UNIVERSITÉ DE RENNES 1

THESE DE DOCTORAT DE

L'UNIVERSITE DE RENNES 1

ECOLE DOCTORALE N° 600
Ecole doctorale Ecologie, Géosciences, Agronomie et Alimentation
Spécialité : Sciences de la Terre et de l'Environnement

Par
Diane Doolaeghe Wehowsky

Colmatage des réseaux de fractures, modèles et conséquences hydrologiques

Thèse présentée et soutenue à Rennes, le 27/09/2021
Unité de recherche : UMR 6118 – Géosciences Rennes

Rapporteurs avant soutenance :

Béatrice Ledésert	Professeur à l'Université de Cergy-Pontoise, France
Joaquin Jimenez Martinez	Maître de Conférences à L'EAWAG-ETH Zurich, Suisse

Composition du Jury :

Président :	Tanguy Leborgne	Professeur (CNAP) à l'Université de Rennes 1, France
Examinateurs :	Tanguy Leborgne	Professeur (CNAP) à l'Université de Rennes 1, France
	Renaud Toussaint	Directeur de recherche (CNRS) à l'Université de Strasbourg, France
	Béatrice Ledésert	Professeur à l'Université de Cergy-Pontoise, France
	Joaquin Jimenez Martinez	Maître de Conférences à L'EAWAG-ETH Zurich, Suisse
	Jan-Olof Selroos	Chef de projets chez SKB, Suède

Dir. de thèse :	Philippe Davy	Directeur de recherche (CNRS) à l'Université de Rennes 1
Co-dir. de thèse :	Caroline Darcel	Chef de projets chez Itasca Consultants SAS, France

A ma grand-mère Mathilde,

Préface

Cette thèse s'est déroulée au sein de l'Université de Rennes 1, dans le cadre d'une collaboration entre l'entreprise *Itasca Consultants SAS*, localisée à Lyon et à Rennes, et le laboratoire de *Géosciences Rennes*. Elle a débuté en janvier 2018, en même temps que la création d'un laboratoire commun entre le CNRS et l'entreprise *Itasca,* appelé *La Fractory*. La thèse a été financée dans le cadre d'une convention CIFRE. Elle a également été en partie financée par l'entreprise *Svensk Kärnbränslehantering AB* (*SKB*), en charge du stockage des déchets nucléaires en Suède.

Résumé

L'état naturel des fractures dans les milieux rocheux cristallins a un impact hydrologique important car elles y constituent les seuls conduits qui existent. Les données de terrain indiquent souvent qu'une large proportion de fractures est cependant colmatée par des processus physico-chimiques, et est donc imperméable aux écoulements. C'est le cas par exemple du site de Forsmark, futur site d'enfouissement de déchets nucléaires en Suède, pour lequel les données de carottes de puits révèlent qu'environ 75-80% des fractures sont colmatées. La manière dont les surfaces de fractures colmatées sont distribuées dans un réseau de fractures (en fonction de la taille, des orientations, etc.) est une question critique puisqu'elle peut drastiquement changer la connectivité de ces ensembles et l'organisation des écoulements.

La première partie de ces travaux porte sur l'étude de la distribution du colmatage à partir de modèles numériques. Une problématique est de disposer de modèles numériques assez simples pour qu'ils puissent être appliqués à l'étude de larges réseaux de fractures. Nous montrons qu'une structure de graphe (faite de nœuds et de liens) peut être utilisée pour simplifier les modèles de réseaux de fractures (DFN) et calculer directement les flux. Ensuite, nous étudions son utilisation pour modéliser un processus de transport réactif engendrant de la précipitation au niveau des parois des fractures. Nous montrons que l'hétérogénéité des flux à l'échelle du réseau peut créer des corrélations entre les taux de précipitation et la taille de fracture.

La seconde partie évalue la distribution du colmatage à partir des données de terrain du site de Forsmark. Les analyses statistiques montrent d'abord une forte corrélation entre le caractère ouvert ou colmaté des fractures et la contrainte normale appliquée au plan de fracture, ce qui indique un contrôle d'ordre mécanique. Ce contrôle mécanique est approfondi par une analyse des pressions de fluides, qui peuvent avoir amené les fractures à la réactivation. Les résultats indiquent que leur rôle n'est pas à négliger. Enfin, en utilisant la modélisation DFN, nous analysons les conséquences hydrologiques de la corrélation avec la contrainte normale identifiée précédemment. Nous montrons que cette corrélation ne permet pas à elle seule d'expliquer l'organisation des flux mesurée dans les puits de Forsmark et qu'une corrélation avec la taille de fracture doit nécessairement être prise en compte.

Abstract

Fracture networks have a major impact on crystalline rocks' hydraulic properties because they constitute the only flowing paths. Field data often point out that a large proportion of the network is however sealed by physico-chemical processes and thus is impermeable. For example, at the Forsmark site (Sweden), future deep nuclear waste repository, the core-log data indicate that 75-80 % of fractures are sealed. The way sealed surfaces are distributed in fracture networks (in terms of fracture size, orientation, etc) is critical because it can drastically change the connectivity and the flow organization.

In the first part, we study how the sealing distribution can be constrained by numerical models. The aim is to have models that are simple enough to be applied to large fracture networks. We show that a graph structure (made of nodes and edges) can be used to simplify fracture networks models (DFN) and to compute the flows directly. Then, we use it to model a sealing process coupled to the flows. The results demonstrate that the flow heterogeneity at the network scale creates correlations between sealing rates and fracture sizes.

In the second part, we evaluate the sealing distribution from Forsmark core-log data. The statistical analyses show a strong correlation between the proportion of open fractures and the normal stress, indicating a mechanical control. This mechanical control is further deepened by an analysis of fluid pressures, which can cause fracture reactivation. The results reveal their significant role. Finally, we evaluate the hydrological consequences of the measured correlation with the normal stress, by using DFN models. We show that this correlation can not itself explain the flow organization measured in Forsmark boreholes and that a correlation with fracture sizes must be considered.

Remerciements

Je souhaite, en tout premier lieu, remercier mes deux directeurs de thèse Caroline et Philippe, sans qui le sujet n'aurait même pas vu le jour. Un énorme merci pour la confiance, la disponibilité, l'aide, et le partage de connaissances dont vous avez fait preuve lors de ces trois années (et demi). Ce manuscrit est essentiellement basé sur nos discussions, alors tout simplement merci ! Merci également d'avoir veillé à ce que je ne manque d'aucun moyen matériel, de m'avoir permis d'assister à de nombreuses conférences et workshops, et enfin de m'avoir offert le cadre agréable de travail qu'est la *Fractory*. Je remercie également très chaleureusement chaque membre de mon jury de thèse pour avoir évalué ces travaux et ma soutenance. Ensuite, un très grand merci à Daniel, qui en plus de me financer après mon stage, s'est montré humainement très présent tout au long de la thèse. I thank also Jan-Olof Selroos, for founding this project and for his scientific contributions to this topic, and for giving me the possibility to go to Sweden for meetings and field works. Thank-you also to Henrik Drake for taking me to Forsmark and sharing his knowledge about the cores and fracture minerals. I also had the opportunity to collaborate with Jeffrey Hyman, that I thank cheerfully for helping me with the graph-paper redaction and for the very nice stay in Santa-Fe and Los-Alamos.

