avec des mathématiciens, géophysiciens, hydrogéologues et géochimistes, dans plusieurs laboratoires de recherche en France et à l'étranger, avec le co-encadrement d'étudiants principalement en Master et en thèse.

Après avoir introduit quelques notions (non exhaustives) sur le contexte de mes recherches pour aider à la compréhension du manuscrit, j'exposerai les travaux que j'ai réalisés ces dix dernières années, et mon projet de recherche pour les années à venir. Un résumé de mes collaborations et des étudiants que j'ai co-encadrés est fourni dans la description de mon parcours de recherche. Mon curriculum vitae complet, incluant les publications avec les collaborateurs et les étudiants, est ajouté à la fin de ce manuscrit.

”Je déclare avoir respecté, dans la conception et la rédaction de ce mémoire d’HDR, les valeurs et principes d’intégrité scientifique destinés à garantir le caractère honnête et scientifiquement rigoureux de tout travail de recherche, visés à l’article L.211-2 du Code de la recherche et énoncés par la Charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et la Charte d’intégrité scientifique de l’Université de Montpellier. Je m’engage à les promouvoir dans le cadre de mes activités futures d’encadrement de recherche.”

2 Introduction

2.1 Contexte

Les formations géologiques souterraines renferment différents types d'hydrosystèmes qui sont impliqués dans une large gamme de problématiques économiques, sociétales et environnementales. Parmi ces hydrosystèmes, les milieux poreux fracturés sont étudiés dans de nombreux domaines de recherche et applications, tels que l'hydrogéologie, la géothermie, l'extraction de ressources et le stockage d'éléments toxiques (Carneiro, 2009; Dershowitz and Miller, 1995; Gautam and Mohanty, 2004; Kolditz and Clauser, 1998; Rotter et al., 2008). La particularité de ces milieux vient de leurs structures géologiques composées d'une roche peu perméable présentant des zones de fracturation fortement conductrices (Figure 1). Pour des problématiques d'exploitation du sous-sol, telles que l'exploitation pétrolière et l'extraction de gaz ou de chaleur, la roche correspond à la zone de stockage de la ressource, et les fractures à des voies d'accès rapides connectant le puits d'exploitation à différentes zones du milieu souterrain. La rentabilité de ces exploitations dépend alors de l'extension du réseau de fractures et de l'optimisation des échanges de la roche vers les fractures. En termes de stockage d'éléments (CO_2 ou éléments radioactifs), la faible perméabilité de la roche assure la sûreté du confinement, alors que les fractures représentent un risque de fuite des éléments stockés. Il est alors essentiel de sélectionner des sites présentant une faible quantité de fractures et des conditions minimisant les échanges de la roche vers les fractures. Le contrôle de ces échanges est aussi déterminant lors de la contamination d'un site, puisque la minimisation des échanges des fractures vers la roche permet de réduire les temps de résidence d'un polluant dans le milieu, alors que l'optimisation des échanges de la roche vers les fractures permet d'accélérer la remédiation du milieu pollué.

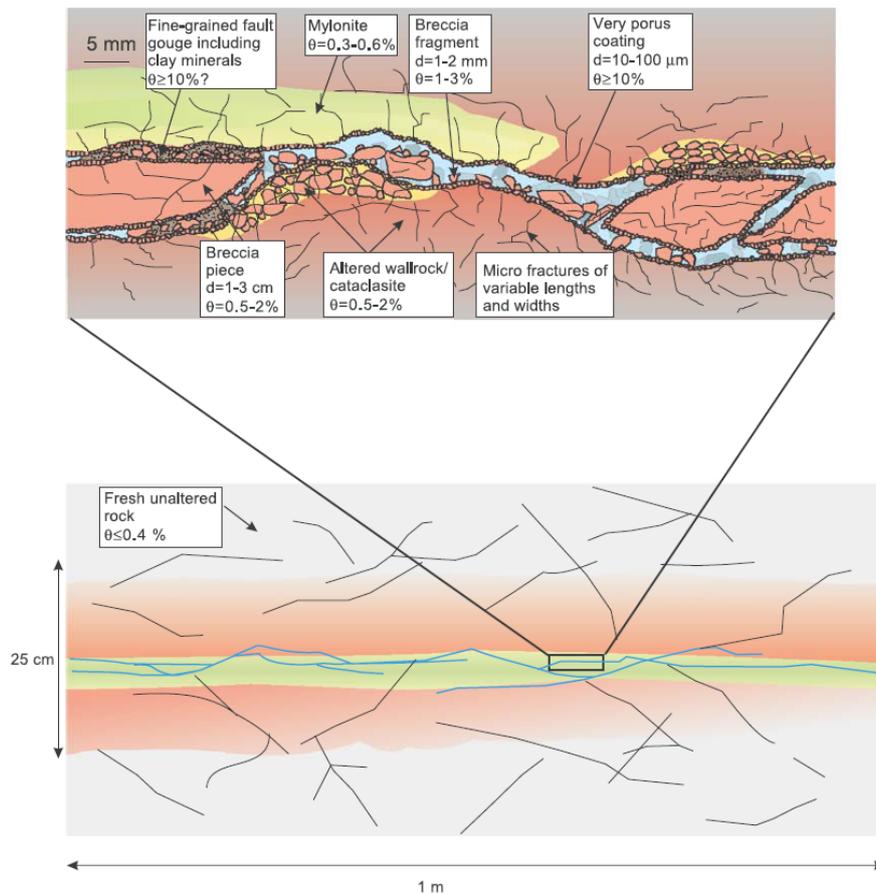


FIGURE 1 – Modèle conceptuel de représentation des milieux poreux fracturés (image provenant de Andersson et al. (2004)).

Les différentes problématiques et applications liées aux aquifères et réservoirs fracturés nécessitent de caractériser les propriétés structurales de ces milieux et de prendre en compte les comportements multi-porosité caractérisés par des dynamiques de réactions hétérogènes et induits par les hétérogénéités de ces structures géologiques. Cela requière de combiner plusieurs méthodes de caractérisation in-situ complémentaires à diverses échelles et d'utiliser des outils numériques adaptés à ces milieux, aussi bien pour interpréter les expériences de caractérisation que pour proposer des modèles prédictifs pertinents.

Représentation des milieux fracturés

Le contraste entre les propriétés hydrauliques des fractures et de la roche matricielle implique des temps de réponse différents, caractéristiques de chacune de ces deux structures (Hamm and Bidaux, 1996). Les premiers modèles capables de reproduire cette spécificité ont été les modèles double-porosité continus, basés sur une superposition de deux domaines représentant la porosité primaire (matrice) et secondaire (fractures) du milieu. Ce concept de modélisation a été largement utilisé pour sa simplicité de représentation où (i) les deux domaines continus sont discrétisés sous forme de blocs associés à des perméabilités équivalentes aux propriétés du mi-

lieu naturel (modèles de boîte à sucre), et (ii) les interactions entre les deux domaines sont représentées par un terme d'échange moyenné à l'échelle de la maille de discrétisation. Cette formulation permet d'éviter une discrétisation coûteuse, voir impossible, de milieux dont les tailles caractéristiques des structures (ouverture des fractures et taille du bloc matriciel) diffèrent de 3 à 6 ordres de grandeur. Pour pallier à la simplicité de ces modèles, de nombreuses modifications ont été proposées pour prendre en compte la géométrie complexe des blocs matriciels et des fractures (Kfoury et al., 2004; Nøtinger et al., 2001; Nøtinger and Estebenet, 2000), la dynamique d'échange transitoire entre les deux domaines (Dykhuizen, 1990; Hassanzadeh and Pooladi-Darvish, 2006; Zimmerman et al., 1993), et la présence de plusieurs niveaux de porosité et de plusieurs types de processus participant aux échanges (Carrera et al., 1998; Haggerty and Gorelick, 1995).

Malgré toutes ces modifications apportées aux modèles double-porosité continus, un point clé inévitable de leur concept de représentation est l'homogénéisation des propriétés des réseaux de fractures. Comme les fractures sont distribuées sur une large gamme d'échelles spatiales avec une forte hétérogénéité de leurs propriétés (Bour and Davy, 1997), l'existence d'un volume élémentaire représentatif (REV) est dans certains cas questionable (de Dreuzy et al., 2001a,b). La représentation continue des fractures est alors critique pour des problématiques tel que le stockage de déchets nucléaires ou de CO₂ dans les réservoirs fracturés, où la dynamique temporelle et spatiale du transport dans les réseaux de fractures est déterminante pour évaluer les risques de fuite des éléments (Smith et al., 2011; Zhang et al., 2010). Dans ce cas, les modèles dits *discrets* et basés sur une représentation explicite des fractures (DFN, Discrete Fracture Network) sont plus adaptés. Une alternative aux précédents concepts de représentation a été proposée avec les modèles double-porosité discrets. Ces modèles combinent les avantages (i) des modèles discrets avec une représentation explicite des fractures, et (ii) des modèles double-porosité avec une représentation double-milieu des interactions fractures-matrice (Lee et al., 2001; Li and Lee, 2008).

La diversité des modèles proposés pour la représentation des structures et la simulation des mécanismes dans les milieux poreux fracturés vient de la complexité de ces milieux. Un premier niveau de complexité est directement relié aux propriétés géométriques fortement hétérogènes des structures géologiques qui composent ces milieux. Un second niveau dépend des mécanismes étudiés et de l'hétérogénéité des propriétés des structures associées à ces mécanismes. Le choix d'un concept de modélisation parmi cette panoplie de modèles dépend des propriétés des milieux étudiés et des applications envisagées, mais aussi des informations disponibles sur le milieu naturel. La formulation de ces modèles à grande échelle étant basée sur des représentations simplificatrices à petite échelle, la validité des hypothèses considérées rentre aussi en compte dans le choix des modèles à utiliser.

Modélisation du transport de solutés

Typiquement, le transport d'éléments dans des représentations explicites de fractures est modélisé par des méthodes de suivi de particules pour des applications et milieux permettant de négliger les écoulements dans la roche matricielle (Cvetkovic et al., 2004; Dershowitz and Miller, 1995). De manière générale, les méthodes basées sur la marche aléatoire (RW) ou le déplacement de particules sont bien adaptées pour modéliser un comportement de transport hydrodynamique anormal à diverses échelles pour différents processus et degrés d'hétérogénéité (Berkowitz et al., 2016; Gouze et al., 2021; Hyman and Dentz, 2021; Noetinger et al., 2016; Painter et al., 2008). Ces méthodes sont en mesure de traiter un large éventail de régimes de transport, y compris des grandes valeurs du nombre de Peclet présentes dans les systèmes à double porosité, de type milieux mobile-immobile et fracture-matrice (Cvetkovic, 2017; Dentz et al., 2011; Gisladottir et al., 2016). Les temps longs de diffusion dans la zone à faible porosité et les modifications de la quantité de masse transportée en raison de réactions chimiques simples sont alors paramétrés par des solutions analytiques permettant d'éviter une discrétisation coûteuse de la zone matricielle, et correspondant par exemple à la probabilité de survie des particules (Benson and Meerschaert, 2008; Bolster et al., 2016; Ding et al., 2013; Perez et al., 2019). Ces solutions sont cependant basées sur des représentations simplifiées des milieux et des processus qui s'y déroulent impliquant des hypothèses fortes telles qu'une diffusion 1D dans des blocs matriciels de forme régulière et idéalisée, et des réactions chimiques linéaires du premier ordre avec une relation linéaire entre les concentrations des domaines mobile et immobile (Carrera et al., 1998; Dentz et al., 2011; Lichtner and Kang, 2007) (Figure 2).

La prise en compte de l'impact des propriétés à petite échelle dans des simulations à grande échelle peut aussi se faire en paramétrant des méthodes RW à grande échelle, telles que les méthodes CTRW (Continuous Time Random Walk), avec les statistiques spatiales et temporelles du déplacement des particules à la petite échelle. Lorsque ces statistiques sont définies à partir de simulations numériques, elles permettent de capturer l'impact des propriétés hétérogènes sur le transfert de masse à différentes échelles et de représenter par exemple un comportement pré-asymptotique qui ne peut être décrit par les méthodes standard de changement d'échelle qui reposent sur l'existence d'un Volume Élémentaire Représentatif (REV) (Gjetvaj et al., 2015; Gouze et al., 2020; Russian et al., 2016). Cela permet d'exécuter des simulations de transport à grande échelle avec des ressources de calcul raisonnables tout en prenant en compte des propriétés hétérogènes dans des conditions hydrodynamiques dominées par l'advection, alors que les méthodes standard (telles que les volumes finis, les différences finies ou les éléments finis) nécessitent une augmentation coûteuse de la discrétisation pour éviter les problèmes de dispersion numérique.

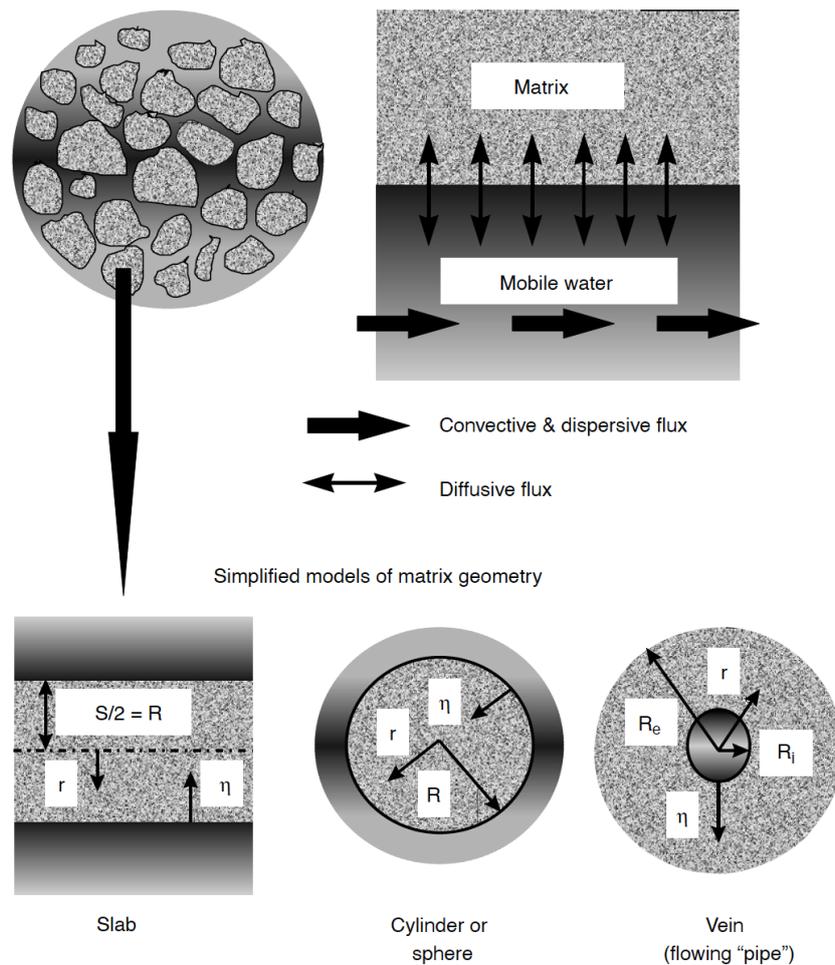


FIGURE 2 – Représentation conceptuelle des modèles de diffusion et de la géométrie des blocs matriciels dans les systèmes mobile-immobile (image provenant de Carrera et al. (1998)).

Ces caractéristiques et les applications réussies de simulations des processus de transport dans des systèmes hétérogènes font des méthodes RW un candidat idéal pour établir des modèles de transport (réactif) efficaces et robustes dans des systèmes hétérogènes. Encore une fois, il est nécessaire cependant de connaître et vérifier les conditions d'applicabilité de chaque modèle en identifiant les hypothèses sous-jacentes à la petite échelle, et de proposer de nouvelles formulations pour réaliser des simulations de transport adaptés à la fois aux hétérogénéités structurelles à diverses échelles et à divers types de réactions chimiques lorsque la réactivité est considérée.

Caractérisation des roches fracturées

La complexité des propriétés des milieux fracturés et des processus qui s'y déroulent implique aussi des limitations quant à leur caractérisation. C'est le cas par exemple des méthodes de résistivité électrique (RE) dont la sensibilité à la présence de fractures a été mise en évidence sur le terrain (Boadu et al., 2005; Mainault et al., 2013; Nguyen et al., 2016; Robert et al., 2011; Wishart et al., 2008), mais dont l'in-

interprétation des données est limitée par le manque de modèles physiques adaptés. Ces méthodes ont l'avantage de donner une information globale sur le milieu à plusieurs échelles et dans plusieurs directions, dépendant de l'espacement et de la position des électrodes placées dans le sol, et ont été largement utilisées pour caractériser la conductivité électrique des milieux poreux (Blome et al., 2009; Pidlisecky and Knight, 2008; Rücker et al., 2006). Cependant, les outils numériques existants pour simuler ces expériences sont basés sur des approches de résolution et de discrétisation classiques (volumes finis, éléments finis) qui ne sont pas adaptées aux spécificités des milieux fracturés hétérogènes. Cela mène à des coûts numériques prohibitifs limitant les études à quelques fractures lors de simulations directes tridimensionnelles, et à des représentations équivalentes des réseaux de fractures qui ne sont utilisables que pour des réseaux de fractures aux propriétés homogénéisables et des organisations de fractures idéalisées (Berryman and Hoversten, 2013; Robinson et al., 2013; Stesky, 1986). Ces limitations se répercutent aussi sur d'autres techniques géophysiques telles que la méthode du potentiel spontanée (PS) qui présente un intérêt particulier pour les applications hydrogéologiques en raison de sa sensibilité directe à l'eau s'écoulant dans le sous-sol. Cela a mené à des études démontrant la capacité de la méthode PS à détecter l'écoulement des eaux souterraines dans les milieux fracturés, déterminer l'orientation des fractures hydrauliquement actives grâce à des mesures azimutales à la surface du sol, et localiser les fuites d'eau à travers une seule fracture (Fagerlund and Heinson, 2003; Mainault et al., 2013; Revil et al., 2015; Wishart et al., 2008). Alors que des approches par éléments finis entièrement discrétisés sont régulièrement utilisées pour simuler les signaux PS dans les milieux poreux (e.g. Revil and Jardani, 2013), de telles méthodes deviennent rapidement prohibitives en termes de ressources de calcul lorsque l'on considère des roches fracturées où les fractures doivent être discrétisées à une échelle spatiale fine.

Le potentiel de ces méthodes pour fournir des informations sur les propriétés des milieux fracturés n'a donc pas été pleinement exploré jusqu'à présent. Il est nécessaire pour cela de développer des approches de modélisation de propagation des courants électriques répondant aux défis de représentation des milieux fracturés. À cela s'ajoute la nécessité de modèles numériques directes assez performants pour être in-fine intégrés dans des méthodes d'inversion des données, sachant que les expériences de RE permettent d'acquérir des milliers de données à inverser et que ces inversions nécessitent elles-mêmes de mettre en oeuvre des milliers de simulations directes.

Diverses techniques de caractérisation peuvent fournir des informations complémentaires sur les roches fracturées, allant des observations directes faites en surface aux données recueillies dans les forages lors d'expériences hydrauliques et de traçage (Bonnet et al., 2001; Becker and Shapiro, 2003; Gouze et al., 2008; Lods et al., 2020). Parmi

ces expériences, les expériences thermiques sont utilisées pour identifier la présence de fractures intersectant les forages, estimer les propriétés hydrauliques de ces fractures, et étudier la chenalisation de l'écoulement et les échanges fracture-matrice à l'échelle de la fracture (Klepikova et al., 2014, 2016; de La Bernardie et al., 2018; Pehme et al., 2013; Read et al., 2013). La plupart de ces expériences est mise en oeuvre grâce aux méthodes ALS (Active Line Source) et DTS (Distributed Temperature Sensing) permettant, respectivement, de modifier uniformément la température de l'eau dans un forage et de mesurer verticalement les changements de température dans des puits d'observation (Pehme et al., 2007; Read et al., 2013). Par rapport à leurs homologues chimiques, ces expériences ne sont pas limitées par les contraintes environnementales et elles présentent l'avantage ne pas reposer sur des techniques d'échantillonnage et d'injections localisées (Akoachere and Van Tonder, 2011; Ptak et al., 2004). De manière générale, l'inversion de données collectées dans les puits est faite (i) soit en considérant des représentations simplifiées du milieu et en estimant la transmissivité et la capacité de stockage des fractures qui intersectent les forages à des profondeurs connues (Klepikova et al., 2013; Paillet et al., 2012; Roubinet et al., 2015), (ii) soit en estimant les propriétés géométriques et hydrauliques d'un réseau de fractures à partir d'un nombre important de données (Fischer et al., 2018; Le Goc et al., 2010; Somogyvari et al., 2017). Alors que ces études sont adaptées pour un nombre de fractures relativement faible afin de travailler avec un nombre de paramètres qui peut être traité par inversion, seulement peu de travaux porte sur la possibilité d'inverser les propriétés statistiques des réseaux de fractures, sans limitation du nombre de fractures considérées (Jang et al., 2008, 2013).

Ici encore, il est nécessaire de développer des approches de modélisation prenant en compte les spécificités des milieux fracturés avec des coûts numériques faibles afin d'envisager d'utiliser ces modèles dans des procédures d'inversion. Il est cependant peu probable pour l'instant que des modèles physiques basés sur des hypothèses simplificatrices acceptables soient assez performants pour être directement utilisés dans des procédures d'inversion des propriétés des réseaux de fractures. Ces modèles peuvent par contre être optimisés pour "entraîner" de nouveaux modèles basés sur des méthodes d'intelligence artificielle ou de réseaux de neurones.

2.2 Orientations de recherche

Les divers défis scientifiques liés aux ressources dans les milieux fracturés m'ont amené à développer les trois axes principaux suivants qui sont présentés dans mes activités de recherche.

(i) La caractérisation des roches fracturées par le développement et l'exploitation de modèles de simulations des courants électriques afin d'explorer pleinement la capacité des expériences électriques à fournir des informations sur les milieux fracturés.

(ii) L'étude du transport de chaleur à plusieurs échelles et pour plusieurs objectifs allant de l'utilisation des expériences thermiques comme traceur du milieu naturel à l'optimisation des échanges fracture-roche pour la performance des exploitations géothermiques.

(iii) Le devenir des solutés dans les milieux fracturés avec pour objectif de prendre en compte la réactivité qui rentre en jeu dans des problématiques de contamination et décontamination de sites, mais aussi pour la compréhension de la formation de certains milieux, tel que les milieux karstiques.

Ces trois orientations de recherche nécessite le développement d'outils de modélisation prenant en compte les spécificités des milieux fracturés tout en offrant des coûts numériques relativement faibles afin d'envisager la mise en oeuvre de procédures de Monte Carlo et d'inversion. Il faut pour cela définir et représenter les processus clés associés à chaque problématique, prendre en compte les phénomènes à la petite échelle qui impactent les comportements à grande échelle, et coupler les différents processus mis en jeu. Différentes techniques seront mis en oeuvre pour s'adapter aux différentes problématiques et échelles de travail, incluant des solutions analytiques, hybrides et numériques, avec des résolutions dans le domaine de Fourier ou l'utilisation de surrogate modèles suivant les applications.

2.3 Parcours de recherche

Au cours de ma thèse (2008-2010), j'ai travaillé sur la modélisation des écoulements et du transport de solutés dans les milieux poreux fracturés avec des méthodes stochastiques de génération des réseaux de fractures et des méthodes de suivi de particules pour le transport. Ceci m'a amené à étudier l'impact des propriétés structurales de ces milieux sur les processus d'écoulement et de transport en collaboration avec Jean-Raynald de Dreuzy et Philippe Davy (Géosciences Rennes), et Hui-Hai Liu (Lawrence Berkeley National Laboratory, LBNL) avec une mobilité de thèse au LBNL (Roubinet et al., 2010a,b, 2013).

Ces travaux ont été étendu au cours d'un post-doctorat (2011-2013) avec Daniel M. Tartakovsky (University of California, San Diego, UCSD) en développant des formulations analytiques et des modèles hybrides pour les processus de transport dans les systèmes fracture-matrice et pour le transport réactif multi-échelle (Roubinet et al., 2012; Roubinet and Tartakovsky, 2013). Mes travaux sur le transport de solutés ont aussi été adaptés au transport de chaleur avec le co-encadrement de Alvaro Ruiz-Martinez (Ruiz Martinez et al., 2014)¹, **Viktor R. Gisladdottir (Gisladdottir et al., 2016)**², et dernièrement **Zitong Zhou (Zhou et al., 2021)**.

Afin d'incorporer des méthodes de caractérisation géophysique à mes travaux de recherche, j'ai fait un post-doctorat (2013-2016) à l'Université de Lausanne (UNIL)

1. Le nom des étudiants en Master co-encadrés et leurs publications seront soulignés dans cette partie du manuscrit.

2. Le nom des étudiants en thèse co-encadrés et leurs publications seront écrits en gras dans cette partie du manuscrit.

avec James Irving. Nous avons développé et exploité des méthodes de modélisation des courants électriques dans les milieux fracturés (Roubinet and Irving, 2014) en co-encadrant **Serdar Demirel (Caballero Sanz et al., 2017; Demirel et al., 2018, 2019; Roubinet et al., 2020)** et Victor Cabellero-Sanz (Caballero Sanz et al., 2017), et en collaboration avec Niklas Linde (UNIL) et Damien Jougnot (UPMC) (Roubinet et al., 2016). Ce post-doctorat a aussi été l'occasion (i) de continuer mes travaux sur le transport de chaleur avec le co-encadrement de Luis G. Moscoso-Lembcke (Moscoso Lembcke et al., 2017) en collaboration avec Beth Parker et Peter Pehme (Université de Guelph), et (ii) d'initier des travaux sur les expériences de flowmeter dans les puits avec Frederick Day-Lewis (USGS) (Roubinet et al., 2015).

Depuis ma prise de fonction en tant que chargé de recherche au CNRS (2017), j'ai étendu mes travaux au sein de nouvelles collaborations sur (i) les méthodes de résistivité électrique (Roubinet et al., 2018, 2020) avec Philippe Pézard (Géosciences Montpellier, GM) et Xiaoguang Wang (Chengdu University of Technology, Chine), (ii) les expériences de caractérisation hydrogéologique (Lods et al., 2020) avec Gérard Lods, Richard Leprovost et Philippe Gouze (GM), et Jurg M. Matter (Southampton University), (iii) le transport de chaleur (Klepikova et al., 2022) avec Maria Klepikova (Géosciences Rennes), et (iv) le transport de solutés de la petite échelle (Gouze et al., 2020, 2021) en collaboration avec Marco Dentz et Alexandre Puyguiraud (IDEAE-CSIC), et Philippe Gouze, à l'échelle du site (Pryet et al., 2022) avec Yohann Cousquer (HSM), et Alexandre Pryet et Pierre Matran (EPOC). Ceci est complété par la modélisation de la réactivité des solutés dans les méthodes RW (Roubinet et al., 2022) et la participation au co-encadrement de la thèse de **Marie Léger (Leger et al., 2022a,b)** sur l'étude de la karstification des roches en laboratoire en collaboration avec Linda Luquot (GM).

3 Activités de recherche

3.1 Caractérisation hydro-géophysique

Afin de pleinement explorer le potentiel des méthodes géoélectriques pour caractériser les milieux poreux fracturés, le développement de modèles adaptés à la propagation du courant électrique dans ces milieux est une étape indispensable. Les outils de modélisation numérique développés pour cela sont présentés dans la partie 3.1.1. Ces modèles ont été ensuite utilisés pour (i) étudier les relations entre les propriétés topologiques et électriques des échantillons de roches fracturées à l'échelle du laboratoire, et comparer à plus grande échelle les caractéristiques hydrauliques et électriques des volumes élémentaires représentatifs (VER) de ces milieux (partie 3.1.2), et (ii) évaluer la signature de la présence de fractures sur des expériences synthétiques de résistivité électrique à l'échelle du terrain, ainsi que sur des mesures de potentiel spontané (partie 3.1.3). Toutes ces études ont pour objectif commun d'évaluer quelles informations peuvent être obtenues à partir des expériences électriques à plusieurs échelles et sur différentes configurations de milieux fracturés.

3.1.1 Modélisation de la propagation de courants électriques

Concept de modélisation

La modélisation du flux de courant électrique dans les milieux fracturés nous oblige à considérer la propagation du courant à travers les domaines de la fracture et de la matrice, car la différence de conductivité électrique entre ces domaines n'est pas assez grande pour considérer uniquement le flux à travers les fractures. Dans cet objectif, une approche double-porosité (double-perméabilité) discrète (discrete dual-porosity, DDP) a été développée en considérant séparément la conservation de la charge aux échelles de la fracture, du réseau de fractures et de la matrice avec prise en compte des échanges fracture-matrice. Cette approche est basée sur une représentation explicite des fractures, une méthode des volumes finis adaptée à une discrétisation relativement grossière de la matrice, et un paramétrage analytique des échanges fracture-matrice. Le concept de modélisation proposé ici est inspiré des modèles double-porosité discrets développés en hydrogéologie pour simuler les écoulements dans des milieux où la circulation de fluides dans la zone matricielle ne peut pas être négligée (Lee et al., 2001; Li and Lee, 2008). Ces derniers modèles considèrent une valeur moyenne de la charge hydraulique le long des segments de fractures obligeant à une discrétisation relativement fine de la zone matricielle pour travailler avec des segments de fractures de faible longueur. Dans les modèles de courants électriques proposés ici, le paramétrage analytique à l'échelle de la fracture permet de décrire la variation de la charge électrique le long des segments de fractures, et donc d'avoir une précision plus fine tout en ayant une discrétisation assez grossière des blocs ma-

triciels. Ce point est essentiel pour proposer des modèles à faible coût numérique qui pourront être utilisés pour des simulations de Monté Carlo et des procédures d'inversion.

Formulation DDP 2D

Dans des conditions de régime permanent, le flux de courant électrique est régi par l'équation de conservation de la charge

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = Q \quad (1)$$

où \mathbf{J} est la densité de courant et Q est un terme source. En exprimant la densité de courant par la loi d'Ohm $\mathbf{J} = -\sigma \nabla \phi$, où σ est la conductivité électrique et ϕ est le potentiel électrique, cela conduit à l'équation

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = Q, \quad (2)$$

qui constitue la base de toutes les techniques de modélisation géoélectrique.

La Figure 3 illustre les différentes étapes de discrétisation liées à la méthode DDP_2D. La matrice est divisée en blocs réguliers (carrés bleus) identifiés par des indices (I, J) , et les fractures sont représentées par des éléments 1D qui sont subdivisés en segments (lignes noires). Les noeuds du domaine (cercles numérotés) sont constitués des extrémités des fractures (rouge), des intersections entre fractures (vert) et des intersections entre les fractures et les limites des blocs matriciels (noir) (Figure 3a). À l'échelle du réseau de fractures, chaque segment k est caractérisé par sa conductivité électrique σ_f^k , son ouverture b_f^k , et son potentiel électrique ϕ_f^k (Figure 3b). À l'échelle du segment, ses extrémités sont situées aux positions $x_k = 0$ et L_k avec L_k la longueur du segment et x_k la variable spatiale 1D le long du segment, et les variables $\varphi_f^{i_k}$ et $\varphi_f^{j_k}$ correspondent aux valeurs du potentiel électrique en ces points (Figure 3c). À l'échelle du bloc, $\sigma_m^{I,J}$ et $\phi_m^{I,J}$ sont utilisés pour désigner la conductivité et le potentiel électrique de la matrice, et $\alpha_{fm}^{I,J}$ le coefficient d'échange fracture-matrice.

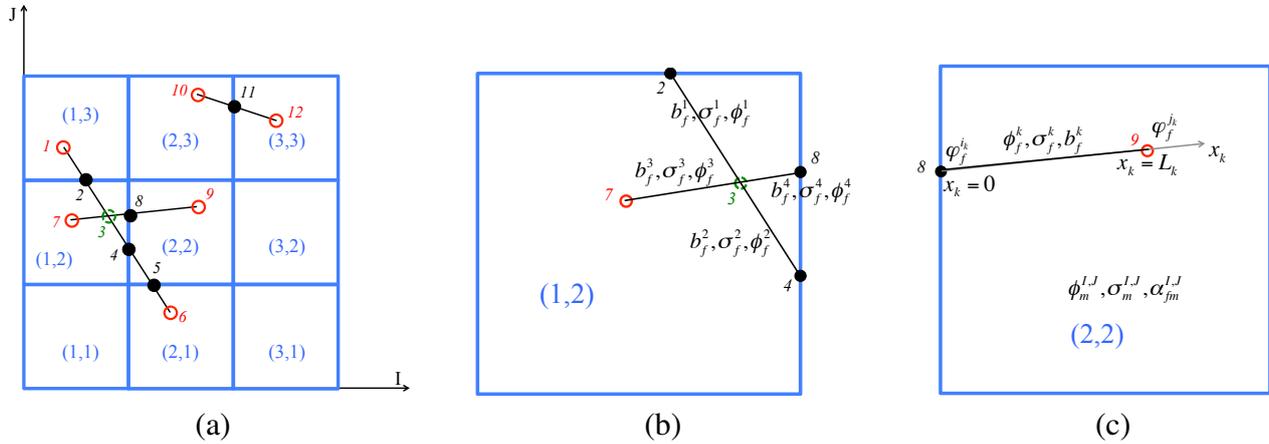


FIGURE 3 – Discrétisation du modèle DDP_2D à l'échelle (a) du domaine, (b) de l'intersection entre fractures, et (c) de la fracture (Roubinet and Irving, 2014).

À l'échelle de la fracture, en considérant un segment de fracture 1D d'indice k délimité par des noeuds i_k et j_k et ayant une conductivité électrique σ_f^k constante sur sa longueur, l'équation (2) conduit à l'expression suivante impliquant le potentiel électrique ϕ_f^k le long du segment :

$$-\sigma_f^k \frac{\partial^2 \phi_f^k}{\partial x_k^2} = -Q_{fm}, \quad Q_{fm} = -\alpha_{fm}^{I,J} (\phi_m^{I,J} - \phi_f^k), \quad (3)$$

où x_k désigne la variable spatiale allant de i_k à j_k , et le terme source Q_{fm} correspond à l'échange de courant électrique entre le segment de fracture et la matrice environnante. En considérant les conditions aux limites de Dirichlet $\varphi_f^{i_k}$ et $\varphi_f^{j_k}$ aux noeuds i_k et j_k du segment, le potentiel ϕ_f^k est exprimé analytiquement comme

$$\phi_f^k(x_k) = \beta(x_k) \varphi_f^{i_k} + \frac{\gamma(x_k)}{\gamma(L_k)} \varphi_f^{j_k} + \left[1 - \frac{\gamma(x_k)}{\gamma(L_k)} - \beta(x_k) \right] \phi_m^{I,J} \quad (4)$$

avec

$$\begin{aligned}\beta(x_k) &= \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right) - \frac{\gamma(x_k)}{\gamma(L_k)} \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right), \quad \Gamma_{I,J}^k \equiv \alpha_{fm}^{I,J} / \sigma_f^k \\ \gamma(x_k) &= \exp\left(-\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right) - \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right).\end{aligned}\quad (5)$$

À l'échelle du réseau de fracture, l'équation (2) est intégrée sur un petit volume V_i contenant chaque intersection i , et l'application du théorème de divergence de Gauss donne les équations de conservation suivantes sous forme continue et discrète

$$\int_{S_i} \sigma \nabla \phi \cdot \vec{n}_{S_i} dS = 0, \quad \sum_{k=1}^{N_i} b_f^k \sigma_f^k \frac{\partial \phi_f^k}{\partial x_k} \Big|_{x_k=0} = 0, \quad (6)$$

où S_i est le contour de surface de V_i , \vec{n}_{S_i} est son vecteur normal unitaire extérieur, N_i est le nombre de segments ayant pour extrémité commune le noeud i et b_f^k et σ_f^k sont l'ouverture et la conductivité électrique du segment k .

En utilisant l'expression analytique (4) du potentiel électrique le long du segment, la dérivée du potentiel du segment dans l'équation discrétisée (6) peut être exprimée comme suit avec prise en compte des échanges de flux de courant fracture-matrice

$$\frac{\partial \phi_f^k}{\partial x_k} = a_{i_k} \varphi_f^{i_k} + a_{j_k} \varphi_f^{j_k} + a_{I,J} \phi_m^{I,J}, \quad (7)$$

avec

$$\begin{aligned}a_{i_k} &= \sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right) + \frac{\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \lambda(x_k)}{\gamma(L_k)} \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right), \quad a_{j_k} = -\frac{\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \lambda(x_k)}{\gamma(L_k)} \\ a_{I,J} &= -\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right) + \frac{\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \lambda(x_k)}{\gamma(L_k)} [1 - \exp(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k)], \\ \lambda(x_k) &= \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right) + \exp\left(-\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} x_k\right).\end{aligned}\quad (8)$$

La combinaison des expressions (6) et (7) pour chaque noeud du domaine conduit à un système linéaire où les inconnues sont les valeurs du potentiel électrique en régime permanent aux noeuds des segments de fracture et dans les blocs matriciels.

Ce système est complété par l'expression de la conservation de charge à l'échelle des blocs matriciels avec les échanges Q_{fm} pris en compte comme un terme source. En intégrant l'équation (2) sur le volume de contrôle de la matrice $V_{I,J}$ et en utilisant à nouveau le théorème de divergence de Gauss, nous obtenons

$$-\int_{S_{I,J}} (\sigma_m \nabla \phi_m) \cdot \vec{n}_{S_{I,J}} dS = \int_{V_{I,J}} Q_{fm} dV, \quad (9)$$

où $S_{I,J}$ correspond au contour de surface de $V_{I,J}$ et \vec{n}_{S_i} est son vecteur normal unitaire extérieur. Le côté gauche de l'équation (9) peut être discrétisé en utilisant la méthode des volumes finis comme suit

$$-\int_{S_{I,J}} (\sigma_m \nabla \phi_m) \cdot \vec{n}_{S_{I,J}} dS = \sigma_m^E (\phi_m^{I,J} - \phi_m^{I-1,J}) - \sigma_m^W (\phi_m^{I+1,J} - \phi_m^{I,J}) \\ + \sigma_m^S (\phi_m^{I,J} - \phi_m^{I,J-1}) - \sigma_m^N (\phi_m^{I,J+1} - \phi_m^{I,J}). \quad (10)$$

Les coefficients σ_m^E , σ_m^W , σ_m^S et σ_m^N correspondent respectivement aux directions est, ouest, sud et nord et sont exprimés par

$$\sigma_m^E = \frac{\Delta y}{\Delta x} \sigma_m^{[(I-1,J),(I,J)]}, \quad \sigma_m^W = \frac{\Delta y}{\Delta x} \sigma_m^{[(I,J),(I+1,J)]}, \quad \sigma_m^S = \frac{\Delta x}{\Delta y} \sigma_m^{[(I,J),(I,J-1)]}, \quad \sigma_m^N = \frac{\Delta x}{\Delta y} \sigma_m^{[(I,J),(I,J+1)]}$$

où Δx et Δy sont respectivement les longueurs longitudinale et transversale des blocs, et les termes $\sigma_m^{[(I,J),(K,L)]}$ représentent la conductivité de la matrice entre les blocs (I, J) et (K, L) et sont évalués comme la moyenne des conductivités de ces blocs.

En considérant (i) l'échange de flux de courant le long des segments de fractures situés dans le volume de contrôle $V_{I,J}$, (ii) l'expression de Q_{fm} donnée dans l'équation (3), et (iii) la définition analytique (4) de ϕ_f^k , le côté droit de l'équation (9) peut être réécrit comme

$$\int_{V_{I,J}} Q_{fm} dV = \phi_m^{I,J} \alpha_{fm}^{I,J} \left[- \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} L_k + \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} c_{I,J} \right] + \alpha_{fm}^{I,J} \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} [c_{i_k} \phi_f^{i_k} + c_{j_k} \phi_f^{j_k}] \quad (11)$$

avec $N_{I,J}^f$ le nombre de segments de fractures contenus dans $V_{I,J}$, $c_{I,J} = L_k - c_{j_k} - c_{i_k}$ et les constantes c_{i_k} et c_{j_k} exprimées comme

$$c_{i_k} = \frac{\exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right) - 1}{\sqrt{\Gamma_{I,J}^k}} + \frac{\exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right)}{\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} \gamma(L_k)} \times \left[\exp\left(-\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right) + \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right) - 2 \right] \\ c_{j_k} = - \frac{\exp\left(-\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right) + \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I,J}^k} L_k\right) - 2}{\gamma(L_k) \sqrt{\Gamma_{I,J}^k}}. \quad (12)$$

La combinaison des expressions (10) et (11) mène à l'expression de conservation de charge pour le bloc matriciel (I, J) dont l'application à chaque bloc matriciel du domaine conduit à un système linéaire où les inconnues sont à nouveau les valeurs du potentiel électrique en régime permanent aux noeuds des segments de fractures et dans les blocs matriciels.

