

**UNIVERSITÉ de POITIERS**

Tél: 05.49.45.30.00 – Fax: 05.49.45.30.60

**APPEL A CANDIDATURE**

Contact : Anthony BEAUDOIN  
Courriel : anthony.beaudoin@univ-poitiers.fr

**Affectation  
Université de  
Poitiers**

*UFR SFA  
Sciences  
Fondamentales et  
Appliquées*  
Rue Albert Turpain B8-  
B35  
86073 POITIERS  
CEDEX 9, FRANCE

**CONTRAT : 01/11/2019 au 31/10/2020**  
Date limite de dépôt des candidatures : **01/10/2019 à 12h**

**Dénomination du  
poste**

**E1E45 - Expert-e  
en calcul  
scientifique  
(Poste de  
catégorie A)**

**Mission du post-doctorant :**

Le stage post-doctoral est financé par l'action 2 « Dynamique des contaminants » de l'axe 3 « Chimie verte et préservation des ressources (eau, sol, biodiversité, carbone renouvelable) » du programme ECONAT « gestion durable des ECOSystèmes et des ressources NATurelles » (CPER 2015 - 2020). Un des objectifs de l'action 2 est d'étudier le transport des contaminants dans les structures calcaires fracturées du bassin versant de la Charente. Dans cette action 2, nous proposons de développer des modèles numériques, basés sur l'approche Monte Carlo, pour estimer la valeur maximale de l'index de dilution Emax dans des milieux poreux ou fracturés, très fortement hétérogènes.

**Lieu du travail :**

La personne recrutée sera intégrée à l'équipe HYDEE (HYdrodynamique et Ecoulements Environnementaux) du département FTC (Fluides, Thermique et Combustion) de l'Institut Pprime, dans le bâtiment H2 situé sur le site universitaire du Futuroscope (Adresse postale : Institut Pprime, CNRS - Université de Poitiers - ENSMA, SP2MI - Téléport 2, boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, F86962 Futuroscopoe Chasseneuil Cedex). Pour accomplir sa mission dans les meilleures conditions, la personne recrutée sera en contact avec le service informatique du bâtiment SP2MI situé sur le site universitaire du Futuroscope.

**Contexte du travail :**

L'étude du transport de solutés inertes à travers des formations géologiques hétérogènes est importante pour répondre à des questions environnementales comme la remédiation des eaux souterraines contaminées et le stockage du CO2 [Nowamooz *et al.*, 2013; Wang *et al.*, 2014]. Pendant le transport des solutés inertes dans ces mêmes formations géologiques, deux principaux mécanismes sont impliqués : advection et diffusion moléculaire. Ces deux basiques mécanismes se combinent pour donner la dispersion. Ils sont responsables du

mélange des solutés inertes, combinaison de l'étalement et de la dilution, qui modifie la taille du nuage de solutés inertes et le volume d'eau occupé par les solutés inertes [Dentz *et al.*, 2011; Herrera *et al.*, 2017].

Ce processus physique peut être quantifié par l'index de dilution  $E$ , introduit par Kitanidis en 1994. Dans le passé, il a été montré que la valeur maximale de l'index de dilution  $E_{max}$  augmente de façon monotone dans des écoulements darcéens à travers des milieux poreux hétérogènes [Kitanidis, 1994; Thierrin et Kitanidis, 1994]. Des simulations numériques récentes, basées sur l'approche Monte Carlo, nous ont permis d'établir la relation entre la pente  $a$  de la valeur maximale de l'index de dilution  $E_{max}$  et la valeur moyenne positive du second invariant  $Q_{av}$  du tenseur de déformation  $\nabla u$  [Beaudoin *et al.*, 2019]. Le travail, proposé dans ce stage post-doctoral, constitue une suite à ces différents travaux.