Merci à toutes les personnes du quotidien, à savoir tous les collègues Itascans de Lyon, et en particulier Christine, avec qui les démarches administratives étaient toujours un grand plaisir, et surtout tous mes collègues de la *Fractory* qui ont toujours été d'une aide précieuse et patiente, surtout en informatique. Merci Romain, Simon, Benoit, Etienne, et Hélène, sans qui le *C++*, *SVN*, *Git*, et le *binding* seraient toujours de grands mystères pour moi. Merci à Marine et Silvia, nos post-docs, pour avoir partagé vos expériences de recherche. Merci Justine, Thomas (et Etienne, avant que tu ne passes du côté obscur des permanents :p) pour tous vos petits *tips* de doctorants concernant l'administratif, les présentations, la soumission d'article et j'en passe !

Je voudrais à présent remercier toutes les personnes qui ont permis à mon cerveau de se changer les idées et rester sain, car oui pendant la thèse, c'est juste vital ! Pour ce faire, j'ai eu droit à une armada de petits Rennais à mon service ;). Je veux particulièrement remercier Grand-frère Etienne et Grande-sœur Justine, mes deux compagnons de thèse adorés, qui m'ont vaillamment soutenue dans les moments les plus sombres. Merci pour les « Therapy Bus », les méditations, les playlist Spotify, et simplement votre humeur et votre humour. Bravo à nous trois pour notre réussite ! Ensuite viennent Alex et Quentin, ou les minots du

P209, là où tout a commencé. Entre les batailles de nerfs, le passage des collègues qui pensaient qu'on était une salle de pause, et vos blagues distinguées, on aura réussi à produire, et ça c'est fort ! Je remercie aussi tous ceux qui m'ont nourrie et motivée à faire du sport, surtout en fin de thèse. Merci Baptiste et Thomas, pour m'avoir invitée à manger à plusieurs reprises, toujours avec un petit épisode de Friends ;), et pour m'avoir motivée à courir (vive les Gayeulles!). Merci Aurélie pour tes gâteaux, sushis, et boutures qui ont égayé mon bureau. Merci Alice et Sebas pour m'avoir partagé votre énergie en grimpe, et vos bon petits plats, toujours pleins de légumes. Merci à mes deux girls, Mery et Allison, pour les après-midi peinture, shopping, spa..., bref, les moments cocooning qui font tant de bien au moral. Enfin, merci à tous les copains du labo que je n'ai pas encore cités pour les chouettes moments passés avec vous, que ce soit autour d'un verre, d'un jeu de société, d'un ballon de volley, ou d'un mur de bloc. Merci Behzad, Lucas, Arthur, Lucille, Claire, Luc B., Aurélie G., Camille V., Charlotte, Maxime, Madeleine, MAF, Mara, Florent, Ronan, Alexandre G., Nicolas C., Lucas, Elias, Virginie, Camille B., Pierre, Martin, Mathilde, Rémi, Luc D.H., Louise J., Jan... Puisque le soutien se fait aussi à distance, je remercie mes Moulettes de l'EOST, Lisa, Louise, Vanille, Manon et Chloé, et mes Patates de Lille, Clothilde, Fanny et Eloise.

Je tiens à remercier de tout cœur ma famille, d'abord, pour m'avoir élevée dans un cadre me permettant d'étudier, et ensuite, pour avoir été source de soutien pendant ces années de thèse. Je remercie particulièrement ma maman pour avoir corrigé toutes mes fautes d'orthographe, mais surtout pour s'être toujours occupée de moi dans les moments de dur labeur.

Table des matières :

Préface....i
Résumé....ii
Abstract....iii
Table des matières....iv

Chapitre 1 : Introduction....1

1.1. Contexte et motivations....2
1.2. Réseaux de fractures : géométrie et propriétés hydrauliques....4
1.3. Processus de colmatage des fractures....28
1.4. Positionnement du sujet de thèse....43
1.5. Organisation du manuscrit....46

Partie I : Distribution du colmatage dans les réseaux de fractures. Eclairage à partir de modèles numériques

Chapitre 2 : Estimation des flux dans les réseaux de fractures à partir d'une structure de graphe....51

2.1. Introduction générale sur l'utilisation des graphes appliqués aux réseaux de fractures....52
2.2. Résumé de l'article....54
2.3. Article : „A graph-based flow modeling approach adapted to multiscale Discrete Fracture Network models “....56
2.4. Travaux complémentaires....80
2.5. Conclusions et perspectives sur l'utilisation des graphes....88

Chapitre 3 : Analyse de la distribution du colmatage dans les réseaux de fractures à partir d'une modélisation numérique de réactivité chimique couplée aux flux....91

3.1. Introduction....92
3.2. Résumé de l'article....93

3.3. Projet d'article : « Analysis of sealing distribution in Discrete Fracture Networks by a first-order reactive transport model »....94
3.4. Résolution de modèle de colmatage avec une structure de graphe....125
3.5. Conclusion et discussion....130

Partie II : Distribution du colmatage dans les réseaux de fractures. Données de terrain

Chapitre 4 : Distribution de la fraction ouverte des réseaux de fractures par une analyse des données de puits du site de Forsmark (Suède)....135

4.1. Introduction....136
4.2. Résumé de l'article....137
4.3. Projet d'article : „Controls of the distribution of the open fraction of fracture networks. Results from core-log analyses (Forsmark, Sweden)“....140
4.4. Travaux complémentaires. Méthode de « *Machine Learning* » appliquée aux données de puits de Forsmark : les arbres aléatoires....170
4.5. Figures annexes....180

Chapitre 5 : Conséquences hydrologiques d'un contrôle par la contrainte de la fraction ouverte. Application au site de Forsmark....189

5.1. Introduction....190
5.2. Méthodologie....191
5.3. Résultats....205
5.4. Conclusions....214

Chapitre 6 : Synthèse et perspectives....217

6.1. Synthèse....217
6.2. Perspectives....220

References....223

Chapitre 1

Introduction

Table des matières :