La combinaison finale de ce système linéaire développé pour la zone matricielle avec le système linéaire dérivé pour le réseau de fractures, permet de déterminer le

potentiel électrique aux noeuds du domaine. En se basant sur les études existantes sur les échanges fracture-matrice en hydrogéologie (Roubinet et al., 2012; Lee et al., 2001; Li and Lee, 2008), le coefficient d'échange de l'équation (3) est défini comme $\alpha_{fm}^{I,J} = \min(\sigma_m^{I,J}, \sigma_f^{I,J})/d$ avec $\sigma_{I,J}^f$ la moyenne des conductivités des fractures contenues dans le volume de contrôle $V_{I,J}$ et d la distance normale moyenne entre les fractures et le volume de bloc matriciel. La démonstration complète des dérivations résumées ci-dessus, ainsi que la validation de l'approche DDP_2D, peuvent être trouvées dans Roubinet and Irving (2014).

Le modèle DDP_2D, ainsi que le modèle DDP_2.5D présenté par la suite, ont été implémentés en C++ et les logiciels correspondants sont déposés auprès du CNRS sous les noms ERT_DDP_2D (#12420-01) et ERT_DDP_2.5D (#12420-02).

Extension aux représentations 2.5D

Afin d'avoir une représentation réaliste des systèmes lors de l'interprétation de données d'expériences de résistivité électrique menées dans le milieu naturel, le modèle DDP_2D est étendu à des configurations 2.5D. Ces représentations sont largement utilisées pour l'interprétation de données de résistivité électrique dans des milieux poreux équivalents et reposent sur des hypothèses de représentation du milieu qui sont décrites dans Dey and Morrison (1979) et utilisées ci-dessous pour les milieux fracturés. La formulation 2.5D revient à décomposer le problème 3D en une série de problèmes 2D dans le domaine de Fourier. Le potentiel électrique est donc déterminé dans le domaine 2D de Fourier pour plusieurs valeurs de la variable de Fourier, puis inversé pour obtenir le résultat dans le domaine réel.

La formulation DDP_2.5D est dérivée en considérant l'équation de conservation de la charge (2) en 3D exprimée comme suit

$$-\nabla \cdot \left[\sigma(x, y, z) \vec{\nabla} \phi(x, y, z) \right] = I \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (13)$$

avec la conductivité électrique $\sigma(x, y, z)$, le potentiel électrique $\phi(x, y, z)$, l'injection d'un courant électrique I à la position (x_0, y_0, z_0) , et la fonction delta de Dirac $\delta(\cdot)$.

En supposant que (i) la conductivité électrique σ est constante dans la direction y (c'est-à-dire, $\sigma(x, y, z) = \sigma(x, z)$ et $\partial_y \sigma = 0$); (ii) le problème considéré est symétrique dans la direction y (c'est-à-dire, $\phi(x, y, z) = \phi(x, -y, z)$); et (iii) l'injection de courant se trouve dans le plan $y = 0$ (c'est-à-dire, $y_0 = 0$), l'équation (13) peut être exprimée dans le domaine de Fourier

$$-\nabla \cdot \left[\sigma(x, z) \vec{\nabla} \bar{\phi}(x, \omega, z) \right] + \omega^2 \sigma(x, z) \bar{\phi}(x, \omega, z) = \frac{I}{2} \delta(x - x_0) \delta(z - z_0), \quad (14)$$

où $\bar{\phi}(x, \omega, z)$ est la transformée en cosinus de Fourier de $\phi(x, y, z)$ et ω est le nombre d'onde du domaine de Fourier. Les distributions des potentiels ϕ et $\bar{\phi}$ sont définies

comme (Bateman, 1954)

$$\bar{\phi}(x, \omega, z) = \int_0^\infty \phi(x, y, z) \cos(\omega y) dy, \quad \phi(x, y, z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \bar{\phi}(x, \omega, z) \cos(\omega y) d\omega. \quad (15)$$

À l'échelle du segment de fractures, l'équation de conservation de la charge est exprimée dans le domaine de Fourier

$$-\sigma_f^k \partial_{x_f^k}^2 \bar{\phi}_f^k + \omega^2 \sigma_f^k \bar{\phi}_f^k = -\bar{Q}_{fm}^k, \quad \bar{Q}_{fm}^k = -\alpha_{fm}^{I_k, J_k} (\bar{\phi}_m^{I_k, J_k} - \bar{\phi}_f^k) \quad (16)$$

avec $\bar{\phi}_f^k = \bar{\phi}_f^k(x_f^k)$ la transformée de Fourier du potentiel électrique moyenné sur l'ouverture de la fracture, \bar{Q}_{fm}^k la transformée de Fourier du terme source représentant les échanges fracture-matrice, et $\bar{\phi}_m^{I_k, J_k}$ la transformée de Fourier du potentiel électrique dans la matrice.

En considérant les conditions aux limites de Dirichlet $\bar{\varphi}_f^{i_k}$ et $\bar{\varphi}_f^{j_k}$ dans le domaine de Fourier, $\bar{\phi}_f^k$ est exprimé analytiquement comme

$$\bar{\phi}_f^k(x_k, \omega) = \beta_w(x_k) \bar{\varphi}_f^{i_k} + \frac{\gamma_w(x_k)}{\gamma_w(L_k)} \bar{\varphi}_f^{j_k} + \frac{\Gamma_{I_k, J_k}^k}{\Gamma_{I_k, J_k}^k + \omega^2} \left[1 - \beta_w(x_k) - \frac{\gamma_w(x_k)}{\gamma_w(L_k)} \right] \bar{\phi}_m^{I_k, J_k} \quad (17)$$

avec

$$\beta_w(x_k) = \exp\left(x_k \sqrt{\Gamma_{I_k, J_k}^k + \omega^2}\right) - \frac{\gamma_w(x_k)}{\gamma_w(L_k)} \exp\left(L_k \sqrt{\Gamma_{I_k, J_k}^k + \omega^2}\right),$$

$$\gamma_w(x_k) = \exp\left(-x_k \sqrt{\Gamma_{I_k, J_k}^k + \omega^2}\right) - \exp\left(x_k \sqrt{\Gamma_{I_k, J_k}^k + \omega^2}\right), \quad \Gamma_{I_k, J_k}^k \equiv \alpha_{fm}^{I_k, J_k} / (b_f^k \sigma_f^k). \quad (18)$$

À l'échelle du réseau de fractures, la conservation de la charge à chaque noeud d'intersection de fractures est appliquée en intégrant l'équation (14) sur l'intersection. Par souci de simplification, il est considéré que chaque noeud i est partagé par N_i segments de fractures ayant la même ouverture b_f^i et la même conductivité σ_f^i , et que la surface de cette intersection peut être approximée par $b_f^i \times b_f^i$. L'application du théorème de divergence de Gauss conduit à

$$b_f^i \omega^2 \sigma_f^i \bar{\phi}_f^i|_{x_f^i=0} - \sigma_f^i \sum_{k=1}^{N_i} \partial_{x_f^k} \bar{\phi}_f^k|_{x_f^k=0} = 0. \quad (19)$$

En combinant les équations (17) et (19), une première partie du système linéaire à résoudre est obtenue avec des expressions formulées en termes des potentiels électriques (inconnus) aux extrémités et intersections des fractures et dans les blocs matriciels.

À l'échelle de la matrice, la conservation des charges est appliquée dans le domaine de Fourier en intégrant l'équation (14) sur chaque volume $V_{I,J}$ des blocs de matrice (I, J) menant à

$$-\int_{V_{I,J}} \nabla \cdot \left(\sigma_m \vec{\nabla} \bar{\phi}_m^{I,J} \right) dV + \int_{V_{I,J}} \omega^2 \sigma_m \bar{\phi}_m^{I,J} dV = \int_{V_{I,J}} \bar{Q}_{fm}^k dV. \quad (20)$$

En utilisant le théorème de divergence de Gauss, le côté gauche de l'équation (20) est discrétisée comme

$$-\int_{V_{I,J}} \nabla \cdot \left(\sigma_m \vec{\nabla} \bar{\phi}_m^{I,J} \right) dV = C_{I,J} \bar{\phi}_m^{I,J} + C_{I,J}^W \bar{\phi}_m^{I-1,J} + C_{I,J}^E \bar{\phi}_m^{I+1,J} + C_{I,J}^S \bar{\phi}_m^{I,J-1} + C_{I,J}^N \bar{\phi}_m^{I,J+1} \quad (21)$$

avec

$$C_{I,J}^W = -\frac{\Delta z}{\Delta x} \mathcal{H}_{(I-1,J),(I,J)}, \quad C_{I,J}^E = -\frac{\Delta z}{\Delta x} \mathcal{H}_{(I+1,J),(I,J)}, \quad C_{I,J}^S = -\frac{\Delta x}{\Delta z} \mathcal{H}_{(I,J-1),(I,J)},$$

$$C_{I,J}^N = -\frac{\Delta x}{\Delta z} \mathcal{H}_{(I,J+1),(I,J)}, \quad C_{I,J} = \omega^2 \sigma_m^{I,J} \Delta x \Delta z - C_{I,J}^W - C_{I,J}^E - C_{I,J}^S - C_{I,J}^N, \quad (22)$$

$\mathcal{H}_{(K,L),(I,J)}$ étant la moyenne harmonique de la conductivité électrique des blocs matriciels (K, L) et (I, J) .

Le membre de droite de l'équation (20) peut être exprimé par

$$\int_{V_{I,J}} \bar{Q}_{fm}^k dV = \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} \int_0^{L_k} \bar{Q}_{fm}^k dV = -\alpha_{fm}^{I,J} \bar{\phi}_m^{I,J} \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} L_k + \alpha_{fm}^{I,J} \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} \bar{\Phi}_f^k \quad (23)$$

avec $N_{I,J}^f$ le nombre de fractures contenues dans le volume du bloc matriciel $V_{I,J}$ et $\bar{\Phi}_f^k$ la valeur intégrée de $\bar{\phi}_f^k$ le long du segment de fractures k , c'est-à-dire $\bar{\Phi}_f^k = \int_0^{L_k} \bar{\phi}_f^k dx_k$. En intégrant l'expression (17) pour définir $\bar{\phi}_f^k$, on obtient l'expression discrétisée finale de l'équation (20)

$$\left[C_{I,J} + \alpha_{fm}^{I,J} \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} (L_k - D_{I,J}) \right] \bar{\phi}_m^{I,J} + C_{I,J}^W \bar{\phi}_m^{I-1,J} + C_{I,J}^E \bar{\phi}_m^{I+1,J} + C_{I,J}^S \bar{\phi}_m^{I,J-1} + C_{I,J}^N \bar{\phi}_m^{I,J+1}$$

$$- \alpha_{fm}^{I,J} \sum_{k=1}^{N_{I,J}^f} \left(D_{i_k} \bar{\phi}_f^{i_k} + D_{j_k} \bar{\phi}_f^{j_k} \right) = 0. \quad (24)$$

avec

$$D_{i_k} = \frac{\zeta_w(L_k) - 1}{\sqrt{\Gamma_{I_k,J_k}^k + \omega^2}} - \frac{2 \exp\left(\sqrt{\Gamma_{I_k,J_k}^k + \omega^2} L_k\right)}{\gamma_w(L_k) \sqrt{\Gamma_{I_k,J_k}^k + \omega^2}}, \quad D_{j_k} = \frac{2 - \lambda_w(L_k)}{\gamma_w(L_k) \sqrt{\Gamma_{I_k,J_k}^k + \omega^2}}$$

$$D_{I,J} = \frac{\Gamma_{I,J}^k}{\Gamma_{I,J}^k + \omega^2} (L_k - D_{j_k} - D_{i_k}). \quad (25)$$

Dans toutes les études utilisant le modèle DDP_2.5D, quatre valeurs de la variable de Fourier sont utilisées correspondant aux valeurs proposées dans Xu et al. (2000). La validation de cette approche et le détail des valeurs de ces variables peuvent être trouvés dans Caballero Sanz et al. (2017) avec la description complète des dérivations qui sont résumées ci-dessus.

Extension au potentiel spontané

En régime permanent, considérons la vitesse de Darcy \mathbf{u} décrite par la loi de Darcy et l'équation de conservation de la masse

$$\mathbf{u} = -K\nabla h, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (26)$$

avec la charge hydraulique h et la conductivité hydraulique $K = \kappa\rho g/\mu$, κ étant la perméabilité, ρ la densité du fluide, g l'accélération gravitationnelle et μ la viscosité dynamique du fluide. Compte tenu de la présence d'une double couche électrique qui se traduit par un excès de charge dans l'eau interstitielle, l'eau traversant le milieu entraîne une partie de cet excès de charge \bar{Q}_v^{eff} qui génère une densité de courant électrocinétique \mathbf{J}_s , qui peut être définie comme $\mathbf{J}_s = \bar{Q}_v^{eff} \mathbf{u}$ (Titov et al., 2002).

L'extension de l'approche de modélisation DDP_2D au potentiel spontané est faite comme suit.

(1) Le problème d'écoulement de fluide défini par les équations (26) est résolu par une formulation hydrogéologique du modèle DDP_2D en considérant (i) des fractures de perméabilité $\kappa_f = (b_f)^2/12$ avec b_f l'ouverture de la fracture (Snow, 1969), et (ii) les échanges de fluide entre fractures et matrice caractérisés par la vitesse de Darcy $u_{fm} = -\frac{K_m(h_m-h_f)}{d}$ avec K_m la conductivité hydraulique de la matrice, h_m et h_f les charges hydrauliques de la matrice et de la fracture, et d la distance normale moyenne entre la fracture et chaque point du bloc matriciel (Lee et al., 2001; Li and Lee, 2008).

(2) Le problème de conservation de la charge électrique prenant en compte la densité de courant électrocinétique \mathbf{J}_s précédemment définie, est modélisé en considérant le terme $-\nabla \cdot \mathbf{J}_s$ comme un terme source de l'équation de conservation de la charge (2) (Sill, 1983). Cette densité de courant étant dénotée $\mathbf{J}_{s,f}$ et $\mathbf{J}_{s,m}$ dans les fractures et la matrice, le modèle DDP_2D est modifié comme suit.

À l'échelle de la fracture, l'équation de conservation de la charge 2D est considérée

$$-\sigma_f \left(\partial_{x_f}^2 \phi_f + \partial_{y_f}^2 \phi_f \right) = -\partial_{x_f} J_{s,f}^{x_f} - \partial_{y_f} J_{s,f}^{y_f}, \quad (27)$$

avec σ_f la conductivité électrique (constante) de la fracture, x_f et y_f les variables spatiales parallèle et perpendiculaire à la fracture considérée, ϕ_f le potentiel électrique dans la fracture, et $J_{s,f}^{x_f}$ et $J_{s,f}^{y_f}$ les composantes de $\mathbf{J}_{s,f}$ dans les directions x_f et y_f . En supposant que la variation de $J_{s,f}^{x_f}$ est négligeable le long de la fracture, la moyenne de l'équation (27) sur l'ouverture de la fracture s'exprime comme

$$-\sigma_f \partial_{x_f}^2 \bar{\phi}_f = -Q_{fm}^E - Q_{fm}^{SP}, \quad (28)$$

avec $\bar{\phi}_f = \frac{1}{b_f} \int_0^{b_f} \phi_f(x_f, y_f) dy_f$ le potentiel électrique moyenné sur l'ouverture de la fracture, et $Q_{fm}^E = -\frac{\sigma_f}{b_f} [\partial_{y_f} \phi_f(y_f=b_f) - \partial_{y_f} \phi_f(y_f=0)]$ et $Q_{fm}^{SP} = \frac{1}{b_f} [J_{s,f}^{y_f}(y_f=b_f) - J_{s,f}^{y_f}(y_f=0)]$ les termes d'échanges fracture-matrice liés aux variations de potentiel électrique et de charge hydraulique, le dernier terme pouvant être exprimé comme $Q_{fm}^{SP} = \bar{Q}_{v,f}^{eff} u_{fm}/b_f$.

À l'échelle du réseau de fractures et de la matrice, la conservation de la charge intégrée sur chaque intersection et bloc matriciel, respectivement, donne

$$- \int_{C_i} \sigma_f \nabla \phi_f \cdot \vec{n}_{C_i} dC_i = - \int_{C_i} \bar{Q}_{v,f}^{eff} \mathbf{u}_f \cdot \vec{n}_{C_i} dC_i, \quad (29)$$

$$- \int_{C_m} \sigma_m \nabla \phi_m \cdot \vec{n}_{C_m} dC_m = - \int_{C_m} \bar{Q}_{v,m}^{eff} \mathbf{u}_m \cdot \vec{n}_{C_m} dC_m + \int_{V_m} (Q_{fm}^E + Q_{fm}^{SP}) dV_m, \quad (30)$$

avec \mathbf{u}_f la vitesse de Darcy du fluide dans la fracture, V_m et C_m le volume et le contour du bloc matriciel et \vec{n}_{C_m} le vecteur normal unitaire extérieur. Les termes de droite de ces deux équations sont pris en compte comme des termes source du système, avec les termes de droite de la seconde équation qui correspondent à la densité de courant de la source électrocinétique $\mathbf{J}_{s,m}$ échangée entre les blocs matriciels et les échanges fracture-matrice se produisant à l'intérieur de chaque bloc.

La validation de cette méthode, ainsi que la démonstration complète de la dérivation qui est résumée ci-dessus, peuvent être trouvées dans Roubinet et al. (2016).

3.1.2 Propriétés topologiques, hydrauliques et électriques à plusieurs échelles

Propriétés topologiques et électriques à l'échelle du laboratoire

De nombreuses expériences en laboratoire et sur le terrain suggèrent que les propriétés électriques des roches fracturées peuvent fournir des informations critiques concernant les propriétés topologiques des réseaux de fractures sous-jacents. Cependant, un manque d'études numériques dédiées à des représentations réalistes des milieux fracturés nous empêche d'évaluer, de manière systématique, les relations entre propriétés électriques et topologiques dans des domaines complexes pour lesquels l'existence du VER est questionnable. Pour étudier ce problème, l'approche de modélisation DDP_2D présentée précédemment est utilisée pour analyser numériquement les propriétés topologiques et électriques d'une large gamme de milieux poreux fracturés avec une description explicite des fractures et la prise en compte des interactions fracture-matrice.

La définition du lien entre les propriétés topologiques et électriques des échantillons de roche se fait généralement en étudiant plusieurs paramètres électriques et en analysant comment ces paramètres dépendent de la porosité de l'échantillon. En considérant une roche entièrement saturée ayant une conductivité électrique σ , pour

laquelle la conductivité de surface est négligeable par rapport à la conductivité du fluide σ_w , l'impact des propriétés topologiques sur la conductivité électrique peut être caractérisé par le facteur de formation électrique $F = \sigma_w/\sigma$. Ce paramètre est souvent lié à la porosité du système ϕ en utilisant la loi empirique d'Archie $F = \phi^{-m}$ (Archie, 1942), où l'exposant d'Archie (ou facteur de cimentation) m est proche de 2 pour la porosité granulaire et environ 1 pour la porosité de type fissuraire (Schön, 2011). Dans ce dernier cas avec des roches à faible porosité, la relation $F = \tau/\phi$, où τ est définie comme la tortuosité électrique, est également utilisée (Walsh and Brace, 1984; Pape et al., 1985; Katsube and Hume, 1987), et correspond à un cas particulier de la loi d'Archie étendue $F = a\phi^{-m}$ (Selley and Sonnenberg, 2015a,b) avec la constante géométrique $a = \tau$ et $m = 1$. Comme les paramètres électriques m et τ fournissent des informations significatives et complémentaires sur les systèmes considérés, ils sont utilisés pour caractériser les propriétés topologiques des échantillons de roches fracturées, parfois indépendamment de la relation entre F et ϕ (Wright and Cashman, 2014; Wright et al., 2009; Violay et al., 2010; Ildefonse and Pezard, 2001; Le Pennec et al., 2001; Pezard et al., 2000). Plus précisément, m est lié à la géométrie des pores du système et caractérise la façon dont le courant électrique échantillonne la porosité interconnectée (Le Pennec et al., 2001; Revil and Cathles, 1999), tandis que τ est lié à l'irrégularité des chemins du courant électrique et caractérise la complexité de ces chemins à travers le système (Le Pennec et al., 2001; Pezard, 1990; Walsh and Brace, 1984). Pour analyser comment les paramètres électriques F , m et τ dépendent de la porosité ϕ , des propriétés du réseau de fractures et des échanges matrice-fracture, ces paramètres sont évalués avec les définitions suivantes (Sunberg, 1932; Archie, 1942; Brace et al., 1965) :

$$F = \sigma_w/\sigma, \quad m = -\log F/\log \phi, \quad \tau = F\phi. \quad (31)$$

En utilisant la méthode DDP_2D décrite précédemment, le problème aux limites suivant est résolu

$$-\nabla \cdot (\sigma_{\mathbf{x}} \nabla \Phi_{\mathbf{x}}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (32a)$$

$$\Phi_{\mathbf{x}} = \Phi_i^*, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_i \text{ with } i = 0, 1 \quad (32b)$$

$$\sigma_{\mathbf{x}} \frac{\partial \Phi_{\mathbf{x}}}{\partial n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_i \text{ with } i = 2, 3, \quad (32c)$$

où $\sigma_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ et $\Phi_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ sont respectivement la conductivité et le potentiel électrique dans le domaine carré à deux dimensions Ω entouré par les bordures gauche, droite, supérieure et inférieure Γ_0 , Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 , respectivement. En fixant les conditions de Dirichlet Φ_0^* et Φ_1^* à 1 V et 0 V, respectivement, la conductivité électrique effective σ est définie comme $\sigma = J_1$ avec J_1 le flux électrique quittant le côté droit du domaine. Cette définition est cohérente avec les expériences de laboratoire qui ont été menées sur des échantillons de roche (Ildefonse and Pezard, 2001; Pezard et al., 2000; Violay et al., 2010; Wright and Cashman, 2014). Les simulations sont

menées en considérant l'ouverture de fractures b_f fixée à 10^{-4} m, la conductivité électrique des fractures égale à la conductivité du fluide $\sigma_w = 1$ S/m, et la conductivité électrique de la matrice déterminée en utilisant la loi d'Archie $\sigma_b = \sigma_w \phi_b^{m_b}$ avec une faible porosité de la matrice ϕ_b fixée à 0.5% et l'exposant d'Archie de la matrice m_b fixé à 2, ce qui donne $\sigma_b = 2.5 \times 10^{-5}$ S/m (Pezard et al., 2000).

La Figure 4 montre des exemples de milieux fracturés considérés dans des domaines de taille unitaire en considérant une distribution aléatoires des positions et orientations des fractures dont les longueurs sont définies soit à partir d'une distribution uniforme allant de L_{min} à L_{max} , soit d'une loi de puissance paramétrée par la longueur de fracture minimale L_{min} et l'exposant a . La densité de fractures est caractérisée par le paramètre de percolation $p = \sum_{i=1}^{N_f} l_i^2 / L^2$, où N_f est le nombre de fractures et l_i la longueur de la fracture i (Bour and Davy, 1997). Les domaines poreux fracturés finaux sont composés de la matrice environnante et du réseau de fractures interconnecté, qui est défini comme le réseau de fractures qui relie les côtés gauche et droit du domaine. Si il n'y a pas de fractures reliant les côtés gauche et droit du domaine, la conductivité électrique globale est définie par la conductivité de la matrice. Les réseaux de fractures sont générés en fixant L_{min} à 10^{-2} m et L_{max} à 1, 0.5, 0.2, 0.1 et 0.05 m pour les longueurs de fractures uniformément réparties, et le paramètre a à 1.5, 2, 2.5, 3 et 3.5 pour les longueurs de fractures réparties selon la loi de puissance.

Les propriétés de l'équation (31) sont calculées pour différentes simulations de ces réseaux, menant aux résultats exposés dans la Figure 5 et aux conclusions suivantes. (i) La représentation équivalente en système fracture-matrice avec des fractures parallèles (courbes pleines dénotées "Simple fracture-matrix systems" sur les Figures 5a) reproduit bien la relation entre F et ϕ pour les systèmes complexes avec des distributions de longueur uniforme présentant une forte densité de fractures ($p = 12$ et 18). (ii) Cette bonne reproduction peut être observée pour des réseaux de fractures peu denses ($p = 6$) si les valeurs de L_{ratio} sont assez grandes ($p = 6$ et $L_{ratio} = 1$ et 0.5). (iii) Pour des distributions de longueur en loi de puissance (Figure 5b), des conclusions similaires peuvent être tirées avec cependant une moins bonne qualité de la reproduction de la relation entre F et ϕ , en particulier pour les plus grandes valeurs du paramètre a . (iv) Pour les deux types de distributions de longueurs considérées, la relation entre F et ϕ ne peut pas être représentée par la loi d'Archie ($F = \phi^{-m}$) pour $p = 6$, alors que cette description est satisfaisante pour $p = 12$ et 18 avec m compris entre 1.3 et 1.5 (Figures 5c-d). Ces résultats montrent que les systèmes complexes fracture-matrice caractérisés par des réseaux de fractures peu denses (c'est-à-dire $p = 6$) ne peuvent pas être décrits par des relations pétrophysiques standards, car la densité de fractures n'est pas suffisamment élevée pour atteindre un VER au sens des propriétés électriques.

Sans s'inquiéter de l'existence d'un VER, comme c'est le cas dans les expériences

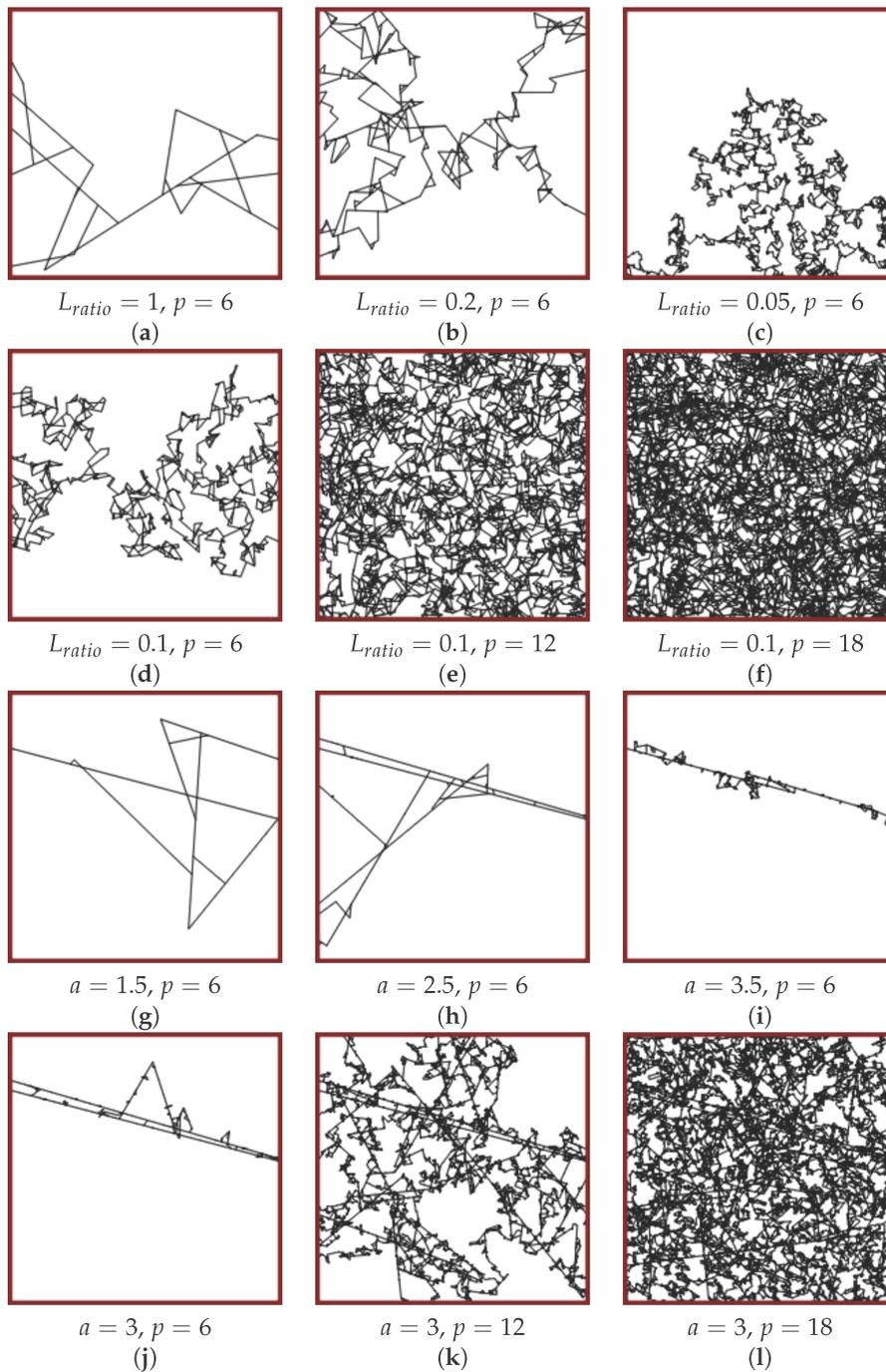


FIGURE 4 – Exemples de réseaux de fractures interconnectés avec les longueurs de fractures étant définies à partir d’une distribution (a-f) uniforme avec $L_{ratio} = L_{max}/L$ et (g-l) de loi de puissance (Roubinet et al., 2018).

menées en laboratoire, les paramètres m et τ sont évalués et analysés dans la publication (Roubinet et al., 2018) qui inclue aussi les résultats présentés ci-dessus. Les résultats obtenus montrent que les faibles valeurs de m sont associés aux fortes densités de fractures qui donnent accès à l’essentiel de la porosité du système. Au contraire, les larges valeurs de m caractérisent de faibles densités de fractures et de larges gammes de variation des distributions des longueurs, correspondant à des réseaux de fractures clairsemés pour lesquels certaines parties du domaine sont dif-

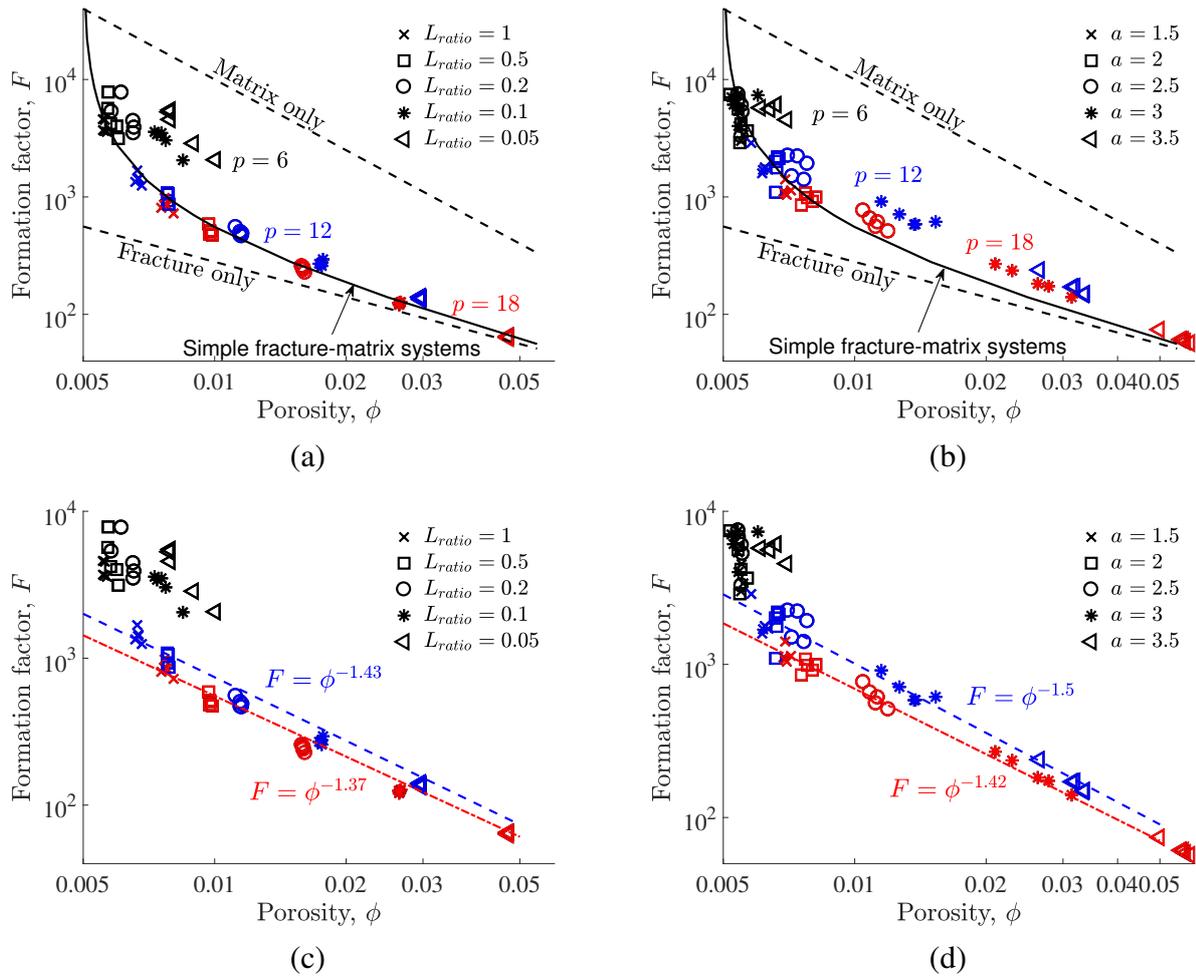


FIGURE 5 – Facteur de formation électrique F tracé en fonction de la porosité ϕ calculé numériquement (symbols) et analytiquement (lignes) pour des distributions uniforme (colonne de gauche) et de loi de puissance (colonne de droite) de longueurs des fractures. Cinq simulations de chaque combinaison des paramètres $\{L_{max}, p\}$ et $\{a, p\}$ sont considérées. Les solutions analytiques correspondent à des représentations simplifiées avec seulement des fractures parallèles ("Fracture only"), seulement la matrice ("Matrix only") et un système fracture-matrice équivalent avec des fractures parallèles ("Simple fracture-matrix systems") (Roubinet et al., 2018).

faciles d'accès. Dans les études existantes, ceci est équivalent aux domaines à pores larges reliés par des gorges étroites où les charges électriques circulent difficilement dans certaines parties de la porosité (e.g., Le Pennec et al., 2001; Revil and Cathles, 1999). Comme attendu, la tortuosité électrique τ augmente lorsque p diminue car la complexité du chemin suivi par le courant électrique est plus grande dans ces réseaux peu denses.

Autant pour m que pour τ , la forte variabilité des résultats obtenus pour les réseaux proches du seuil de percolation ($p = 6$) suggère qu'une grande quantité de données est nécessaire pour étudier le comportement de ces systèmes. Cette variabilité est étudiée en calculant les paramètres F , m et τ pour une centaine de réalisations de milieux fracturés. La large gamme de variation de ces paramètres qui est observée est liée aux propriétés des réseaux de fractures considérés et au contraste de pro-

priétés entre les fractures et la matrice. Les valeurs moyennées obtenues pour F sont présentées sur la Figure 6 avec le meilleur modèle pouvant représenter la relation entre F et ϕ . Ajouter le paramètre de porosité critique ϕ_c , qui est restreint entre 0 et la porosité minimale de la famille de fractures considérée, permet d'obtenir une reproduction acceptable des résultats avec le modèle de la théorie de la percolation $F = (\phi - \phi_c)^{-t}$ (Ghanbarian et al., 2014; Markov et al., 2014; Daigle et al., 2015).

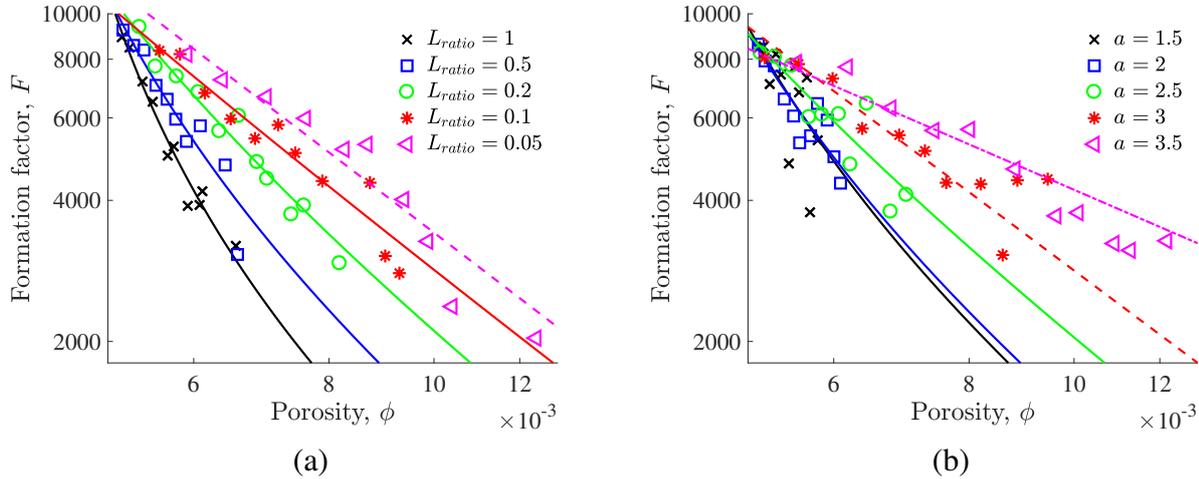


FIGURE 6 – Facteur de formation électrique F moyenné sur 100 simulations de milieux en fonction de la porosité ϕ pour des distributions de longueurs de fractures (a) uniforme et (b) de loi de puissance. Le meilleur ajustement entre les modèles $F = \phi^{-m}$ (lignes pointillées), $F = \tau/\phi$ (lignes pointillées serrés) et $F = (\phi - \phi_c)^{-t}$ (traits pleins) est montré pour chaque famille de fractures (Roubinet et al., 2018).

La prise en compte de la variabilité de ces milieux permet d'améliorer la reproduction par des modèles simples de la relation entre le facteur de formation et la porosité. Les résultats correspondants, dont le détail peut être trouvé dans Roubinet et al. (2018) comme indiqué précédemment, peuvent être synthétisés comme suit : (i) la formulation standard de la loi d'Archie conduit à des modèles satisfaisants (c'est-à-dire, $R^2 > 0.8$, R étant le coefficient de détermination du fit) pour $L_{ratio} = 0.2, 0.1$ et 0.05 , et $a = 3$ et 3.5 , (ii) la formulation $F = \tau'/\phi$ fournit le meilleur modèle pour $a = 3.5$, et (iii) le modèle de la théorie de la percolation et la formulation $F = \phi^{-m'}$ sont également adéquats (c'est-à-dire, même valeur de R^2) lorsque $L_{ratio} = 0.05$, et $a = 3$ et 3.5 . Par conséquent, bien que les réseaux de fractures au seuil de percolation soient associés à des distributions peu denses de fractures impliquant que la loi d'Archie ne s'applique pas aux systèmes fracture-matrice résultants, cette affirmation est discutable lorsque les systèmes considérés sont caractérisés par la présence de petites fractures qui interagissent avec la matrice environnante. Cela montre aussi qu'il est nécessaire d'analyser des valeurs moyennées sur un nombre de simulations assez importants pour avoir des données représentatives du comportement de ces milieux.

Propriétés hydrauliques et électriques à l'échelle du site

La caractérisation des milieux fracturés à partir des propriétés électriques de ces milieux se fait aussi à l'échelle du site avec des expériences de résistivité azimutale. Dans ce cas, l'anisotropie électrique observée sur le terrain est utilisée pour déduire les caractéristiques hydrauliques du milieu. Alors que la taille du VER et les caractéristiques de tenseur correspondantes pour la conductivité hydraulique (K) dans la roche fracturée ont fait l'objet de nombreuses recherches antérieures, très peu d'études ont porté sur la conductivité électrique (σ). Afin d'étudier la validité de déterminer les propriétés hydrauliques du milieu à partir de mesures géoélectriques, l'impact des propriétés du réseau de fracture sur la taille du VER et sur les caractéristiques des tenseurs effectifs des conductivités électrique et hydraulique est évalué. Pour cela, nous avons utilisé une approche statistique et numérique combinée où la taille du VER est estimée à partir de la variabilité de la conductivité observée à travers de multiples réalisations de réseaux de fractures stochastiques pour différentes tailles de domaine. Les réalisations sont initialement définies sur une région à grande échelle (100×100 m) à partir de laquelle un sous-domaine carré central ayant la longueur de côté souhaitée L est extrait (Figures 7a-b).