### **Travail à effectuer :**

La première tâche de la personne recrutée est de compléter le travail réalisé par Beaudoin *et al.* sur l'estimation de la valeur maximale de l'index de dilution  $E_{max}$  dans des écoulements darcéens à travers des milieux poreux très fortement hétérogènes [Beaudoin *et al.*, 2019]. L'étude paramétrique, réalisée par Beaudoin *et al.*, est incomplète. La personne recrutée analysera les effets de la dispersion locale sur la valeur maximale de l'index de dilution  $E_{max}$  à partir de nouvelles simulations numériques Monte Carlo, en 2D et 3D. Dans la version actuelle du modèle numérique, une fonction exponentielle de corrélation est utilisée pour caractériser la distribution log-normal de la conductivité hydraulique. D'autres fonctions de corrélation, existant dans la littérature scientifique, seront implémentées dans le modèle numérique [Hsu, 2000; Gomez-Hernandez and Wen, 2018]. Cela permettra d'étudier les effets de la nature de la conductivité hydraulique sur la valeur maximale de l'index de dilution  $E_{max}$ , toujours dans des écoulements darcéens à travers des milieux poreux très fortement hétérogènes.

La deuxième tâche de la personne recrutée est de modifier la version actuelle du modèle numérique pour simuler l'écoulement de l'eau et le transport de solutés inertes à travers une seule fracture. Deux modifications seront à faire dans la version actuelle du modèle numérique. La première modification consistera à implémenter la simulation de l'écoulement de l'eau dans le plan de la fracture selon les travaux de Plouraboue *et al.* (1998) ou de Zhang et Huan (2018). L'approximation de Reynolds sera appliquée pour résoudre l'écoulement de l'eau. Le gradient de l'ouverture de la fracture sera supposé être assez faible pour considérer l'écoulement dans le plan de la fracture comme un écoulement de Poiseuille. Ainsi, le problème de l'écoulement de l'eau pourra être considéré comme 2D où l'estimation de la vitesse moyenne est faite à partir de l'équation de continuité et de la loi de Darcy avec une conductivité hydraulique proportionnelle à l'ouverture de la fracture. La génération de la fracture sera basée sur les travaux de Mourzenko *et al.* (1996 et 2016). La fracture sera limitée par deux surfaces rugueuses non corrélées. L'ouverture de la fracture sera donnée en estimant la distance moyenne entre les deux surfaces. La rugosité de chaque surface sera caractérisée par une fluctuation aléatoire donnée par une fonction de corrélation spatiale, Gaussian ou auto-affine. La deuxième modification consistera à implémenter le transport de particules inertes dans le plan de la fracture avec une nouvelle méthode tracker permettant de considérer la dispersion de Taylor-Aris sans être obligé de simuler numériquement l'écoulement de l'eau en 3D. La difficulté est alors de considérer la déformation des particules inertes induite par la variation de la vitesse dans la direction perpendiculaire au plan de la fracture (Wang *et al.*, 2012; Wu *et al.*, 2017). La solution est d'utiliser la notion de

moments. Les moments rendent possible de suivre la forme des particules inertes pendant leur transport dans la fracture. La nouvelle version du modèle numérique permettra d'étudier les effets de la distribution des ouvertures de la fracture sur le transport de solutés inertes (Stoff *et al.*, 2019).