1.1. Contexte et motivations 2

1.2. Réseaux de fractures : géométrie et propriétés hydrauliques 4

1.2.1. Géométrie 4

1.2.1.1. Fracture : définitions, formation et propriétés 4

1.2.1.2. Réseaux de fractures : géométrie et lois d'échelles 5

1.2.1.3. Des données au modèle de fractures discrètes (le GeoDFN) 11

1.2.2. Propriétés hydrauliques des réseaux de fractures 17

1.2.2.1. Données et approches de caractérisation hydraulique 17

1.2.2.2. Effet de la structure géométrique sur les écoulements 19

1.2.2.3. Modèles de transmissivités de fractures (HydroDFN) 24

1.3. Processus de colmatage des fractures 28

1.3.1. Processus physico-chimiques à l'interface fluide-roche 28

1.3.1.1. Réactions d'adsorption et de précipitation 28

1.3.1.2. Equilibre et cinétique des réactions d'adsorption/précipitation 31

1.3.2. Paramètres critiques 32

1.3.2.1. Impact des flux 32

1.3.2.2. Impact de la température 37

1.3.2.3. Impact de la contrainte 39

1.3.3. Colmatage des fractures et déformations tectoniques : l'exemple du cycle sismique 41

1.4. Positionnement du sujet de thèse 43

1.5. Organisation du manuscrit 46

1.1. Contexte et motivations

La compréhension et la prédiction des circulations de fluides dans le sous-sol font partie de nombreux enjeux actuels. Une première catégorie d'enjeux concerne l'exploitation des ressources naturelles souterraines. Leur amoindrissement dû à une exploitation grandissante depuis plusieurs décennies rend nécessaire la prédiction de leur quantité et leur gestion dans le temps. Parmi ces ressources on trouve essentiellement l'eau, vitale pour l'homme, les ressources énergétiques telles que les hydrocarbures, et la ressource géothermique, dont le potentiel énergétique dépend fortement des propriétés thermiques et hydrauliques du milieu souterrain (Dezayes et al., 2010; Doe et al., 2014). Une seconde catégorie d'enjeux concerne l'impact humain sur l'environnement au travers de la production de déchets. Ces déchets peuvent se retrouver non-intentionnellement dans le sous-sol, par exemple les rejets de produits chimiques industriels ou domestiques. La remédiation écologique de ces sous-sols implique de comprendre les temps de résidences des fluides qu'ils hébergent (Marçais, 2018). Ces déchets peuvent aussi y être stockés intentionnellement afin de les éloigner du milieu vivant. C'est le cas, par exemple, du stockage profond de déchets radioactifs (Selroos & Follin, 2014) ou du stockage de CO_2 (De Simone & Krevor, 2021; Tsang et al., 2008). Le risque que ces déchets, transportés par l'eau, puissent atteindre la surface à l'échelle de temps humaine, nécessite une modélisation précise des écoulements, et cela sur des temps longs.

Les écoulements souterrains dépendent de l'agencement des « vides » dans la roche solide, qu'on appelle la porosité. On distingue deux grands types de porosité : les milieux « poreux », dont les vides sont formés par les espaces laissés entre les grains qui forment la roche, et les milieux « fracturés », dont les vides sont formés par des discontinuités planaires. La manière de modéliser ces deux types de porosités est très différente car dans le premier cas, on peut faire l'hypothèse que les propriétés hydrauliques (p. ex. la perméabilité) sont homogènes à partir d'un certain volume représentatif, alors que dans le second cas, l'ensemble des fractures, de tailles très diverses, crée des écoulements très hétérogènes et chenalisés, et ce, pour des échelles d'observation très variées (Bear et al., 2012). Le terme « chenalisé » renvoie au phénomène de concentration des écoulements dans des petites portions du milieu (Le Goc, 2009).

L'impact des fractures sur les écoulements est d'autant plus fort lorsque les propriétés hydrauliques de la matrice rocheuse sont négligeables. C'est le cas des roches cristallines (roches ignées ou métamorphiques), qui sont très peu perméables lorsque la roche est saine, mais peuvent avoir leurs propriétés hydrauliques fortement modifiées lorsqu'elles sont fracturées. Les milieux cristallins occupent une vaste part de la surface terrestre. Ils sont aujourd'hui fortement étudiés pour leur faible perméabilité dans le cadre du stockage de déchets radioactifs, comme en Suède et en Finlande (bouclier fennoscandien) ou encore au Canada (bouclier canadien). Ils sont également étudiés pour leurs ressources en eau, par

exemple en France (Bretagne ; Touchard (1998)) mais surtout dans les régions arides du globe dans lesquelles les aquifères cristallins constituent la seule source d'eau souterraine (Figueroa et al., 2021).

La modélisation géométrique des fractures et leur organisation en réseau constituent le thème de beaucoup d'études actuelles, afin de comprendre et prédire la connectivité et le caractère perméable de ces ensembles aux propriétés géométriques complexes. Une question reste cependant encore très peu étudiée et à peine prise en compte dans ces modèles de réseaux de fractures. Il s'agit de l'effet du colmatage des fractures sur les propriétés hydrauliques de ces réseaux. Le colmatage réduit l'ouverture et donc la transmissivité des fractures. Il résulte de processus physico-chimiques qui prennent place sur des temps plus ou moins longs (échelles humaines à échelles géologiques ; Gratier (2011)). Dans beaucoup de milieux géologiques, notamment les milieux cristallins, les observations ont souvent révélé qu'une majorité de fractures est naturellement colmatée. C'est le cas pour le site de Forsmark en Suède, futur site profond de stockage de déchet nucléaires. Les données collectées par la société SKB (*Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company*) sur le site montrent qu'en moyenne environ 75% des fractures interceptées par les forages profonds sont colmatées et que les flux sont très fortement chenalisés. Cette forte chenalisation, typique des milieux cristallins peu perméables, ne peut s'expliquer sans une compréhension de la géométrie de l'ensemble du réseau et de la répartition des surfaces de fractures colmatées à l'intérieur du système fracturé. Dans ce contexte industriel, une étude sur cette répartition manque donc aux prédictions sur le risque hydrologique associé à l'enfouissement de déchets nucléaires en milieu cristallin. Par exemple, l'extension des surfaces colmatées et leur répartition dans le réseau en fonction de la taille des fractures ou de leurs orientations sont des interrogations importantes et pourtant encore très peu évaluées. Ce projet de recherche s'inscrit principalement dans ce cadre industriel, mais soulève également des questions fondamentales sur la modélisation des écoulements dans les milieux fracturés.

Ce chapitre introductif a pour but de présenter un état de l'art sur les réseaux de fractures et sur les processus de colmatage dans les fractures. Il est organisé en trois grandes parties. D'abord, nous décrivons les propriétés géométriques et hydrauliques des réseaux de fractures (section 1.2). Ensuite, nous faisons l'état de l'art sur les processus de colmatage appliqués aux fractures (section 1.3). Enfin, nous posons la problématique du colmatage appliquée aux réseaux de fractures et positionnons le sujet de thèse (section 1.4).

1.2. Réseaux de fractures : géométrie et propriétés hydrauliques

1.2.1. Géométrie

1.2.1.1. Fracture : définitions, formation et propriétés

Une fracture est une discontinuité au sein d'une matrice rocheuse, formée par une déformation cassante. Elle est généralement représentée par un plan de taille finie et avec une certaine orientation (Zhang & Einstein, 2010). Initialement, un *crack*[1] (petite fracture) se forme lorsque le champ de contrainte dépasse localement le seuil de rupture (voir p. ex. modèle de rupture de Mohr-Coulomb ; Gudmundsson (2011)). Ce seuil dépend de paramètres mécaniques de la roche (friction, cohésion). Le *crack* prend une certaine orientation selon ces paramètres et selon le champ de contraintes (Ramsey & Chester, 2004). Une fois le *crack* initié, il va lui-même perturber le champ de contrainte, formant un relâchement, ou « zone d'ombre » dans un certain volume centré en son plan, qui est compensé par des concentration de contraintes au niveau des fronts de fissure (*tips*), qui vont accélérer sa propagation (Atkinson, 2015; Irwin, 1957).

