

Jean-François THOVERT

Directeur de Recherche au CNRS

Tel 05 49 49 67 78

jean.francois.thovert@univ-poitiers.fr

Institut Pprime CNRS / IAES-ENSMA / Université de Poitiers (UPR 3346)

Département Fluide-Thermique-Combustion

Equipe CH, "Combustion Hétérogène – Milieux Poreux"

SP2MI Téléport 2, Bd P et M Curie, BP30179

86962 Futuroscope Cedex

Responsable de l'équipe CH, "Combustion Hétérogène – Milieux Poreux"

(~25 personnes, 11 chercheurs et enseignants-chercheurs permanents)

Membre du **Comité de pilotage du labex INTERACTIFS**, thème "Transferts de masse et de chaleur"

Thèmes de recherche

Tous nos travaux portent sur l'étude des matériaux poreux, fractures, réseaux de fractures, et matériaux poreux fracturés, avec une méthodologie commune : rendre compte de la façon la plus détaillée et précise possible de la microstructure, et résoudre les équations qui régissent les phénomènes à cette échelle avec le minimum d'approximations, en 3 dimensions. L'objectif est de déterminer des propriétés effectives par un changement d'échelle basé sur la prise en compte détaillée de la morphologie et des processus physiques, ou éventuellement de conduire des simulations numériques directes.

Les champs d'application les plus directs, passés, actuels ou potentiels, concernent l'exploitation de ressources souterraines (eau, énergies fossiles), le stockage souterrain (déchets, CO₂), et de nombreuses situations souvent liées à des considérations environnementales. En particulier, les transports réactifs et notamment la combustion en milieu poreux interviennent dans nombre de situations, naturelles ou industrielles (diagenèse, brûlage de déchets ou mise en œuvre de combustibles solides, incendies, ...).

1. Caractérisation morphologique et topologique, procédures de reconstruction, incidence de la géométrie sur les propriétés effectives

Une part de nos travaux porte sur l'étude systématique de tous les aspects des milieux poreux et/ou fracturés, d'un point de vue fondamental, en enrichissant sans cesse la gamme des types de milieux et des types de mécanismes considérés. Ceci inclut notamment :

- la caractérisation topologique et géométrique de milieux réels ;

Scientific interests

All our activities pertain to porous media, fractures, fracture networks and fractured porous media, with a common methodology: to account in the most detailed and accurate way as possible for the microstructure, and solve the equations which govern the phenomena on this scale, in 3 dimensions, with the least possible approximations and hypotheses. The purpose is to determine the macroscopic properties and behaviors of these disordered materials, by an upscaling procedure based on a detailed account of the morphology and of the physical processes, or alternatively to perform direct numerical simulations.

The most direct fields of applications, past, current or potential, include the exploitation of underground resources (water, fossile fuels, geothermal energy), underground storage (waste repositories, CO₂) and many situations often related to environmental issues. In particular, reactive transports and especially combustion in porous media are involved in many situations, in natural or industrial settings (diagenesis, waste incineration, burning of solid fuels, fire accidents, ...).

1. Morphological and topological characterization, reconstruction procedures, influence of the geometry on the effective properties

A large part of our work consists in the systematic study of all aspects of porous and/or fractured media, from a fundamental point of view, with an ever growing range of material kinds and processes. This includes in particular:

- the topological and geometrical characterization of real media;

- la mise au point de procédures de reconstruction stochastiques de ces milieux, géométrique ou en simulant les processus qui interviennent dans leur genèse ;
- le développement d'outils de simulation pour les mécanismes physiques dans ces milieux (conduction/diffusion, écoulement simple ou double-phase, déformations élastiques, ...) et pour leurs couplages (transport passif ou réactif, électrocinétique, hydromécanique, ...);
- l'application de ces outils à la détermination des coefficients effectifs (upscaling) qui interviennent dans une description à plus grande échelle.

De là découle une connaissance de base et des outils qui peuvent être mis à profit dans beaucoup d'applications. En particulier, la mise en place d'outils de simulation complets et à grande échelle tels que décrits dans la suite bénéficie des importants acquis ainsi obtenus.

2. Modélisation numérique et simulation dans les milieux poreux fracturés

Les coefficients effectifs obtenus en §1 peuvent être mis en œuvre dans des modèles de simulation, pour poursuivre la démarche d'upscaling vers une échelle supérieure ou pour conduire des simulations à l'échelle du champ.

La situation la plus complexe concerne les milieux poreux fracturés, où les transferts dans la matrice et dans les fractures sont pris en compte simultanément. Nous avons développé des outils sans équivalents pour explorer les propriétés de ces milieux. Ils s'articulent autour d'un puissant outil de maillage et de codes de simulation de processus incluant les écoulements simple- ou double-phase, le couplage hydromécanique et le transport de masse et de chaleur.

Maintes d'applications en ont été faites, dans des domaines divers souvent liés à l'exploitation pétrolière, au stockage souterrain ou à la gestion, exploitation ou protection des eaux souterraines. Par ailleurs, beaucoup d'outils conceptuels ont été conçus et beaucoup de résultats théoriques ont été établis, portant sur les propriétés géométriques, topologiques et stéréologiques des réseaux de fractures, qui fournissent une base pour l'exploitation des données de terrains, et pour la modélisation raisonnée des propriétés de transport. Ceci a donné lieu au livre "Fractured Porous Media", Adler, Thovert & Mourzenko, Oxford University Press, Oxford, 2012.