Les composantes des tenseurs de conductivité hydraulique et électrique correspondant à une réalisation DFN particulière sont estimées en simulant les écoulements de fluide et la circulation de courant électrique. Deux ensembles orthogonaux de conditions aux limites de Dirichlet sont considérés avec différentes valeurs de potentiel fixes sur deux côtés opposés et une variation linéaire entre ces valeurs sur les autres côtés (Figures 7c-d). En supposant que la conductivité dans le domaine 2D puisse être représentée par un tenseur de second ordre, la densité de flux résultante est

$$\mathbf{q} = -\mathbf{C} \nabla \phi, \quad (33)$$

où \mathbf{q} est le vecteur de densité de flux ($[\text{m s}^{-1}]$ ou $[\text{C m}^{-2} \text{ s}^{-1}]$), ϕ est le potentiel ($[\text{m}]$ ou $[\text{V}]$), et

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{xx} & C_{xy} \\ C_{yx} & C_{yy} \end{bmatrix} \quad (34)$$

est le tenseur de conductivité ($[\text{m s}^{-1}]$ ou $[\text{S m}^{-1}]$).

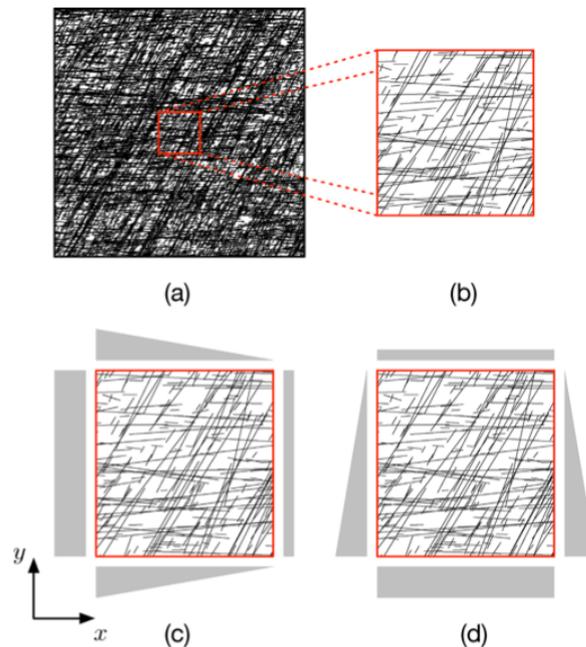


FIGURE 7 – (a) Exemple de réseaux de fractures générés à grande échelle. (b) Extraction du sous-domaine sur lequel les simulations sont effectuées. (c-d) Conditions aux limites de Dirichlet considérées pour évaluer les composantes des tenseurs de conductivité (Demirel et al., 2019).

Pour simuler les écoulements de fluide à travers les différentes réalisations DFN, la matrice est considérée comme imperméable en supposant que sa capacité à transmettre du fluide est plusieurs ordres de grandeur inférieure à celle du réseau de fractures (Cacas et al., 1990; Long et al., 1982; NAP, 2015). Les écoulements sont définis en considérant la loi cubique à l'échelle de la fracture (Snow, 1969) et la conservation de la masse à chaque intersection de fractures. Pour simuler la propagation de courant électrique, le modèle DDP_2D précédemment décrit est utilisé pour prendre en compte la circulation de courant dans le réseau de fractures et la matrice environnante.

L'efficacité des approches numériques utilisée permet de travailler sur des milieux fracturés denses et complexes comme ceux présentés en Figure 8. 100 générations de domaines par cas d'étude sont considérées pour observer une stabilisation de la moyenne et de l'écart type des composantes des tenseurs calculés. Les centres des fractures sont uniformément répartis dans les directions x et y sur tout le domaine avec une densité de fractures de 2 m^{-2} . Deux ensembles de fractures ayant des orientations différentes sont considérées, et les angles d'orientation des fractures au sein de chaque ensemble sont décrits par une distribution normale. Les longueurs de fractures suivent une loi de puissance et, suivant les cas, les ouvertures sont supposées constantes dans chaque ensemble de fractures ou distribuées selon une loi lognormale avec des cas où l'ouverture des fractures est corrélée à leur longueur.

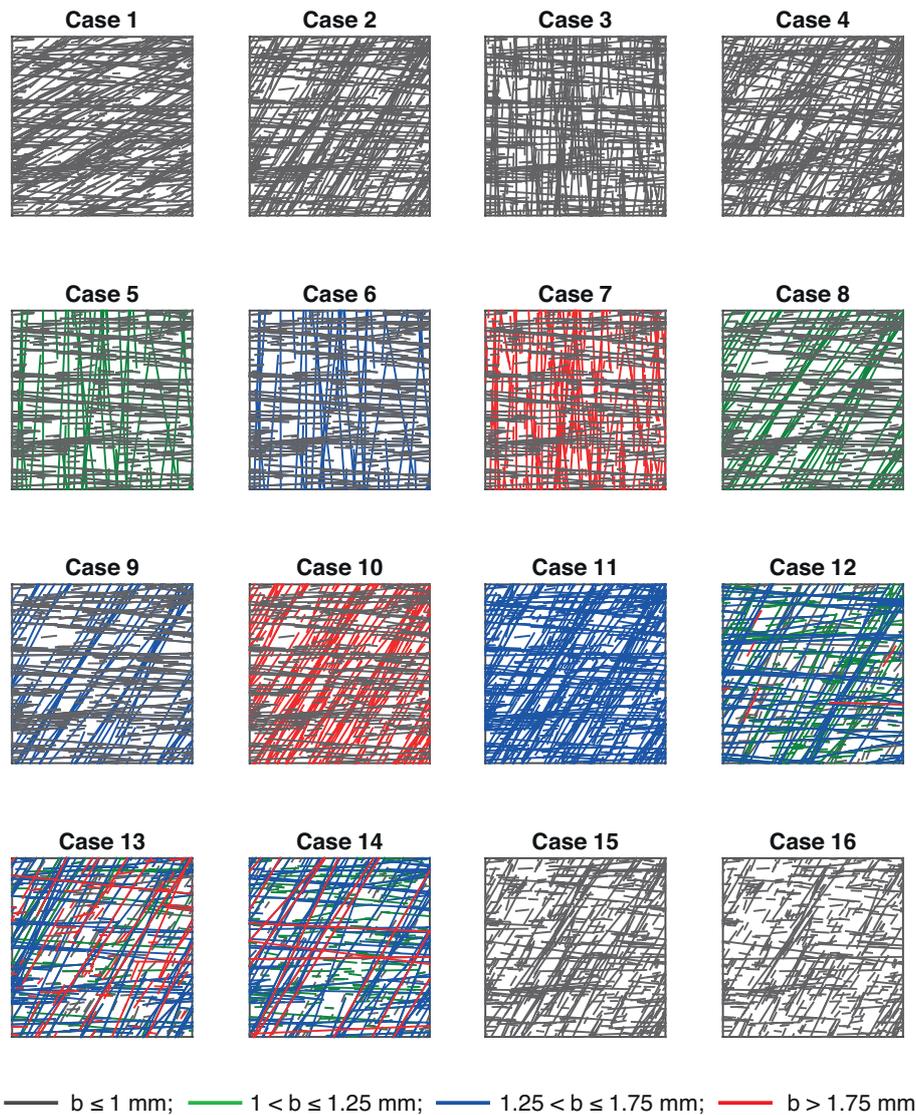


FIGURE 8 – Exemple de réseaux de fractures (16×16 m) correspondant aux différents cas test étudiés (Demirel et al., 2019).

Les principaux résultats obtenus dans ces travaux montrent des différences importantes entre le flux de fluide et de courant électrique dans les milieux fracturés conduisant à des différences significatives dans la taille du VER et les caractéristiques du tenseur pour σ et K . En raison de l'importance de la matrice dans le cas électrique et de la puissance unique (au lieu de la puissance cubique pour le fluide) pour relier le flux de courant électrique à l'ouverture, (i) le VER pour la conductivité électrique est toujours plus petit que celui pour la conductivité hydraulique, et (ii) le tenseur équivalent correspondant présente moins d'anisotropie, souvent avec des orientations principales notablement différentes. Ces résultats, qui sont présentés en détails dans Demirel et al. (2019), montrent que le lien entre les propriétés hydrauliques et électriques n'est pas trivial et que les interprétations obtenues à partir des données électriques ne peuvent pas être directement exportées aux propriétés hydrauliques.

3.1.3 Caractérisation des fractures à l'échelle du site

Expériences de Résistivité Electrique

Les outils de modélisation présentés dans la partie 3.1.1 permettent aussi d'évaluer les informations qui peuvent être extraites concernant la présence de fractures et leurs propriétés à partir d'expériences de prospection électrique (Electrical Resistivity Tomography, ERT). Ce type d'expériences, simulé avec l'approche DDP_2.5D, consiste à injecter un courant électrique entre deux électrodes (électrodes de courant A et B) et mesurer la différence de potentiel entre deux autres électrodes (électrodes de mesure M et N). En considérant la configuration d'électrodes présentée sur la Figure 9, la Figure 10 montre les résultats de ces simulations pour trois exemples de réseaux de fractures. Ces résultats sont exprimés en termes de résistivité apparente normalisée $\rho_a^* = \rho_a \times \rho^m / \rho_a^m$ avec ρ^m (ρ_a^m) la résistivité (apparente) de la matrice et $\rho_a = 2\pi s V_{MN}$, V_{MN} étant la différence absolue de potentiel entre les électrodes de mesure et $2\pi s$ un facteur de correction avec s l'espacement entre les électrodes. Les simulations sont effectuées en considérant une ouverture de fractures constante fixée à 10^{-3} m et un écart de conductivité électrique entre les fractures (plus conductrices) et la matrice de trois ordres de grandeur.

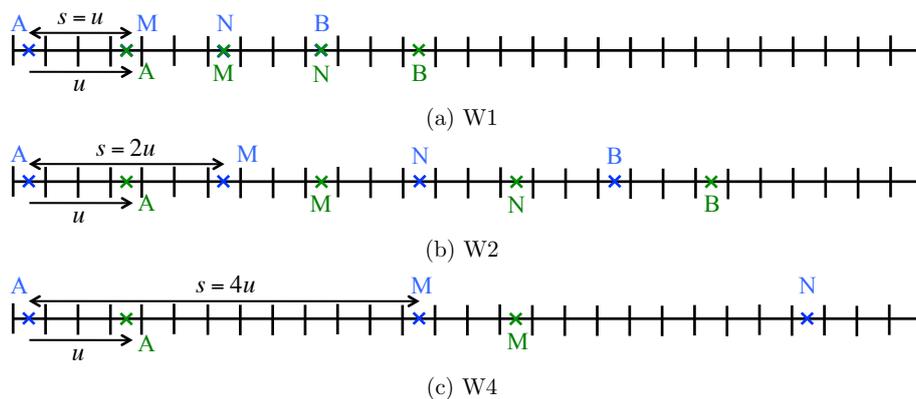


FIGURE 9 – Configurations d'électrodes Wenner avec s l'espacement entre les électrodes qui est égal à (a) u (W1), (b) $2u$ (W2) et (c) $4u$ (W4), les électrodes étant translatées de la distance $u = 0,9$ m entre chaque expérience. Les électrodes en bleu et vert correspondent respectivement à la première et seconde série de mesures, qui sont suivies de mesures successives par translation jusqu'à atteindre l'extrémité droite du domaine (Caballero Sanz et al., 2017).

Les résultats présentés sur la Figure 10, dont une description détaillée est fournie dans Caballero Sanz et al. (2017), peuvent être résumés comme suit. (1) La présence des fractures et leurs propriétés impactent la profondeur d'influence des électrodes qui est généralement définie comme étant égale à la moitié de l'espacement entre les électrodes (e.g., Binley and Kemna, 2005). Dans les cas considérés, nous observons des valeurs six fois plus grandes que cette valeur de référence définie pour les milieux poreux homogènes, impliquant que la profondeur du milieu caractérisée par la mesure de courant électrique est difficilement prévisible à priori pour les milieux frac-

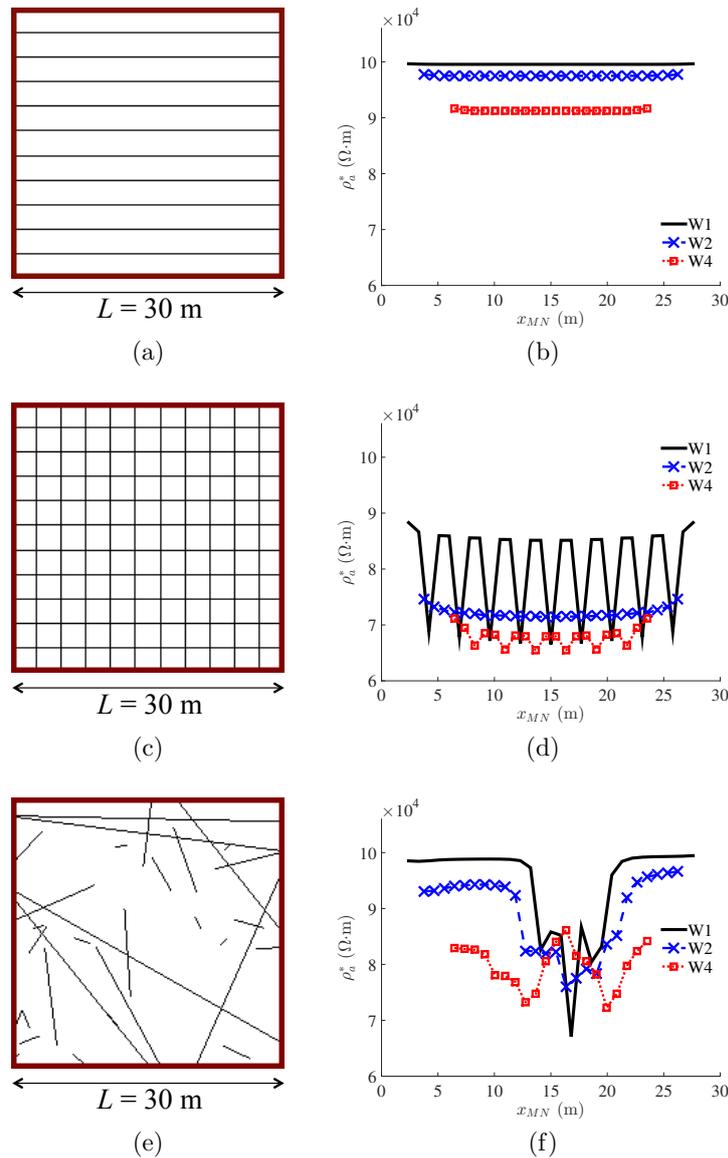


FIGURE 10 – Exemples de milieux fracturés étudiés avec la résistivité apparente normalisée ρ_a^* correspondante pour les trois espacements de Wenner (W1, W2, W3) illustrés à la Figure 9. ρ_a^* est tracé en fonction de la position latérale du centre de réseau d'électrodes x_{MN} (Caballero Sanz et al., 2017).

turés. (2) Le comportement de ρ_a^* est prévisible et facilement explicable pour le cas de fractures parallèle (Figures 10a-b) avec (i) une valeur constante le long de l'axe x_{MN} puisque les fractures sont présentes sur tout le long du domaine, et (ii) une diminution de ρ_a^* lorsque l'on augmente l'espacement entre les électrodes (de la configuration W1 à la configuration W4), puisque augmenter cet espacement implique une propagation du courant plus en profondeur du domaine et donc une prise en compte de plus de fractures qui diminuent la résistivité mesurée. (3) Comme démontré dans Caballero Sanz et al. (2017), les résultats obtenus pour le réseau de fractures parallèles dans la configuration W4 sont dus à la présence des deux premières fractures situées sous la surface. Cela implique que la présence d'un petit nombre de fractures à l'échelle millimétrique, ici seulement deux fractures parallèles d'une ouverture de

10^{-3} m, peuvent avoir un impact significatif sur la résistivité électrique apparente qui est diminuée de 10% à comparer de la valeur de la zone matricielle. (4) Un comportement plus compliqué est observé pour les cas de fractures en grille (Figures 10c-d) et de fractures à positions aléatoires et longueurs distribuées en loi de puissance (Figures 10e-f). Pour ces cas, les valeurs de ρ_a^* varient le long de la position x_{MN} et en fonction de l'espacement entre les électrodes car ces deux paramètres impliquent que différentes parties du réseau de fractures influent les données mesurées. Comme détaillé Caballero Sanz et al. (2017), chaque variation s'explique par l'effet combiné de plusieurs fractures présentes dans la zone d'influence des électrodes avec un impact de la longueur et de l'orientation de ces fractures sur les résultats. Il en résulte que la complexité de ces comportements empêche de définir à priori les propriétés des fractures qui en sont responsables.

En complément de cette étude, et au vu de la complexité des résultats obtenus pour les réseaux de fractures hétérogènes, nous avons aussi mené une étude systématique pour analyser l'impact des propriétés d'une fracture unique sur les données de résistivité électrique avec les deux configurations d'électrodes standard Wenner-Schlumberger (WS) et Dipôle-Dipôle (DD), et trois facteurs d'espacement entre les électrodes. En fonction de la configuration d'électrodes considérée, nous constatons que l'angle et la longueur de la fracture ont un impact différent sur les courbes d'anomalie de résistivité, la configuration WS étant mieux adaptée pour faire la distinction entre les fractures sub-horizontales et sub-verticales, mais la configuration DD conduisant à une plus grande amplitude globale des anomalies. En supposant la présence d'une couche superficielle, nous constatons également que l'ampleur de l'anomalie de résistivité, et donc la détectabilité de la fracture, est fortement affectée par la profondeur et la résistivité électrique de cette couche, ainsi que par l'ouverture de la fracture et le contraste entre les résistivités de la fracture et du substrat rocheux. Ces travaux, qui sont présentés en détails dans Demirel et al. (2018), montrent qu'il est difficile d'interpréter intuitivement les courbes obtenues, même pour le cas simple d'une fracture unique. Pour aider à la compréhension de la forme des anomalies observées, des vidéos de la propagation du courant électrique, et de la variation de la résistivité ρ_a^* correspondante, sont fournies avec cette étude.

Mesures de potentiel spontané

Enfin nous avons aussi souhaité évaluer comment les mesures de potentiel spontané (PS) peuvent aider à identifier la présence de fractures et déterminer leurs propriétés. Pour cela, nous étudions les configurations fracturées présentées sur les Figures 11a-b avec un pompage au centre du domaine. Ces milieux correspondent à une fracture horizontale passant par le pompage caractérisée par une ouverture de 2×10^{-3} m et une distribution aléatoire de fractures avec une ouverture de 10^{-3} m, les positions et orientations étant aléatoires et la longueur suivant une loi de puissance d'exposant

$a = 1.5$ (Figure 11a) et 2.5 (Figure 11b) et de paramètre de percolation $p = 6$. Les propriétés de la matrice sont choisies pour être représentatives d'un grès et les conductivités électriques des fractures et de la matrice diffèrent de deux ordres de grandeur. Pour le problème hydrogéologique, des conditions de Dirichlet de 1 et 0 m sont considérées sur les bords gauche et droit, et variant linéairement sur les bords haut et bas du domaine, avec un pompage fixé à $0.8 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

Après résolution du problème hydrogéologique et électrique avec l'approche de modélisation DDP_2D étendue au potentiel spontané, les résultats présentés sur les Figures 11c-e montrent que pour des configurations de fractures peu denses les valeurs maximales de signal caractérisent les zones contribuant fortement au pompage. Le signal est particulièrement fort pour les zones avec de forts échanges fracture-matrice correspondant à des zones où la matrice contribue au pompage par l'intermédiaire de ses connexions avec les fractures. Pour des réseaux de fractures plus denses (Figures 11d-f), bien que les différences de signal soient moins visibles, il est quand même possible d'identifier les régions qui sont bien connectées au pompage. Ces résultats ouvrent des possibilités en particulier pour identifier à distance et de manière non invasive les échanges fracture-matrice à l'aide de mesures PS. Ces résultats sont présentés plus en détails dans Roubinet et al. (2016).

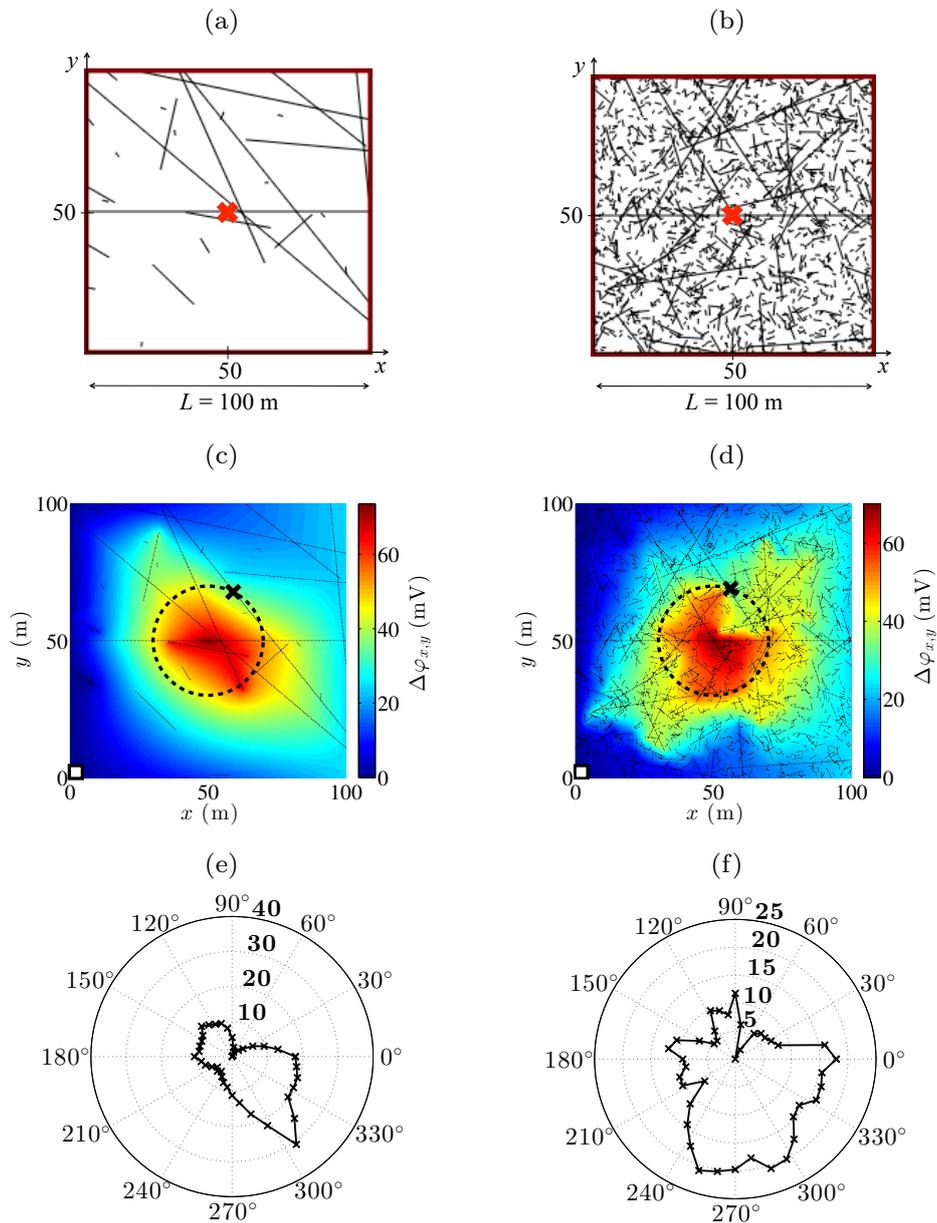


FIGURE 11 – (a-b) Domaines fracturés étudiés où la croix rouge représente la position du pompage. (c-d) Distribution spatiale du signal PS avec $\Delta\varphi_{x,y}$ la différence de potentiel électrique entre la position (x, y) et l'électrode de référence située en bas à gauche du domaine (carré blanc). (e-f) Tracés polaires du signal PS le long des cercles pointillés noirs représentés en (c) et (d) et relativement aux valeurs minimums observées dont les positions sont représentées par les croix noires en (c) et (d) (Roubinet et al., 2016).

3.2 Étude du transport de chaleur

En complément des données électriques précédemment décrites, le suivi de la propagation de la chaleur dans le milieu naturel peut potentiellement fournir des informations sur la présence de fractures et leurs propriétés. Dans ce cas, les mesures collectées dans des puits d'observation sont influencées à la fois par les propriétés thermiques de la roche et par des arrivées d'eau de température différente créant des anomalies de température dans les puits et correspondant à la présence de fractures hydrauliquement actives. Les processus mis en jeu de conduction et convection thermiques dans la roche et les fractures régissant les comportements observés, sont aussi clés pour optimiser les échanges de chaleur dans les systèmes fracture-matrice et à l'échelle des réseaux de fractures pour les problématiques d'exploitations géothermiques et pour la caractérisation de ces milieux. La mise en oeuvre de différents approches de modélisation, de solutions analytiques simplifiées à des surrogate modèles en passant par des modèles numériques complexes, est nécessaire pour s'adapter aux différentes configurations et problématiques liées aux milieux fracturés.

3.2.1 Interprétation des mesures de température dans les puits

Estimation des propriétés thermiques de la roche

Les propriétés thermiques du sous-sol peuvent être estimées in-situ à partir des expériences de forage de type test de réponse thermique (TRT) et méthode active-line-source (ALS), présentées par la Figure 12. Avec l'approche TRT standard, l'eau chauffée s'écoule dans un tube en U situé dans le forage et la température est surveillée à l'entrée et à la sortie du système au cours du chauffage, et généralement après l'arrêt du chauffage (Lamarche et al., 2010; Rainieri et al., 2011; Raymond et al., 2011). Avec la méthode ALS, un câble chauffant est utilisé pour réchauffer l'eau présente dans le forage et la température est enregistrée en fonction du temps à un ou plusieurs endroits le long du forage par diagraphie avec une sonde de température ou en utilisant la technologie de détection de température distribuée (DTS) (Pehme et al., 2007; Coleman et al., 2015).

Pour ces deux types d'expériences, la conductivité et la diffusivité thermiques du sous-sol sont estimées en utilisant des expressions analytiques asymptotiques basées sur une (ou les deux) hypothèse(s) suivante(s). (1) Les propriétés thermiques du forage sont les mêmes que celles de la matrice, c'est-à-dire que le puits n'est pas explicitement représenté et que la source de chaleur est localisée dans la roche. (2) La source de chaleur est située exactement au centre du forage. En relation avec cela, le temps après chauffage pour lequel les solutions asymptotiques sont valides est appelé "temps asymptotique" et est supposé se produire quelques heures après le début de l'expérience. Cependant, l'évaluation de ce temps est elle-même basée sur

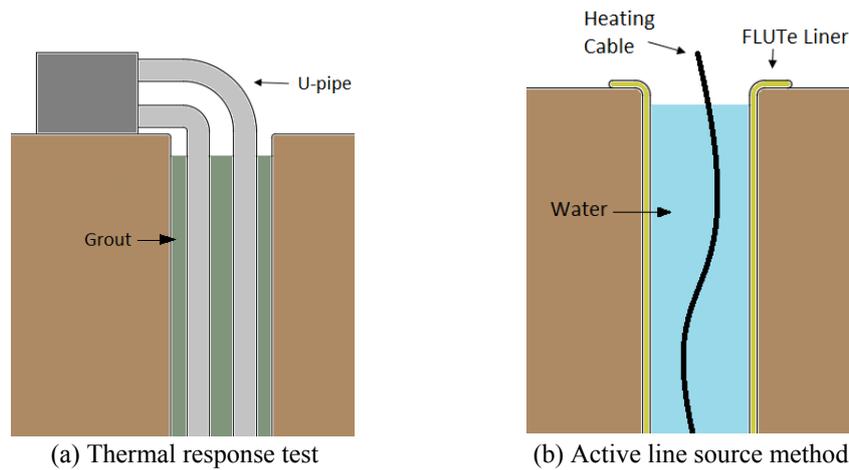


FIGURE 12 – Expériences thermiques en forage pour évaluer les propriétés thermiques du sous-sol (Moscoso Lembcke et al., 2016).

l'hypothèse (2) amenant à des erreurs d'estimation des propriétés thermiques. Les résultats présentés sur la Figure 13 illustrent ce problème avec des erreurs sur l'estimation de la conductivité thermique pouvant aller jusqu'à 60% de la valeur à estimer en utilisant la définition standard du temps asymptotique (Figure 13a), alors que l'erreur est limitée à 13% avec une meilleure définition de ce temps (Figure 13b). Il est à noter que l'erreur maximale dans ce dernier cas correspond au terme source localisé au centre du domaine puisque c'est à cette position que l'impact des différences de propriétés entre le puits et la matrice dure le plus longtemps.

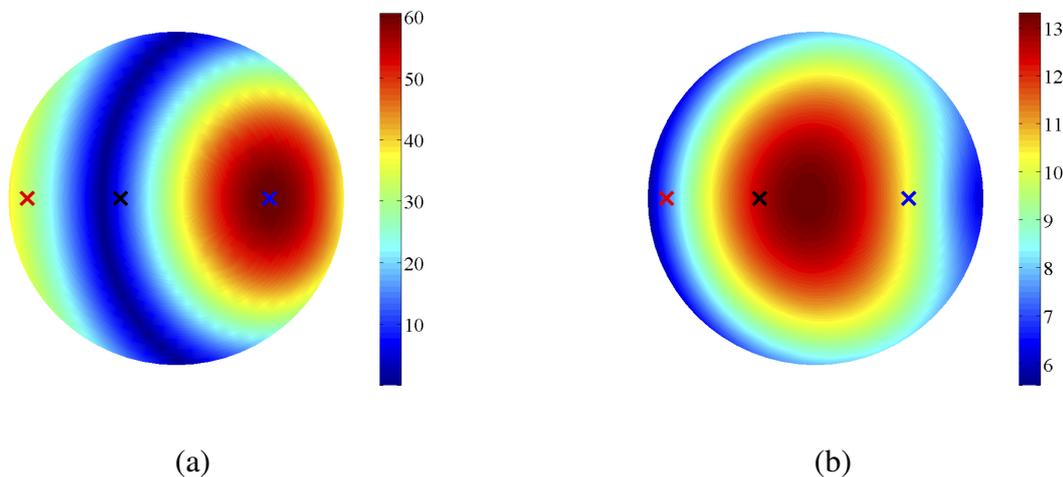


FIGURE 13 – Erreur (en %) sur l'estimation de la conductivité thermique de la roche en fonction de la position du terme source avec (a) la définition standard du temps asymptotique et (b) la définition sans hypothèse simplificatrice de représentation du problème (Moscoso Lembcke et al., 2016).

Ces résultats sont présentés dans Moscoso Lembcke et al. (2016) avec le développement des solutions analytiques permettant de prendre en compte les propriétés du puits et la position du terme source. Cette étude contient aussi (i) la distribution des temps asymptotiques prenant en compte ces hypothèses pour une large gamme de valeurs

des propriétés thermiques, (ii) une analyse de l'effet de la position du terme source sur ce temps, et (iii) les erreurs d'estimation de la diffusivité thermique.

Dilution thermique en milieux fracturés

Une autre façon d'effectuer des expériences thermiques dans les puits est d'injecter de l'eau chauffée dans le puits et d'observer les changements de température correspondants. En mesurant ces changements de température avec la technique de détection de température distribuée par fibre optique (Fiber-Optic Distributed Temperature Sensing, FO-DTS), les hétérogénéités verticales du puits et leurs réponses au cours du temps peuvent être caractérisées. Ce type d'expériences a été menée sur le In-situ Stimulation and Circulation (ISC) rock laboratory, au Grimsel Test Site (GTS) en Suisse sous conditions hydrauliques ambiantes et forcées (Figure 14) menant à des mesures de l'anomalie de température en profondeur et au cours du temps (Figure 15). On observe que la configuration sous conditions forcées de pompage (Figure 15b) met en évidence des zones qui ne sont pas visibles sous conditions ambiantes (Figure 15a), correspondant à la présence de fractures pour lesquelles le processus d'advection sera dominant.

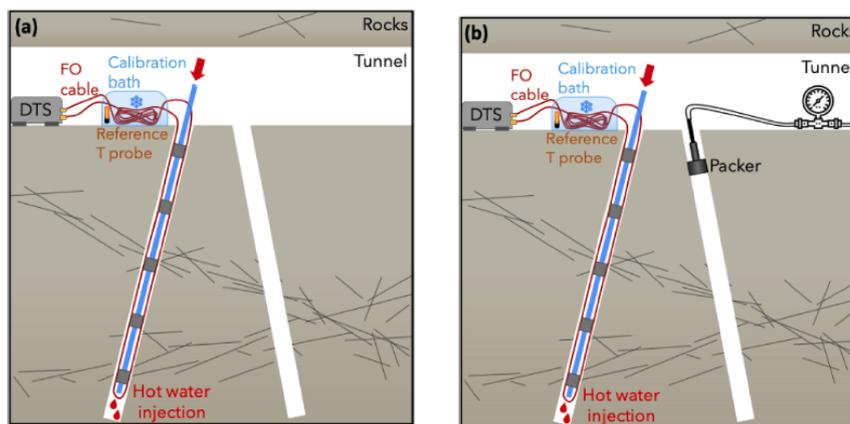


FIGURE 14 – Configurations expérimentales considérées avec injection d'eau chaude dans le puits à tester et mesure des variations de température dans le même puits grâce à une Fibre Optique en conditions hydrauliques (a) ambiantes et (b) forcées en injectant à pression constante de l'eau à travers un packer localisé dans le second puits (Klepikova et al., 2022).

Pour mener une étude plus approfondie des informations qui peuvent être extraites de ces données, nous considérons les représentations schématiques présentées sur la Figure 16 et utilisons des solutions analytiques et numérique adaptées à chaque configuration. Pour la configuration puits-roche (Figure 16b), en considérant une différence de température constante T_0 à l'état initial entre le puits et la roche, et en supposant que la conduction est le seul mécanisme de transfert de chaleur dans le milieu, la résolution de l'équation de diffusion pour un système composite mène à

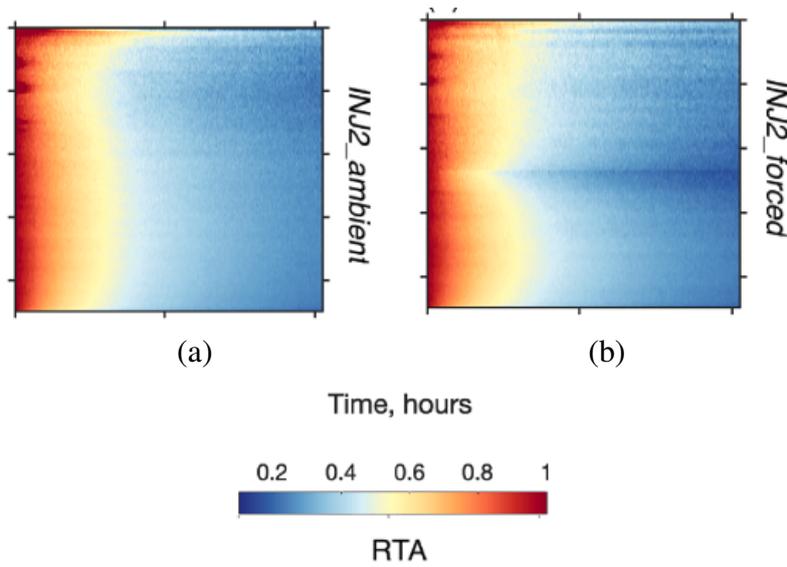


FIGURE 15 – Mesures de température dans le puits INJ2 sous conditions hydrauliques (a) ambiantes et (b) forcées avec RTA l’anomalie de température relative (Relative Temperature Anomalie) correspondant au ratio entre la température mesurée et la température au début du suivi relativement à la température du milieu avant l’injection d’eau chaude (Klepikova et al., 2022).

(Carslaw and Jaeger, 1986) (p.346, eq (4)-(5))

$$\bar{T}_1^*(r, p) = \frac{1}{p} - \frac{K_2 \sqrt{\kappa_1} \mathcal{K}_1(q_2 R) \mathcal{I}_0(q_1 r)}{p \Delta}, \quad \bar{T}_2^*(r, p) = \frac{K_1 \sqrt{\kappa_2} \mathcal{I}_1(q_1 R) \mathcal{K}_0(q_2 r)}{p \Delta} \quad (35)$$

$$\Delta = K_2 \sqrt{\kappa_1} \mathcal{I}_0(q_1 R) \mathcal{K}_1(q_2 R) + K_1 \sqrt{\kappa_2} \mathcal{I}_1(q_1 R) \mathcal{K}_0(q_2 R)$$

avec \bar{T}_1^* et \bar{T}_2^* les transformées de Laplace des températures relativement à T_0 dans le puits et la matrice, respectivement, p étant la variable de Laplace. Dans les expressions (35), $\kappa_i = K_i / (\rho_i c_i)$ et $q_i = \sqrt{p / \kappa_i}$ ($i = 1, 2$), et $\mathcal{I}_j(\cdot)$ et $\mathcal{K}_j(\cdot)$ sont respectivement les fonctions de Bessel modifiées du premier et du second type. L’expression analytique de \bar{T}_2^* est alors utilisée pour évaluer les propriétés thermiques de la roche menant à une bonne reproduction des données mesurées sur le terrain et à des valeurs des propriétés thermiques cohérentes avec les expériences menées en laboratoire (Figure 17a). Pour la configuration puits-fracture, une solution numérique est développée avec Comsol en résolvant l’équation d’advection-diffusion dans une fracture en considérant une vitesse de circulation du fluide connue à priori, constante en temps et homogène dans la fracture.

Ces deux outils de modélisation sont utilisés pour évaluer l’impact des processus d’advection et de diffusion sur les données thermiques afin de déterminer pour quelles gammes des valeurs des paramètres ces deux processus peuvent être dissociés. L’objectif étant de déterminer si certaines de ces données sont clairement la signature des processus d’advection, et donc liées à la présence d’une fracture dans laquelle un écoulement de fluide a lieu, ou si la diffusion thermique dans la roche est la seule raison du comportement observé. La Figure 17b montre la gamme de va-

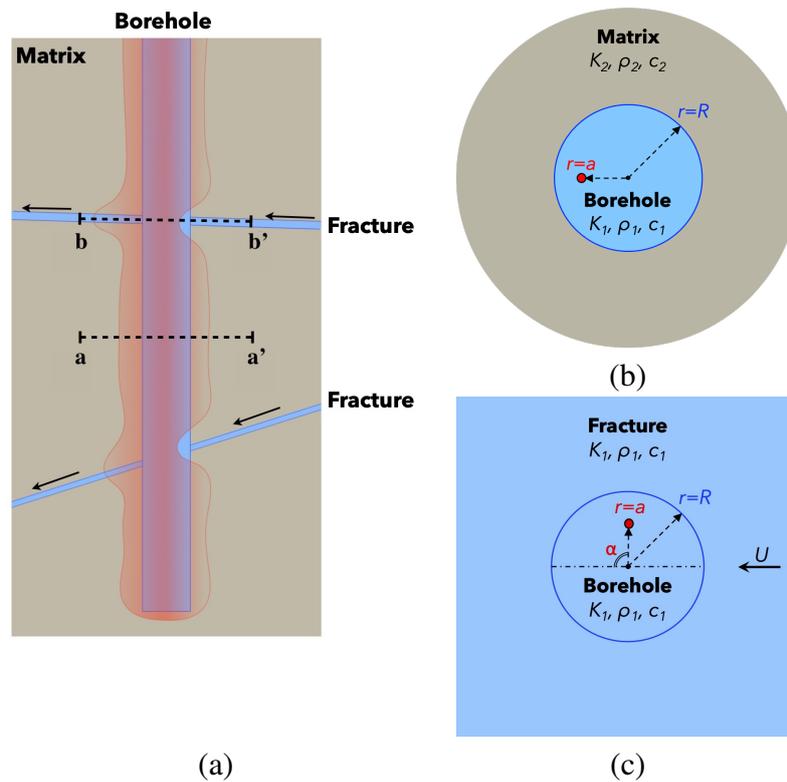


FIGURE 16 – Représentations schématiques (a) du puits entouré par la roche matricielle et intersecté par des fractures, (b) du système puits-matrice où les changements de température sont contrôlés par la diffusion thermique dans la roche et (c) du système puits-fracture où les changements de température sont principalement contrôlés par les écoulements de fluide dans la fracture (Klepikova et al., 2022).

riation de l'anomalie de température dans les cas purement diffusif en faisant varier la conductivité thermique K entre 2 et 5 W/m°C (zone bleue) et advectif-diffusif en faisant varier la vitesse d'écoulement dans la fracture U entre 10^{-7} et 5×10^{-4} m/s (zone rose). La superposition des zones purement diffusives et advectives est obtenue lorsque U varie de 10^{-6} à 3×10^{-6} m/s, montrant que la distinction entre les deux configurations est faisable pour des vitesses d'écoulement supérieures à 3×10^{-6} m/s. Les données récoltées sur le terrain sont d'ailleurs dans cette zone commune lorsqu'elles sont recueillies en conditions ambiantes (ligne noire) et sont à la limite de la distinction entre les deux zones en conditions forcées. Ceci implique que de futures expériences avec un forçage hydraulique plus important permettront de clairement distinguer les processus responsables de l'anomalie de température le long du puits, et ainsi de pouvoir plus facilement inverser les propriétés correspondantes. Ces travaux, qui sont présentés en détail dans Klepikova et al. (2022), pourront servir à une meilleure détermination des conditions expérimentales à utiliser pour aider à la caractérisation des propriétés du milieu dans de futures études.