Communément, on classifie les fractures selon leur mode de propagation et de déplacement. On distingue trois modes :

- le mode I : fracture en extension, qui résulte d'une contrainte normale extensive
- le mode II : fracture en cisaillement, la direction de la contrainte en cisaillement est perpendiculaire au front de fissure
- le mode III : fracture en cisaillement, la direction de la contrainte en cisaillement est parallèle au front de fissure

On distingue communément les « joints » (mode I) des « failles » (mode II et mode III) (voir Peacock et al. (2016) pour un glossaire sur la terminologie des fractures).

A cause de l'hétérogénéité de la matrice, une fracture n'est en réalité jamais complètement plane mais forme plutôt un plan irrégulier. On parle de rugosité de la fracture (Figure 1-1). Sous un champ de contrainte donné, cette rugosité va créer des forces de frottement, limitant les déplacements relatifs entre les deux parois de la fracture. Autrement dit, la rugosité confère des propriétés mécaniques à la fracture (raideur élastique, friction, cohésion ; Bandis et al. (1983); Byerlee (1978); Davy et al. (2018a)), qui vont influencer son déplacement, défini comme soit cisaillant soit normal. Le déplacement en cisaillement peut engendrer un glissement d'une paroi par rapport à l'autre qui, combiné à la rugosité, crée une

[1] Les termes en italique sont délibérément laissés en anglais pour une meilleure compréhension

ouverture liée au décalage des deux parois (Figure 1-1). Par ce phénomène, les deux parois de la fracture peuvent aussi s'éloigner l'une de l'autre, ce qu'on appelle la dilation en cisaillement (Ferrill & Morris, 2003; Hossain et al., 2002; Min et al., 2004). L'ouverture est aussi impactée par la contrainte normale à la fracture, qui rapproche les deux parois lorsqu'elle est compressive et les éloigne lorsqu'elle est extensive. Ce déplacement normal dépend aussi de la rugosité, qui influence la raideur normale de la fracture (Bandis et al., 1983).

Après sa formation, la fracture peut se remplir de matériel qui va venir altérer son ouverture, tels que des minéraux qui se cristallisent, des éléments en suspension qui se déposent (gouge, colloïdes), ou encore des fragments de roche (Figure 1-1). Dans ce manuscrit de thèse, nous appelons fracture toute discontinuité qui s'est formée dans la matrice rocheuse en réponse à une sollicitation en contraintes.

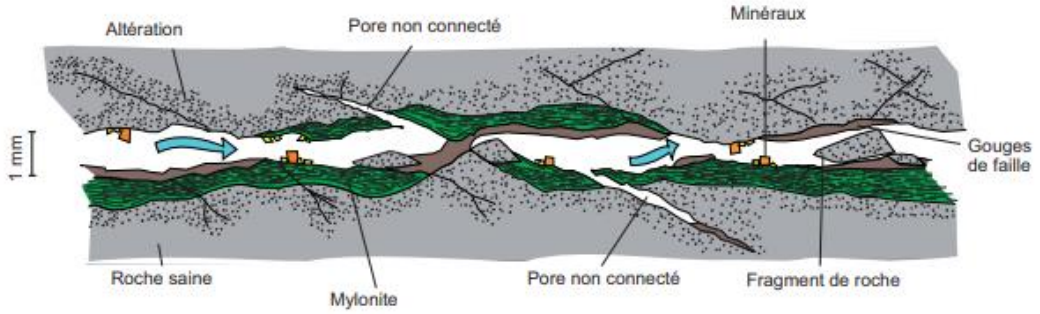


Figure 1-1 : Représentation schématique d'une fracture rugueuse et ouverte, avec des matériaux déposés. Exemple de la granodiorite d'Aspö. Modifié d'après de Winberg et al. (2000).

1.2.1.2. Réseaux de fractures : géométrie et lois d'échelles

Un réseau de fractures est le résultat de la croissance de multiples fractures dans une matrice rocheuse, de manière simultanée ou séquentielle, lors d'un ou plusieurs évènements géodynamiques. Le réseau de fractures s'organise de manière spécifique et complexe. Beaucoup d'études ont montré que le réseau suivait des lois d'échelles. Ces lois ont été mises en évidence lors d'expériences de croissance de fractures (Cowie et al., 1995; Davy et al., 1995; Davy et al., 1990; 1992; Sornette & Davy, 1991), et pour caractériser des réseaux de fractures affleurant la surface, comme par exemple le système de failles de San Andreas (Bour & Davy, 1999; Davy, 1993) (Figure 1-2b) et le bassin Norvégien de Hornelen (Bour et al., 2002; Darcel et al., 2003a; Odling, 1997). Ces lois d'échelles sont issues de deux processus : les corrélations spatiales entre fractures et la distribution de leurs tailles. Davy et al. (1990) proposent une unique formulation pour caractériser ces deux processus. Le nombre de fractures $N(l,r)$ de taille l compris dans un espace de taille r peut être décrit par la formulation :

$$N(l,r) = \alpha.l^{-a}.r^{D} \quad (1\text{-}1)$$

où a et D sont respectivement l'exposant de la loi d'échelle des tailles de fractures et celui des positions de fractures. α est un paramètre de normalisation lié à la densité du réseau. D est classiquement appelé dimension fractale.

Corrélations spatiales

Très souvent, la répartition spatiale des réseaux de fracture est hétérogène, c'est-à-dire que la manière dont elles occupent l'espace (soit par leurs positions, leurs tailles, ou leurs orientations) n'est pas aléatoire, mais plutôt le fruit d'interactions mécaniques complexes entre elles-mêmes. Ce caractère non-aléatoire se voit facilement le long de carottes de puits ou sur des affleurements, sur lesquels les intersections avec les fractures sont spatialement corrélées (Figure 1-2a, b). Comme cela a été vu dans la section précédente, une fracture croît en perturbant le champ de contraintes et peut donc influencer la formation et la croissance des fractures suivantes. Plusieurs études ont montré que l'environnement local d'une fracture peut être corrélé avec sa taille, car plus la taille est grande plus la perturbation du champ de contrainte est étendue (zone d'ombre et concentration aux bords, voir section 1.2.1.1.) (Ackermann & Schlische, 1997; Bour & Davy, 1999; Darcel et al., 2003a; Gupta & Scholz, 2000). Ces études montrent que les fractures ont tendance à être entourées d'une zone vide d'autres fractures, dont l'étendue dépend de la taille de la fracture. Certaines études utilisent cette hypothèse pour générer des modèles de réseaux de fractures dont les *cracks* initiaux sont placés principalement au niveau des bords des fractures, là où les contraintes se concentrent, et très peu autour des plans de fracture, là où les contraintes se relâchent (Bonneau et al., 2016; Lavoine et al., 2020).