- the development of stochastic reconstruction procedures for these media, based only on geometrical data or by simulating the processes involved in their genesis;
- the development of simulation tools for the physical mechanisms in these media (convection/diffusion, single- or two-phase flow, elastic deformations, ...) and for their couplings (passive or reactive transport, electrokinetic, hydromechanics, ...);
- the application of these tools for the determination of the effective coefficients (upscaling) which are involved in a homogenized description on a larger scale.

This provides a broad knowledge base and conceptual or numerical tools which can be used in many applications. In particular, they are an essential asset for the implementation of the large scale simulation softwares mentioned in the following.

2. Numerical modelling and simulations in fractured porous media

The effective coefficients obtained in §1 can be implemented in simulation models, to carry the upscaling procedure further toward another larger scale, or to perform direct simulations on the field scale.

The most complex situation is reached with fractured porous media, when the transfers in the porous matrix and in the fractures are accounted for simultaneously. We have developed unique softwares for the explorations of the properties of this kind of media, based on a powerful meshing tool and on simulation codes for processes including single- and two-phase flow, hydromechanical coupling and heat & mass transport.

Many applications have been conducted, in various domains often related to oil production, to underground storage or to the management, exploitation or preservation of aquifers. On the other hand, many conceptual tools have been devised and many theoretical results established, regarding the geometrical, topological and stereological properties of fracture networks, which provides keys for the interpretation of field data and for a reasoned modelling of the transport properties. This was the matter of a book, "Fractured Porous Media", by Adler, Thovert & Mourzenko, Oxford University Press, Oxford, 2012.

3. Transferts réactifs en milieux poreux - Description à la microéchelle, problèmes théoriques associés à l'homogénéisation

Ces études fondamentales portent toutes, bien que dans des contextes différents, sur la validité et la forme d'une formulation homogénéisée pour des processus réactifs. On s'est intéressé à diverses situations.

- Analyse théorique et numérique de la réaction $A+B\rightarrow C$ entre espèces dissoutes. La question fondamentale peut se résumer à: le taux de réaction homogénéisé dépend-il seulement des concentrations moyennes locales, ou la contribution de leurs fluctuations doit-elle être prise en compte?
- Upscaling des transports réactifs en milieu poreux, quand une réaction de combustion hétérogène gouvernée par une loi d'Arrhenius se produit entre un combustible (dans la phase solide) et un comburant (dans le fluide en écoulement), selon les conditions d'équilibre thermique local.
- Combustion en milieu poreux prenant en compte deux processus supplémentaires, la pyrolyse préalable d'un kérogène et la calcination de la phase minérale le contenant.

4. Pyrolyse et combustion en milieu poreux

Ces processus sont considérés ici dans une optique plus tournée vers une mise en œuvre et vers le développement d'outils de simulation numérique directe. Deux principaux domaines sont à mentionner.

- Combustion de schistes bitumineux, en réacteur ou in situ. Le problème implique un modèle chimique complexe (séchage, pyrolyse, calcination, plusieurs oxydo-réductions) et beaucoup de processus de transport. L'étude par simulation microscopique a permis de dégager une typologie des comportements selon quelques paramètres adimensionnels, et se poursuit en complétant et améliorant le modèle, pour aller vers une échelle supérieure.
- Problèmes liés à la sécurité incendie. Nos travaux portent sur un verrou stratégique dans les simulations d'incendie : la dégradation des solides exposés au feu, qui dégage d'importantes quantités de gaz combustibles et contribue fortement au développement du sinistre. L'approche est assez semblable à celle appliquée aux schistes bitumineux, avec prise en compte des couplages entre transports et processus chimiques. Elle a été appliquée au bois, et l'est actuellement aux polymères constituant les gaines de câbles électriques.

3. Reactive transfers in porous media – Microscopic description, theoretical issues associated with the homogenization procedure

All these fundamental studies address the validity and the appropriate form of a homogenized formulation for reactive processes, in various contexts. The following situations have been examined.

- Theoretical and numerical analysis of the reaction $A+B\rightarrow C$ between dissolved species. The main fundamental question comes down to: does the homogenized reaction rate depend only on the local mean concentrations, or does the contribution of their fluctuations have to be taken into account?
- Upscaling of reactive transports in porous media, when a heterogeneous combustion reaction governed by Arrhenius law takes place between a fuel (in the solid phase) and an oxidizer (in the fluid), depending on the local thermal equilibrium conditions.
- Combustion in porous media, taking into account additional processes: the preliminary pyrolysis of a kerogen and the calcination of the mineral phase which contains it.

4. Pyrolysis and combustion in porous media

These processes are considered here from a more application-oriented point of view, with the development of direct simulation softwares. Two main fields of application can be mentioned.

- Combustion of oil shales, in a fixed bed reactor or in situ. The problem involves a complex chemical model (drying, pyrolysis, calcination, several redox reactions) and many transport mechanisms. A typology of the behaviors could be established from microscale simulations, as a function of a few dimensionless parameters, and we proceed with the extension and improvement of the model, in order to address larger scale applications.
- Problems associated with fire safety. We aim to contribute in overcoming a strategic issue in the simulations of fire accidents: the degradation of solids exposed to fire, which produces large amounts of combustible gases and strongly contributes to the development of the fire. The approach is similar to that applied to oil shales, with an account of the coupling between transports and chemical processes. It has been applied to wood, and currently to the polymers constituting electrical cable sheaths.