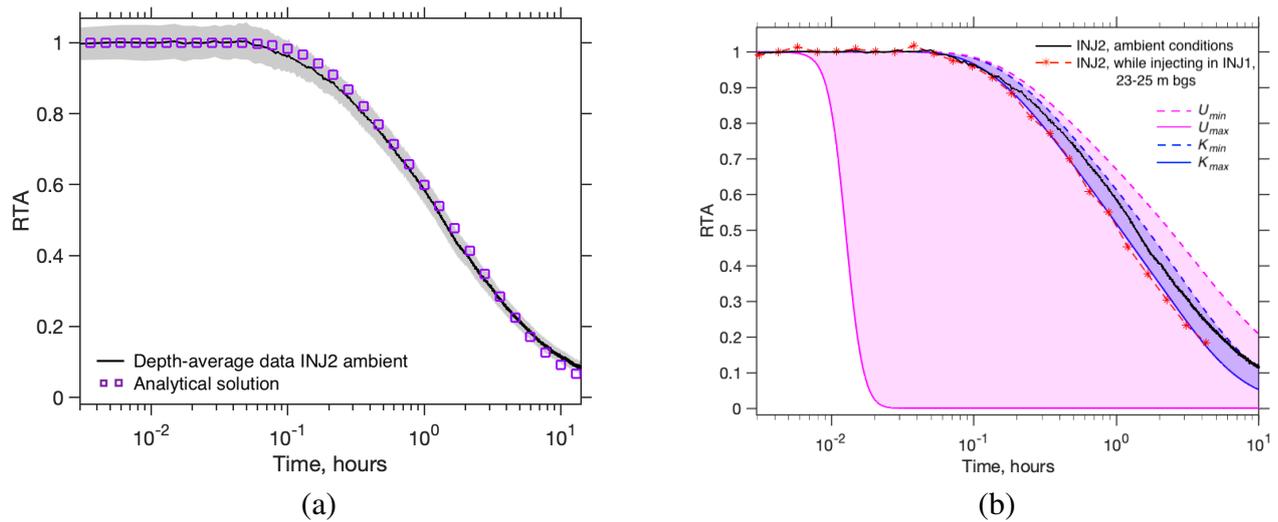


FIGURE 17 – (a) Comparaison entre les données d’anomalie de température recueillies sur le terrain et celles simulées par la solution analytique. (b) Utilisation des solutions analytique (zone bleu) et numérique (zone rose) pour évaluer la gamme de variation de l’anomalie de température dans le cas purement diffusif et advectif-diffusif, respectivement. Pour comparaison, les données recueillies en conditions hydrauliques ambiante et forcée sont aussi reportées (Klepikova et al., 2022).

3.2.2 Modélisation du transport de chaleur dans les milieux fracturés

La modélisation du transport de chaleur dans le milieu naturel, et plus particulièrement dans les milieux fracturés, est aussi nécessaire pour les problématiques de production d’énergie liée aux performances des systèmes géothermiques améliorés (Enhanced Geothermal Systems, EGS) dans la roche sèche chaude (Hot Dry Rocks, HDRs). Une étude de ces performances peut se faire d’abord à l’échelle des systèmes fracture-matrice, assimilable à des systèmes mobile-immobile équivalent à grande échelle et utilisable pour être incorporer dans des modèles à l’échelle des réseaux de fractures. Par analogie avec les modèles de transport de solutés, une représentation explicite des réseaux de fractures est nécessaire lorsque l’existence d’un VER n’est pas vérifiée et la représentation du transport par des méthodes de suivi de particules permet d’optimiser les coûts numériques tout en étant adaptées aux représentations des milieux fracturés.

Échanges thermiques dans les systèmes fracture-matrice

Les échanges de flux thermiques dans les systèmes mobile-immobile sont souvent caractérisés par des approches analytiques pour leur simplicité d’utilisation (Baston and Kueper, 2009; Cheng et al., 2001; Yeh et al., 2012). Ces études reposent sur les hypothèses d’un écoulement monophasique et incompressible, avec une densité non dépendante de la température et des effets négligeables de la gravité. Les hypothèses d’ouverture constante, d’écoulement constant et laminaire et de matrice homogène sont également faites dans ces études. Ces solutions permettent des simulations rapides et peu coûteuses où l’inversion de propriétés ne nécessite que peu de données.

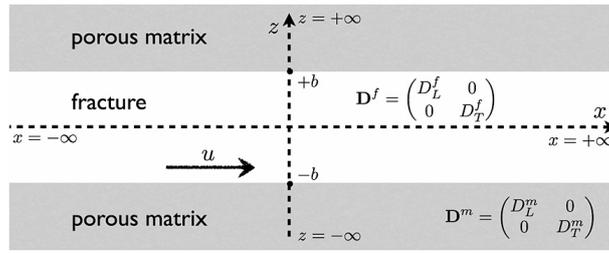


FIGURE 18 – Système fracture-matrice composé d’une fracture unique de demi-ouverture b entourée par une matrice infinie (Ruiz Martinez et al., 2014).

Cependant, les approches numériques montrent que leurs hypothèses connexes sont discutables et peuvent entraîner des estimations erronées. En particulier, la diffusion longitudinale dans la matrice, toujours négligée dans les solutions analytiques, impacte fortement l’évolution temporelle et la distribution spatiale de la chaleur (Baston and Kueper, 2009; Cheng et al., 2001; Kolditz, 1995). Afin de développer une nouvelle solution analytique dans un système fracture-matrice qui prend en compte la diffusion longitudinale et transversale dans la matrice, la représentation de la Figure 18 est considérée avec la formulation mathématique suivante.

La température du fluide $T^f(x, z, t)$ dans la fracture $\Omega_f = \{(x, z) : -\infty < x < \infty, 0 \leq z \leq b\}$ satisfait l’équation d’advection-dispersion

$$\frac{\partial T^f}{\partial t} + u \frac{\partial T^f}{\partial x} = D_L^f \frac{\partial^2 T^f}{\partial x^2} + D_T^f \frac{\partial^2 T^f}{\partial z^2} + f, \quad (x, z) \in \Omega_f, \quad (36)$$

où u est la vitesse du fluide, $f(x, z, t)$ est un terme source, et $D_L^f = \lambda_L^f / (\rho_f c_f) + E_L^f / (\rho_f c_f)$ et $D_T^f = \lambda_T^f / (\rho_f c_f) + E_T^f / (\rho_f c_f)$ sont respectivement les coefficients de dispersion longitudinale et transversale avec ρ_f la masse volumique du fluide et c_f sa capacité calorifique, λ_L^f et λ_T^f les coefficients de conductivité thermique longitudinal et transversal et E_L^f et E_T^f les coefficients de dispersion thermique longitudinal et transversal, respectivement (Yang and Yeh, 2009).

Le domaine matriciel $\Omega_m = \{(x, z) : -\infty < x < \infty, b \leq z < \infty\}$ est supposé imperméable au fluide et la température $T^m(x, z, t)$ dans ce domaine est régie par l’équation de diffusion

$$\frac{\partial T^m}{\partial t} = D_L^m \frac{\partial^2 T^m}{\partial x^2} + D_T^m \frac{\partial^2 T^m}{\partial z^2}, \quad (x, z) \in \Omega_m, \quad (37)$$

avec $D_L^m = \lambda_L^e / c_e$ et $D_T^m = \lambda_T^e / c_e$ les coefficients de diffusion longitudinale et transversale, c_e étant la capacité calorifique effective de la matrice et λ_L^e et λ_T^e les coefficients de conductivité thermique longitudinal et transversal dans la matrice, respectivement.

La température initiale $T_i(x, z)$ est définie dans le système à $t = 0$ et aux extrémités du système (i.e., quand $x \rightarrow -/+ \infty$ dans les deux domaines) et la dérivée de T^f suivant z est fixée à 0. À l’interface $z = b$, les conditions de continuité de température

et de flux de chaleur sont

$$T^f = T^m, \quad \phi_m D_T^m \frac{\partial T^m}{\partial z} = D_T^f \frac{\partial T^f}{\partial z} \equiv r, \quad z = b, \quad (38)$$

avec $\phi_m = [\phi + (1 - \phi)\rho_s c_s / (\rho_f c_f)]$, ϕ étant la porosité de la matrice et $r(x, t)$ le flux thermique (inconnu) entre la fracture et la matrice.

L'utilisation de fonctions de Green définies dans chaque domaine puis couplées à l'interface entre les deux domaines permet de développer une solution analytique du problème considéré dans le domaine de Fourier Laplace, correspondant à une solution semi-analytique dans le domaine réel. Cette solution peut être simplifiée pour obtenir directement une solution analytique dans le domaine réel sous des conditions qui sont facilement vérifiables pour les études géothermiques, correspondant principalement à des régimes dominés par les mécanismes de convection et à un temps minimum de caractérisation. Ces conditions, ainsi que la démonstration complète permettant d'obtenir les solutions semi-analytiques et analytiques, sont explicitées dans Ruiz Martinez et al. (2014). Ces travaux incluent aussi une étude paramétrique mettant en évidence que la composante longitudinale de la diffusion dans la matrice est un mécanisme clé pour caractériser l'impact d'une source de chaleur sur le comportement thermique de la fracture, et pour évaluer les temps d'atteinte de l'équilibre thermique dans la fracture. Les conditions d'exploitation optimales des systèmes basés sur une représentation mobile-immobile sont aussi définies en fonction du ratio entre les temps caractéristiques de diffusion dans la roche et d'advection dans la fracture, noté R . Les performances géothermiques sont optimales pour $R > 7$ et variables pour $R < 7$ (Figure 19). Dans ce dernier cas, l'exploitation du système peut être améliorée en minimisant le ratio entre le temps d'exploitation et la taille du système, correspondant à de faibles valeurs du temps relatifs à la diffusion (Figure 19b). Au contraire, le temps relatif à l'advection aura peu d'impact, montrant que les variations des propriétés advectives du système ne permettent pas d'améliorer ses performances (Figure 20). Ces résultats permettent de sélectionner les paramètres optimaux pour l'exploitation géothermique des roches fracturées représentées par le concept de zones mobile-immobile équivalentes. Pour une représentation prenant en compte la complexité du réseau de fractures, la solution analytique développée lors de cette étude pourrait être utilisée pour paramétrer le comportement à l'échelle de la fracture dans des modèles à l'échelle du réseau de fractures.

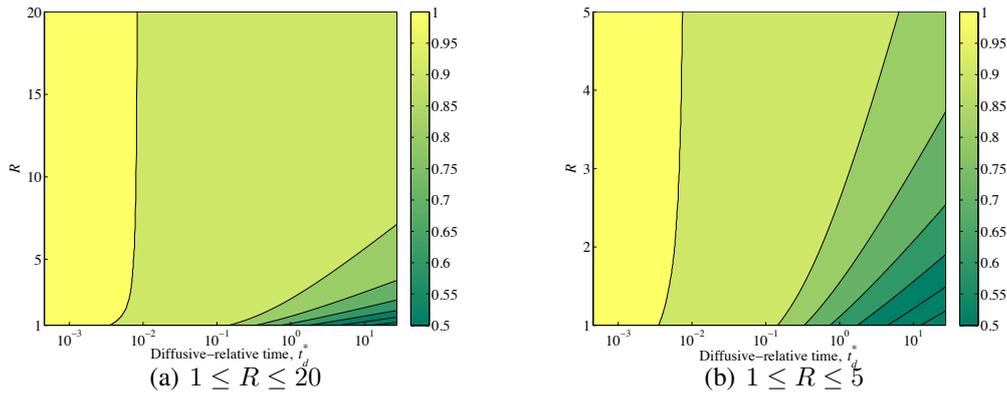


FIGURE 19 – Performances géothermiques allant de 50 (vert) à 100% (jaune) en fonction du ratio R (Ruiz Martinez et al., 2014).

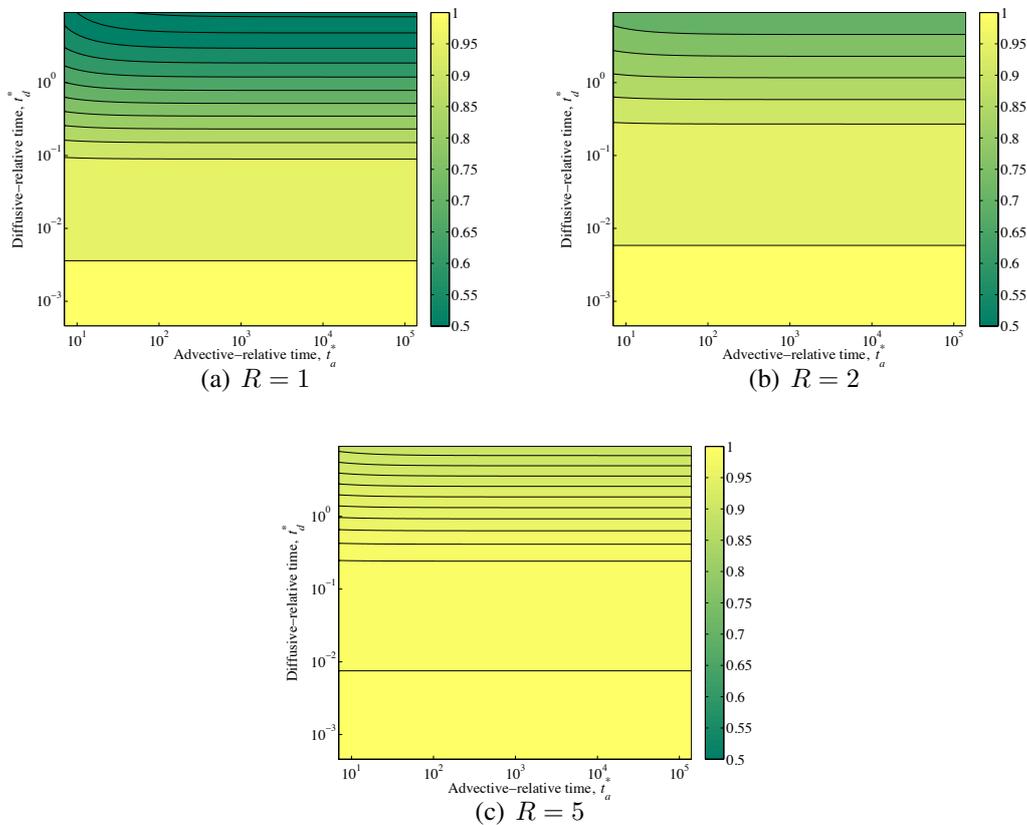


FIGURE 20 – Performances géothermiques allant de 50 (vert) à 100% (jaune) en fonction du ratio R (Ruiz Martinez et al., 2014).

Performances thermiques dans les milieux fracturés

Le transfert de chaleur dans les milieux fracturés est considéré avec les modèles de réseaux de fractures fractales des réservoirs géothermiques proposé par Watanabe and Takahashi (1995) et défini par le nombre de fractures N_f et la longueur r_i de la fracture i ($i = 1, \dots, N_f$)

$$N_f = \text{int}(C/r_0^D), \quad r_i = (C/i)^{1/D}, \quad (39)$$

avec la fonction $\text{int}(x)$ qui arrondit x à l'entier supérieur, C la densité de fracture,

D la dimension fractale, et r_0 la plus petite longueur de fracture. La position des fractures est aléatoire, deux angles préférentiels, θ_1 et θ_2 , sont considérés et l'ouverture b est constante et la même pour toutes les fractures. La Figure 21 montre les réseaux de fractures considérés pour une taille de domaine $L = 100$ m, un ordre de grandeur de différence entre r_0 et L , et les angles θ_1 et θ_2 fixés à 25° et 145° .

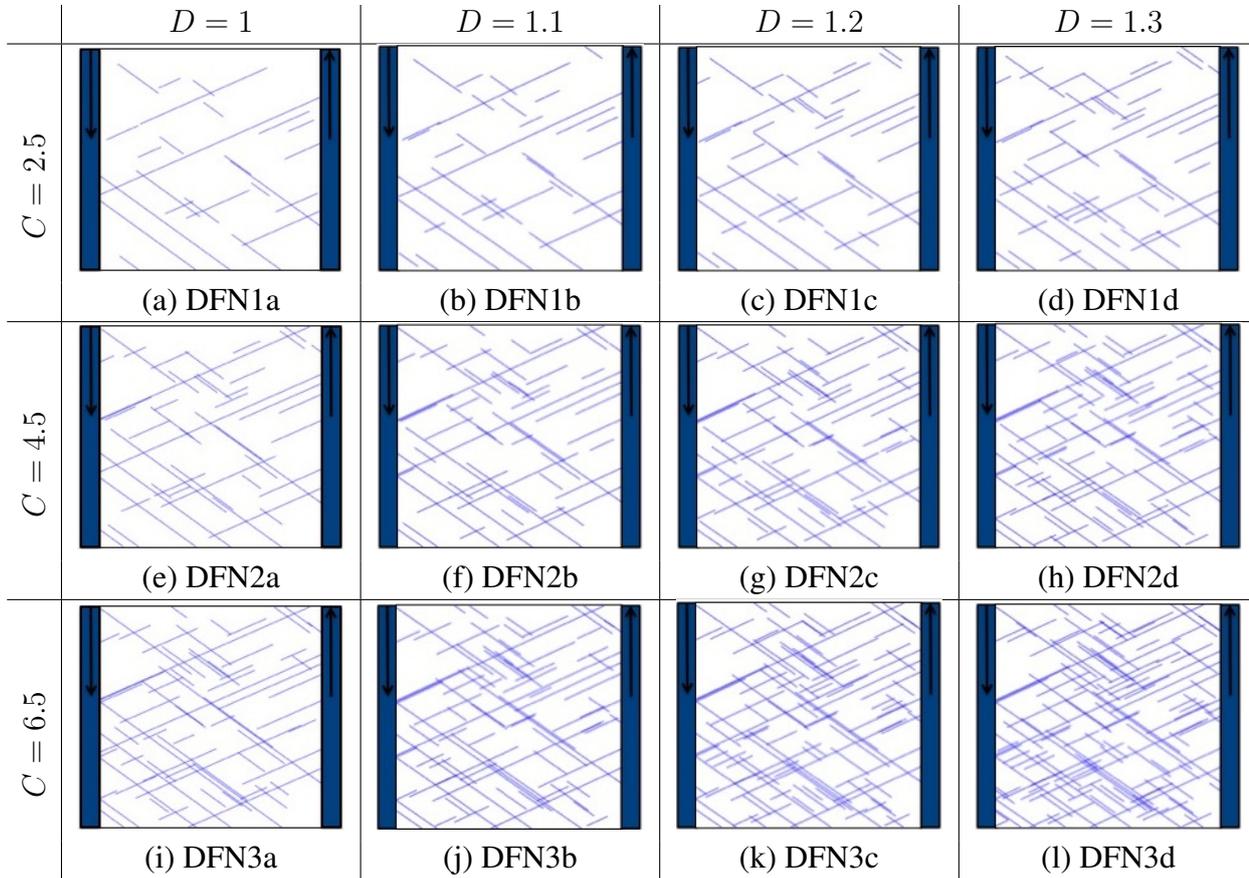


FIGURE 21 – Réseaux de fractures étudiés pour différentes valeurs des paramètres C et D . Les rectangles bleus sur les côtés gauche et droit des domaines représentent respectivement les puits d'injection et d'extraction des systèmes géothermiques (Gisladottir et al., 2016).

Les écoulements dans les réseaux de fractures sont considérés comme laminaire en régime permanent sous l'hypothèse d'un fluide incompressible, et chaque fracture est considérée comme formée par deux plaques lisses parallèles avec la densité du fluide ρ et la viscosité dynamique μ constantes. La loi de Poiseuille donne la vitesse moyenne d'écoulement $u = -\frac{\rho g b^2}{12\mu} J$ avec g la constante d'accélération gravitationnelle et J le gradient de charge hydraulique le long de la fracture. Les vitesses d'écoulement dans le système sont définies en appliquant la conservation de la masse aux intersections entre les fractures. Dans la présente étude, on considère les paramètres $\rho = 10^3$ kg/m³ et $\mu = 10^{-3}$ kg/(m·s), ainsi que deux gradients hydrauliques appliqués entre les bords droit et gauche du système : une condition forcée venant des études de géothermie (Suzuki et al., 2015) et correspondant à un gradient de 1.25 (*Fast flows*), et une condition naturelle correspondant à un gradient de 10^{-2} (*Slow flows*).

Le transport de chaleur est simulé avec la méthode de suivi de particules présentée dans Roubinet et al. (2010b). Les grandes lignes de cette méthode, ainsi que son adaptation au transport de chaleur, sont rappelées ici. Elle se décompose en trois parties : (i) à l'échelle fracture-matrice, le transfert de chaleur est décrit par advection dans la fracture et conduction dans la matrice infinie ; (ii) à l'échelle du bloc matriciel, la conduction thermique dans la matrice est limitée par la présence de fractures voisines, dans lesquelles les particules peuvent transférer ; et (iii) à l'échelle du réseau de fractures, la conservation du flux de chaleur est appliquée à chaque intersection de fractures en considérant que la probabilité pour une particule d'entrer dans une fracture est égal au ratio entre le débit de la fracture considérée et la somme des débits sortant de l'intersection étudiée

À l'échelle du système fracture-matrice, nous utilisons la solution analytique du problème défini par les équations (36)–(37) avec les simplifications suivantes (Tang et al., 1981) : (i) l'ADE (36) est moyennée sur l'ouverture de la fracture pour obtenir une représentation unidimensionnel ; (ii) la dispersion longitudinale dans la fracture est supposée négligeable par rapport à la convection ; (iii) la diffusion longitudinale dans la matrice est négligée ; (iv) la continuité de flux exprimée par la deuxième condition dans (38) aux interfaces fracture-matrice est remplacée par un terme source dans l'équation de fracture qui ne dépend que des propriétés de la matrice. Sous ces conditions, dont la validité a été étudiée par Roubinet et al. (2012), la température de la fracture est exprimée comme

$$T^f(x, t) = T_{\text{inj}} \operatorname{erfc} \left(\frac{\phi_m \sqrt{D_T^m} x}{2ub\sqrt{t} - x/u} \right), \quad (40)$$

en utilisant les mêmes notations des variables que pour le problème défini par les équations (36)–(37), et avec T_{inj} la température dans la fracture à la position $x = 0$. Cette expression est convertie en un modèle probabiliste pour t_d^∞ , le temps de diffusion d'une particule dans une matrice infinie

$$t_d^\infty = \left[\frac{\phi_m \sqrt{D_T^m} t_a}{2b \operatorname{erfc}^{-1}(\alpha)} \right]^2, \quad t_a = \frac{x}{u}, \quad (41)$$

où α est un nombre aléatoire uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$ et t_a est le temps d'advection passé dans la fracture pour atteindre la position x .

La présence de fractures voisines situées aux distances l_1 et l_2 de la fracture initiale est prise en compte avec les probabilités $P_{\text{transfert}}^1$ d'atteindre la première fracture sans atteindre la seconde, et $P_{\text{transfert}}^2$ d'atteindre la seconde fracture sans atteindre la première. Ces probabilités sont définies dans le domaine de Laplace comme (Feller,

1954)

$$\bar{P}_{\text{transfert}}^1 = \frac{\exp(l_1 \sqrt{s/D_T^m})}{s} \frac{1 - \exp(-2l_2 \sqrt{s/D_T^m})}{1 - \exp[2(l_1 - l_2) \sqrt{s/D_T^m}]} \quad (42a)$$

$$\bar{P}_{\text{transfert}}^2 = \frac{\exp(l_2 \sqrt{s/D_T^m})}{s} \frac{1 - \exp(-2l_1 \sqrt{s/D_T^m})}{1 - \exp[2(l_2 - l_1) \sqrt{s/D_T^f}]} \quad (42b)$$

avec s la variable de Laplace, et en effectuant l'inversion numérique de ces expressions avec l'algorithme de Stehfest (1970). La probabilité $P_{\text{transfert}}$ qu'une particule transfère vers l'une des deux fractures voisines en un temps $t_{\text{transfert}}$ inférieur au temps de diffusion maximum t_d^∞ est exprimée

$$P_{\text{transfert}} = P_{\text{transfert}}^1 (t_{\text{transfert}} \leq t_d^\infty) + P_{\text{transfert}}^2 (t_{\text{transfert}} \leq t_d^\infty). \quad (43)$$

Si le transfert est avéré, la particule transfère vers la première fracture si $\frac{U}{P_{\text{transfert}}} > \frac{l_1}{l_1+l_2}$, U étant le nombre aléatoire tiré d'une distribution uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$ qui a permis de décider du transfert, sinon la particule transfère vers la deuxième fracture. Une description détaillée de cette méthode, ainsi que sa validation, sont fournies dans Roubinet et al. (2010b).

Comme présenté en détail dans Gisladdottir et al. (2016), les hétérogénéités des milieux présentés dans la Figure 21 impliquent un comportement anormal du transfert de chaleur. Ces hétérogénéités peuvent aussi impacter les performances géothermiques (Figure 22) qui sont optimales au début de la simulation lorsque la température de l'eau extraite est égale à la température initiale du système ($P_f = 1$), et qui se détériorent lorsque la température extraite est impactée par la température de l'eau injectée qui est inférieure ($P_f \rightarrow 0$). L'impact des propriétés des structures est ici surtout visible pour les conditions *Slow Flows* avec une forte densité de fractures (DFN3) pour lesquelles l'augmentation de la dimension fractale (de DFN3a à DFN3d) se traduit par des structures plus complexes avec des hétérogénéités plus importantes. Des distributions plus larges de la taille des blocs matriciels sont observées avec la présence de petits blocs qui limitent la conduction thermique dans la matrice et réduisent les performances des systèmes.

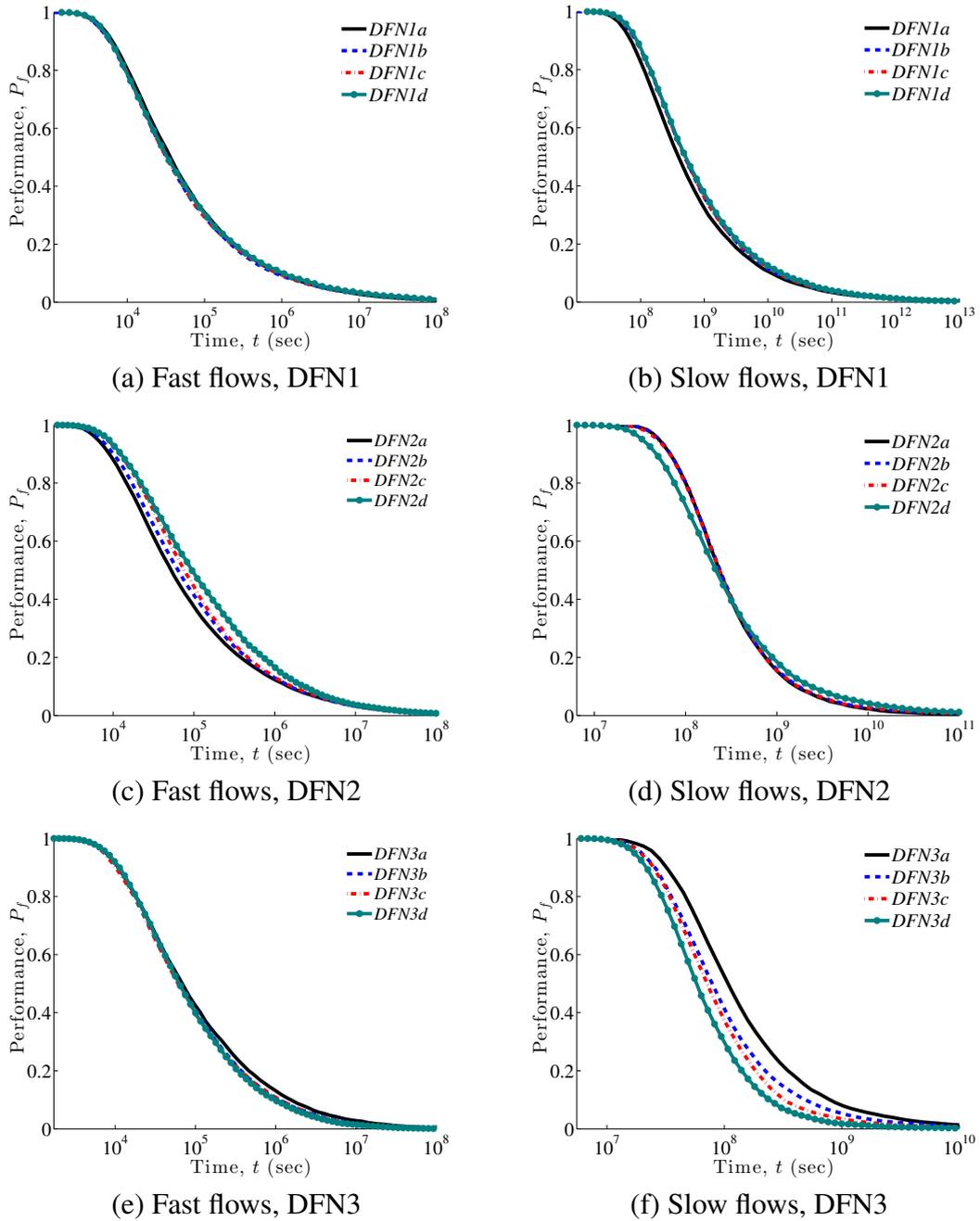


FIGURE 22 – Performance géothermique P_f au cours du temps pour les milieux de la Figure 21 avec les conditions hydrauliques rapides et lentes (colonne de gauche et droite) (Gisladdottir et al., 2016).

3.2.3 Inversion des propriétés statistiques des réseaux de fractures

Les résultats présentés dans Gisladdottir et al. (2016) montrent que les mesures thermiques entre puits sont sensibles aux propriétés des milieux fracturés sous certaines conditions d'écoulement. La possibilité d'inverser les propriétés statistiques des réseaux de fractures à partir de mesures de température entre puits est alors étudiée. Cela nécessite des modèles directs qui simulent le transport de chaleur dans les milieux fracturés ayant des coûts numériques compatibles avec des méthodes d'inversion, c'est-à-dire des temps de calculs assez faibles pour être capables de générer des milliers de simulations en des temps raisonnables. Bien que la méthode

de suivi de particules présentée précédemment soit plus efficace que les méthodes classiques car elle permet d'éviter un maillage coûteux de la zone matricielle, elle n'est pas assez efficace pour être directement utilisée dans des méthodes d'inversion. Cependant, elle permet d'obtenir assez de simulations en un temps raisonnable pour entraîner des modèles de réseaux de neurones qui eux seront assez efficaces pour l'inversion. Il est à noter que aucune méthode de modélisation à base physique pour les processus de transport dans des milieux fracturés hétérogènes non homogénéisables n'est assez efficace à ce jour pour être utilisée dans des méthodes d'inversion, impliquant la nécessité d'utiliser des modèles de substitution.

En considérant le modèle de réseaux de fractures de Watanabe and Takahashi (1995) illustré précédemment par la Figure 21, les paramètres statistiques à inverser sont les paramètres C et D , correspondant à la densité de fracture et la dimension fractale, respectivement. Pour prendre en compte le caractère aléatoire de la génération de ces réseaux, nous considérons 20 réalisations de réseaux de fractures et nous générons les courbes de restitutions moyennées sur ces 20 réalisations pour 100 valeurs des paramètres C et D , menant à 10.000 simulations de transport de particules par réalisation. La Figure 23 montre des exemples des CDFs (cumulative distribution functions) obtenues pour six paires des paramètres C et D , et la transformation des CDFs en ICDFs (inverse CDFs) pour faciliter l'entraînement des modèles à réseaux de neurones.

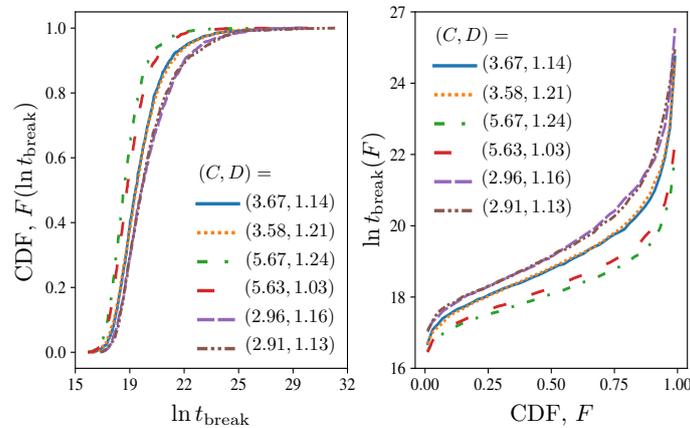


FIGURE 23 – Transformations des CDFs en ICDFs (Zhou et al., 2021).

Les performances de ces modèles sont montrées sur la Figure 24 où l'on observe une bonne reproduction des données synthétiques. Ils sont ensuite utilisés pour améliorer la définition des fonctions de probabilité comme montré dans la Figure 25 pour un coût de calcul équivalent entre les modèles à base physique et les modèles de substitution. La définition de ces fonctions de probabilité est alors assez bonne pour utiliser des méthodes d'inversion classique de type grid search qui sont adaptées pour estimer un faible nombre de paramètres. La Table 1 montre les coûts de chaque modèle avec une réduction de 4 ordres de grandeurs du temps total nécessaire avec les modèles de substitution. Chaque inversion nécessite N_{sim} simulations directs qui

prennent le temps T_{tot} qui comprend le temps d'apprentissage du modèle (T_{train}), le temps d'exécution des simulations directes (T_{run}) et le temps de définition de la PDF postérieure sur la grille des paramètres discrétisés (T_{grille}). Ces travaux sont publiés et présentés en détail dans Zhou et al. (2021).

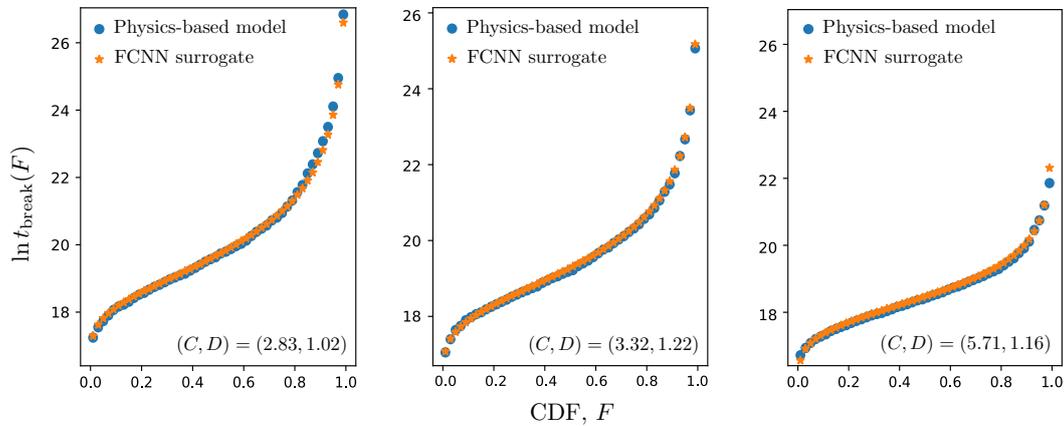


FIGURE 24 – Exemples de reproduction des ICDFs par le modèle à réseaux de neurones (Zhou et al., 2021).

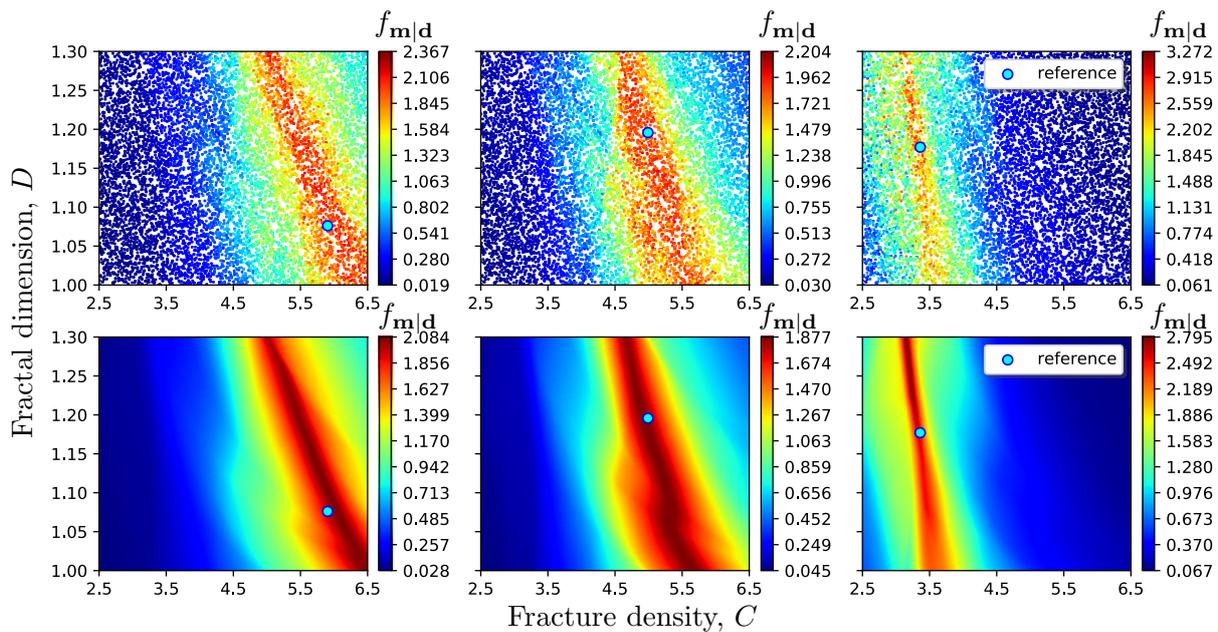


FIGURE 25 – Exemples de posterior PDFs normalisées pour les paramètres C et D avec la valeur de référence représentée par un point bleu. Les résultats du haut sont obtenus avec 10^4 simulations du modèle à base physique et ceux du bas avec 10^7 simulations du modèle à réseaux de neurones, pour des temps de calcul équivalents (Zhou et al., 2021).

TABLE 1 – Coût de calcul de l’inversion bayésienne en utilisant le modèle à base physique $g(\mathbf{m})$ ou le substitut $NN(\mathbf{m})$. Tous les temps sont en secondes. Le temps d’exécution de $g(\mathbf{m})$ est une projection basée sur le temps de simulation nécessaire pour 10^4 simulations. Le modèle $NN(\mathbf{m})$ a été formé et exécuté sur des GPU fournis par GoogleColab (Zhou et al., 2021).