Pour caractériser ces corrélations spatiales et établir une loi d'échelle (exposant D dans équation (1-1)), les milieux fracturés ont largement été étudiés en utilisant la théorie fractale (Mandelbrot, 1982; Turcotte, 1986). Bonnet et al. (2001) ou encore Moein et al. (2019) proposent des revues de ces différentes méthodes. La méthode la plus classique est celle de « *box-counting* », qui consiste à recouvrir le réseau de fractures contenu dans un système de taille R d'un quadrillage de plus en plus fin et de compter le nombre de boites $N_b(R,r)$ de taille r qui contiennent une portion de la géométrie du réseau (Figure 1-2c). La loi d'échelle suivante est obtenue : $N_b(R,r) \sim r^{-D}$. Si le milieu fracturé est réparti de manière homogène alors un exposant D valant la dimension Euclidienne d est mesuré (p. ex. 2 dans le cas d'un support en 2-dimensions). A l'inverse, si le milieu est réparti avec des corrélations spatiales, alors $D < d$, et on dit que l'objet est fractal. La méthode de « *box-counting* » est cependant très sensible aux effets de tailles finies, qui limitent la mesure de D. Des résultats plus probants

sont obtenus à partir de méthodes utilisant les distances mutuelles entre centres de fractures (Bour et al., 2002; Gillespie et al., 1993; Moein et al., 2019).

La méthode de *correlation pair fonction* mesure le nombre de fractures dont la distance mutuelle est inférieure à une taille donnée r. Cette mesure tend à évoluer en loi de puissance r^{D_c}, où D_c s'appelle la dimension de corrélation. Par exemple, Bour et al. (2002) mesurent avec cette méthode une valeur $D_c = 1.8$ pour le Basin de Hornelen, et Bour and Davy (1999) une valeur $D_c = 1.65 \pm 0.05$ pour les failles de San Andreas. Une synthèse de valeurs de dimensions fractales mesurées sur des réseaux en 2 dimensions est fournie dans Bonnet et al. (2001). Elle montre des dimensions allant de 1 à 2.

Enfin, la mesure de « lacunarité », introduite plus récemment, est utilisée pour mesurer l'hétérogénéité du réseau de fracture avec l'échelle (Lavoine et al., 2019; 2020; Roy et al., 2014). Elle se base sur le « *box-counting* » et évalue la variabilité des densités de fractures mesurées par boite en fonction de leurs tailles. Cette méthode met en avant les effets de *clustering* des fractures, et peut déceler l'émergence de différents motifs avec l'échelle (Roy et al., 2014).

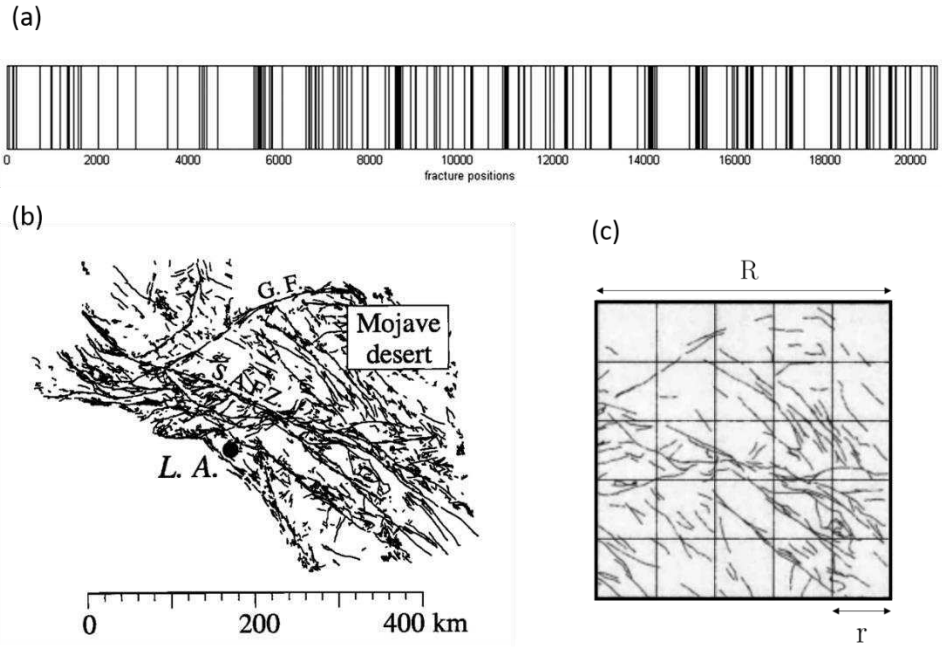


Figure 1-2 : Corrélations spatiales des réseaux de fractures. (a) Scanline de surface de 21 m de long présentant plusieurs regroupement (ou cluster) de fractures (données du Monterrey salient, NE Mexico). Les clusters présentent une dimension fractale de 0.42. Dans Roy et al. (2014). (b) Carte de la partie sud de la faille de San Andreas. La dimension fractale du réseau est environ 1.65±0.5 (Bour & Davy, 1999). (c) Méthode de caractérisation fractale de « box-counting » appliquée à un réseau en deux dimensions. Dans Bonnet et al. (2001).

Distribution des tailles de fractures

La loi d'échelle qui peut être observée le plus directement à partir d'un affleurement est celle de la distribution des tailles de fractures (Figure 1-3b). La large gamme de tailles s'explique par la complexité avec lesquelles elles se forment. Elles peuvent se former à des temps différents, induisant une hiérarchie entre elles due au fait que les fractures semblent stopper leurs croissances lorsqu'elles intersectent une fracture plus grande (Davy et al., 2013; Davy et al., 2010). La croissance des unes peut aussi inhiber la croissance des autres à cause de la zone de relâchement de contraintes (« zone d'ombre ») qui s'accroit à mesure que la fracture grandit.

Dans l'équation (1-1), cette distribution est caractérisée par une loi de puissance d'exposant a. Cependant, dans la littérature, d'autres lois ont été utilisées : exponentielle, log-normale, gamma (voir Bonnet et al. (2001) pour une revue ; Figure 1-3a). Beaucoup d'études ont d'abord caractérisé leurs données d'affleurement avec une loi log-normale (Cacas et al., 1990b; Priest & Hudson, 1981). Davy (1993) utilise cette loi pour caractériser la distribution des tailles de failles issues des données d'affleurement de San Andreas. Il stipule cependant que la décroissance du nombre de failles en dessous d'un certain seuil de taille (comme indiqué par la loi log-normale) est contradictoire avec l'évidence géologique d'un nombre de plus en plus élevée à mesure que l'on regarde des petites failles. Il attribue cela à un effet d'échantillonnage et de résolution. Il montre qu'une loi gamma (mélange d'une loi de puissance et d'une loi exponentielle) est physiquement plus adaptée, avec une longueur caractéristique $l_0 = 24$ km, proche de l'épaisseur de la croûte cassante terrestre. Cependant, s'il n'existe pas de limite physique à la croissance des fractures, comme par exemple ci-avant l'épaisseur de la croûte ou encore l'existence de strates géologiques (Odling et al., 1999), la plupart des études indiquent que la distribution des tailles suit en réalité un processus en loi de puissance (Bour et al., 2002; Cowie et al., 1995; Davy et al., 1990; Odling, 1997; Sornette & Davy, 1991). C'est le cas des milieux cristallins qui sont par nature non-stratifiés.

En plus des effets de résolution pour les petites fractures, des effets de « troncatures » (fracture plus grande que la fenêtre d'échantillonnage) et de « segmentation » (fracture segmentée due à l'état de l'affleurement, p. ex. érosion, végétation) peuvent affecter la distribution des tailles (Figure 1-3b). Généralement, les études combinent des mesures faites sur plusieurs échelles d'échantillonnage (depuis les affleurements de terrain jusqu'aux photos aériennes) pour établir le modèle de distributions des tailles (Figure 1-3c).