- Nowamooz, G. Radilla, M. Fourar and B. Berkowitz, Non-Fickian Transport in Transparent Replicas of Rough-Walled Rock Fractures, *Transport in Porous Media*, 98 (2013), 651–682.
- L. Wang and M. Bayani Cardenas, Non-Fickian transport through two-dimensional rough fractures: Assessment and prediction, *Water Resources Research*, 50 (2014), 871–884.
- M. Dentz, T. Le Borgne, A. Englert and B. Bijeljic, Mixing, spreading and reaction in heterogeneous media: A brief review, *Journal of Contaminant Hydrology*, 120 (2011), 1–17.
- P.A. Herrera, J.M. Cortinez and A.J. Valocchi, Lagrangian scheme to model subgrid scale mixing and spreading in heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, 53 (2017), 3302–3318.
- P.K. Kitanidis, The concept of the dilution index, *Water Resources Research*, 30 (1994), 2011–2026.
- J. Thierrin and P.K. Kitanidis, Solute dilution at the Borden and Cape Cod groundwater tracer tests, *Water Resources Research*, 30 (1994), 2883–2890.
- Beaudoin, A. Dartois and S. Huberson, Analysis of the influence of averaged positive second invariant  $Q_{av}$  of deformation tensor  $\nabla u$  on the maximum dilution index  $E_{max}$  in steady Darcy flows through heterogeneous porous media, *Advances in Water Resources*, in press (2019).
- Beaudoin, A. Dartois and S. Huberson, Analysis of the influence of averaged positive second invariant  $Q_{av}$  of deformation tensor  $\nabla u$  on the maximum dilution index  $E_{max}$  in steady Darcy flows through heterogeneous porous media, *Advances in Water Resources*, in press (2019).
- K.C. Hsu, General first order expressions for solute transport in two and three dimensional randomly heterogeneous porous media, *Geological Society of America, Special paper*, 348 (2000).
- J.J. Gomez-Hernandez and X.H. Wen, To be or not to be multi-Gaussian ? A reflection on stochastic hydrogeology, *Advances in Water Resources*, 21 (2018), 47–61.
- F. Plouraboue, J.P. Hulin, S. Roux and J. Koplik, Numerical study of geometrical dispersion in self-affine rough fractures, *Physical Review E*, 58 (1998), 3334–3346.
- Y. Zhang and N. Huan, Numerical study on the shear-flow behavior and transport process in rough rock fractures, *Compte Rendu Mecanique*, 346 (2018), 877–886.
- V.V. Mourzenko, J.F. Thovert and P.M. Adler, Geometry of simulated fractures, *Physical Review E*, 53 (1996), 5606–5626.
- V.V. Mourzenko, J.F. Thovert and P.M. Adler, Conductivity and Transmissivity of a Single Fracture, *Transport in Porous Media*, 112 (2016).
- L. Wang, M. Bayani Cardenas, W. Deng and P.C. Bennett, Theory for dynamic longitudinal dispersion in fractures and rivers with Poiseuille flow, *Geophysical Research Letters*, 39 (2012).
- Y. Wu, Q. Liu, A. Chan and H. Liu, Implementation of a time-domain random walk method into a discrete element method to simulate nuclide transport in

- fractured rock masses, *Geofluids*, 17 (2017).
- M. Stoll, F.M Huber, M. Trumm, F. Enzmann, D. Meinel, A. Wenka, E. Schill, T. Schäfer, Experimental and numerical investigations on the effect of fracture geometry and fracture aperture distribution on flow and solute transport in natural fractures, *Journal of Contaminant Hydrology*, 221 (2019), 82-97.

### **Activités principales :**

- Comprendre les méthodes numériques permettant de résoudre les problèmes d'écoulement d'eau et de transport de masse dans les milieux poreux ou fracturés, très fortement hétérogènes : cela implique d'être capable de les décrire à d'autres personnes ou dans un rapport d'activités.
- Implémenter ces méthodes numériques dans des modèles numériques : cela implique d'écrire en C++ des bibliothèques parallélisées sous MPI.
- Installer et lancer ces modèles numériques sur des supercalculateurs.
- Réaliser une validation des modèles numériques : cela implique de définir des benchmarks et de les appliquer.
- Réaliser une étude physique, théorique et/ou appliquée, pour améliorer la compréhension de l'écoulement de l'eau et du transport de masse dans les milieux poreux ou fractures, très fortement hétérogènes.
- Organiser une base de données et son accès : les données seront générées lors des deux étapes précédentes.

### **Compétences attendues :**

- Doctorat en Mathématiques Appliquées, Géosciences, Simulations Numériques à Haute Performance.
- Développer en C++ avec MPI.
- Capacité de décision.
- Expression orale et écrite en Anglais / Français.
- Travail en équipe.