	N_{sim}	T_{train}	T_{run}	T_{grille}	T_{tot}
$g(\mathbf{m})$	2×10^8	0	$1.312 \cdot 10^8$	5.47	$1.312 \cdot 10^8$
$NN(\mathbf{m})$	10^7	37340	1.26	5.47	$3.735 \cdot 10^4$

3.3 Devenir des solutés à plusieurs échelles

3.3.1 Transport anormal dans les milieux fracturés

Modélisation dans les réseaux de fractures

Les méthodes de représentation des processus de transport décrites précédemment de l’échelle des systèmes fracture-matrice à l’échelle des réseaux de fractures, ont été initialement développées pour le transport de solutés dans les roches fracturées. Afin d’étudier le transport anormal dans ces milieux, le modèle de suivi de particules décrit dans Roubinet et al. (2010b) a été utilisé sur des structures de type tapis de Sierpinski qui ont l’avantage de présenter une organisation fractale du réseau de fractures avec une distribution hétérogène de la taille des blocs matriciels (Figure 26). Les simulations de transport effectuées sur une large gamme de conditions hydrauliques montrent que l’impact des structures géologiques dépend du régime de transport considéré. Ce régime est caractérisé par le ratio $\beta = D_m \phi / (bv)$ avec D_m et ϕ le coefficient de diffusion et la porosité dans la matrice, et b et v l’ouverture et la vitesse du fluide dans les fractures. Lorsque le régime est dominé par l’advection ($\beta < 10^{-4}$), les temps d’arrivée sont modulés par la complexité du réseau de fractures et sont indépendants de la taille des blocs matriciels (Figure 27). Au contraire, lorsque la diffusion est dominante ($\beta > 10^{-1}$), les temps d’arrivée médians sont déterminés par la taille du plus grand bloc matriciel, et la complexité du réseau n’impacte que la variance des temps d’arrivée (Figure 28). L’étude de régimes intermédiaires montre un impact progressif de l’hétérogénéité du réseau de fractures et de la distribution de la taille des blocs, avec une sollicitation progressive des blocs de taille croissante. Ces résultats sont présentés en détail dans Roubinet et al. (2013) et peuvent amener à caractériser différentes propriétés du milieu en fonction des régimes hydrauliques considérés.

Représentation des systèmes fracture-matrice

Comme toutes les méthodes de suivi de particules s’affranchissant du maillage de la matrice, le modèle précédemment présenté et utilisé repose sur le paramétrage analytique des temps de diffusion dans la roche matricielle. Ceci repose sur une représentation schématique des échanges entre les fractures et la roche environnante. En considérant des vitesses d’écoulement négligeables dans la roche à comparer des vitesses d’écoulement dans les fractures, les échanges diffusifs sont le résultat des interactions entre les zones mobiles (fractures) et immobiles (matrice ou roche) du

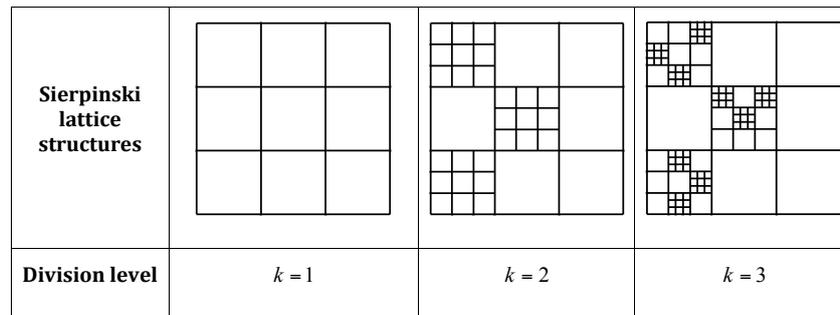


FIGURE 26 – Tapis de Sierpinski pour les milieux fracturés de complexité croissante de $k = 1$ à 3 (Roubinet et al., 2010b).

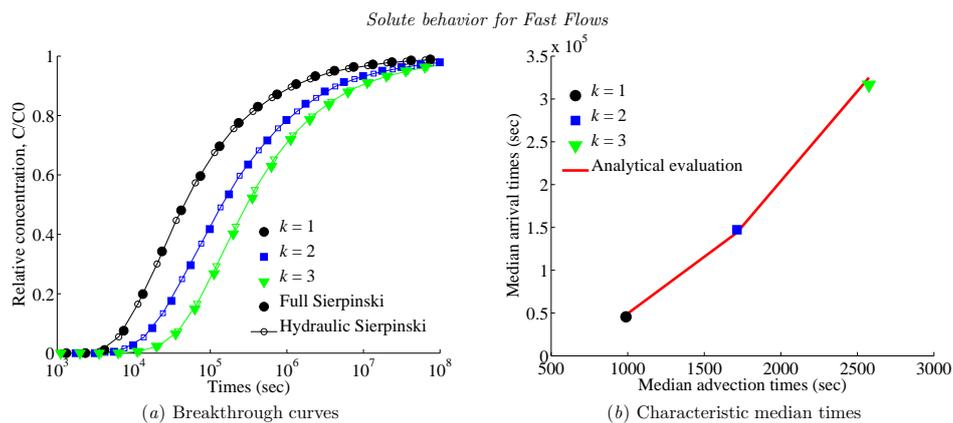


FIGURE 27 – (a) Courbes de restitution pour des régimes dominés par l’advection avec/sans (Full/Hydraulic Sierpinski) prise en compte de la taille des blocs matriciels. (b) Temps médians d’arrivée et d’advection reliés indépendamment de la taille des blocs matriciels (Roubinet et al., 2010b).

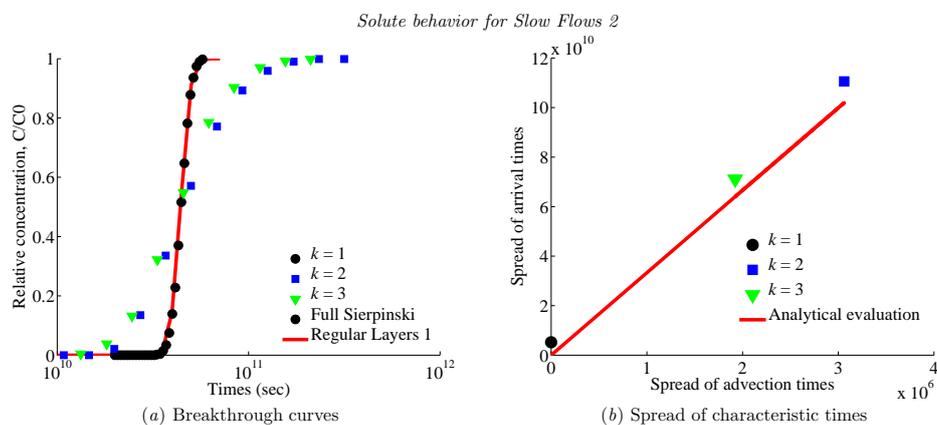


FIGURE 28 – (a) Courbes de restitution pour des régimes dominés par la diffusion avec/sans (Full Sierpinski/Regular Layers 1) prise en compte de la complexité du réseau de fractures. (b) Variance des temps d’arrivée et d’advection reliés par une fonction de la taille du plus grand bloc matriciel (Roubinet et al., 2010b).

milieu. Mathématiquement, le concept de représentation mobile-immobile se traduit par le couplage des équations d’advection-dispersion (ADE, dans la zone mobile) et de pure diffusion (dans la zone immobile) comme vu précédemment pour le transport de chaleur. Cette représentation est aussi bien utilisée pour les systèmes fracture-

roche à l'échelle de la fracture, que pour les systèmes aquifère-aquitard à l'échelle du milieu naturel. Cela implique que les solutions (semi-)analytiques développées pour ces systèmes (Sudicky and Frind, 1982; Tang et al., 1981; Zhan et al., 2009) peuvent être utilisées pour l'interprétation d'expériences de traçage dans le milieu naturel (Callahan et al., 2000; Maloszewski and Zuber, 1993; Moreno et al., 1985), ou la paramétrisation des modèles à l'échelle du réseau de fractures vu précédemment.

Dans ces études, la dimensionalité des équations du système (en passant de deux équations 2D à deux équations 1D) et le couplage sont simplifiés en supposant, pour rappel, (i) une distribution homogène des solutés dans la direction transversale de la zone mobile (complete mixing), (ii) un effet négligeable de la diffusion longitudinale dans la zone immobile, et (iii) des transferts entre zones mobile et immobile régis par les propriétés de la zone immobile. Cependant, la gamme de validité de ces hypothèses n'a jamais été clairement établie, et l'impact des propriétés et mécanismes qu'elles négligent n'a pas été quantifié. Ceci est fait dans les travaux présentés dans Roubinet et al. (2012) en utilisant des outils mathématiques spécifiquement adaptés qui permettent de résoudre le système initial d'équations 2D sans hypothèses simplificatrices des mécanismes mis en jeu dans le système, et sans une expression à priori des échanges entre zones mobile et immobile. La distribution spatiale et temporelle des concentrations de solutés dans les zones mobile et immobile est exprimée en utilisant les fonctions de Green associées aux équations, et en imposant la continuité des échanges de flux de solutés à l'interface des deux milieux. La condition de continuité de ces expressions à l'interface mène à une équation d'intégrale dans le domaine de Laplace, dont la résolution semi-analytique permet d'obtenir les solutions finales du système.

Les solutions ainsi développées sont utilisées pour montrer que les échanges entre zones mobile et immobile sont régulés par (i) les propriétés de la zone immobile pour des systèmes de type fracture-roche, et (ii) les propriétés de la zone mobile pour des systèmes aquifère-aquitard caractérisés par une forte dispersion transversale dans l'aquitard, avec un effet d'autant plus significatif pour les régimes dominés par la diffusion. Concernant la représentation unidimensionnel de la diffusion dans la zone immobile, la gamme de validité de cette hypothèse est mise en évidence en fonction du nombre de Péclet du système. La diffusion longitudinale dans la zone immobile n'est pas un mécanisme déterminant pour des régimes dominés par l'advection ($Pe \geq 10^{-1}$), correspondant à des conditions de forçage hydraulique du système (Figure 29a). Au contraire, pour des régimes dominés par la diffusion ($Pe \leq 10^{-2}$), la diffusion longitudinale dans la zone immobile a un impact déterminant sur la distribution spatiale et temporelle des solutés dans le système (Figure 29b-c), et donc sur la distribution des temps de restitution des solutés. En favorisant le déplacement longitudinal dans le système et les échanges entre zones mobile et immobile, l'étude d'une injection ponctuelle à l'entrée de la fracture montre que les temps de restitution sont plus courts et l'amplitude de la queue de restitution est réduite lorsque les échanges fracture-matrice sont correctement représentés, comme présenté en détail dans Roubinet et al. (2012).

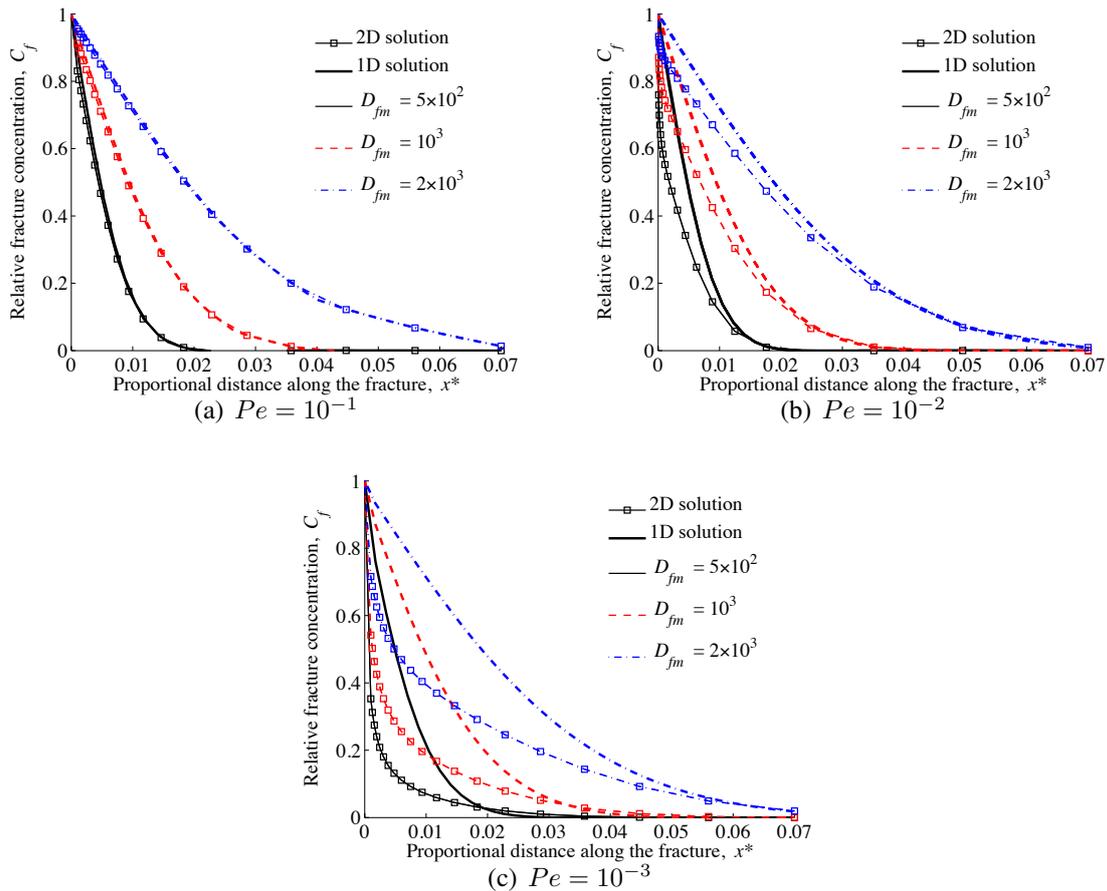


FIGURE 29 – Concentrations dans la fracture avec les solutions analytiques 1D et 2D pour plusieurs ratios D_{fm} des propriétés dispersives et diffusives du milieu, et pour des régimes de transport (a) dominé par l’advection, (b) intermédiaire et (c) dominé par la diffusion (Roubinet et al., 2012).

3.3.2 Réactions et changement d’échelle

Changement d’échelle pour les systèmes fracture-matrice

Pour prendre en compte des conditions de réactivité des solutés dans les systèmes précédemment décrits, les méthodes existantes de suivi de particules considèrent des réactions constantes ou linéaires (ordre zéro ou premier ordre) dans des domaines aux propriétés homogènes. Cela permet de simplifier la prise en compte de la perte ou du gain de la masse transportée par les particules mais pas de travailler avec des réactions aux expressions complexes, qui sont réalistes et représentatives des réactions ayant lieu dans le milieu naturel ou en laboratoire. Dans l’objectif d’adapter les méthodes de suivi de particules, nous proposons une nouvelle méthode, appelée R-TDRW (Reactive-Time Domain Random Walk), et sa version effective appelée UR-TDRW (Upscaled Reactive-TDRW). La méthode R-TDRW à la petite échelle repose sur le déplacement de particules sur une grille fixe et sur un couplage transport-chimie en effectuant les réactions chimiques à l’échelle de la grille sur des temps de pause du transport. Cette formulation nous permet de travailler avec n’importe quelle expression de la réaction chimique tout en profitant des avantages liés à la

modélisation du transport par des particules (c'est-à-dire, adapté aux propriétés et processus hétérogènes, facilité pour l'upscaling et possibilité de parallélisation).

Le problème est formulé en considérant le transport de N_s espèces réactives tel que la concentration de soluté $c_s(\mathbf{x}, t)$ de l'espèce s ($s = 1, \dots, N_s$) à la position \mathbf{x} et au temps t satisfait l'équation de transport réactif

$$\frac{\partial[\phi(\mathbf{x})c_s(\mathbf{x}, t)]}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}(\mathbf{x})c_s(\mathbf{x}, t)] = \nabla \cdot [\mathbf{D}(\mathbf{x})\nabla c_s(\mathbf{x}, t)] - r_s(c_s, \mathbf{x}, t) \quad (44)$$

avec ϕ la porosité, \mathbf{u} la vitesse d'écoulement, \mathbf{D} la matrice du tenseur de diffusion et r_s le terme de réaction lié à l'espèce s . $\phi = 1$ dans le domaine mobile, $\mathbf{u} = 0$ dans le domaine immobile, et le coefficient de diffusion effectif $D_e = D_m\phi^n$ avec D_m le coefficient de diffusion moléculaire et n l'exposant de porosité dans le domaine immobile et $D_e = D_m$ dans le domaine mobile.

À l'échelle du système fracture-matrice, les domaines bidimensionnels sont discrétisés en pixels de taille régulière Δx et le déplacement des particules est modélisé avec l'approche TDRW (Dentz et al., 2012; Russian et al., 2016) qui est formulée ici pour les processus advectifs et diffusifs avec une matrice hétérogène

$$\mathbf{x}_i(n+1) = \mathbf{x}_j(n) + \xi_{ij}, \quad t(n+1) = t(n) + \theta_j, \quad (45)$$

exprimant le déplacement du pixel j vers le pixel i avec le pas de déplacement $|\xi_{ij}|$ et le temps de transition θ_j . La probabilité w_{ij} de sauter du pixel j vers l'un de ses pixels voisins i appartenant à l'ensemble \mathcal{V}_j , est définie comme

$$w_{ij} = \frac{b_{ij}}{\sum_{k \in \mathcal{V}_j} b_{kj}} \quad \text{avec} \quad b_{ij} = D_{ij}\Delta x + u_{ij}\Delta x^2 H(u_{ij}), \quad (46)$$

avec $H(u_{ij}) = 1$ si $u_{ij} > 0$ et 0 sinon, u_{ij} étant la vitesse d'écoulement du pixel j vers i et D_{ij} la moyenne harmonique des coefficients de diffusion dans les pixels i et j . Le temps θ_j associé au saut partant du pixel j de porosité et volume ϕ_j et V_j , est tiré dans la distribution exponentielle $\psi(t, \tau_j) = \exp(-t/\tau_j)/\tau_j$ avec $\tau_j = \phi_j V_j / \sum_{k \in \mathcal{V}_j} b_{kj}$. Les réactions sont modélisées à l'échelle du pixel avec la concentration $c_{j,s}$ des espèces s dans le pixel j définie comme

$$c_{j,s} = \sum_{k \in \mathcal{K}_j} m_{k,s} / (\phi_j V_j), \quad (47)$$

avec \mathcal{K}_j l'ensemble des particules présentes dans le pixel j et $m_{k,s}$ la masse de l'espèce s portée par la particule k . En utilisant une approche de fractionnement d'opérateur, la concentration et la masse des particules dans le pixel sont mises à jour de manière isochronique, c'est-à-dire à des instants discrets $t_n = n\Delta t$ ($n = 1, 2, \dots$) en fonction de la vitesse de réaction chimique $r_s(c_s, \mathbf{x}, t)$ associé à l'espèce de soluté s . Cela implique que les concentrations et masses sont mises à jour comme suit

$$c'_{j,s} = c_{j,s} + \Delta t \frac{r_s}{\phi_j}, \quad m'_{k,s} = c'_{j,s} \phi_j \frac{V_j}{N(\mathcal{K}_j)}, \quad k \in \mathcal{K}_j \quad (48)$$

avec $N(\mathcal{K}_j)$ le nombre de particules dans l'ensemble \mathcal{K}_j .

La formulation à une échelle supérieure repose sur une représentation 1D du domaine mobile sur laquelle les processus d'advection et de diffusion sont considérés et couplés à la diffusion dans le domaine immobile (non représenté physiquement). Les particules se déplacent le long du domaine mobile 1D selon les probabilités aval (down, W_d) et amont (up, W_u)

$$W_d = \frac{D_m}{2D_m + U\Delta X}, \quad W_u = \frac{D_m + U\Delta X}{2D_m + U\Delta X}, \quad (49)$$

avec D_m , U et ΔX le coefficient de diffusion moléculaire, la vitesse d'écoulement mise à l'échelle et la taille de pixel du domaine mobile 1D. Les temps de déplacement correspondants sont exprimés comme

$$T(n+1) = T(n) + \theta_j, \quad \theta_j = T_j^m + T_j^{im}, \quad T_j^m \sim \psi(t, \tau_j), \quad (50)$$

avec θ_j le temps de saut de la particule partant du pixel j comprenant les temps dans les domaines mobile (T_j^m) et immobile (T_j^{im}). T_j^m est défini à partir de la forme 1D-réduite de l'approche TDRW, correspondant à la distribution exponentielle $\psi(t, \tau_j)$ pour laquelle la moyenne de distribution se réduit à $\tau_j = \Delta X^2 / (2D_m + U\Delta X)$. T_j^{im} est une description à grande échelle du processus diffusif dans le domaine immobile, dont la distribution $P_{\tau_{im}}$ est dérivée des simulations numériques à petite échelle. Ces expressions sont associés à la probabilité de survie \mathcal{S}_j^s , qui est la probabilité qu'une particule continue à porter l'espèce s après avoir quitté le pixel j , et qui est aussi définie à partir des simulations numériques à petite échelle.

Ces nouvelles approches numériques permettent de travailler sur des systèmes fracture-matrice avec des propriétés hétérogènes de la matrice (Figure 30), d'effectuer des simulations à l'échelle du système fracture-matrice du transport de solutés avec réactions pour une grande gamme de variation des propriétés hydrochimiques (Figure 31, lignes), et de définir des fonctions d'upscaling de transport et de réactivité (Figure 32) qui peuvent ensuite être utilisées dans des simulations à plus grande échelle (Figure 31, croix). Les résultats reportés ci-dessous sont décrits en détail dans Roubinet et al. (2022).

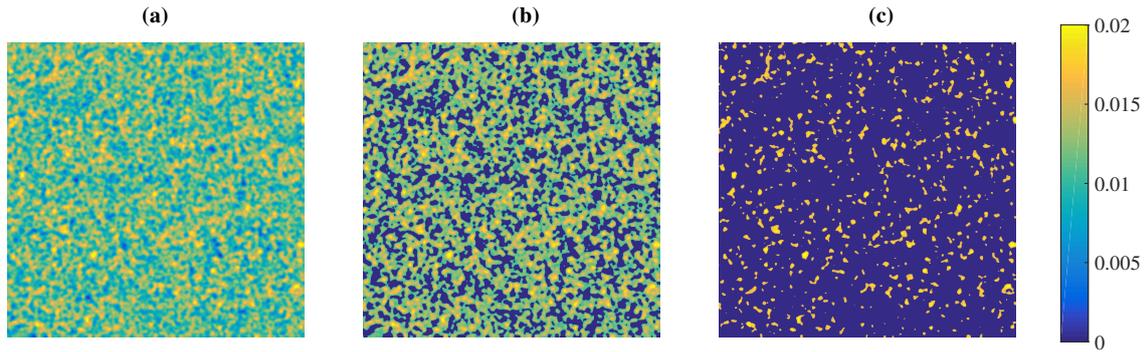


FIGURE 30 – Champs de porosité hétérogènes de distribution multi-gaussienne avec la porosité de seuil ϕ_{th} fixée à (a) 0,0, (b) 0,01 et (c) 0,015. L'échelle de couleur indique la porosité (Roubinet et al., 2022).

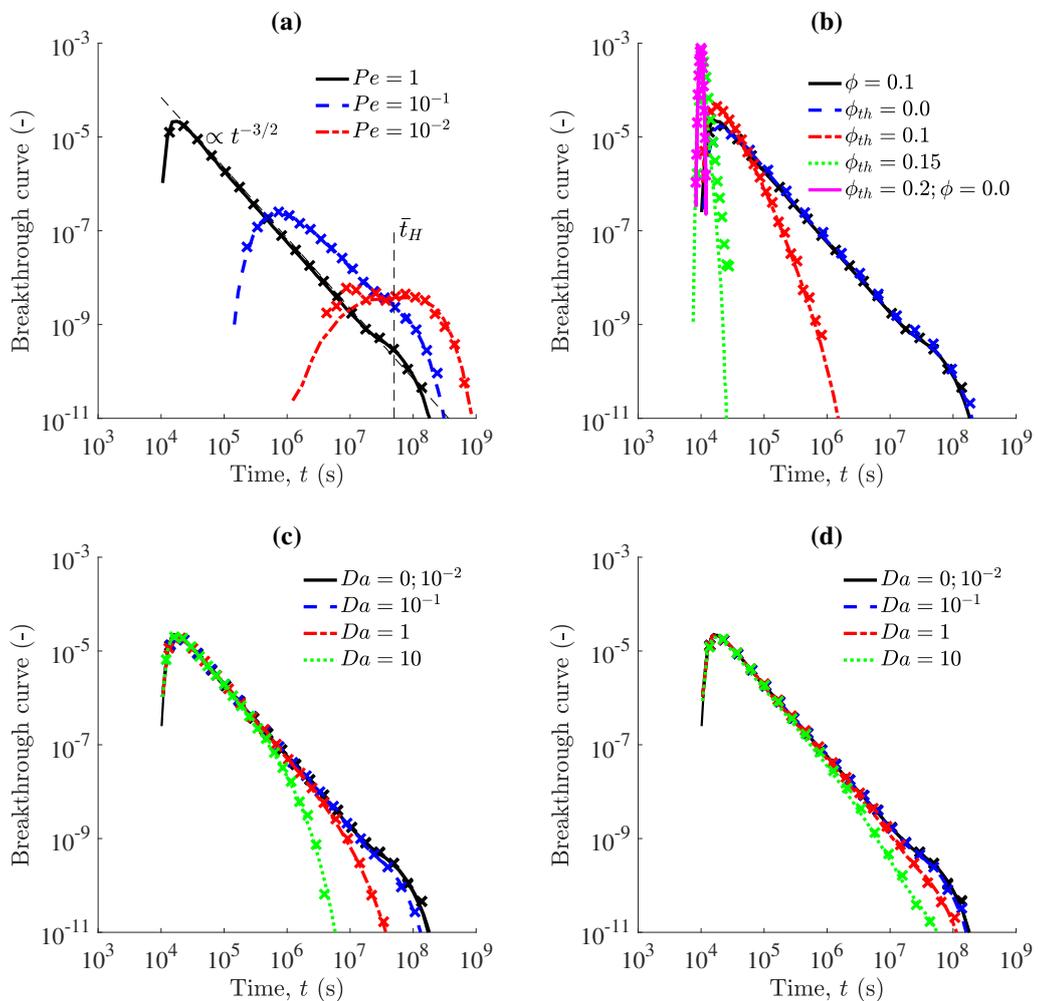


FIGURE 31 – Courbes de restitution calculées avec les modèles R-TDRW (lignes) et UR-TDRW (croix) pour (a) différentes conditions hydrodynamiques, (b) différentes propriétés de la matrice, (c-d) différentes conditions chimiques et types de réaction ((c) linéaires et (d) non-linéaires) (Roubinet et al., 2022).

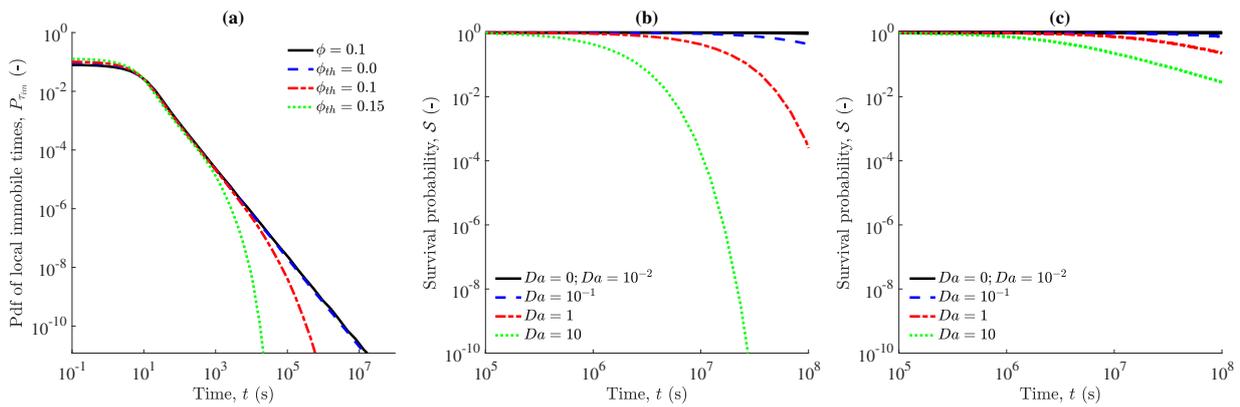


FIGURE 32 – Fonctions pour l’upscaling. (a) Pdfs des temps locaux immobiles en fonction des hétérogénéités matricielles, et (b-c) probabilités de survie pour une réaction linéaire et non-linéaire (Roubinet et al., 2022).

Modèles hybrides pour les fractures

Les modèles présentés précédemment reposent sur une description des écoulements et du transport à l’échelle de Darcy, échelle de travail qui est nécessaire, et généralement valide, pour des simulations à grande échelle. Cependant, pour des simulations à petite échelle reproduisant certaines expériences en laboratoire, les conditions de validité de ces représentations ne sont pas respectées et l’impact des mécanismes locaux sur le comportement global du système ne sont pas capturés correctement (Battiato and Tartakovsky, 2011; Noiriél et al., 2007; Tartakovsky et al., 2008). Alors qu’une description à l’échelle du pore est requise pour ces mécanismes, la taille des expériences et les limitations numériques empêchent une telle description sur l’ensemble du domaine. En combinant différentes échelles de représentation, les modèles hybrides permettent d’améliorer la description des phénomènes locaux déterminants et de coupler plusieurs processus et échelles. Ces modèles sont basés sur le couplage entre les équations à l’échelle du pore dans les zones non homogénéisables et les équations homogénéisées dans le reste du domaine (Battiato et al., 2011; Tartakovsky et al., 2008). Cependant, lors de l’étude de réactions géochimiques hétérogènes sous contraintes hydrauliques, les modèles hybrides existants sont limités à des temps courts de simulations, dûs à des coûts numériques encore trop importants et des hypothèses sur la géométrie et l’hydrodynamique du système.

Ces limitations peuvent être contournées en remplaçant le couplage analytique itératif des concentrations et des flux de solutés des méthodes existantes par l’utilisation d’interpolateurs numériques (Roubinet and Tartakovsky, 2013). Ces noeuds de discrétisation supplémentaires sont localisés à l’interface entre les deux échelles de description et mène à une discrétisation hybride du milieu (Figure 33). Les écoulements sont alors définis par la loi de Poiseuille dans le domaine continu et par la résolution numérique des équations de Stokes dans le domaine poreux. Les concentrations de solutés sont déterminées par une formulation hybride des volumes finis considérant

les équations d'advection-dispersion 1D et advection-diffusion 2D dans les domaines continus et poreux, respectivement, et incorporant les conditions de continuité des concentrations et des flux de solutés aux interfaces. L'évolution de la géométrie du domaine est évaluée à partir d'une loi d'homogénéisation et d'un algorithme d'automates cellulaires dans les domaines continus et poreux, respectivement.

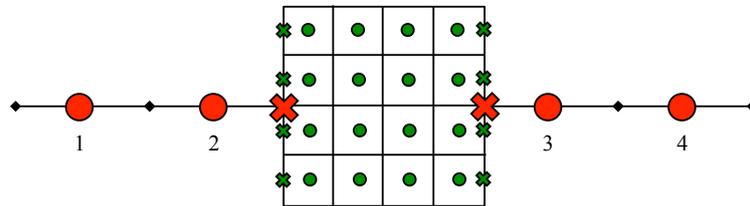


FIGURE 33 – Discrétisation hybride avec une discrétisation 2D à l'échelle du pore (cercles verts) et 1D à l'échelle continue (cercles rouges) avec des noeuds de couplage (croix) à l'interface (Roubinet and Tartakovsky, 2013).

Le concept de modélisation ainsi développé permet de caractériser la distribution des concentrations de solutés, ainsi que l'impact des réactions géochimiques, dans des zones non homogénéisables incluses dans des domaines homogénéisés. Ces configurations sont observées, par exemple, lors de l'injection de solutés dans une fracture associée à une réaction de précipitation qui entraînera une diminution de l'ouverture de la fracture à l'entrée du système (là où la concentration est la plus forte). La Figure 34 montre que l'augmentation des taux de réaction globaux mène à une diminution des temps de demi-fermeture de la fracture et à des concentrations de solutés à l'entrée de la fracture qui sont de moins en moins homogénéisables. La présence localisée de forts taux de réactions mène aussi à des comportements différents en fonction des taux de réactions considérés (Figure 35). Pour la plus faible valeur de k_c (Figure 35a), la concentration de soluté au temps d'observation est proche de sa valeur initiale dans la majeure partie de la fracture, et la croissance localisée de la paroi de la fracture est similaire dans les trois points chauds. L'augmentation du taux de réaction k_c (Figure 35b-c) augmente la variabilité longitudinale de la concentration de soluté et facilite la différenciation de l'intensité de la croissance de surface aux points chauds.

La stratégie de modélisation précédemment résumée et les résultats associés sont décrits en détail dans Roubinet and Tartakovsky (2013). Les modèles hybrides ainsi définis sont applicables à d'autres processus que ceux étudiés jusqu'à présent, et à d'autres échelles de représentation. Ces modèles seront typiquement bien adaptés pour prendre en compte des réactions géochimiques et biotiques localisées dans des systèmes hétérogènes, et en particulier pour reproduire des expériences menées en laboratoire.

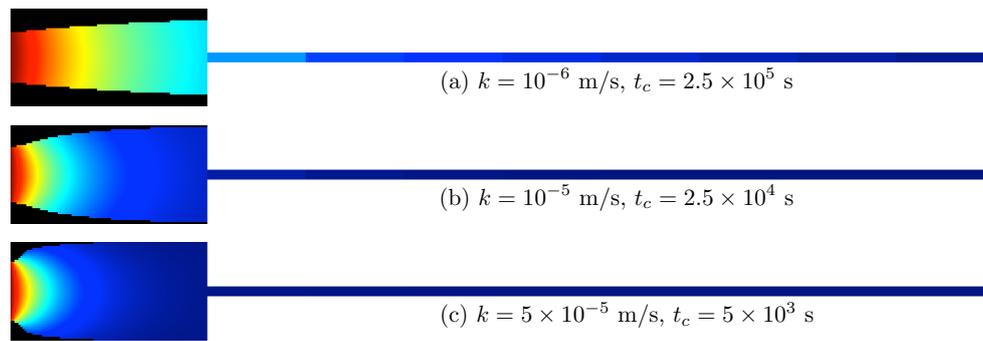


FIGURE 34 – Impact des réactions de précipitation sur la géométrie d'une fracture lors d'une injection de solutés à l'entrée du domaine. Les concentrations diminuent de l'entrée (rouge foncé) vers la sortie (bleu foncé) du domaine et les zones noires représentent la formation de masse solide à la moitié du temps de fermeture t_c de la fracture. Une description à l'échelle du pore est utilisée à l'entrée de la fracture et à l'échelle continue sur le reste du domaine avec un taux de réaction k impliquant un comportement global du milieu de (a) homogénéisable à (c) non-homogénéisable (Roubinet and Tartakovsky, 2013).

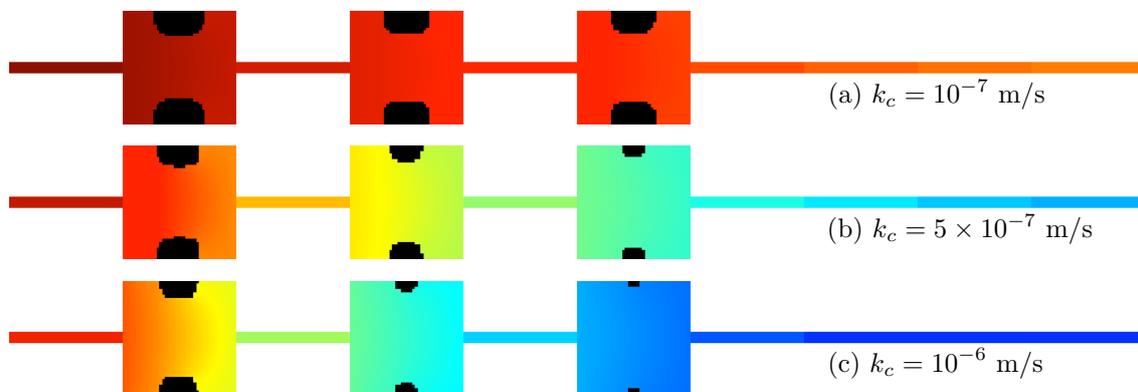


FIGURE 35 – Impact des taux de réactions hétérogènes le long d'une fracture avec une représentation à l'échelle du pore pour les zones de fortes réactions (carrés) et une représentation homogénéisée pour le reste du domaine (lignes épaisses) en augmentant le taux de réaction globale k_c de (a) vers (c) (Roubinet and Tartakovsky, 2013).

3.3.3 Expériences de karstification en laboratoire

De nombreuses applications sont liées à l'étude des réactions géochimiques et à la nécessité de comprendre l'impact sur le comportement à grande échelle de ces réactions qui se déroulent à la petite échelle. Dans le contexte de la pérennisation et de la protection des ressources en eau, la formation des karsts est une problématique clé nécessitant des expériences en laboratoire pour la compréhension des processus mis en jeu, et le développement de modèles adaptés pour reproduire ces processus à différentes échelles et sous différentes conditions. Pour comprendre et caractériser la formation de réseaux de drainage en fonction des contraintes minéralogiques, structurales et hydrodynamiques, des expériences de dissolution sur plusieurs roches carbonatées et sous différentes conditions hydrochimiques ont été développées en laboratoire. Ces travaux ont été menés dans le cadre de la thèse de Marie Léger grâce à l'expertise de Linda Luquot sur les expériences de transport réactif en laboratoire.

Les expériences ont consisté en l'injection d'une solution acide dans des échantillons de roches carbonatées dont les propriétés pétrophysiques ont été évaluées en laboratoire et par imagerie avant et après les expériences. Des conditions atmosphériques de pression et température sont considérées et les expériences sont menées jusqu'à l'obtention d'un chemin préférentiel connectant la face d'injection de l'échantillon et sa face opposée, l'obtention de ce(s) chemin(s) étant révélée par une hausse soudaine et forte de la perméabilité de l'échantillon dans le sens de l'écoulement (Figure 36). Ces expériences ont été conduites sur (i) des échantillons de craie avec différents débits et concentrations de la solution acide injectée, et (ii) trois types de roche carbonatées avec différents débits d'injection. La caractérisation des échantillons, la description des expériences et les résultats obtenus sont décrits en détail dans Leger and Luquot (2021); Leger et al. (2022a,b) et résumés ci-dessous.

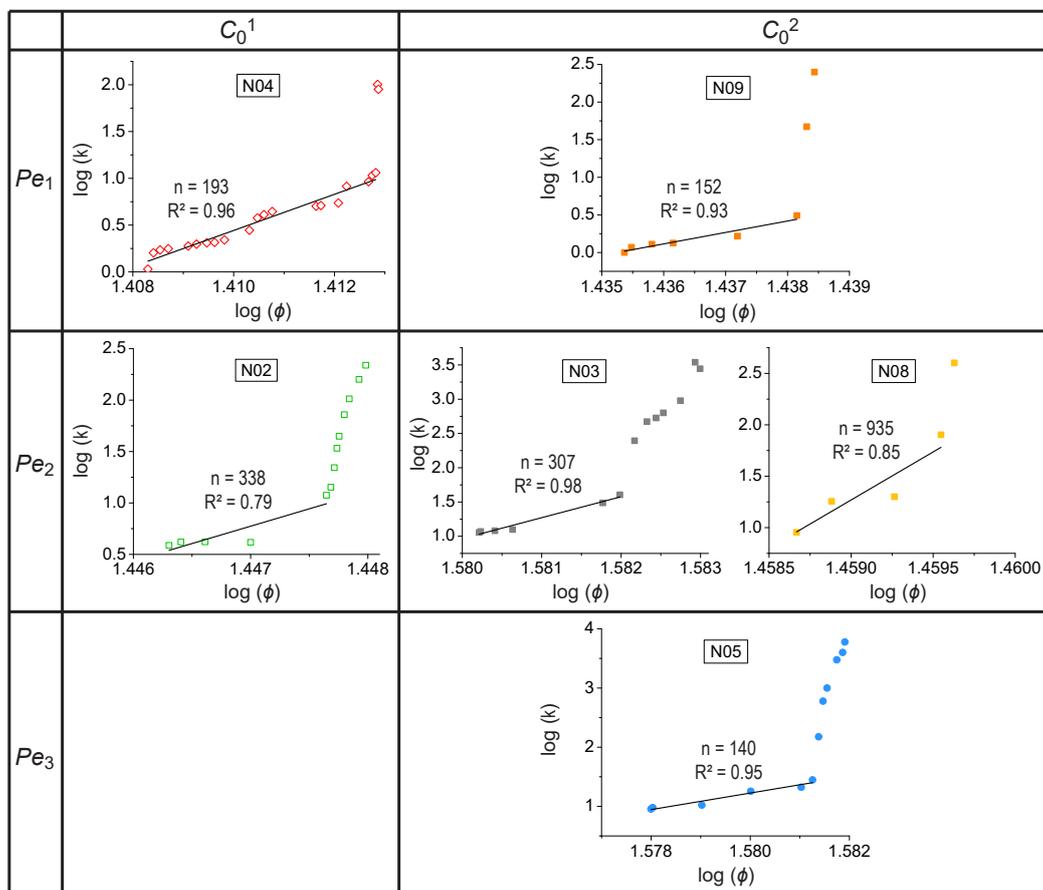


FIGURE 36 – Évolution de la perméabilité en fonction de la porosité des échantillons N02, N03, N04, N05, N08 et N09 avec les concentrations $C_0^1 = 10^{-3}$ et $C_0^2 = 10^{-2}$ mol/L d'acide injecté et les débits d'injection 2.9, 25.2 et 63 mL/h correspondant aux nombres de Peclét Pe_1 , Pe_2 et Pe_3 . n est l'exposant de puissance de la loi de Kozeny (1927) $k = \phi^n$ (Leger et al., 2022a).