La distribution des tailles de fractures est classiquement décrite comme une fonction $n(l)$, où $n(l).dl$ est le nombre de fractures de taille l contenue dans une unité d'espace de dimension D (éventuellement fractale) :

$$n(l) = \frac{N(l, L)}{L^D} \tag{1-2}$$

Si dans un modèle, on fait l'hypothèse que les positions de fractures sont réparties de manière homogène, alors $n(l).dl$ est le nombre de fractures par unité de volume, d'aire, ou de ligne, selon la dimension topologique d de l'espace étudié. Pour une distribution en loi de puissance, cela donne :

$$n(l) = \alpha.l^{-a} \tag{1-3}$$

avec α le paramètre de normalisation lié à la densité des fractures et a l'exposant de la loi de puissance. Pour modéliser un réseau de fractures, cette loi est définie entre une taille de fracture minimale l_{min} et une taille de fracture maximale l_{max}. Le nombre total de fractures est alors :

$$N = L^D.\int_{l_{min}}^{l_{max}} n(l).dl. \tag{1-4}$$

L'exposant a fixe la proportion des grandes fractures par rapport aux plus petites. Plus a est faible plus le poids des grandes fractures est élevé, et plus a est élevé plus le poids des grandes fractures est faible. Une synthèse de valeurs de a estimées à partir d'affleurements est disponible dans Bonnet et al. (2001) et indique des valeurs allant de 1.7 à 2.75.

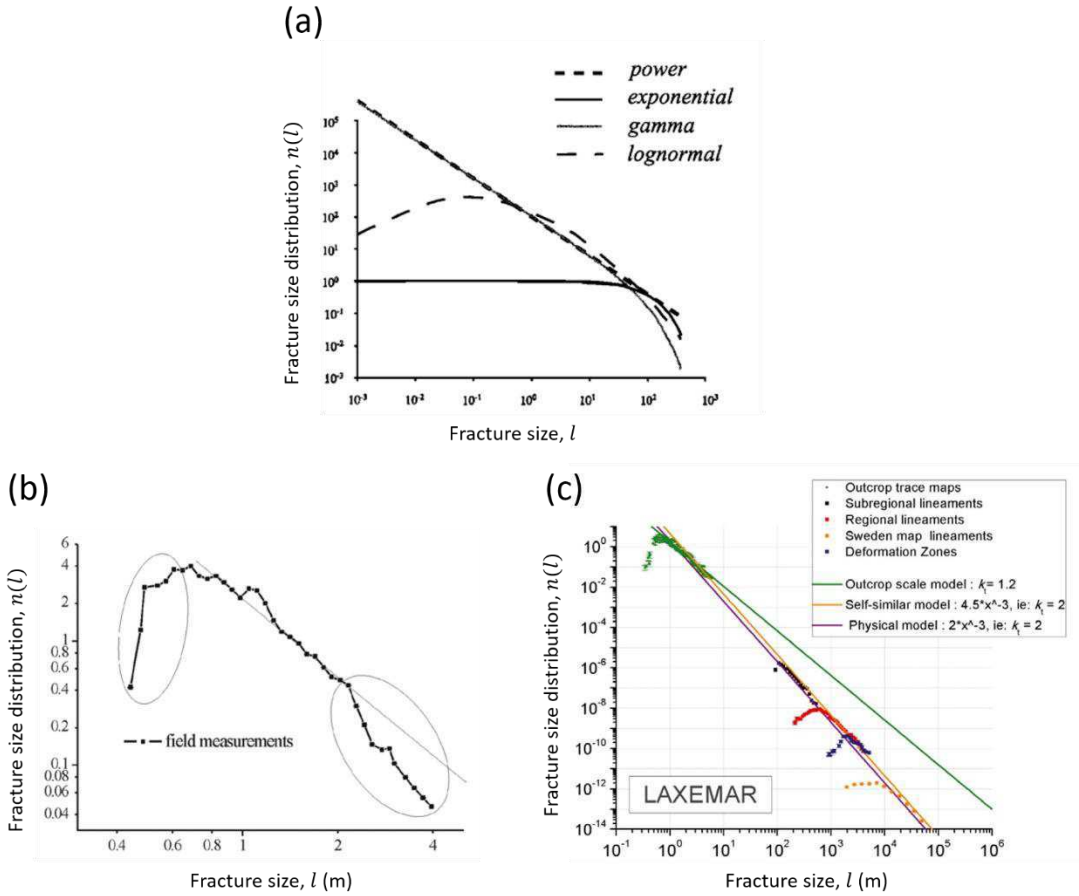


Figure 1-3 : Distributions des tailles de fractures, $n(l)$. (a) Cas de distributions analytiques en lois de puissance, exponentielle, gamma et log-normale. Modifié d'après Bonnet et al. (2001). (b) Distribution à partir d'un affleurement avec effet de troncature et de résolution et (c) analyse avec plusieurs échelles d'échantillonnage. Dans Darcel et al. (2009).

Davy et al. (2010) mettent en évidence le fait que la distribution des tailles de fractures serait caractérisée par deux régimes : un régime « dilué », dans lequel les fractures croissent librement ; et un régime « dense », dans lequel les fractures s'arrêtent les unes sur les autres. Les deux régimes sont séparés par une taille critique l_c, au-dessus de laquelle les (grandes) fractures, en régime dense, sont caractérisées par une loi de puissance d'exposant a égal à $D + 1$, où D est la dimension fractale. En dessous de l_c, les (petites) fractures sont caractérisées par une loi de puissance dont l'exposant a dépend de la loi de croissance et est inférieur à $D + 1$.

1.2.1.3. Des données au modèle de fractures discrètes (le GeoDFN)

Pour modéliser les réseaux de fractures, la méthode la plus courante consiste à générer une population de fractures discrètes. Le nom donné à cette méthode est DFN pour *Discrete Fracture Network* (Davy et al., 2018b; Lei et al., 2017) (Figure 1-6). Ce type de modèle géométrique et discret sert de support pour des simulations numériques de phénomènes physiques, tels que des simulations de flux et de transport de particules (De Dreuzy et al., 2012; J. D. Hyman et al., 2019; Maillot et al., 2016), ou pour des simulations de déformations mécaniques (Darcel et al., 2015; Davy et al., 2018a). Dans ce manuscrit, nous utilisons la terminologie de GeoDFN pour qualifier ce modèle géométrique. A cause de la forte hétérogénéité des milieux cristallins et de leurs propriétés multi-échelles (voir section 1.2.1.2.), la modélisation DFN semble être la plus adaptée, par opposition à des méthodes continues (Long et al., 1982; Olofsson, 2001; Selroos et al., 2002). Plusieurs logiciels permettent d'utiliser la modélisation DFN, en gérant toutes les étapes de modélisation, de la génération des fractures aux simulations physiques. Pour les simulations hydrologiques, on peut citer *DFN.Lab* (Le Goc et al., 2019; Pinier et al., in prep.) que nous avons utilisé pour ce travail de thèse, ou encore *DFNWorks* (Hyman et al., 2015). Dans cette section, nous présentons les données de terrain couramment utilisées et les méthodes de génération du GeoDFN.

Types de données

On distingue deux principales catégories de données : les données issues de puits, généralement carottés (Figure 1-4a), et celles issues d'affleurements (Figure 1-4b). Les premières sont des données en une dimension car le petit diamètre du puits donne des informations ponctuelles sur le plan de fracture qu'il intersecte : orientation, position, ouverture, remplissage. Cette mesure n'informe pas sur la taille de la fracture. Ensuite, les affleurements fournissent des données en deux dimensions, et permettent de mesurer la distribution des tailles. Un troisième type de données, moins couramment utilisé, concerne celles acquises par méthodes géophysiques (sismiques, électromagnétiques) (Liu & Martinez, 2014; Molron et al., 2020). Elles permettent d'accéder directement à une information en trois dimensions sur la géométrie des fractures. Les méthodes géophysiques permettent généralement d'identifier les structures les plus larges du volume sondé, ce qui peut être utile pour contraindre un modèle par de grandes fractures déterministes (Molron, 2021). Cependant, à cause de leur résolution limitée, elles permettent rarement d'obtenir une information statistique sur les fractures, comme c'est le cas pour les puits ou affleurements.

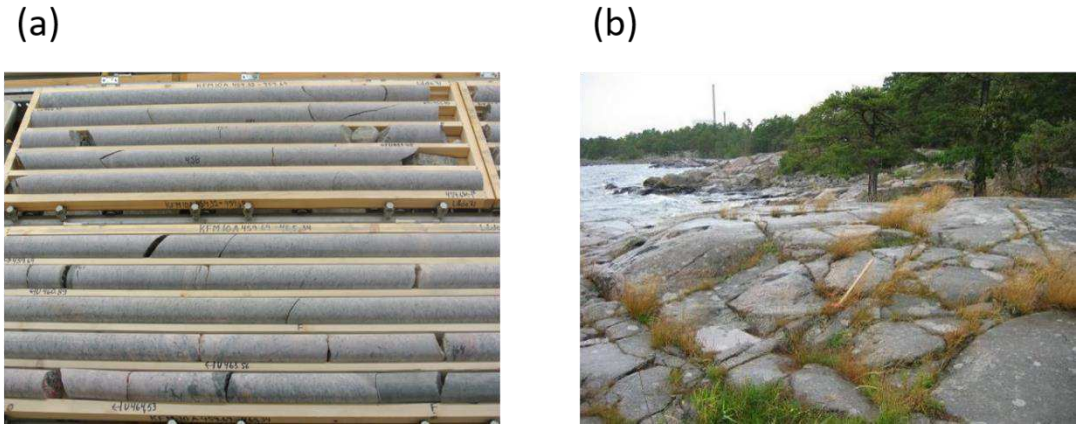


Figure 1-4 (a) Exemple de carottes de puits de Forsmark (puits KFM10A). (b) Exemple d'affleurement en surface. Crédit photo de Philippe Davy.

Densités

Une mesure statistique clé faite à partir des données de puits et d'affleurement est la mesure de densité de fractures. Différents types de densités (p_{Dd}) sont distingués selon la dimension d de la mesure effectuée : nombre ($d = 0$), longueur totale ($d = 1$), ou surface totale ($d = 2$), et la dimension D du support utilisé : puits ($D = 1$), affleurement ($D = 2$), ou volume ($D = 3$) (Dershowitz et al., 2000; Dershowitz & Herda, 1992). Le long d'un puits, on mesure le nombre de fractures par unité de longueur de puits, que l'on note p_{10}. Sur un affleurement, on mesure la longueur totale de fracture par unité de surface, p_{21}. Enfin, pour caractériser un réseau de fractures en trois dimensions, on mesure la surface totale de fractures par unité de volume, p_{32}. La mesure p_{32} est la plus couramment utilisée car de nombreux processus physiques (p. ex. les écoulements) sont susceptibles de dépendre de la surface totale de fractures. Le p_{32} n'est pas directement mesurable à partir des données de terrain, mais est évalué grâce à des règles mathématiques, dites stéréologiques (voir ci-après).

Orientations

Les fractures sont modélisées par des objets plans avec une certaine orientation. Cette orientation est caractérisée par deux valeurs : le pendage (inclinaison par rapport à l'horizontale ; *dip* en anglais), et l'azimut (orientation par rapport au nord) de la trace ou de la direction vers laquelle la fracture est inclinée (*strike* ou *dip direction* en anglais). On peut mesurer les orientations à partir d'affleurements si une partie du plan de la fracture y est visible, et à partir des puits forés.

Les orientations d'une population de fractures sont communément représentées sur un diagramme *stereonet* sur lequel on peut lire les pendages et azimuts des pôles de fractures. Le

pôle de la fracture est projeté sur un demi-hémisphère, généralement vers le bas (Figure 1-5a). Ensuite, l'ensemble des points est projeté en deux dimensions (c.-à-d. le *stereonet* ; Figure 1-5b) en utilisant une projection stéréographique. La projection stéréographique la plus communément utilisée est celle de Lambert (ou de Schmidt en géologie) qui conserve les aires (*equal-area projection* ; Terzaghi (1965)).

Très souvent, les fractures se regroupent en « familles » d'orientations à cause des différents évènements tectoniques qui les ont activées dans des orientations particulières (p. ex. *stereonet* Figure 1-5b). Pour modéliser ces familles d'orientations dans des réseaux de fractures, on a généralement recours à des lois de distribution de probabilité, comme par exemple la distribution de Fisher (Fisher, 1953), qui nécessite comme paramètres une orientation moyenne et une dispersion autour de cette moyenne.

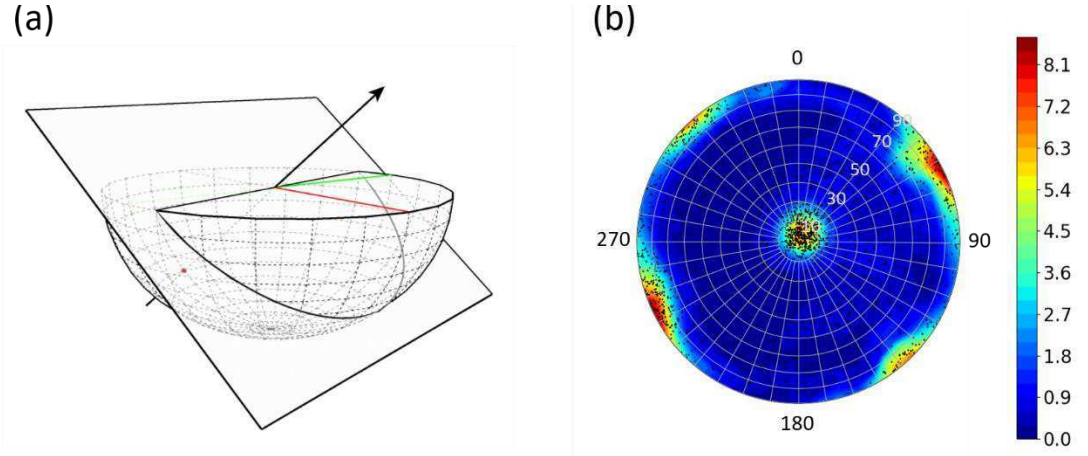


Figure 1-5 : (a) Pôle d'une fracture (plan rectangulaire) projeté sur un hémisphère inférieur. Dans Lavoine (2020). (b) Pôles d'une population de fractures, projetés dans un diagramme 2D appelé stereonet. La projection stéréographique utilisée conserve les aires (equal-area). Les azimuts des pôles de fractures se lisent sur le tour du stereonet, et leurs pendages, du centre vers l'extérieur. La couleur quantifie la densité des points.