Ces expériences mettent en évidence différents types de réseaux de connexion en fonction des débits et concentrations d'injection considérés, avec des réseaux qui semblent aller de structures fines et plutôt localisées vers des structures plus étalées et denses en augmentant la concentration et le débit des injections de solution acide (Figure 37). Nous observons aussi un impact des propriétés initiales de la roche avec

(i) des porosités initiales plus importantes pour les échantillons N03 et N05 (Figure 36) qui seraient à l'origine d'une dissolution plus uniforme sur la face d'injection (Figure 37), et (ii) les hétérogénéités initiales de la roche qui seraient à l'origine des chemins créés en comparant les réseaux avant et après expérience (non montré ici).

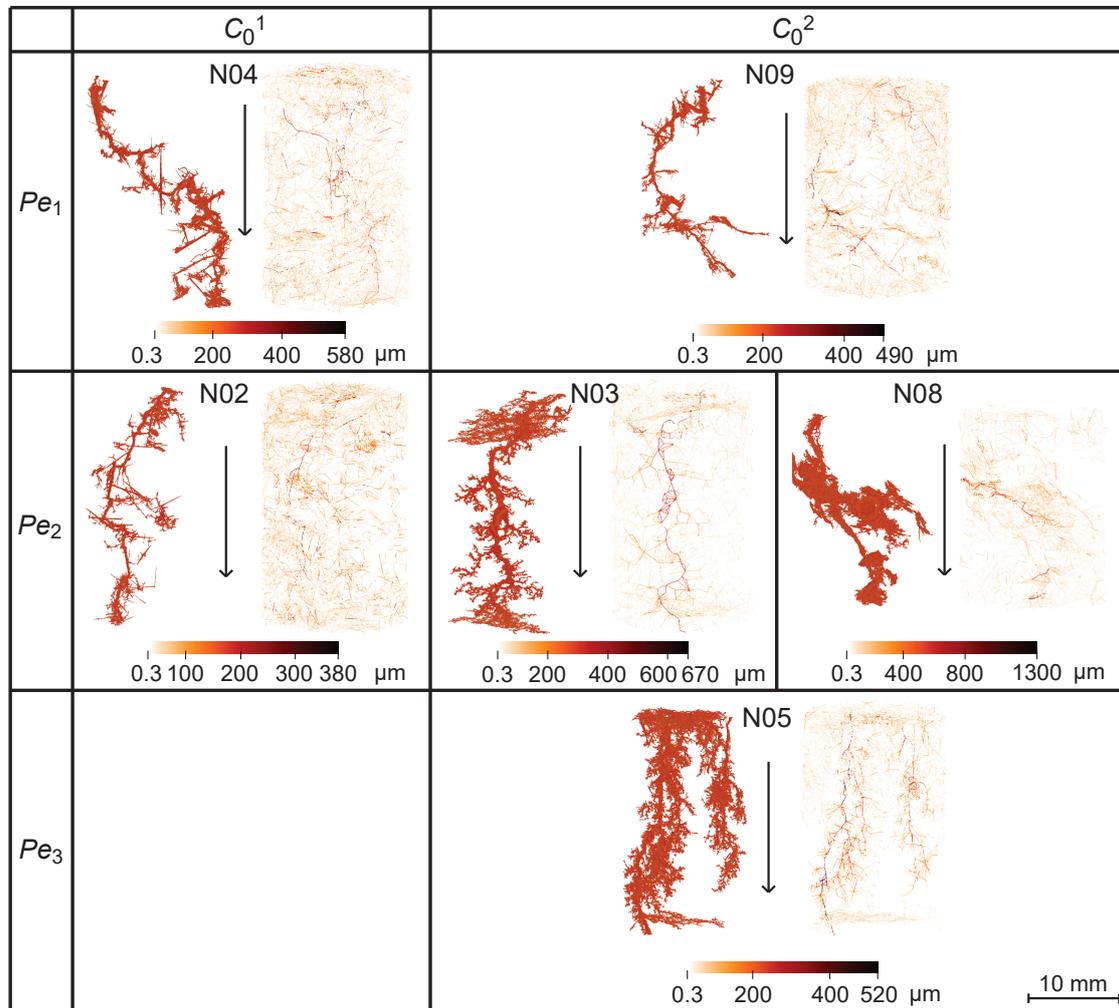


FIGURE 37 – Chemins préférentiels mis en évidence pour chaque échantillon avec l'image de l'acquisition de tomographie à rayon X (à gauche) et l'image de Pore Network Model obtenue à partir du logiciel OpenPNM (Gostick et al., 2016) (à droite). La flèche indique le sens du flux injecté, les échelles de couleurs représentent les diamètres de gorge en μm des PNM et l'échelle en bas à droite s'applique à tous les échantillons (Leger et al., 2022a).

Les expériences menées ensuite sur différents types de roches carbonatées avec différents débits d'injection et une seule concentration d'acide injecté permettent de recueillir des données relatives à (i) la dépendance entre le taux de dissolution et le nombre de Péclet avec une augmentation du taux de dissolution avec le nombre de Péclet, et (ii) l'impact du type de roche pour un nombre de Péclet donné avec un taux de dissolution qui diminue dans l'ordre suivant : craie, dolomie et calcaire crinoïdal (Figure 38). Ce comportement pourrait être lié à la microporosité de la craie qui est plus importante (avec un faible facteur de formation) induisant des surfaces de

réactions plus grandes, et à la présence de conduits plus localisés et moins tortueux dans la dolomite qui expliquerait des augmentations de perméabilité plus linéaires et des taux de dissolution plus importants que pour le calcaire crinoidal (mis en évidence dans Leger et al. (2022b)). Comme précédemment, la structure initiale de la roche a aussi un impact déterminant sur ses propriétés après expérience.

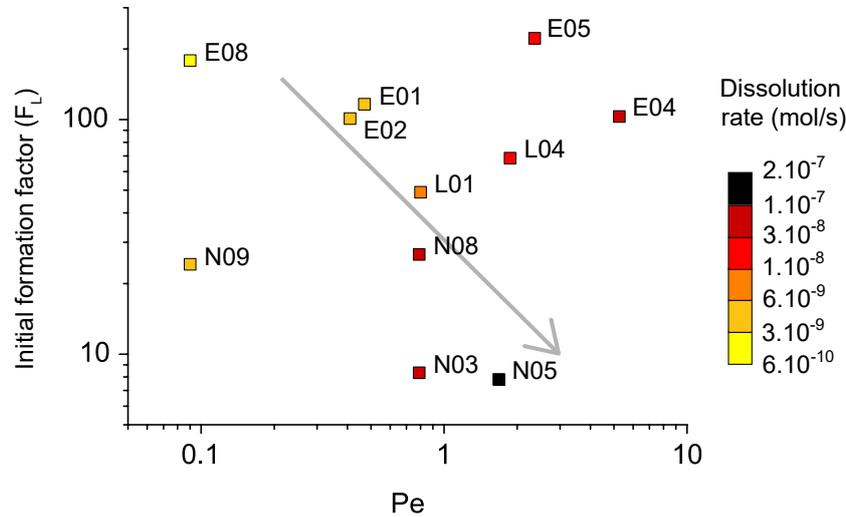


FIGURE 38 – Taux de dissolution pour les échantillons de craie (Normandie, Nxx), calcaire crinoidal (Euville, Exx) et dolomite (Lexos, Lxx) en fonction du facteur de formation F_L (déterminé à partir des données électriques) et du nombre de Péclet Pe (Leger et al., 2022b).

Les expériences menées dans ce travail, et les analyses qui y sont associées, permettent de mettre en évidence l'impact des hétérogénéités à l'échelle du pore lors de la dissolution des roches carbonatées, et de caractériser le rôle des propriétés hydrodynamiques et chimiques du fluide réactif. Les données recueillies et les conclusions qui en découlent sont des outils précieux pour mettre en oeuvre des approches de modélisation reproduisant ce type d'expériences, et permettant à plus long terme de proposer des modèles à grande échelle de formation des karsts.

4 Projet de recherche

4.1 Méthodes de caractérisation sur sites

4.1.1 Interprétation des données de résistivité électrique

Mes travaux sur la caractérisation des milieux fracturés à partir de méthodes de mesure électrique seront poursuivis à court et moyen terme suivant deux axes principaux. Le premier axe correspond à l'inversion de données synthétiques générées avec le code `ERT_DDP_2.5D`. Ces travaux sont développés en collaboration avec Cédric Champollion (Géosciences Montpellier) et ont été l'objet du stage de Batyste Perrin (Master 2, Université de Montpellier). Nous avons déjà montré que les méthodes d'inversion classique n'estiment pas correctement les propriétés des milieux fracturés comme illustré sur la Figure 39a. Cette Figure montre un exemple simple d'inversion d'un milieu homogène avec la présence d'une fracture verticale au milieu du domaine pour lequel l'inversion avec les méthodes classiques ne montre pas une zone plus conductrice où la fracture est localisée. À partir de ce constat, l'objectif du stage de Batyste Perrin a été d'effectuer l'inversion de données synthétiques de milieux fracturés avec le code `ERT_DDP_2.5D` associé à une inversion stochastique de type MCMC (Markov Chain Monte Carlo). Une première étape a consisté en l'inversion de la position de la fracture en considérant à priori une fracture unique verticale. Les tests effectués avec une dizaine de chaînes de Monte Carlo convergent vers la position réelle de la fracture en un nombre faible d'itérations et la valeur la plus probable de la densité de probabilité du paramètre à estimer (la position de la fracture) est bien la position réelle de la fracture. Ces tests sur une fracture unique ont été complétés par des tests sur la même fracture découpée en segments pour lesquels on estime la probabilité de présence ou non de chaque segment. L'étape suivante est alors de travailler sur une grille de segments de fractures pour lesquels on estime leur présence ou non (Figure 39b). Pour cela, il sera nécessaire de définir l'expression de la fonction coût à minimiser prenant en compte l'écart entre les données réelles et simulées, mais en cherchant aussi à influencer sur la cohérence des configurations obtenues en favorisant la continuité des connexions par exemple. À plus long terme, l'objectif est d'aboutir à une méthodologie d'inversion qui sera utilisée pour estimer les propriétés des milieux fracturés à partir de mesures de résistivité électrique collectées en surface. Les premiers tests sur des données réelles pourront être effectués sur des sites tels que Saint Ferron dans le Larzac (Géosciences Montpellier), Hyderabad en Inde (BRGM) et Amma-Catch en Afrique (IRD).

Le deuxième axe envisagé pour l'inversion des données de résistivité électrique concerne des données acquises entre puits avant et après l'injection d'un agent réducteur chimique sur un site pollué aux solvants chlorés (Lévy et al., 2022). Ce travail est mené en collaboration avec Léa Lévy (Lund University, Suède) dans le cadre du stage M1 de Léa Lelimoizin (2022), et sera poursuivi pendant son stage de M2 en 2023.

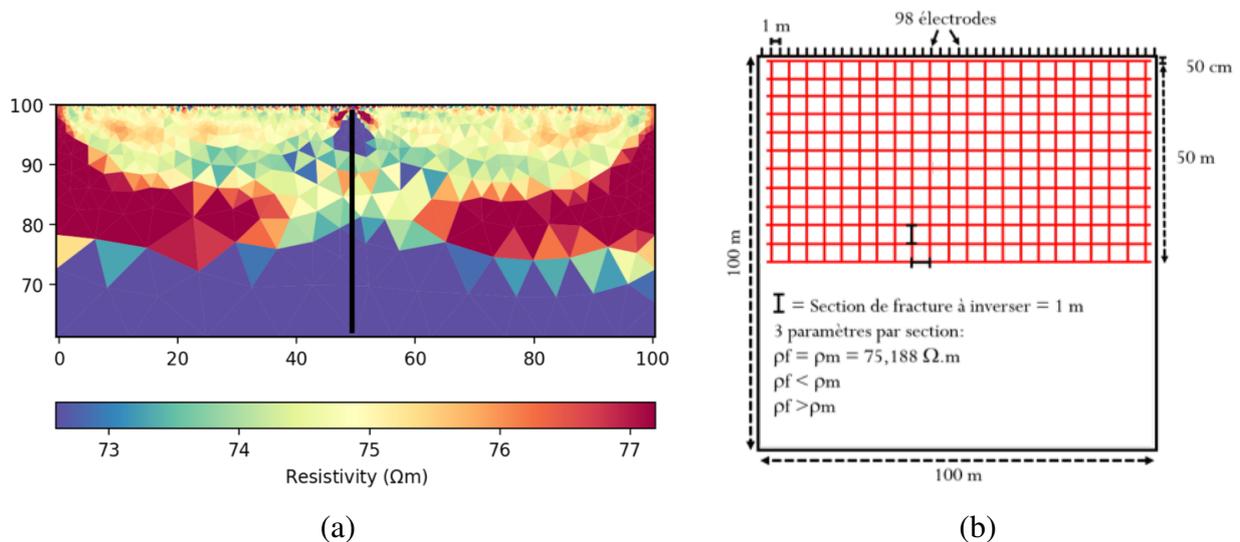


FIGURE 39 – (a) Inversion des données de résistivité électrique avec le logiciel Pygimli en présence d'une fracture verticale située au centre du domaine. (b) Représentation des fractures découpées en segments dont la présence sera estimée par inversion (Perrin, 2021).

La Figure 40 montre le résultat de l'inversion des données obtenues sur le terrain par une méthode classique de type milieux poreux équivalents. Ces résultats mettent en évidence des zones qui sont devenues plus conductrices (en bleu), probablement en lien avec la création de chemins préférentiels lors de l'injection de solvant. Pour tester cette hypothèse, nous définissons le ratio de résistivité électrique avec le modèle ERT_DDP_2.5D en considérant trois fractures pour représenter les zones conductrices précédemment mises en évidence. Les similarités observées entre les données de terrain et les résultats obtenues avec le milieu fracturé (non montrées ici) montrent la pertinence de représenter ces zones conductrices par des éléments fins de type fractures. Ces travaux seront poursuivis (i) en mettant en oeuvre une inversion de ces éléments (inversion sur leur présence et leurs propriétés) en considérant plusieurs scénarios du nombre de fractures, et (ii) en comparant les résultats de cette inversion à celle obtenue avec les méthodes de représentation en milieux poreux équivalents afin d'identifier si une représentation discrète des zones conductrices amène à plus de précision dans les résultats.

Une extension de ces travaux concerne ensuite le couplage des données de résistivité électrique avec des données de transport où la géométrie des zones conductrices peut être déterminante, et où leur représentation sous forme de milieux poreux équivalents est problématique car trop grossière. Le couplage entre le transport de solutés et les données électriques sera considéré pour utiliser ces dernières données comme outils de suivi des polluants, de leur propagation à leur remédiation. Ceci rentre dans le cadre de la collaboration avec Léa Lelimoizin et Léa Lévy précédemment citée, et correspond à des projets de recherche initiés par Léa Lévy en utilisant et étendant mes codes de transport dans les milieux réactifs.

Ces deux axes de travail permettront de tester l'utilisation du modèle ERT_DDP_2.5D

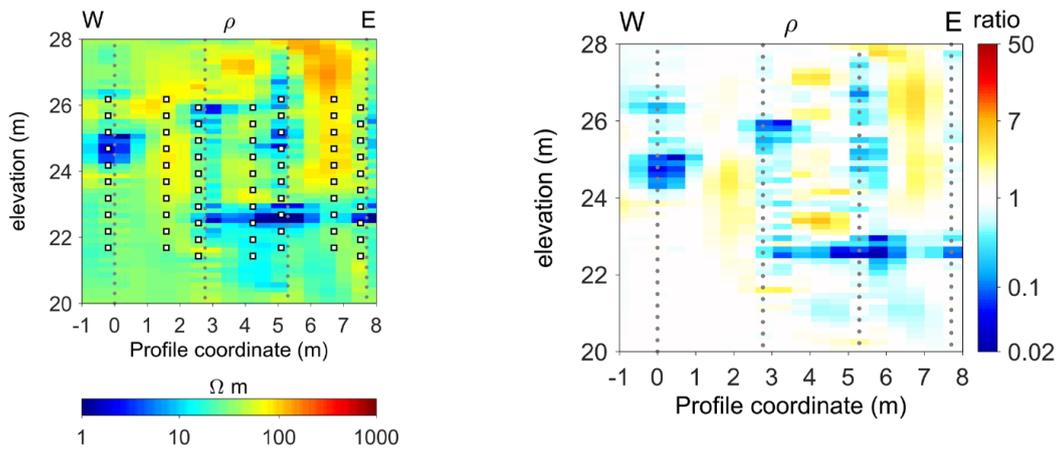


FIGURE 40 – (a) Inversion des données de résistivité un jour après l’injection. (b) Ratio entre la résistivité avant et après injection (Lévy et al., 2022).

dans des procédures d’inversion, en évaluant en particulier le temps nécessaire pour estimer les paramètres étudiés et en optimisant le modèle direct si besoin. Ces inversions seront menées sur la plateforme MESO@LR de l’Université de Montpellier avec deux niveaux de parallélisation, (i) la parallélisation du modèle direct correspondant à la résolution de plusieurs expériences de résistivité électrique en même temps, et (ii) la parallélisation de l’inversion en lançant plusieurs chaînes de Monte Carlo en même temps. Si l’optimisation du modèle direct et les deux niveaux de parallélisation ne permettent pas d’aboutir à des inversions faisables en des temps raisonnables, l’utilisation de surrogate modèles, comme utilisés dans la partie thermique de mes travaux, sera envisagée.

4.1.2 Extension des modèles pour les expériences thermiques

Les modèles développés pour le transport de chaleur dans les milieux fracturés et optimisés pour interpréter des données thermiques recueillies dans les puits seront confrontés à des données de terrain. Ils ont été pour l’instant mis au point et testés avec des données synthétiques dans des configurations 2D. Le modèle sera modifié pour prendre en compte des configurations 3D en deux étapes. À court terme, la symétrie radiale du système lors d’un pompage sera représentée en considérant que la coupe 2D correspond à la vue de surface du système, supposant que les éléments fracturés s’étendent infiniment dans la profondeur du système. Les données de terrain seront fournies par Maria Klepikova (Géosciences Rennes) et correspondront à des données sur lesquelles nous avons déjà travaillé avec des interprétations simplifiées (Klepikova et al., 2022). Nous chercherons à estimer les paramètres stochastiques du milieu fracturé (comme fait sur les cas synthétiques) en intégrant le modèle direct dans des procédures d’inversion à complexité croissante allant des méthodes de minimisation standard disponible dans les bibliothèques Matlab (tel que des recherches sur grilles comme utilisées dans Roubinet et al. (2015)) à des méthodes MCMC si

nécessaire (comme utilisées pour la partie géophysique des travaux en collaboration avec Cédric Champollion, Géosciences Montpellier). Cette première étape sera développée avec Guofeng Song (étudiant en thèse de l'Université Pétrolière de Chine en collaboration avec GM) qui a travaillé sur l'extension du modèle de réseaux de neurones pour le transport de chaleur proposé dans Zhou et al. (2021) (article en cours de rédaction, Figure 41).

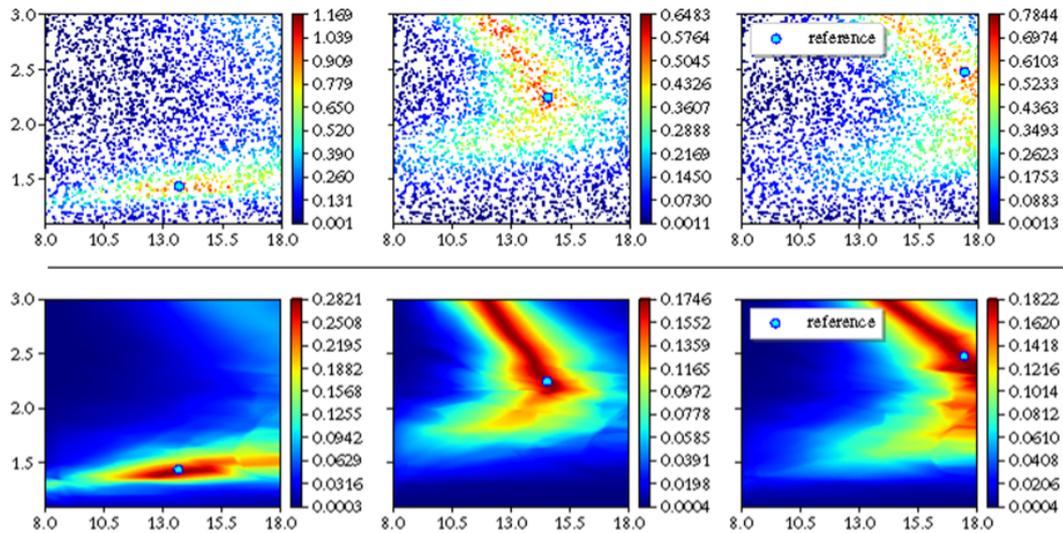


FIGURE 41 – Posterior PDFs avec extension des paramètres de génération des réseaux de fractures.

À plus long terme, la possibilité de travailler avec des générations de milieux fracturés 3D sera évaluée. Cela nécessite de déterminer si le nombre de simulations de transport de chaleur nécessaire pour entraîner des modèles de réseaux de neurones peut être réalisé en des temps raisonnables en considérant en particulier la difficulté de maillage des réseaux de fractures 3D et la nécessité de mettre en oeuvre des simulations basées sur le déplacement de particules dans ces milieux. Des tests seront effectués avec des logiciels classiques tels que Comsol pour le maillage et la résolution des équations d'écoulement, qui pourront être couplés avec des codes de recherche pour la partie résolution de l'équation de la chaleur par le transport de particules. Gérard Lods (ingénieur de recherche en calcul scientifique et caractérisation hydrogéologique à Géosciences Montpellier) sera associé à ce travail aussi bien pour la partie modélisation que pour la partie terrain, avec la possibilité d'étendre son expertise de caractérisation de sites aux mesures thermiques. Cela ouvrirait de nombreuses possibilités d'acquisition et d'interprétation de données pour la suite de ces travaux. La partie modélisation profitera des stratégies développées dans la partie géophysique avec en particulier le déploiement des codes directs et des procédures d'inversion en parallèle sur la plateforme MESO@LR de l'Université de Montpellier.

4.2 Transport (réactif) et upscaling

4.2.1 Développement théorique et analyse

Plusieurs axes de travail seront considérés pour la modélisation du transport de solutés dans les milieux hétérogènes et fracturés. Un premier axe correspond à l'utilisation et l'extension des approches de modélisation R-TDRW et UR-TDRW proposées dans Roubinet et al. (2022) et décrites dans la partie 3.3.2 de mes activités de recherche. Dans un premier temps, des applications pour le transport non-réactif dans une fracture 3D seront considérées en représentant cette fracture par un plan 2D tout en prenant en compte des champs d'ouverture hétérogènes de la fracture. L'objectif sera de résoudre les équations de transport dans la fracture avec les processus d'advection et dispersion, tout en représentant les échanges avec la roche matricielle environnante. Ceci sera fait en combinant la méthode TDRW pour le déplacement dans la fracture, et l'utilisation de solutions analytiques (ou fonctions mémoires analytiques) pour exprimer les temps de retard liés à la diffusion dans la matrice. L'intérêt principal de combiner ces deux méthodes est d'obtenir une résolution rapide et optimisée du problème afin d'étudier l'impact des hétérogénéités du champ d'ouverture sur le transport de solutés, et de prendre en compte la variabilité de ce champ en travaillant sur des centaines de réalisations. Ces travaux sont déjà initiés en collaboration avec Yves Méheust (Géosciences Rennes) et les modèles développés seront aussi exploités pour le transport de chaleur avec les travaux de Pu Li (étudiant en thèse en Chine en visite à Géosciences Montpellier) en collaboration avec Mao Sheng (Université Pétrôlière de Chine, Beijing) et Xiaoguang Wang (Chengdu University of Technology, Chine). L'objectif ici est d'étudier différents scénarios de modification du champs d'ouverture des fractures dans le cadre de l'exploitation géothermique du sous-sol avec des événements tels que le fracking pour la création ou la ré-ouverture de fractures, ou l'injection de fluides pour maintenir la perméabilité des fractures. Les modifications ainsi générées dans les propriétés des fractures donnent lieu à des modifications du transport de chaleur dans les systèmes fracture-matrice correspondants qui seront étudiés avec ces modèles. Cela amènera à mettre en évidence les configurations expérimentales permettant d'optimiser les transferts de chaleur et la variabilité associée à ces phénomènes. Pour ces études, un second objectif sera de proposer des méthodes d'upscaling en se basant sur les méthodes CTRW qui devraient être à même de s'adapter à la variabilité des milieux et des résultats considérés.

4.2.2 Reproduction des expériences en laboratoire

Les expériences de dissolution des carbonates présentées dans la partie 3.3.3 fournissent des jeux de données caractérisant l'impact des conditions hydrochimiques et structurales sur la réactivité du milieu et la formation des chemins préférentiels dans

les milieux karstiques. Une prochaine étape est d'associer des modèles de transport réactif à ces expériences afin de (i) vérifier si les modèles proposés sont capables de reproduire les différentes dynamiques observées, et (ii) tester les hypothèses qui ont été faites pour interpréter les résultats obtenus, en particulier en termes de rôle des hétérogénéités structurales et d'impact des conditions hydrochimiques. La structure du milieu étant décrite grâce aux Pore Network Models (PNMs) qui sont définis à partir du logiciel spécialisé OpenPNM, une première étape consiste à définir jusqu'où peut être menée la modélisation du transport réactif avec ce logiciel et ses analogues développés par Imperial College par exemple. Ce travail est actuellement mené par Jiayan Ji (Université Pétrôlière de Chine en visite à Géosciences Montpellier) et en collaboration avec Xiaoguang Wang (Chengdu University of Technology, Chine) et Linda Luquot (Géosciences Montpellier). Des expressions de réactions relativement simples peuvent être prises en compte avec ces logiciels et l'accès aux propriétés des structures devrait permettre de les modifier en fonction de lois prédéfinies de l'impact des réactions sur les structures. Il est probable que ces outils de modélisation ne permettront pas de complètement reproduire les dynamiques de dissolution observées pendant les expériences. Si c'est le cas, les simulations déjà mises en oeuvre serviront de base de validation pour le développement d'un nouveau code qui se basera sur le couplage de ces logiciels avec des méthodes de déplacement de particules. Ces codes seront inspirés des méthodes développés pour le transport de solutés dans les réseaux de fractures, appliqués à des réseaux de PNMs simplifiés.

À plus long terme, les modèles de transport réactif présentés précédemment (en particulier le modèle R-TDRW) seront adaptés pour reproduire les nombreuses expériences de laboratoire menées par les membres de l'équipe TMP de Géosciences Montpellier. Les premiers efforts se concentreront sur les expériences de dissolution menées dans des échantillons fracturés pour lesquelles l'hétérogénéité de la roche matricielle a été identifiée comme ayant un rôle déterminant sur le type de dissolution mis en jeu, impliquant soit une modification des propriétés hydrauliques de la fracture, soit un changement des propriétés de la matrice (Garcia-Rios et al., 2017; Dávila et al., 2016). Les expériences menées sur les ciments et le stockage de CO₂ (Abdoulghafour et al., 2016; Luquot and Gouze, 2009; Noiriél et al., 2007) pourront aussi être considérées avec pour nécessité commune de mettre en oeuvre un couplage adapté des processus hydro-géochimiques et de proposer une description pertinente des réactions mises en jeu. Cette nécessité est aussi présente pour prendre en compte les réactions biotiques qui peuvent réduire la présence d'une pollution comme la dénitrification naturelle observée sur le site de Ploemeur en Bretagne (Boisson, 2011) ou pour optimiser les méthodes de stockage de CO₂ avec la biominéralisation (Dupraz et al., 2009). L'objectif global ici est de se baser sur une série d'expériences particulières pour améliorer et tester les modèles développés, mais aussi pour vérifier les

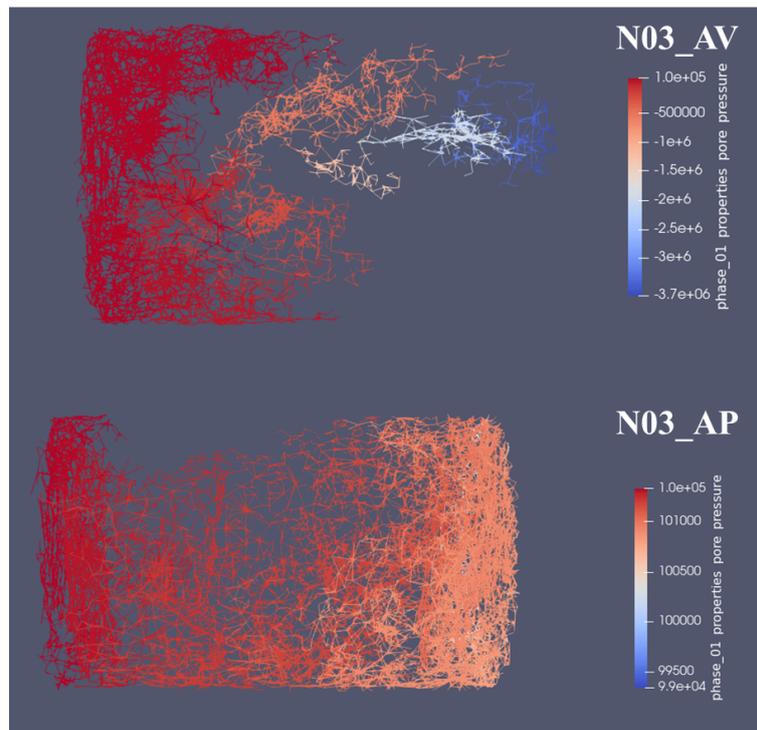


FIGURE 42 – Simulations des écoulements de fluides dans les PNM de l'échantillon N03 avant (haut) et après (bas) expérience. Les PNM ont été définis par Leger et al. (2022a) et les simulations sont effectuées avec le logiciel OpenPNM par Jiayan Ji.

interprétations faites au cours des expériences. La large gamme d'expériences pouvant être considérée a pour base commune d'être en relation avec des problématiques environnementales de risques de pollution des aquifères comme détaillé dans la partie 4.3. Les différentes étapes du couplage des processus hydro-biogéochimiques sont explicitées ci-dessous d'abord pour le cas de réactions biotiques à une échelle de représentation explicite des processus, avec ensuite des indications d'adaptation pour les réactions géochimiques et pour le changement d'échelle. L'échelle de description considérée est l'échelle de Darcy pour les écoulements. L'utilisation de méthodes de représentations hybrides, comme décrites dans la partie 3.3.2 de mes travaux, sera considérée si une description à l'échelle de Darcy n'est pas valide sur tout le système et à tous les temps.

4.2.3 Couplage des processus hydro-biogéochimiques

Les méthodes R-TDRW et UR-TDRW développées pour l'instant considèrent le transport d'une seule espèce sans changement des propriétés structurelles du milieu. Afin de pouvoir considérer un large panel de réactions biogéochimiques, ces méthodes seront étendues à la prise en compte des changements des propriétés du milieu nécessitant une mise à jour régulière des interactions entre les écoulements, le transport, les réactions et les changements de propriétés du milieu (Figure 43).

À la petite échelle, correspondant à l'échelle de Darcy pour laquelle on considère une représentation explicite des processus, un premier exemple de couplage des pro-

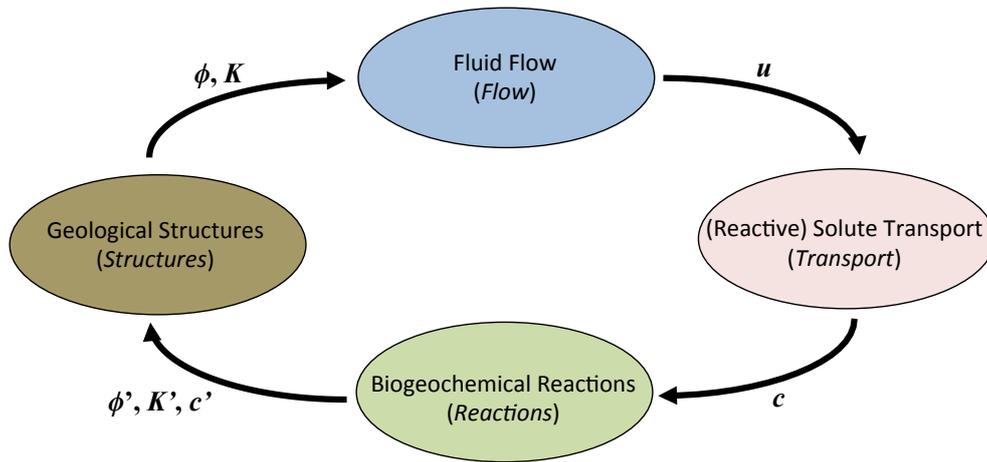


FIGURE 43 – Couplage des processus hydro-biogéochimiques avec ϕ , K , u , et c la porosité, perméabilité, vitesse d'écoulement et concentration de soluté, et ϕ' , K' , et c' les valeurs modifiées.

cessus hydro-biogéochimiques sera mise en oeuvre en considérant le développement de biofilm dont la modélisation a déjà fait l'objet de nombreuses études (Dupin et al., 2001; Tang and Valocchi, 2013; Tao and Slater, 2011). Comme illustré par la Figure 44, le domaine du biofilm est composé de (i) la biomasse qui contient la substance polymère extracellulaire (EPS) et les bactéries, et (ii) les vides présents entre les systèmes EPS-bactéries. Dans cette représentation, la biomasse (solide) est caractérisée par sa densité $\rho_{biomasse}$ et les vides sont remplis d'eau.

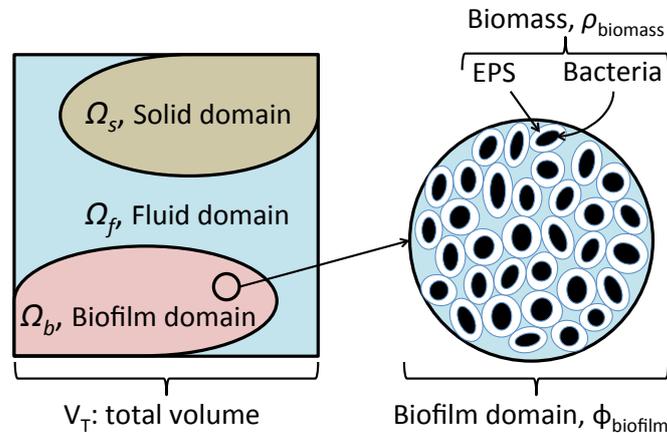


FIGURE 44 – Représentation schématique de l'ensemble roche-fluide-biofilm.

Ce système peut être modélisé en considérant le domaine Ω qui contient la partie fluide Ω_f et biofilm Ω_b , et dans lequel la concentration du substrat $c_s(x, y, t)$ satisfait l'équation d'advection-diffusion-réaction

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c_s) = D\nabla^2 c_s + r_s(c_s, c_X). \quad (51)$$

Le vecteur de vitesse des écoulements \mathbf{u} est fixé à 0 dans Ω_b et le coefficient de

diffusion D est défini comme

$$D = \begin{cases} D_m, & (x, y) \in \Omega_f \\ D_b, & (x, y) \in \Omega_b \end{cases} \quad (52)$$

avec D_m and D_b les coefficients de diffusion du substrat dans les domaines fluide et biofilm, respectivement. En considérant la loi de Monod simple, le taux de consommation du substrat $r_s(c_s, c_X)$ est exprimé comme (Beefink et al., 1990; Picioreanu et al., 2000)

$$r_s(c_s, c_X) = \left(\frac{\mu_m}{Y_{XS}} + m_s \right) c_X \frac{c_s}{K_s + c_s} \quad (53)$$

avec μ_m , Y_{XS} et m_s qui sont des paramètres régulant la croissance du biofilm, K_s la constante de saturation du substrat, et c_X la densité de biomasse (aussi nommée $\rho_{biomasse}$) qui est exprimé comme suit en considérant un substrat limitant

$$\frac{dc_X}{dt} = Y_{XS} (r_s - m_s c_X). \quad (54)$$

Cette formulation du problème de développement de biofilm alimenté par la circulation d'un substrat peut être modélisée avec une adaptation de la méthode R-TDRW. Cela nécessite de coupler la résolution du transport à une méthode d'automates cellulaires pour la propagation du biofilm à travers les mailles du système, comme fait dans Roubinet and Tartakovsky (2013) pour prendre en compte les changements de propriétés des structures en lien avec des réactions géochimiques. Par soucis de simplification, la roche est considérée comme une zone solide non accessible mais ceci n'est pas une hypothèse nécessaire à la résolution du problème. La formulation avec une méthode de TDRW amènera à une représentation discrétisée du système pour lequel on pourra considérer une configuration simplifiée pour valider la méthode avec des solutions analytiques existantes (Figure 45).

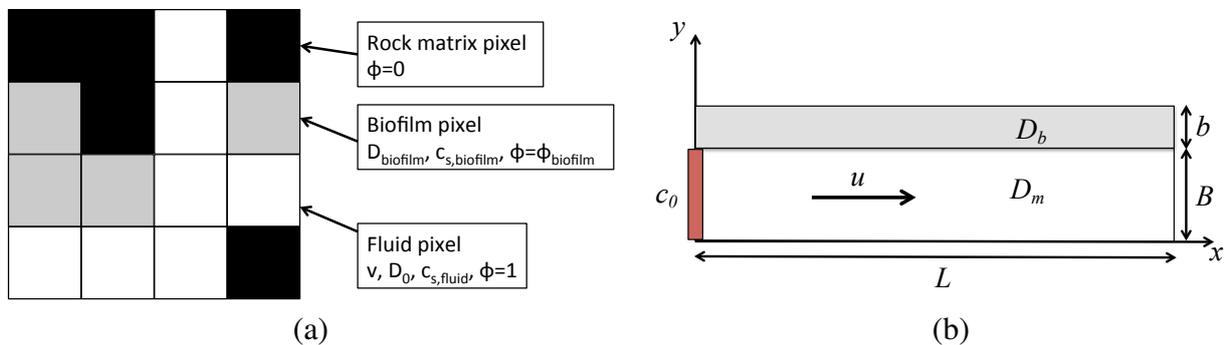


FIGURE 45 – (a) Discretisation du système fluide-biofilm-roche. (b) Configuration simplifiée pour validation.

L'extension à des réactions géochimiques pourra se baser sur les développements effectués pour les problèmes de biofilm puisque les nécessités de couplage de processus et de changement des propriétés du milieu sont identiques. Des adaptations

complémentaires seront nécessaires telles que le transport de plusieurs espèces qui pourra être considéré avec la méthode TDRW en considérant une hypothèse de complete mixing à l'échelle de la particule qui transportera une certaine quantité de chaque soluté. Selon les réactions considérées, le code de transport devra être couplé avec un code de spéciation tel que PhreeqC pour évaluer les concentrations des éléments impliqués dans le système de réactions.

L'upscaling de ces systèmes pourra aussi être considéré en utilisant la description par (i) fonctions mémoires pour représenter les temps de diffusion dans le milieu matriciel, et (ii) probabilité de survie pour prendre en compte l'impact des réactions chimiques sur la concentration des solutés transportés, comme fait dans la méthode d'upscaling UR-TDRW. Ces descriptions devront prendre en compte l'évolution des propriétés du milieu avec par exemple des pdfs conditionnées à la porosité du domaine considéré. Cela pourra mener à la modélisation de divers problèmes de transport réactif à l'échelle des réseaux de fractures où les fonctions mémoires et les probabilités de survie seront définis à l'échelle des systèmes fracture-matrice, et utilisés à l'échelle des réseaux de fractures. Les premières applications concerneront des scénarios où la zone matricielle peut être considérée comme infinie au sens de la diffusion pour concentrer les efforts sur les réactions à prendre en compte et les hétérogénéités de la matrice. La considération de réseaux fracturés 3D sera faite en utilisant des logiciels commerciaux ou des codes de recherche déjà développés et mis à disposition au sein de collaborations à définir.

4.3 Stratégie intégrée pour les sites

Les différentes problématiques et applications liées aux aquifères et réservoirs fracturés nécessitent de caractériser les propriétés structurales de ces milieux et de prendre en compte les comportements multi-porosité caractérisés par des dynamiques de réactions hétérogènes et induits par les hétérogénéités de ces structures géologiques. Cela requiert de combiner plusieurs méthodes de caractérisation in-situ complémentaires à diverses échelles et d'utiliser des outils numériques adaptés à ces milieux aussi bien pour interpréter les expériences de caractérisation que pour proposer des modèles prédictifs pertinents. Au vu de l'impact des réactions biogéochimiques sur l'équilibre chimique et l'hydrodynamique du milieu naturel, et de leurs implications aussi bien pour la préservation des ressources en eau, le stockage géologique et l'exploitation des réservoirs, la modélisation de ces mécanismes doit être améliorée et incorporée dans les modèles à grande échelle. Ceci nécessite d'abord une compréhension approfondie à l'échelle du laboratoire de ces mécanismes et des interactions hydrobiogéochimiques auxquelles ils participent, puis une transposition à l'échelle du terrain des observations et conclusions obtenues. Ceci doit être fait en intégrant ces mécanismes et leurs interactions dans des modèles prédictifs à l'échelle du site qui sont paramétrés par les données observables dans le milieu naturel. Dans cet objectif,

mes travaux de recherche seront poursuivis suivant deux axes principaux.

(1) Les méthodes de caractérisation déjà développées seront testées sur des données de sites en s'attachant à déterminer les améliorations qu'il est nécessaire d'apporter aux modèles directs, notamment en termes de représentation du milieu et de coût numérique. Différents types de méthodes d'inversion seront considérées en fonction du nombre de paramètres à inverser et de la complexité du problème, les problèmes allant de l'inversion des données statistiques des réseaux de fractures avec peu de paramètres à l'inversion de la probabilité de présence des fractures avec un nombre de paramètres supérieure ou égale au nombre de fractures. Les méthodes d'inversion considérées peuvent donc aller des méthodes de recherche de minimum classiques déterministes à des inversions stochastiques avec la mise en oeuvre des méthodes MCMC. Suite à une mise en oeuvre satisfaisante de chaque méthode de caractérisation considérée, le couplage entre différentes méthodes de caractérisation sera aussi à considérer avec la nécessité de mettre en oeuvre des inversions jointes, en collaboration avec l'Université de Lausanne (Suisse).

Les sites pressentis pour mener les tests du premier axe sont les suivants. (i) Le In-situ Stimulation and Circulation (ISC) rock laboratory au Grimsel Test Site (GTS) en Suisse de type granitique en collaboration avec Maria Klepikova (Géosciences Rennes) pour lequel les données de température sont déjà collectées, avec en complément des données de mesure des propriétés thermiques de la roche en laboratoire et des expériences hydrauliques entre les puits sur site (Brixel et al., 2020a,b; Klepikova et al., 2022, 2020; Krietsch et al., 2018). (ii) Un site situé au Danemark et dont la zone d'investigation est composée d'argile, qui a accueilli une usine d'emballage et de plastique des années 60 à 90, impliquant une contamination aux solvants chlorés et hydrocarbures. Des injections d'agent réducteur chimique et de culture bactérienne ont été menées en 2019 pour réduire la contamination, l'objectif étant de conduire à des réductions de la déchlorination en dégradant les éthènes chlorés en éthène/éthane inoffensifs. Des expériences de résistivité électrique entre puits et des analyses chimiques sur des prélèvements d'eau dans les puits ont été effectuées avant et après les injections. Le travail d'inversion des données géophysiques et le couplage avec les mesures chimiques sera fait en collaboration avec Léa Lévy (Lund University, Suède) qui a collecté les données géophysiques sur le site (Lévy et al., 2022). (iii) Le site karstique de Saint Ferron, observatoire du Larzac (SNO H+ / OZCAR / eLTER) qui se situe sur la bordure sud des Causses à une centaine de kilomètres de Montpellier, avec l'aquifère du Durzon. Des observations géologiques et des suivis hydrogéophysiques ont été mis en place depuis plus de 10 ans sur ce site donnant accès à une grande variété d'observations (variable hydro-climatique, topographie de cavités, observations hydrodynamiques, ...) avec la base de données karst3d hébergée par l'OREME. En particulier, des mesures de résistivité électrique ont été mises en oeuvre entre la surface et un tunnel, et des mesures de potentiel

spontané sont planifiées dans le cadre des Workshops de Géophysique Passive de CRITEX. Le travail sur ce site sera fait en collaboration avec Cédric Champollion et Philippe Vernant (Géosciences Montpellier), Yohann Cousquer (HydroSciences Montpellier) et Nolwenn Lesparre (Institut Terre et Environnement de Strasbourg).

(2) En parallèle du premier axe de recherche, un deuxième axe se concentrera sur la modélisation du devenir des contaminants à grande échelle en passant par les étapes suivantes. (i) Le développement de modèles à l'échelle du laboratoire pour reproduire des expériences hydro-(bio)géochimiques en se basant sur la base de données des expériences hydro-géochimiques menées dans l'équipe TMP de Géosciences Montpellier, en collaboration avec Linda Luquot et Philippe Gouze. La partie biologique des modèles sera d'abord étudiée théoriquement et confrontée ensuite à des données existantes avec des collaborations possibles en particulier avec Bénédicte Ménez (IPGP). (ii) Le développement de méthodes d'upscaling en se basant sur les capacités des méthodes de marcheurs aléatoires à s'adapter aux milieux hétérogènes et à optimiser les temps de calcul. Ceci étant suivi de l'intégration de ces méthodes dans des modèles à grande échelle.

La description mathématique aux différentes échelles des couplages entre les différents mécanismes mis en jeu, ainsi que la prise en compte de structures géologiques complexes, permettront de construire progressivement les outils numériques nécessaires à la simulation des transferts de masse à l'échelle des systèmes aquifères. L'objectif in-fine est de développer des modèles prédictifs à l'échelle du site intégrant l'impact des interactions physico-biochimiques sur la qualité des ressources hydriques en relation avec l'anthropisation de la surface, l'exploitation des ressources énergétiques du sous-sol et le stockage géologique. Les nouveaux modèles ainsi développés seront destinés à améliorer notre capacité à (i) caractériser les milieux avec les diverses méthodes hydro-géophysiques, (ii) simuler les processus hydrodynamiques et bio-réactifs aux différentes échelles fonctionnelles, et (iii) analyser les risques liés à l'exploitation multi-usage du sous-sol, ainsi que développer des technologies pour la bio-dépollution des aquifères et la bio-mitigation des fuites liées à l'exploitation des réservoirs.

Références

- Abdoulghafour, H., Gouze, P., Luquot, L., Leprovost, R., 2016. Characterization and modeling of the alteration of fractured class-G Portland cement during flow of CO₂-rich brine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 48, Part 1, 155–170. doi :10.1016/j.ijggc.2016.01.032.
- Akoachere, II, R.A., Van Tonder, G., 2011. The trigger-tube : A new apparatus and method for mixing solutes for injection tests in boreholes. *Water SA* 37, 139–146.
- Andersson, P., Byegard, J., Tullborg, E., Doe, T., Hermanson, J., Winberge, A., 2004. In situ tracer tests to determine retention properties of a block scale fracture network in granitic rock at the Aspo Hard Rock Laboratory, Sweden. *Journal of Contaminant Hydrology* 70, 271–297. doi :10.1016/j.jconhyd.2003.09.009.
- Archie, G., 1942. The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. *Transactions of The American Institute of Mining and Metallurgical Engineers* 146, 54–61.
- Baston, D.P., Kueper, B.H., 2009. Thermal conductive heating in fractured bedrock : Screening calculations to assess the effect of groundwater influx. *Advances in Water Resources* 32, 231–238. doi :10.1016/j.adwatres.2008.10.019.
- Bateman, H., 1954. *Bateman Manuscript Project : Tables of Integral Transforms*. McGraw-Hill.
- Battiato, I., Tartakovsky, D.M., 2011. Applicability regimes for macroscopic models of reactive transport in porous media. *Journal of Contaminant Hydrology* 120-21, 18–26. doi :10.1016/j.jconhyd.2010.05.005.
- Battiato, I., Tartakovsky, D.M., Tartakovsky, A.M., Scheibe, T., 2011. Hybrid models of reactive transport in porous and fractured media. *Advances in Water Resources* 34, 1140–1150. doi :10.1016/j.adwatres.2011.01.012.
- Becker, M.W., Shapiro, A.M., 2003. Interpreting tracer breakthrough tailing from different forced-gradient tracer experiment configurations in fractured bedrock. *Water Resources Research* 39, 1024. doi :10.1029/2001WR001190.
- Beeftink, H., Van der Heijden, R., Heijnen, J., 1990. Maintenance requirements : energy supply from simultaneous endogenous respiration and substrate consumption. *FEMS Microbiology Letters* 73, 203–209. doi :10.1111/j.1574-6968.1990.tb03942.x.

- Benson, D.A., Meerschaert, M.M., 2008. Simulation of chemical reaction via particle tracking : Diffusion-limited versus thermodynamic rate-limited regimes. *Water Resources Research* 44. doi :10.1029/2008WR007111.
- Berkowitz, B., Dror, I., Hansen, S.K., Scher, H., 2016. Measurements and models of reactive transport in geological media. *Reviews of Geophysics* 54, 930–986. doi :10.1002/2016RG000524.
- Berryman, J.G., Hoversten, G.M., 2013. Modelling electrical conductivity for earth media with macroscopic fluid-filled fractures. *Geophysical Prospecting* 61, 471–493. doi :10.1111/j.1365-2478.2012.01135.x.
- Binley, A., Kemna, A., 2005. DC Resistivity and Induced Polarization Methods, in : Rubin, Y., Hubbard, S.S. (Eds.), *Hydrogeophysics*. Springer Netherlands. volume 50 of *Water Science and Technology Library*, pp. 129–156. doi :10.1007/1-4020-3102-5_5.
- Blome, M., Maurer, H.R., Schmidt, K., 2009. Advances in three-dimensional geoelectric forward solver techniques. *Geophysical Journal International* 176, 740–752. doi :10.1111/j.1365-246X.2008.04006.x.
- Boadu, F., Gyamfi, J., Owusu, E., 2005. Determining subsurface fracture characteristics from azimuthal resistivity surveys : A case study at Nsawam, Ghana. *Geophysics* 70, B35–B42. doi :10.1190/1.2073888.
- Boisson, A., 2011. Etude multi-échelles des réactions de dénitrification dans les aquifères hétérogènes : Approches expérimentales de l'influence des écoulements sur la réactivité biogéochimique. Thèse de doctorat. Université de Rennes 1.
- Bolster, D., Paster, A., Benson, D.A., 2016. A particle number conserving lagrangian method for mixing-driven reactive transport. *Water Resources Research* 52, 1518–1527. doi :10.1002/2015WR018310.
- Bonnet, E., Bour, O., Odling, N.E., Davy, P., Main, I., Cowie, P., Berkowitz, B., 2001. Scaling of fracture systems in geological media. *Reviews of Geophysics* 39, 347–383. doi :10.1029/1999RG000074.
- Bour, O., Davy, P., 1997. Connectivity of random fault networks following a power law fault length distribution. *Water Resources Research* 33, 1567–1583. doi :10.1029/96WR00433.
- Brace, W.F., Orange, A.S., Madden, T.R., 1965. The effect of pressure on the electrical resistivity of water-saturated crystalline rocks. *Journal of Geophysical Research* 70, 5669–5678. doi :10.1029/JZ070i022p05669.

- Brixel, B., Klepikova, M., Jalali, M.R., Lei, Q., Roques, C., Kriestch, H., Loew, S., 2020a. Tracking fluid flow in shallow crustal fault zones : 1. insights from single-hole permeability estimates. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 125, e2019JB018200. doi :10.1029/2019JB018200.
- Brixel, B., Klepikova, M., Lei, Q., Roques, C., Jalali, M.R., Krietsch, H., Loew, S., 2020b. Tracking fluid flow in shallow crustal fault zones : 2. insights from cross-hole forced flow experiments in damage zones. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 125, e2019JB019108. doi :10.1029/2019JB019108.
- Caballero Sanz, V., Roubinet, D., Demirel, S., Irving, J., 2017. 2.5-D discrete-dual-porosity model for simulating geoelectrical experiments in fractured rock. *Geophysical Journal International* 209, 1099–1110. doi :10.1093/gji/ggx080.
- Cacas, M.C., Ledoux, E., de Marsily, G., Barbreau, A., Calmels, P., Gaillard, B., Margritta, R., 1990. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network : Calibration and validation : 2. the transport model. *Water Resources Research* 26, 491–500. doi :10.1029/WR026i003p00491.
- Callahan, T.J., Reimus, P.W., Bowman, R.S., Haga, M.J., 2000. Using multiple experimental methods to determine fracture/matrix interactions and dispersion of non-reactive solutes in saturated volcanic tuff. *Water Resources Research* 36, 3547–3558. doi :10.1029/2000WR900212.
- Carneiro, J.F., 2009. Numerical simulations on the influence of matrix diffusion to carbon sequestration in double porosity fissured aquifers. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3, 431–443. doi :10.1016/j.ijggc.2009.02.006.
- Carrera, J., Sanchez-Vila, X., Benet, I., Medina, A., Galarza, G., Guimera, J., 1998. On matrix diffusion : formulations, solution methods and qualitative effects. *Hydrogeology Journal* 6, 178–190. doi :10.1007/s100400050143.
- Carslaw, H., Jaeger, J., 1986. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford science publications, Clarendon Press.
- Cheng, A., Ghassemi, A., Detournay, E., 2001. Integral equation solution of heat extraction from a fracture in hot dry rock. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 25, 1327–1338. doi :10.1002/nag.182.
- Coleman, T.I., Parker, B.L., Maldaner, C.H., Mondanos, M.J., 2015. Groundwater flow characterization in a fractured bedrock aquifer using active DTS tests in sealed boreholes. *Journal of Hydrology* 528, 449–462. doi :10.1016/j.jhydrol.2015.06.061.

- Cvetkovic, V., 2017. Statistical Formulation of Generalized Tracer Retention in Fractured Rock. *Water Resources Research* 53, 8736–8759. doi :10.1002/2017WR021187.
- Cvetkovic, V., Painter, S., Outters, N., Selroos, J.O., 2004. Stochastic simulation of radionuclide migration in discretely fractured rock near the äspö hard rock laboratory. *Water Resources Research* 40. doi :10.1029/2003WR002655.
- Daigle, H., Ghanbarian, B., Henry, P., Conin, M., 2015. Universal scaling of the formation factor in clays : Example from the nankai trough. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 120, 7361–7375. doi :10.1002/2015JB012262.
- Dávila, G., Luquot, L., Soler, J.M., Cama, J., 2016. 2d reactive transport modeling of the interaction between a marl and a co₂-rich sulfate solution under supercritical co₂ conditions. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 54, 145–159. doi :10.1016/j.ijggc.2016.08.033.
- Demirel, S., Irving, J., Roubinet, D., 2019. Comparison of REV size and tensor characteristics for the electrical and hydraulic conductivities in fractured rock. *Geophysical Journal International* 216, 1953–1973. doi :10.1093/gji/ggy537.
- Demirel, S., Roubinet, D., Irving, J., Voytek, E., 2018. Characterizing Near-Surface Fractured-Rock Aquifers : Insights Provided by the Numerical Analysis of Electrical Resistivity Experiments. *Water* 10. doi :10.3390/w10091117.
- Dentz, M., Gouze, P., Carrera, J., 2011. Effective non-local reaction kinetics for transport in physically and chemically heterogeneous media. *Journal of contaminant hydrology* 120-21. doi :10.1016/j.jconhyd.2010.06.002.
- Dentz, M., Gouze, P., Russian, A., Dweik, J., Delay, F., 2012. Diffusion and trapping in heterogeneous media : An inhomogeneous continuous time random walk approach. *Advances in Water Resources* 49. doi :10.1016/j.advwatres.2012.07.015.
- Dershowitz, W., Miller, I., 1995. Dual porosity fracture flow and transport. *Geophysical Research Letters* 22, 1441–1444. doi :10.1029/95GL01099.
- Dey, A., Morrison, H., 1979. Resistivity modeling for arbitrarily shaped two-dimensional structures. *Geophysical Prospecting* 27, 106–136. doi :10.1111/j.1365-2478.1979.tb00961.x.
- Ding, D., Benson, D.A., Paster, A., Bolster, D., 2013. Modeling bimolecular reactions and transport in porous media via particle tracking. *Advances in Water Resources* 53, 56–65. doi :10.1016/j.advwatres.2012.11.001.

- de Dreuzy, J.R., Davy, P., Bour, O., 2001a. Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution : 1. Effective connectivity. *Water Resources Research* 37, 2065–2078. doi :10.1029/2001WR900011.
- de Dreuzy, J.R., Davy, P., Bour, O., 2001b. Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution : 2. Permeability of networks based on lognormal distribution of apertures. *Water Resources Research* 37, 2079–2095. doi :10.1029/2001WR900010.
- Dupin, H., Kitanidis, P., McCarty, P., 2001. Pore-scale modeling of biological clogging due to aggregate expansion : A material mechanics approach. *Water Resources Research* 37, 2965–2979. doi :10.1029/2001WR000306.
- Dupraz, S., Menez, B., Gouze, P., Leprovost, R., Benezeth, P., Pokrovsky, O.S., Guyot, F., 2009. Experimental approach of CO₂ biomineralization in deep saline aquifers. *Chemical Geology* 265. doi :10.1016/j.chemgeo.2008.12.012.
- Dykhuizen, R.C., 1990. A new coupling term for dual-porosity models. *Water Resources Research* 26, 351–356. doi :10.1029/WR026i002p00351.
- Fagerlund, F., Heinson, G., 2003. Detecting subsurface groundwater flow in fractured rock using self-potential (SP) methods. *Environmental Geology* 43, 782–794. doi :10.1007/s00254-002-0693-x.
- Feller, W., 1954. Diffusion processes in one dimension. *Transactions of the American Mathematical Society* 77, 1–31. doi :10.2307/1990677.
- Fischer, P., Jardani, A., Lecoq, N., 2018. Hydraulic tomography of discrete networks of conduits and fractures in a karstic aquifer by using a deterministic inversion algorithm. *Advances in Water Resources* 112, 83–94. doi :10.1016/j.advwatres.2017.11.029.
- Garcia-Rios, M., Luquot, L., Soler, J.M., Cama, J., 2017. The role of mineral heterogeneity on the hydrogeochemical response of two fractured reservoir rocks in contact with dissolved co₂. *Applied Geochemistry* 84, 202–217. doi :10.1016/j.apgeochem.2017.06.008.
- Gautam, P., Mohanty, K., 2004. Matrix-fracture transfer through countercurrent imbibition in presence of fracture fluid flow. *Transport in Porous Media* 55, 309–337. doi :10.1023/B:TIPM.0000013326.95597.10.
- Ghanbarian, B., Hunt, A.G., Ewing, R.P., Skinner, T.E., 2014. Universal scaling of the formation factor in porous media derived by combining percolation and effective medium theories. *Geophysical Research Letters* 41, 3884–3890. doi :10.1002/2014GL060180.

- Gisladottir, V.R., Roubinet, D., Tartakovsky, D.M., 2016. Particle methods for heat transfer in fractured media. *Transport in Porous Media*, 1–16doi :10.1007/s11242-016-0755-2.
- Gjetvaj, F., Russian, A., Gouze, P., Dentz, M., 2015. Dual control of flow field heterogeneity and immobile porosity on non-fickian transport in berea sandstone. *Water Resources Research* 51, 8273–8293. doi :10.1002/2015WR017645.
- Gostick, J., Aghighi, M., Hinebaugh, J., Tranter, T., Hoeh, M.A., Day, H., Splacy, B., Sharqawy, M.H., Bazylak, A., Burns, A., Lehnert, W., Putz, A., 2016. OpenPNM : A Pore Network Modeling Package. *Comput. Sci. Eng.* 18, 60–74. doi :10.1109/MCSE.2016.49.
- Gouze, P., Borgne, T.L., Leprovost, R., Lods, G., Poidras, T., Pezard, P., 2008. Non-fickian dispersion in porous media : 1. Multiscale measurements using single-well injection withdrawal tracer tests. *Water Resources Research* 44. doi :10.1029/2007WR006278.
- Gouze, P., Puyguiraud, A., Roubinet, D., Dentz, M., 2020. Characterization and upscaling of hydrodynamic transport in heterogeneous dual porosity media. *Advances in Water Resources* 146. doi :10.1016/j.advwatres.2020.103781.
- Gouze, P., Puyguiraud, A., Roubinet, D., Dentz, M., 2021. Pore-scale transport in rocks of different complexity modeled by random walk methods. *Transport in Porous Media* doi :10.1007/s11242-021-01675-2.
- Haggerty, R., Gorelick, S.M., 1995. Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity. *Water Resources Research* 31, 2383–2400. doi :10.1029/95WR10583.
- Hamm, S.Y., Bidaux, P., 1996. Dual-porosity fractal models for transient flow analysis in fissured rocks. *Water Resources Research* 32, 2733–2745. doi :10.1029/96WR01464.
- Hassanzadeh, H., Pooladi-Darvish, M., 2006. Effects of fracture boundary conditions on matrix-fracture transfer shape factor. *Transport in Porous Media* 64, 51–71. doi :10.1007/s11242-005-1398-x.
- Hyman, J.D., Dentz, M., 2021. Transport upscaling under flow heterogeneity and matrix-diffusion in three-dimensional discrete fracture networks. *Advances in Water Resources* 155, 103994. doi :10.1016/j.advwatres.2021.103994.
- Ildefonse, B., Pezard, P., 2001. Electrical properties of slow-spreading ridge gabbros from ODP site 735, southwest indian ridge. *Tectonophysics* 330, 69–92. doi :10.1016/S0040-1951(00)00220-1.

- Jang, I.S., Kang, J.M., Park, C.H., 2008. Inverse fracture model integrating fracture statistics and well-testing data. *Energy Sources Part A - Recovery Utilization and Environmental Effects* 30, 1677–1688. doi :10.1080/15567030802087510.
- Jang, Y.H., Lee, T.H., Jung, J.H., Kwon, S.I., Sung, W.M., 2013. The oil production performance analysis using discrete fracture network model with simulated annealing inverse method. *Geosciences Journal* 17, 489–496. doi :10.1007/s12303-013-0034-y.
- Katsube, T.J., Hume, J.P., 1987. Permeability determination in crystalline rocks by standard geophysical logs. *Geophysics* 52, 342–352. doi :10.1190/1.1442308.
- Kfoury, M., Ababou, R., Noetinger, B., Quintard, M., 2004. Matrix-fracture exchange in a fractured porous medium : stochastic upscaling. *Comptes Rendus Mécanique* 332, 679–686. doi :10.1016/j.crme.2004.04.001.
- Klepikova, M., Brixel, B., Jalali, M., 2020. Transient hydraulic tomography approach to characterize main flowpaths and their connectivity in fractured media. *Advances in Water Resources* 136, 103500. doi :10.1016/j.advwatres.2019.103500.
- Klepikova, M., Brixel, B., Roubinet, D., 2022. Analysis of thermal dilution experiments with distributed temperature sensing for fractured rock characterization. *Journal of Hydrology* 610, 127874. doi :10.1016/j.jhydrol.2022.127874.
- Klepikova, M.V., Le Borgne, T., Bour, O., Dentz, M., Hochreutener, R., Lavenant, N., 2016. Heat as a tracer for understanding transport processes in fractured media : Theory and field assessment from multiscale thermal push-pull tracer tests. *Water Resources Research* 52, 5442–5457. doi :10.1002/2016WR018789.
- Klepikova, M.V., Le Borgne, T., Bour, O., de Dreuzy, J.R., 2013. Inverse modeling of flow tomography experiments in fractured media. *Water Resources Research* 49, 7255–7265. doi :10.1002/2013WR013722.
- Klepikova, M.V., Le Borgne, T., Bour, O., Gallagher, K., Hochreutener, R., Lavenant, N., 2014. Passive temperature tomography experiments to characterize transmissivity and connectivity of preferential flow paths in fractured media. *Journal of Hydrology* 512, 549–562. doi :10.1016/j.jhydrol.2014.03.018.
- Kolditz, O., 1995. Modelling flow and heat transfer in fractured rocks : dimensional effect of matrix heat diffusion. *Geothermics* 24, 421–437. doi :10.1016/0375-6505(95)00018-L.

- Kolditz, O., Clauser, C., 1998. Numerical simulation of flow and heat transfer in fractured crystalline rocks : Application to the Hot Dry Rock site in Rosemanowes (U.K.). *Geothermics* 27, 1–23. doi :10.1016/S0375-6505(97)00021-7.
- Kozeny, J., 1927. Uber kapillare Leitung des Wassers im Boden. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften in Wien Abteilung Ila* , 271–301.
- Krietsch, H., Doetsch, J., Dutler, N., Jalali, M., Gischig, V., Loew, S., Amann, F., 2018. Comprehensive geological dataset describing a crystalline rock mass for hydraulic stimulation experiments. *Scientific Data* 5, 180269. doi :10.1038/sdata.2018.269.
- de La Bernardie, J., Bour, O., Le Borgne, T., Guihéneuf, N., Chatton, E., Labasque, T., Le Lay, H., Gerard, M.F., 2018. Thermal attenuation and lag time in fractured rock : Theory and field measurements from joint heat and solute tracer tests. *Water Resources Research* 54, 10,053–10,075. doi :10.1029/2018WR023199.
- Lamarche, L., Kaji, S., Beauchamp, B., 2010. A review of methods to evaluate borehole thermal resistances in geothermal heat-pump systems. *Geothermics* 39, 187–200. doi :10.1016/j.geothermics.2010.03.003.
- Le Goc, R., de Dreuzy, J.R., Davy, P., 2010. An inverse problem methodology to identify flow channels in fractured media using synthetic steady-state head and geometrical data. *Advances in Water Resources* 33, 782–800. doi :10.1016/j.advwatres.2010.04.011.
- Le Pennec, J.L., Hermitte, D., Dana, I., Pezard, P., Coulon, C., Cochemé, J.J., Mulyadi, E., Ollagnier, F., Revest, C., 2001. Electrical conductivity and pore-space topology of merapi lavas : Implications for the degassing of porphyritic andesite magmas. *Geophysical Research Letters* 28, 4283–4286. doi :10.1029/2001GL013401.
- Lee, S., Lough, M., Jensen, C., 2001. Hierarchical modeling of flow in naturally fractured formations with multiple length scales. *Water Resources Research* 37, 443–455. doi :10.1029/2000WR900340.
- Leger, M., Luquot, L., 2021. Importance of microstructure in carbonate rocks : Laboratory and 3d-imaging petrophysical characterization. *Applied Sciences* 11. doi :10.3390/app11093784.
- Leger, M., Luquot, L., Roubinet, D., 2022a. Role of mineralogical, structural and hydrodynamic rock properties in conduits formation in three distinct carbonate rock types. *Chemical Geology* 607, 121008. doi :10.1016/j.chemgeo.2022.121008.

- Leger, M., Roubinet, D., Jamet, M., Luquot, L., 2022b. Impact of hydro-chemical conditions on structural and hydro-mechanical properties of chalk samples during dissolution experiments. *Chemical Geology* 594, 120763. doi :10.1016/j.chemgeo.2022.120763.
- Lévy, L., Thalund-Hansen, R., Bording, T., Fiandaca, G., Christiansen, A., Rügge, K., Tuxen, N., Hag, M., Bjerg, P., 2022. Quantifying reagent spreading by cross borehole electrical tomography to assess performance of groundwater remediation. *Water Resources Research* 58. doi :10.1029/2022WR032218.
- Li, L., Lee, S.H., 2008. Efficient field-scale simulation of black oil in a naturally fractured reservoir through discrete fracture networks and homogenized media. *SPE Reservoir Evaluation and Engineering* 11, 750–758.
- Lichtner, P.C., Kang, Q., 2007. Upscaling pore-scale reactive transport equations using a multiscale continuum formulation. *Water Resources Research* 43. doi :10.1029/2006WR005664.
- Lods, G., Roubinet, D., Matter, J.M., Leprovost, R., Gouze, P., 2020. Groundwater flow characterization of an ophiolitic hard-rock aquifer from cross-borehole multi-level hydraulic experiments. *Journal of Hydrology* 589, 125152. doi :10.1016/j.jhydrol.2020.125152.
- Long, J.C.S., Remer, J.S., Wilson, C.R., Witherspoon, P.A., 1982. Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research* 18, 645–658. doi :10.1029/WR018i003p00645.
- Luquot, L., Gouze, P., 2009. Experimental determination of porosity and permeability changes induced by injection of CO₂ into carbonate rocks. *Chemical Geology* 265. Doi :10.1016/j.chemgeo.2009.03.028.
- Maineult, A., Thomas, B., Nussbaum, C., Wiczorek, K., Gibert, D., Lavielle, B., Kergosien, B., Nicollin, F., Mahiouz, K., Lesparre, N., 2013. Anomalies of noble gases and self-potential associated with fractures and fluid dynamics in a horizontal borehole, Mont Terri Underground Rock Laboratory. *Engineering Geology* 156, 46–57. doi :10.1016/j.enggeo.2013.01.010.
- Maloszewski, P., Zuber, A., 1993. Tracer experiments in fractured rocks : Matrix diffusion and the validity of models. *Water Resources Research* 29, 2723–2735. doi :10.1029/93WR00608.
- Markov, M., Mousatov, A., Kazatchenko, E., Markova, I., 2014. Determination of electrical conductivity of double-porosity formations by using generalized differential effective medium approximation. *Journal of Applied Geophysics* 108, 104–109. doi :10.1016/j.jappgeo.2014.07.006.

- Moreno, L., Neretnieks, I., Eriksen, T., 1985. Analysis of some laboratory tracer runs in natural fissures. *Water Resources Research* 21, 951–958. doi :10.1029/WR021i007p00951.
- Moscoso Lembcke, L.G., Roubinet, D., Gidel, F., Irving, J., Pehme, P., Parker, B.L., 2016. Analytical analysis of borehole experiments for the estimation of subsurface thermal properties. *Advances in Water Resources* 91, 88–103. doi :10.1016/j.advwatres.2016.02.011.
- NAP, 2015. *Characterization, Modeling, Monitoring, and Remediation of Fractured Rock*. National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. National Academies Press, Washington, DC. doi :10.17226/21742.
- Nguyen, F., Kemna, A., Robert, T., Hermans, T., 2016. Data-driven selection of the minimum-gradient support parameter in time-lapse focused electric imaging. *Geophysics* 81, A1–A5. doi :10.1190/geo2015-0226.1.
- Nøtinger, B., Estebenet, T., 2000. Up-scaling of double porosity fractured media using continuous-time random walks methods. *Transport in Porous Media* 39, 315–337. doi :10.1023/A:1006639025910.
- Nøtinger, B., Estebenet, T., Landereau, P., 2001. A direct determination of the transient exchange term of fractured media using a continuous time random walk method. *Transport in Porous Media* 44, 539–557. doi :10.1023/A:1010647108341.
- Noetinger, B., Roubinet, D., Russian, A., Le Borgne, T., Delay, F., Dentz, M., de Dreuzy, J.R., Gouze, P., 2016. Random walk methods for modeling hydrodynamic transport in porous and fractured media from pore to reservoir scale. *Transport in Porous Media* , 1–41doi :10.1007/s11242-016-0693-z.
- Noiriel, C., Madé, B., Gouze, P., 2007. Impact of coating development on the hydraulic and transport properties in argillaceous limestone fracture. *Water Resources Research* 43. doi :10.1029/2006WR005379.
- Paillet, F.L., Williams, J.H., Urik, J., Lukes, J., Kobr, M., Mares, S., 2012. Cross-borehole flow analysis to characterize fracture connections in the Melechov Granite, Bohemian-Moravian Highland, Czech Republic. *Hydrogeology Journal* 20, 143–154. doi :10.1007/s10040-011-0787-1.
- Painter, S., Cvetkovic, V., Mancillas, J., Pensado, O., 2008. Time domain particle tracking methods for simulating transport with retention and first-order transformation. *Water Resources Research* 44. doi :10.1029/2007WR005944. w01406.
- Pape, H., Riepe, L., Schopper, J.R., 1985. *Petrophysical detection of microfissures in granites*. Society of Petrophysicists and Well-Log Analysts .

- Pehme, P., Parker, B., Cherry, J., Molson, J., Greenhouse, J., 2013. Enhanced detection of hydraulically active fractures by temperature profiling in lined heated bedrock boreholes. *Journal of Hydrology* 484, 1–15. doi :10.1016/j.jhydrol.2012.12.048.
- Pehme, P.E., Greenhouse, J.P., Parker, B.L., 2007. The active line source temperature logging technique and its application in fractured rock hydrogeology. *Journal of Environmental & Engineering Geophysics* 12, 307–322. doi :10.2113/JEEG12.4.307.
- Perez, L.J., Hidalgo, J.J., Dentz, M., 2019. Reactive random walk particle tracking and its equivalence with the advection-diffusion-reaction equation. *Water Resources Research* 55, 847–855. doi :10.1029/2018WR023560.
- Perrin, B., 2021. Modélisation discrète et inversion de fractures par tomographie électrique. Master's thesis. Université de Montpellier.
- Pezard, P., Ito, H., Hermitte, D., Revil, A., 2000. Electrical properties and alteration of granodiorites from the GSJ Hirabayashi Hole, Japan, in : Ito, H., Fujimoto, K., Tanaka, H., Lockner, D. (Eds.), *International Workshop of the Nojima Fault Core and Borehole Data Analysis*, Geological Survey of Japan, Tsukuba, Japan. pp. 255–262.
- Pezard, P.A., 1990. Electrical properties of mid-ocean ridge basalt and implications for the structure of the upper oceanic crust in hole 504b. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 95, 9237–9264. doi :10.1029/JB095iB06p09237.
- Picioreanu, C., Van Loosdrecht, M.C., Heijnen, J.J., 2000. Effect of diffusive and convective substrate transport on biofilm structure formation : a two-dimensional modeling study. *Biotechnol Bioeng* 69, 504–515.
- Pidlisecky, A., Knight, R., 2008. FW2_5D : A MATLAB 2.5-D electrical resistivity modeling code. *Computers & Geosciences* 34, 1645–1654. doi :10.1016/j.cageo.2008.04.001.
- Pryet, A., Matran, P., Cousquer, Y., Roubinet, D., 2022. Particle tracking as a vulnerability assessment tool for drinking water production. *Front. Earth Sci.* doi :10.3389/feart.2022.975156.
- Ptak, T., Piepenbrink, M., Martac, E., 2004. Tracer tests for the investigation of heterogeneous porous media and stochastic modelling of flow and transport - a review of some recent developments. *Journal of Hydrology* 294, 122–163. doi :10.1016/j.jhydrol.2004.01.020.

- Rainieri, S., Bozzoli, F., Pagliarini, G., 2011. Modeling approaches applied to the thermal response test : A critical review of the literature. *HVAC&R Research* 17, 977–990. doi :10.1080/10789669.2011.610282.
- Raymond, J., Therrien, R., Gosselin, L., Lefebvre, R., 2011. A review of thermal response test analysis using pumping test concepts. *Ground Water* 49, 932–945. doi :10.1111/j.1745-6584.2010.00791.x.
- Read, T., Bour, O., Bense, V., Le Borgne, T., Goderniaux, P., Klepikova, M., Hochreutener, R., Lavenant, N., Boschero, V., 2013. Characterizing groundwater flow and heat transport in fractured rock using fiber-optic distributed temperature sensing. *Geophysical Research Letters* 40, 2055–2059. doi :10.1002/grl.50397.
- Revil, A., Cathles, L.M., 1999. Permeability of shaly sands. *Water Resources Research* 35, 651–662. doi :10.1029/98WR02700.
- Revil, A., Jardani, A., 2013. *The Self-Potential Method : Theory and Applications in Environmental Geosciences*. Cambridge University Press.
- Revil, A., Mao, D., Haas, A., Karaoulis, M., Frash, L., 2015. Passive electrical monitoring and localization of fluid leakages from wells. *Journal of Hydrology* 521, 286–301. doi :10.1016/j.jhydrol.2014.12.003.
- Robert, T., Dassargues, A., Brouyère, S., Kaufmann, O., Hallet, V., Nguyen, F., 2011. Assessing the contribution of electrical resistivity tomography (ERT) and self-potential (SP) methods for a water well drilling program in fractured/karstified limestones. *Journal of Applied Geophysics* 75, 42–53. doi :10.1016/j.jappgeo.2011.06.008.
- Robinson, J., Johnson, T., Slater, L., 2013. Evaluation of known-boundary and resistivity constraints for improving cross-borehole DC electrical resistivity imaging of discrete fractures. *Geophysics* 78, D115–D127. doi :10.1190/geo2012-0333.1.
- Rotter, B.E., Barry, D.A., Gerhard, J.I., Small, J.S., 2008. Modeling U(VI) biomineralization in single- and dual- porosity porous media. *Water Resources Research* 44, W08437. doi :10.1029/2007WR006301.
- Roubinet, D., Demirel, S., Voytek, E.B., Wang, X., Irving, J., 2020. Hybrid analytical and numerical approach for modeling fluid flow in simplified three-dimensional fracture networks. *Geofluids* , 3583817doi :10.1155/2020/3583817.
- Roubinet, D., de Dreuzy, J.R., Davy, P., 2010a. Connectivity-consistent mapping method for 2-D discrete fracture networks. *Water Resources Research* 46, W07532. doi :10.1029/2009WR008302.

- Roubinet, D., de Dreuzy, J.R., Tartakovsky, D.M., 2012. Semi-analytical solutions for solute transport and exchange in fractured porous media. *Water Resources Research* 48, W01542. doi :10.1029/2011WR011168.
- Roubinet, D., de Dreuzy, J.R., Tartakovsky, D.M., 2013. Particle-tracking simulations of anomalous transport in hierarchically fractured rocks. *Computers & Geosciences* 50, 52–58. doi :10.1016/j.cageo.2012.07.032.
- Roubinet, D., Gouze, P., Puyguiraud, A., Dentz, M., 2022. Multi-scale random walk models for reactive transport processes in fracture-matrix systems. *Advances in Water Resources* 164, 104183. doi :10.1016/j.advwatres.2022.104183.
- Roubinet, D., Irving, J., 2014. Discrete-dual-porosity model for electric current flow in fractured rock. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth* 119, 767–786. doi :10.1002/2013JB010668.
- Roubinet, D., Irving, J., Day-Lewis, F.D., 2015. Development of a new semi-analytical model for cross-borehole flow experiments in fractured media. *Advances in Water Resources* 76, 97–108. doi :10.1016/j.advwatres.2014.12.002.
- Roubinet, D., Irving, J., Pezard, P.A., 2018. Relating topological and electrical properties of fractured porous media : Insights into the characterization of rock fracturing. *Minerals* 8, 14. doi :10.3390/min8010014.
- Roubinet, D., Linde, N., Jougnot, D., Irving, J., 2016. Streaming potential modeling in fractured rock : Insights into the identification of hydraulically active fractures. *Geophysical Research Letters* 43, 4937–4944. doi :10.1002/2016GL068669.
- Roubinet, D., Liu, H.H., de Dreuzy, J.R., 2010b. A new particle-tracking approach to simulating transport in heterogeneous fractured porous media. *Water Resources Research* 46, W11507. doi :10.1029/2010WR009371.
- Roubinet, D., Tartakovsky, D.M., 2013. Hybrid modeling of heterogeneous geochemical reactions in fractured porous media. *Water Resources Research* 49, 7945–7956. doi :10.1002/2013WR013999.
- Rücker, C., Günther, T., Spitzer, K., 2006. Three-dimensional modelling and inversion of DC resistivity data incorporating topography - I. Modelling. *Geophysical Journal International* 166, 495–505. doi :10.1111/j.1365-246X.2006.03010.x.
- Ruiz Martinez, A., Roubinet, D., Tartakovsky, D.M., 2014. Analytical models of heat conduction in fractured rocks. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth* 119, 83–98. doi :10.1002/2012JB010016.

- Russian, A., Dentz, M., Gouze, P., 2016. Time domain random walks for hydrodynamic transport in heterogeneous media. *Water Resources Research* 52, 3309–3323. doi :10.1002/2015WR018511.
- Schön, J., 2011. Physical properties of rocks, in : Schön, J. (Ed.), *Physical Properties of Rocks - A Workbook*. Elsevier. volume 8 of *Handbook of Petroleum Exploration and Production*. doi :10.1016/S1567-8032(11)08012-8.
- Selley, R.C., Sonnenberg, S.A., 2015a. Chapter 3 - methods of exploration, in : Selley, R.C., Sonnenberg, S.A. (Eds.), *Elements of Petroleum Geology (Third Edition)*. third edition ed.. Academic Press, Boston, pp. 41–152. doi :10.1016/B978-0-12-386031-6.00003-5.
- Selley, R.C., Sonnenberg, S.A., 2015b. Chapter 6 - the reservoir, in : Selley, R.C., Sonnenberg, S.A. (Eds.), *Elements of Petroleum Geology (Third Edition)*. third edition ed.. Academic Press, Boston, pp. 255–320. doi :10.1016/B978-0-12-386031-6.00006-0.
- Sill, W., 1983. Self-potential modeling from primary flows. *Geophysics* 48, 76–86. doi :10.1190/1.1441409.
- Smith, J., Durucan, S., Korre, A., Shi, J.Q., 2011. Carbon dioxide storage risk assessment : Analysis of caprock fracture network connectivity. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5, 226–240. doi :10.1016/j.ijggc.2010.10.002.
- Snow, D.T., 1969. Anisotropic permeability of fractured media. *Water Resources Research* 5, 1273–1289. doi :10.1029/WR005i006p01273.
- Somogyvari, M., Jalali, M., Parras, S.J., Bayer, P., 2017. Synthetic fracture network characterization with transdimensional inversion. *Water Resources Research* 53, 5104–5123. doi :10.1002/2016WR020293.
- Stehfest, H., 1970. Algorithm 368 : Numerical inversion of laplace transform. *Communication of the ACM* 13, 47–49.
- Stesky, R.M., 1986. Electrical conductivity of brine-saturated fractured rock. *Geophysics* 51, 1585–1593. doi :10.1190/1.1442209.
- Sudicky, E.A., Frind, E.O., 1982. Contaminant transport in fractured porous media : Analytical solutions for a system of parallel fractures. *Water Resources Research* 18, 1634–1642. doi :10.1029/WR018i006p01634.
- Sunberg, K., 1932. Effect on impregnating waters on electrical conductivity of soils and rocks. *Trans. of the Amer. Inst. of Mining and Metal. Eng.* 79, 367–391.

- Suzuki, A., Niibori, Y., Fomin, S.A., Chugunov, V.A., Hashida, T., 2015. Analysis of water injection in fractured reservoirs using a fractional-derivative-based mass and heat transfer model. *Mathematical Geosciences* 47, 31–49. doi :10.1007/s11004-014-9522-5.
- Tang, D.H., Frind, E.O., Sudicky, E.A., 1981. Contaminant transport in fractured porous media : Analytical solution for a single fracture. *Water Resources Research* 17, 555–564. doi :10.1029/WR017i003p00555.
- Tang, Y., Valocchi, A.J., 2013. An improved cellular automaton method to model multispecies biofilms. *Water Research* 47, 5729–5742. doi :10.1016/j.watres.2013.06.055.
- Tao, Y.G., Slater, G.W., 2011. A Simulation Model of Biofilms with Autonomous Cells, 2-Explicit Representation of the Extracellular Polymeric Substance. *Macromolecular Theory and Simulations* 20, 571–583. doi :10.1002/mats.201100030.
- Tartakovsky, A.M., Tartakovsky, D.M., Scheibe, T.D., Meakin, P., 2008. Hybrid simulations of reaction-diffusion systems in porous media. *SIAM Journal on Scientific Computing* 30, 2799–2816. doi :10.1137/070691097.
- Titov, K., Ilyin, Y., Konosavski, P., Levitski, A., 2002. Electrokinetic spontaneous polarization in porous media : petrophysics and numerical modelling. *Journal of Hydrology* 267, 207–216. doi :{10.1016/S0022-1694(02)00151-8}.
- Violay, M., Pezard, P.A., Ildefonse, B., Belghoul, A., Laverne, C., 2010. Petrophysical properties of the root zone of sheeted dikes in the ocean crust : A case study from Hole ODP/IODP 1256D, Eastern Equatorial Pacific. *Tectonophysics* 493, 139–152. doi :10.1016/j.tecto.2010.07.013.
- Walsh, J.B., Brace, W.F., 1984. The effect of pressure on porosity and the transport properties of rock. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 89, 9425–9431. doi :10.1029/JB089iB11p09425.
- Watanabe, K., Takahashi, H., 1995. Fractal geometry characterization of geothermal reservoir fracture networks. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth* 100, 521–528. doi :10.1029/94JB02167.
- Wishart, D.N., Slater, L.D., Gates, A.E., 2008. Fracture anisotropy characterization in crystalline bedrock using field-scale azimuthal self potential gradient. *Journal of Hydrology* 358, 35–45. doi :10.1016/j.jhydrol.2008.05.017.
- Wright, H.M., Cashman, K.V., 2014. Compaction and gas loss in welded pyroclastic deposits as revealed by porosity, permeability, and electrical conductivity measu-

- rements of the Shevlin Park Tuff. *Geological Society of America Bulletin* 126, 234–247. doi :10.1130/B30668.1.
- Wright, H.M., Cashman, K.V., Gottesfeld, E.H., Roberts, J.J., 2009. Pore structure of volcanic clasts : Measurements of permeability and electrical conductivity. *Earth and Planetary Science Letters* 280, 93–104. doi :10.1016/j.epsl.2009.01.023.
- Xu, S., Duan, B., Zhang, D., 2000. Selection of the wavenumbers k using an optimization method for the inverse Fourier transform in 2.5D electrical modelling. *Geophysical Prospecting* 48, 789–796. doi :10.1046/j.1365-2478.2000.00210.x.
- Yang, S.Y., Yeh, H.D., 2009. Modeling heat extraction from hot dry rock in a multi-well system. *Applied Thermal Engineering* 29, 1676–1681. doi :10.1016/j.applthermaleng.2008.07.020.
- Yeh, H.D., Yang, S.Y., Li, K.Y., 2012. Heat extraction from aquifer geothermal systems. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 36, 85–99. doi :10.1002/nag.994.
- Zhan, H., Wen, Z., Huang, G., Sun, D., 2009. Analytical solution of two-dimensional solute transport in an aquifer-aquitard system. *Journal of Contaminant Hydrology* 107, 162–174. doi :10.1016/j.jconhyd.2009.04.010.
- Zhang, Y., Oldenburg, C., Finsterle, S., 2010. Percolation-theory and fuzzy rule-based probability estimation of fault leakage at geologic carbon sequestration sites. *Environmental Earth Sciences* 59, 1447–1459. doi :10.1007/s12665-009-0131-4.
- Zhou, Z., Roubinet, D., Tartakovsky, D.M., 2021. Thermal experiments for fractured rock characterization : Theoretical analysis and inverse modeling. *Water Resources Research* 57, e2021WR030608. doi :10.1029/2021WR030608.
- Zimmerman, R.W., Chen, G., Hadgu, T., Bodvarsson, G.S., 1993. A numerical dual-porosity model with semianalytical treatment of fracture/matrix flow. *Water Resources Research* 29, 2127–2137. doi :10.1029/93WR00749.

5 Curriculum vitae

Informations générales

ROUBINET Delphine

delphine.roubinet@umontpellier.fr
+33(0)4 67 14 90 66

Researcher ID : O-5303-2016

ORCID ID : 0000-0002-1757-9173

<https://sites.google.com/site/delphineroubi>

Position : Chargé de Recherche Classe Normale

Laboratoire d'accueil : Géosciences Montpellier (UMR 5243)

Nombre de citations : 578 ; h-index : 13 ; i10-index : 17 (*fourni par Google Scholar, 31/08/2017*)
27 articles ; 1 chapitre de livre ; 3 proceedings

Formation

- 2008-2010 Thèse en Sciences de la Terre, Géosciences Rennes (UMR 6118), France
Encadrants de thèse : Drs. Philippe Davy et Jean-Raynald de Dreuzy
- 2007 Master en Eau et Environnement, Université de Montpellier, France
- 2006 Diplôme d'ingénieur en Mathématiques et Modélisation, Institut National des Sciences Appliquées (INSA), Toulouse, France

Expériences professionnelles

- Depuis 2017 Chargé de Recherche CNRS, Géosciences Montpellier, France
- 2013-2016 Post-doctorat, Applied and Environmental Geophysics Group, Université de Lausanne (UNIL), Suisse
- 2011-2013 Post-doctorat, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of California, San Diego (UCSD), États-Unis
- 2009 Mobilité doctorale, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), États-Unis
- 2008-2010 Assistante d'enseignement, Université de Rennes, France

Cours et responsabilité d'enseignement

- Depuis 2022 Responsable du parcours Earth and Water under Global Change - mention STPE (master AWARE-IDIL¹, Université de Montpellier)
- 2016-2020 Master GER (Géologie de l'Exploration et des Réservoirs), Montpellier
- Écoulements dans les milieux poreux fracturés
- 2008-2010 Master2 H3 (Hydrogéologie Hydrobiogéochimie Hydropédologie), Rennes
- Caractérisation et modélisation hydrogéologique de sites
Master1 Sciences de la Terre et de l'Environnement, Rennes
- Modélisation numérique pour les Sciences de la Terre et de l'Environnement
- Évaluation des risques environnementaux
- Cartographie
Master2 Sciences, Technologies, Santé, Rennes
- Physique des milieux hétérogènes à la macro-échelle
- 2008 Co-auteur de cours en ligne de Master en Modélisation Hydrogéologique
(<http://www.envam.org/module/modelisation-hydrogeologique-des-milieux-souterrains>)

Activités professionnelles et collectives

- 2022
- **Comité de thèse**, Sina Momeni, Sorbonne Université-IFPEN, France
 - Co-organisateur du workshop CRITEX-OZCAR Géophysique Passive, Montpellier
 - Co-convener, CMWR conference, session "Transport and Reactions Across Scales in Hydrological Systems"
- 2021
- **Comité de thèse**, Ali Asaad, Université de Poitiers, France
 - Comité de sélection, Poste de maître de conférences en Hydrogéologie, Université de Montpellier, France
 - **Editeur invité**, Engineering Geology, Special Issue : "Discrete fracture networks in geo-hydrology : advancements and practical applications"
- 2020-2021
- Membre du comité de suivi de thèse de Jingyi Wang, Université de Montpellier
- Depuis 2020
- Membre nommé du Conseil de Laboratoire, Géosciences Montpellier, France
 - Co-responsable de l'axe scientifique "Hydrosystèmes", Géosciences Montpellier
- 2020
- Co-convener, EGU online session "Characterization and modeling of (coupled) THMC processes for geothermal energy" (ERE2.7)
 - Chair, CMWR online session "Mixing and reaction - Pore scale" (11.B), Stanford University, June 21-25 2020
- 2019
- **Editeur invité**, *Geofluids - Innovative tools to understand, image, monitor, and model physical processes in fractures*
 - Reviewer, ACS-PRF (American Chemical Society-Petroleum Research Fund)
 - Comité de sélection, Poste de maître de conférences en Géosciences, Université de Montpellier
- depuis 2018
- **Editeur associé**, *Journal of Hydrology* (~ 16 manuscripts par an)
- 2018-2020
- Représentante élue des chercheurs, Géosciences Montpellier
- 2018-2019
- Organisation des séminaires de l'Ecole Doctorale GAIA, Université de Montpellier
- 2018
- **Comité de thèse** (défense privée et public), Serdar Demirel, Université de Lausanne, Suisse
 - Commission d'éligibilité, École Doctorale GAIA, Université de Montpellier
 - Membre du comité de suivi de thèse de Alexandre Puyguiraud, Université de Montpellier, France
- 2017
- **Comité de thèse**, Jérôme de La Bernardie, Université de Rennes, France

Financements

- 2019-2021 - Sheared-Induced Permeability Enhancement and its Impact on Heat Transfer in Hot Dry Rock (PermHeat), PRC-CNRS (Projet de Recherche Collaboratif), PI, 18k€
- 2019-2020 - Models for characterization of fractured rock from thermography experiments (FracTherm), Projet de Collaboration du Centre France-Stanford, co-PI, 16.2k€
- 2019 - Towards quantitative critical zone monitoring with passive geophysical methods, CRITEX-OZCAR funding, co-PI (PI : C. Champollion), 10k€
- 2018-2020 - Anomalous hydrodynamic reactive transport in heterogeneous media : multi-scale laboratory experiments and modeling approaches (CROSSCALE), PICS-CNRS (Projet International de Coopération Scientifique), PI, 20k€
- 2018-2019 - Petrophysic system for characterizing reactive transport in karstic domains (STARTREK), EC2CO (CNRS-INSU), Scientific Leader (PI : L. Luquot), 34.5k€
- 2018 - Reactive transport in karstic media, (TREK & TREK2), IM2E (Institut Montpellierain de l'Eau et de l'Environnement), co-PI, 7.5k€
- 2018 - Pollution and remediation in fractured aquifers and reservoirs, Projet jeune chercheure, Géosciences Montpellier, PI, 6k€
- 2013 - Bourse de recherche Computers & Geosciences - Elsevier et IAMG (International Association for Mathematical Geosciences), 2.2k€
- 2009 - Bourse de mobilité de la région Bretagne (6 mois, USA), 4k€
- 2008 - Financement pour la création d'une maquette de vulgarisation de l'hydrogéologie (CNRS et BRGM), 2k€

Développement de plateformes et logiciels

- 2021-2022 - Développement du modèle FM-TDRW_3D pour le transport de solutés dans des systèmes fracture-matrice 3D
- 2017-2021 - Développement de la plateforme R-TDRW pour le transport de solutés réactifs dans les milieux poreux et fracturés hétérogènes 2D
- Développement de la plateforme UR-TDRW pour l'upscaling du transport de solutés réactifs dans les milieux poreux et fracturés hétérogènes 2D
- 2018 - Déclaration des logiciels ERT_DDP_2D (#12420-01) et ERT_DDP_2.5D (#12420-02) au service valorisation du CNRS (Electrical Resistivity Tomography with Discrete-Dual Porosity models)
- 2013-2017 - Développement de plateformes pour la modélisation des courants électriques dans les roches fracturées (2D, 2.5D, 3D) et pour le potentiel spontané (2D)
- 2011-2012 - Développement d'une plateforme de modèles hybrides pour les expériences de laboratoire (HYMLAB)
- 2011 - Développement du logiciel PERFORM pour la modélisation du transport de solutés dans les milieux fracturés
- Logiciel déposé avec le CNRS auprès de l'Agence pour la Protection des Programmes (<https://github.com/cageo/Roubinet-2012>)
- 2008-2010 - Contribution au développement de la plateforme H2OLAB (<http://h2olab.inria.fr/>)

Encadrement (et co-encadrement) d'étudiants

Thèses soutenues co-encadrées

- Marie Léger, Formation des réseaux karstiques : Rôle des hétérogénéités structurales, hydrodynamiques et minérales, Université de Montpellier, France, 2022 (co-encadrement 20%) - Année de césure
- Serdar Demirel, Electrical studies in fractured media, Université de Lausanne (UNIL), Suisse, 2018 (co-encadrement 80%) - Ingénieur en Modélisation des Risques à Rabobank (Pays-Bas)
- Zitong Zhou, Deep neural network surrogates for inverse problems, Stanford University, USA, 2021 (co-encadrement 20%) - Employée comme research scientist à Meta (États-Unis)

- Viktoria R. Gisladdottir, Transport in networks, University of California San Diego (UCSD), USA, 2018 (co-encadrement 20%) - Ingénieur de recherche à U.S. Army Engineer Research and Development Center (ERDC) (États-Unis)

Thèses en cours - collaboration

- Guofeng Song, Université Pétrôlière de Chine (Beijing) - Thermal Hydraulic Mechanical Chemical Coupling Analysis of Production and Optimization of Thermal Performance from Geothermal reservoirs (titre provisoire)
- Jiayan Ji, Université Pétrôlière de Chine (Beijing) - Complex 3D Fractured Reservoir Description, Mechanism of water-rock reaction and Thermal-Hydraulic-Chemistry Coupling Analysis in the Reservoir (titre provisoire)
- Pu Li, Université Pétrôlière de Chine (Beijing) - Low-frequency cyclic hydraulic fracturing mechanism of hot granite rock (titre provisoire)

Master 2

- Batyste Perrin (2021), Modélisation discrète et inversion de fractures par tomographie électrique, Université de Montpellier
- Noubough Alhaj Sleiman (2019), Modélisation du transport de solutés dans les milieux hétérogènes - Application à la formation des karsts, Université de Montpellier
- Marwa Alali (2019), Inverse problem for the characterization of fractured media from temperature experiments, Université de Montpellier
- Nadine Dirani (2018), Modélisation stochastique du transport de solutés (bio)réactifs dans les aquifères et réservoirs hétérogènes, Université de Montpellier
- Ajay Srinivasan Narayanan (2018), Numerical study of electrical resistivity methods for the characterization of fractured media, École Centrale de Nantes
- Victor Caballero Sanz (2014), 2.5D modeling of electric current in fractured rock, Université de Madrid
- Luis Guillermo Moscoso Lembcke (2014), Analytical analysis of thermal experiments at the borehole scale, Université de Madrid
- Álvaro Ruiz Martinez (2012), Analytical solution for heat transfer in fractured porous media, Université de Madrid

Publications scientifiques

* Corresponding author; ‡ Étudiant en thèse; † Étudiant en Master; # Étudiant en License

Publications avec des étudiants en thèse ou Master co-encadrés

REVUES À COMITÉ DE LECTURE

- Pryet A.^{*}, P. Matran, Y. Cousquer and **D. Roubinet** (2022), Particle tracking as a vulnerability assessment tool for drinking water production, *Front. Earth Sci.*, 10 :975156, doi :10.3389/feart.2022.975156
- Leger, M.[‡], L. Luquot^{*} and **D. Roubinet** (2022), Role of mineralogical, structural and hydrodynamic rock properties in conduits formation in three distinct carbonate rock types, *Chemical Geology*, 607, 121008, doi : 10.1016/j.chemgeo.2022.121008
- Klepikova, M.^{*}, B. Brixel and **D. Roubinet** (2022), Analysis of thermal dilution experiments with Distributed Temperature Sensing for fractured rock characterization, *Journal of Hydrology*, 127874, doi : 10.1016/j.jhydrol.2022.127874
- **Roubinet, D.**^{*}, P. Gouze, A. Puyguiraud and M. Dentz (2022), Multi-scale random walk models for reactive transport processes in fracture-matrix systems, *Advances in Water Resources*, 104183 (164), doi : 10.1016/j.advwatres.2022.104183
- Leger, M.^{‡,*}, **D. Roubinet**, M. Jamet[†] and L. Luquot (2022), Impact of hydro-chemical conditions on structural and hydro-mechanical properties of chalk samples during dissolution experiments, *Chemical Geology*, 594, 120763, doi : 10.1016/j.chemgeo.2022.120763
- Zhou, Z.[‡], **D. Roubinet** and D. M. Tartakovsky^{*} (2021), Thermal experiments for fractured rock characterization : theoretical analysis and inverse modeling, *Water Resources Research*, 57, e2021WR030608, doi :10.1029/2021WR030608
- Gouze, P.^{*}, A. Puyguiraud, **D. Roubinet** and M. Dentz (2021), Pore-scale transport in rocks of different complexity modelled by random walk methods, *Transport in Porous Media*, doi : 10.1007/s11242-021-01675-2
- Gouze, P.^{*}, A. Puyguiraud, **D. Roubinet** and M. Dentz (2020), Characterization and Upscaling of Hydrodynamic Transport in heterogeneous Dual Porosity Media, *Advances in Water Resources*, 103781, doi :10.1016/j.advwatres.2020.103781
- Lods, G., **D. Roubinet**^{*}, J. M. Matter, R. Leprovost and P. Gouze (2020), Groundwater flow characterization of an ophiolitic hard-rock aquifer from cross-borehole multi-level hydraulic experiments, *Journal of Hydrology*, 125152, doi :10.1016/j.jhydrol.2020.125152
- **Roubinet, D.**^{*}, S. Demirel[‡], E. Voytek, X. Wang and J. Irving (2020), Hybrid analytical and numerical approach for modeling fluid flow in simplified three-dimensional fracture networks, *Geofluids*, 3583817, doi :10.1155/2020/3583817
- Demirel, S.[‡], J. Irving^{*} and **D. Roubinet** (2019), Comparison of REV size and tensor characteristics for the electrical and hydraulic conductivities in fractured rock, *Geophysical Journal International*, 216(3), 1953-1973, doi :10.1093/gji/ggy537
- Köpke, C.[‡], J. Irving^{*} and **D. Roubinet** (2019), Stochastic inversion for soil hy-

draulic parameters in the presence of model error : an example involving ground-penetrating radar monitoring of infiltration, *Journal of Hydrology*, 569, 829-843, doi :10.1016/j.jhydrol.2018.12.016

- Demirel, S.[‡], **D. Roubinet**, J. Irving* and E. Voytek (2018), Characterizing near-surface fractured-rock aquifers : insights provided by the numerical analysis of electrical resistivity experiments, *Water*, 10(9), 1117, doi :10.3390/w10091117

- **Roubinet, D.***, J. Irving and P. A. Pezard (2018), Relating topological and electrical properties of fractured porous media : insights into the characterization of rock fracturing, *Minerals*, 8, 14, doi :10.3390/min8010014

- Caballero Sanz, V.[†], **D. Roubinet***, S. Demirel[‡], and J. Irving (2017), 2.5D discrete-dual-porosity model for simulating geoelectrical experiments in fractured rock, *Geophysical Journal International*, 209(2), 1099-1110, 10.1093/gji/ggx080

- Gisladdottir, V. R.[‡], **D. Roubinet**, D. M. Tartakovsky* (2016), Particle methods for heat transfer in fractured media, *Transport in Porous Media*, 1-16, 10.1007/s11242-016-0755-2

- **Roubinet D.***, N. Linde, D. Jougnot, and J. Irving (2016), Streaming potential modeling in fractured rock : insights into the identification of hydraulically-active fractures, *Geophysical Research Letters*, 43, 10.1002/2016GL068669

- Noetinger, B.* , **D. Roubinet**, A. Russian, T. Le Borgne, F. Delay, M. Dentz, J.-R. de Dreuzy, P. Gouze (2016), Random walk methods for modeling hydrodynamic transport in porous and fractured media from pore to reservoir scale, *Transport in Porous Media*, 1-41, 10.1007/s11242-016-0693-z

- Moscoso Lembcke, L. G.[†], **D. Roubinet***, F. Gidel[#], J. Irving, P. Pehme, and B. L. Parker (2016), Analytical analysis of borehole experiments for the estimation of subsurface thermal properties, *Advances in Water Resources*, 91, 88-103, 10.1016/j.advwatres.2016.02.011

- **Roubinet D.***, J. Irving, and F. D. Day-Lewis (2015), Development of a new semi-analytical model for cross-borehole flow experiments in fractured media, *Advances in Water Resources*, 76(0), 97-108, 10.1016/j.advwatres.2014.12.002

- **Roubinet D.*** and J. Irving (2014), Discrete dual-porosity model for electric current flow in fractured rock, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 119, doi :10.1002/2013JB010016

- Ruiz Martinez, A.[†], **D. Roubinet**, and D. M. Tartakovsky* (2014), Analytical models of heat conduction in fractured rocks, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 119, 10.1002/2012JB010016

- **Roubinet D.*** and D. M. Tartakovsky (2013), Hybrid modeling of heterogeneous geochemical reactions in fractured porous media, *Water Resources Research*, 49, doi :10.1002/2013WR013999

- **Roubinet, D.***, J.-R. de Dreuzy, and D. M. Tartakovsky (2013), Particle-tracking

simulations of anomalous transport in hierarchically fractured rocks, *Computers and Geosciences*, 50(0)10.1016/j.cageo.

2012.07.032

- **Roubinet, D.***, J.-R. de Dreuzy, and D. M. Tartakovsky (2012), Semi-analytical solutions for solute transport and exchange in fractured porous media, *Water Resources Research*, 48, 10.1029/2011WR01

1168

- **Roubinet, D.***, H.-H. Liu, and J.-R. de Dreuzy (2010), A new particle-tracking approach to simulating transport in heterogeneous fractured porous media, *Water Resources Research*, 46.10.1029/2010W

R009371

- **Roubinet, D.***, J.-R. de Dreuzy, and P. Davy (2010), Connectivity-consistent mapping method for 2-D discrete fracture networks, *Water Resources Research*, 46, 10.1029/2009WR008302

CHAPITRES D'OUVRAGES, PROCEEDING ET AUTRES PUBLICATIONS

- Song, G.[‡], **D. Roubinet**, Z. Zhou, X. Wang, D. M. Tartakovsky and X. Song (2022), Estimation of Statistical Properties of Fracture Networks from Thermal-tracer Experiments, Proceedings, 47th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California, February 7-9, 2022, SGP-TR-223

- Jougnot, D.*, **D. Roubinet**, L. Guarracino and A. Mainault (2020), Modeling streaming potential in porous and fractured media, description and benefits of the effective excess charge density approach, "Advances in Modeling and Interpretation in Near Surface Geophysics" in Springer Geophysics Series (Ed. Arkoprovo Biswas, PhD), doi : 10.1007/978-3-030-28909-6

- Wang, X., M. Sheng and **D. Roubinet** (2020), Augmentation de la perméabilité par cisaillement et ses impacts sur le transfert de chaleur dans les "roches sèches et chaudes", Projet de Recherche Conjoint - PermHeat (2019-2021), Le CNRS en Chine, La vie des laboratoires, N°32, Automne-Hiver 2020-2021

- Gisladdottir, V. R.[‡], **D. Roubinet** and D. M. Tartakovsky (2018), Efficient simulations of heat transfer in fractured rocks, Proceedings, 43rd Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California, February 12-14, 2018, SGP-TR-213

- Irving, J.*, C. Köpke[‡], **D. Roubinet** (2015), Accounting for model error in Bayesian solutions to near-surface geophysical inverse problems, *Near-Surface Asia Pacific Conference, Waikoloa, Hawaii, 7-10 July 2015*, pp. 79-82, doi :10.1190/nsapc2015-020

- **Roubinet D.[†]**, A. Boisson^{*,†}, L. Aquilina, O. Bour and P. Davy (2015), Impact of

flow velocity on biochemical processes - A laboratory experiment, *Hydrology and Earth System Sciences Discuss.*, 11, 9829-9862, doi :10.5194/hessd-11-9829-2014

COMMUNICATIONS À DES CONGRÈS ET WORKSHOPS

- Pryet, A., P. Matran, Y. Cousquer and **D. Roubinet** (2022), Particle tracking as a vulnerability assessment tool for drinking water production, hybrid EGU General Assembly 2022, EGU22-5966 (oral)
- Leger, M., L. Luquot and **D. Roubinet** (2022), Impact of hydro-chemical conditions on structural and hydro-mechanical properties of chalk samples during dissolution experiments, Interpore Conference (oral)
- Champollion, C. and **D. Roubinet** (2022), Discrete Fracture Network geophysical imaging from Electrical Resistivity Methods, IAHS-AISH Scientific Assembly, IAHS2022-390 (poster)
- Champollion, C. and **D. Roubinet** (2022), Inversion of synthetic Electrical Resistivity Tomography experiments for the characterization of fractured rocks, Eurokarst (talk)
- Song, G., **D. Roubinet**, Z. Zhou, X. Wang, D. M. Tartakovsky, X. Song (2022), Estimation of Statistical Properties of Fracture Networks from Thermal-tracer Experiments, Stanford Geothermal Workshop (talk)
- **Roubinet, D.**, Z. Zhou and D. M. Tartakovsky (2021), Efficient inversion of synthetic thermal experiments for fractured rock characterization, AGU, H41C-06 (talk)
- **Roubinet, D.**, B. Perrin and Champollion C. (2021), Inversion of synthetic Electrical Resistivity Tomography experiments for the characterization of fractured rocks , AGU Fall Meeting 2021, H35B-1047 (poster)
- Champollion, C. , B. Perrin and **D. Roubinet** (2021), Discrete Fracture Network inversion from Electrical Resistivity Dataset, OZCAR TERENO International Conference (poster)
- Leger, M., M. Jamet, **D. Roubinet** and L. Luquot (2021), Monitoring of hydrodynamic, mechanical and chemical properties of chalk during experimental dissolution, Goldschmidt conference, doi : 10.7185/gold2021.4648 (poster and talk, online meeting)
- **Roubinet, D.** (2021), Derivation of numerical modeling approaches for flow and transport processes in fractured rocks, 5th Summer School on Flow and Transport in porous & fractured media (invited talk)
- Klepikova, M., B. Brixel, M. Dentz and **D. Roubinet** (2020) New insights in the characterization of sparse fracture systems obtained from Distributed Temperature Sensing data acquired during thermal experiments, AGU Fall Meeting 2020 (online

meeting)

- **Roubinet, D.**, M. Dentz and P. Gouze (2020), Particle-based methods for simulating the propagation and (bio)degradation of contaminants in heterogeneous fractured porous media, CMWR online conference, Stanford University, June 21-25 2020 (talk)
- Jiang, C., X. Wang, X., **D. Roubinet** and Z. Sun (2020), Combined effects of network topology, hydraulic conditions and in-situ stress variations on solute propagation in natural fracture networks, Interpore online conference, 12th annual meeting (talk)
- **Roubinet, D.**, Z. Zhou and D. M. Tartakovsky (2020), Numerical strategies for characterizing fractured rock from heat tracer experiments, EGU, online conference, D973, EGU2020-13699, doi :10.5194/egusphere-egu2020-13699 (talk)
- Lods, G., **D. Roubinet**, J.M. Matter, R. Leprovost, P. Gouze and the Oman Drilling Project Science Party (2020), Groundwater flow characterization of the Drilling Project Batin test site (Sultanate of Oman) using cross-borehole and multiple-level hydraulic tests, International Conference on Ophiolites and the Oceanic Lithosphere : Results of the Oman Drilling Project and Related Research, 12-14th January, 2020, Sultan Qaboos University, Muscat, Sultanate of Oman (talk)
- Matter, J.M., P.A. Pezard, P. Gouze, **D. Roubinet**, et al., and the Oman Drilling Project Science Team (2020), Groundwater flow and fluid-rock interaction in the mantle peridotites of the Samail Ophiolite : Results from advanced downhole hydrogeophysical logging and borehole testing from the Oman Drilling Project, International Conference on Ophiolites and the Oceanic Lithosphere : Results of the Oman Drilling Project and Related Research, 12-14th January, 2020, Sultan Qaboos University, Muscat, Sultanate of Oman (talk)
- **Roubinet, D.** (2019), Analytical and numerical models for heat transfer and geothermal performances in fractured rocks, ARMA-CUPB, Geothermal International Conference, Beijing, China (talk)
- **Roubinet, D.**, S. Demirel[‡], J. Irving and E. Voytek (2018), Mixed analytical and numerical modeling approach for fluid flow in simplified 3D fracture networks, AGU, Washington D.C., USA (talk)
- Irving, J., S. Demirel[‡] and **D. Roubinet** (2018), Numerical investigation of electrical resistivity profiling for near-surface fracture characterization, AGU, Washington D.C., USA (poster)
- Gisladdottir, V. R.[‡], **D. Roubinet**, and D. M. Tartakovsky (2018), Efficient simulations of heat transfer in fractured rocks, 43rd Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California (talk)
- **Roubinet, D.**, A. Russian, M. Dentz, and P. Gouze (2017), Modeling reactive trans-

port processes in fractured rock using the time domain random walk approach within a dual-porosity framework, AGU, New Orleans, Louisiana, USA (talk reference : H52A-03)

- Gouze, P., **D. Roubinet**, M. Dentz, V. Plane, and A. Russian (2017), Characterization and upscaling of pore scale hydrodynamic mass transfers, AGU, New Orleans, Louisiana, USA (talk reference : H14G-03)

- Irving, J., V. Caballero Sanz, S. Demirel, and **D. Roubinet** (2017), 2.5-D discrete-dual-porosity model for simulating geoelectrical experiments in fractured rock, AGU, New Orleans, Louisiana, USA (poster reference : H33A-1644)

- **Roubinet, D.**, A. Russian, M. Dentz, and P. Gouze (2017), A new Time Domain Random Walk approach for modeling reactive transport processes in heterogeneous fractured porous media, Reactive Transport - Workshop, Amboise, France (invited talk)

- Gouze, P., F. Gjetvaj, A. Russian, M. Dentz, **D. Roubinet**, V. Plane, E.-A. Fiorentino, P. Smal, and A. Puyguiraud (2017), Modeling non-Fickian dispersion in X-ray-microtomography imaged rock samples, 79th EAGE Conference & Exhibition 2017 - Workshop, Paris, France (talk)

- **Roubinet D.**, N. Linde, D. Jougnot and J. Irving, 2016, Streaming potential modeling to understand the identification of hydraulically active fractures and fracture-matrix fluid interactions using the self-potential method, AGU, San Francisco, California, USA

- Demirel S.[‡], J. Irving, and **D. Roubinet**, 2016, Estimation of REV size and tensor characteristics for the electrical and hydraulic conductivities in fractured rock, AGU, San Francisco, California, USA

- Irving J., C. Köpke[‡], and **D. Roubinet**, 2016, Addressing the issue of model error in Bayesian solutions to near-surface geophysical inverse problems, SIMAI Conference, Milan, Italy

- Irving J., C. Köpke[‡], and **D. Roubinet**, 2016, Accounting for known sources of model error during Bayesian posterior sampling of geophysical inverse problems, SIAM Conference on Uncertainty Quantification, Lausanne, Switzerland

- Irving J., C. Köpke[‡], and **D. Roubinet**, 2015, Accounting for model error in Bayesian solutions to near-surface geophysical inverse problems, Near-Surface Asia Pacific Conference, Waikoloa, Hawaii

- Gisladdottir V. R.[‡], **D. Roubinet**, and D. M. Tartakovsky, 2015, Two-dimensional heat transfer in a heterogeneous fracture network, AGU, San Francisco, California, USA

- **Roubinet D.**, J. Irving, and F. Day-Lewis, 2014, Semi-analytical model of cross-borehole flow experiments for fractured medium characterization, AGU, San Francisco, California, USA

- Köpke C.[‡], J. Irving, and **D. Roubinet**, 2014, Assessing and accounting for the effects of model error in Bayesian solutions to hydrogeophysical inverse problems, AGU, San Francisco, California, USA
- Demirel S.[‡], **D. Roubinet**, and J. Irving, 2014, Modeling electric current flow in 3D fractured media, AGU, San Francisco, California, USA
- **Roubinet, D.**, and J. Irving, 2014, Discrete dual porosity modeling of electrical current flow in fractured media, RST, France
- **Roubinet, D.** and J. Irving, 2013, Discrete dual porosity modeling of electrical current flow in fractured media, AGU, San Francisco, California, USA
- Gisladdottir V.R.[‡], **D. Roubinet**, and D. M. Tartakovsky, 2013, Heat transfer in heterogeneous fractured rocks, AGU, San Francisco, California, USA
- Demirel S.[‡], **D. Roubinet**, and J. Irving, 2013, Modeling electric current flow in 3D fractured media, SGM, Lausanne, Switzerland
- Köpke C.[‡], J. Irving, and **D. Roubinet**, 2013, Exploring the issue of model error in stochastic solutions to hydrogeophysical inverse problems, SGM, Lausanne, Switzerland
- **Roubinet, D.**, and J. Irving, 2013, Discrete dual porosity modeling of electrical current flow in fractured media, SGM, Lausanne, Switzerland
- **Roubinet, D.**, A. Boisson, L. Aquilina, O. Bour and P. Davy, 2012, Flow velocity impact on denitrification process at the pore-scale, AGU, San Francisco, California, USA
- **Roubinet, D.**, D. M. Tartakovsky, and I. Battiato, 2011, A hybrid description of biogeochemical processes : a continuum-scale model with pore-scale refinement, AGU, San Francisco, California, USA
- **Roubinet, D.**, J.-R. de Dreuzy, H.H. Liu, 2010, Influence of fracture-network structures on radionuclide behavior in fractured porous media, CMWR, Barcelona, Spain
- **Roubinet, D.**, J.-R. de Dreuzy, P. Davy, D. Tartakovsky, and Y. Meheust, 2010, Fracture matrix exchanges driven by fracture-scale and network-scale flow organizations, Summer School on Flow and Transport in Porous and Fractured Media, Cargèse, France
- **Roubinet, D.**, J.-R. de Dreuzy, H.H. Liu, Q. Zhou, 2009, Influence of the Fracture-Network Structure on Contaminant Transport in Fractured Porous Media, AGU, San Francisco, USA
- **Roubinet, D.**, J.-R. de Dreuzy, P. Davy, 2008, A discrete dual-porosity fracture network for modeling flow in heterogeneous porous fractured media, Gordon conference, Oxford, England
- Paturel, J.-E., Casenave, L., Rescan, M., **Roubinet, D.**, Ardoin-Bardin, S., Dezetter, A., Mahe, G. and Servat, E., 2007, Impact of climate change on water resources

in West Africa, International conference for impact of climate change on natural, economical and societal systems in West Africa, Ouagadougou, Burkina Faso

SÉMINAIRES ET WEBINAIRES

- Champollion, C. and **D. Roubinet** (2021), Modélisation et inversion d'hétérogénéités discrètes en géophysique : fractures et tomographie de résistivité électrique, Initiatives #GeoMaths, Université de Montpellier (talk)
- **Roubinet, D.** (2021), What can we learn from electrical measurements? Applications to fractured rocks from laboratory to field scale, GeoScience & GeoEnergy Webinar (lien youtube ¹)
- Lods, G. and **D. Roubinet** (2021), Expériences hydrauliques entre puits : mesures, données et modèles d'interprétation, Initiatives #GeoMaths, Université de Montpellier (talk)
- **Roubinet, D.** (2019), Multi-scale modeling and characterization approaches in heterogeneous fractured porous media, Oceanographical Institute of China, Qingdao, China (seminar)
- **Roubinet, D.** (2019), Multi-scale modeling and characterization approaches in heterogeneous fractured porous media, Wuhan University, Wuhan, China (seminar)
- **Roubinet, D.** (2018), Pollution et remédiation dans les aquifères et réservoirs fracturés - Apport des méthodes (hydro-)géoélectriques pour la détection et la caractérisation des fractures, Géosciences Montpellier, Université de Montpellier, Montpellier, France (seminar)

1. https://www.youtube.com/watch?v=iiM6Up9DC_c

6 Articles sélectionnés

* Corresponding author ; ‡ Étudiant en thèse ; † Étudiant en Master ;

Modélisation et interprétation des méthodes électriques

(A1) Caballero Sanz, V.[†], D. Roubinet*, S. Demirel[‡], and J. Irving (2017), 2.5D discrete-dual-porosity model for simulating geoelectrical experiments in fractured rock, *Geophysical Journal International*, 209(2), 1099-1110, 10.1093/gji/ggx080

(A2) Demirel, S.[‡], D. Roubinet, et al. (2018), Characterizing near-surface fractured-rock aquifers : insights provided by the numerical analysis of electrical resistivity experiments, *Water*, 10(9), 1117, 10.3390/w10091117

Transport de chaleur dans les milieux fracturés

(A3) Ruiz Martinez, A.[†], D. Roubinet, and D. M. Tartakovsky* (2014), Analytical models of heat conduction in fractured rocks, *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 199, 10.1002/2012JB0100-16

(A4) Zhou, Z.[‡], D. Roubinet and D. M. Tartakovsky* (2021), Thermal experiments for fractured rock characterization : theoretical analysis and inverse modeling, *Water Resources Research*, 57, e2021WR030608, 10.1029/2021WR030608

Devenir des contaminants dans les milieux hétérogènes

(A5) Roubinet D.* and D. M. Tartakovsky (2013), Hybrid modeling of heterogeneous geochemical reactions in fractured porous media, *Water Resources Research*, 49, 10.1002/2013WR013999

(A6) Roubinet, D.*, P. Gouze, A. Puygiraud and M. Dentz (2022), Multi-scale random walk models for reactive transport processes in fracture-matrix systems, *Advances in Water Resources*, 104183 (164), 10.1016/j.advwatres.2022.104183