Règles stéréologiques

Les règles stéréologiques servent à déduire les propriétés géométriques d'une population de fractures en trois dimensions (p. ex. la densité ou la distribution des longueurs) à partir des mesures faites sur des supports de dimensions inférieures (puits, affleurements naturels ou de tunnels). Ces règles traduisent la probabilité qu'une fracture intersecte ces supports. Elles ont été établies pour inférer des densités à partir de données de puits (Davy et al., 2006b; Terzaghi, 1965), pour estimer la distribution des tailles de fractures à partir des tailles de traces observées sur un affleurement (Darcel et al., 2003b; Piggott, 1997) ou sur les parois d'un tunnel cylindrique (Mauldon & Mauldon, 1997). L'ensemble de ces règles sont illustrées et appliquées dans Molron (2021) (chapitre 4). Nous rappelons ci-dessous les plus utilisées.

Pour des données de puits, la densité p_{10} (nombre de fractures N intersectées par unité de longueur) quantifie statistiquement la densité p_{32} (surface totale de fracture par unité de volume) si on pondère chaque trace par un poids qui dépend de son orientation par rapport au puits :

$$p_{32} = \frac{1}{L} \cdot \sum_{f}^{N} \frac{1}{\cos(\theta_f)} \tag{1-5}$$

θ_f est l'angle entre la direction du puits et la normale au plan de fracture correspondant à la trace vue sur le puits. $\cos(\theta_f)$ correspond à la probabilité d'intersection entre le puits et la fracture (Terzaghi, 1965). Notons qu'une valeur seuil minimum est souvent appliquée à $\cos(\theta_f)$ pour ne pas donner un poids trop large à une fracture quasi-parallèle au puits. Cette valeur seuil est établie à partir de l'incertitude de mesure de l'angle. L'équation (1-5) est valable pour les fractures de tailles plus grandes que le diamètre du puits. Davy et al. (2006b) montrent que, dans le cas où certaines fractures ont leurs tailles inférieures au diamètre de puits, l'exposant a de la distribution des tailles de fractures (voir équation (1-2)) doit aussi être considéré dans la mesure du p_{32}.

Pour les données d'affleurement, la distribution des tailles de traces permet d'obtenir la distribution des longueurs en trois dimensions, en faisant des hypothèses simplificatrices sur la géométrie des fractures et sur leur répartition dans l'espace. Piggott (1997) montre que pour une population de fractures en forme de disques, réparties uniformément, et intersectant un affleurement plan, on a les relations suivantes entre les paramètres α et a de la distribution des longueurs en loi de puissance (voir équation (1-2)) :

$$a_{3D} = a_{2D} + 1 \tag{1-6}$$

$$\alpha_{3D} = \alpha_{2D} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{2 + a_{2D}}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1 + a_{2D}}{2}\right)} \tag{1-7}$$

où Γ est la fonction gamma. Darcel et al. (2003b) montrent que ces équations restent valables dans le cas de réseaux suivant une distribution fractale des positions de fractures.

Modèles DFN stochastiques

La manière la plus utilisée pour modéliser des réseaux de fractures (en 2D ou en 3D) consiste à générer une population de fractures à partir de statistiques obtenues sur les données de terrain (p. ex. la densité, la distribution des longueurs, et la distribution des orientations). Les géométries de fractures les plus couramment utilisées sont des lignes en 2D ou des disques

en 3D, mais on trouve aussi des modèles basés sur des ellipses (Barker, 2018; De Dreuzy et al., 2000). Les modèles dit « Poissoniens » (Poisson, 1837) présentent une distribution uniforme (aléatoire) des positions de fractures et sont les modèles les plus classiques (J. D. Hyman et al., 2019; Lavoine et al., 2019; Long & Witherspoon, 1985; Maillot et al., 2016) (Figure 1-6a). Dans ces modèles, les caractéristiques de fractures (p. ex. la taille ou l'orientation) sont piochées dans une distribution et sont indépendantes les unes des autres. Cette méthode a l'avantage d'être la plus facile à mettre en place mais elle a pour conséquence de générer des réseaux sans respecter les corrélations spatiales entre les positions de fractures et leurs interactions. Plusieurs études montrent que ne pas prendre en compte des corrélations spatiales réalistes a des conséquences importantes sur l'estimation des propriétés hydrauliques (Belayneh et al., 2009; Maillot et al., 2016; Odling & Webman, 1991).

D'autres modèles stochastiques apportent plus de réalisme en considérant les corrélations spatiales entre fractures. Par exemple, Darcel et al. (2003c) étudient la connectivité de modèles DFN en deux dimensions, dont la position des fractures est générée statistiquement avec une certaine dimension fractale D (voir équation (1-1)) (Figure 1-6b).

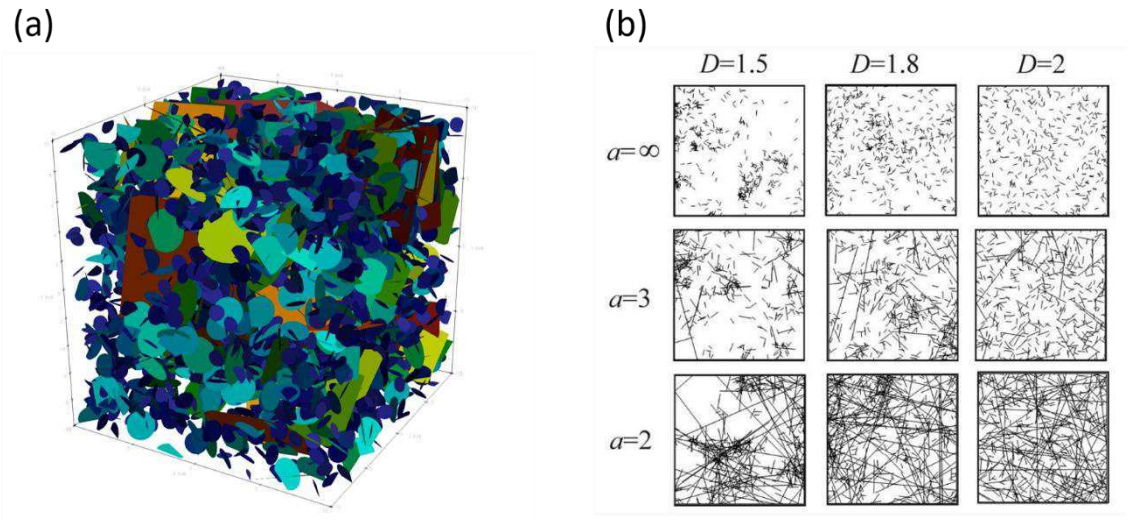


Figure 1-6 : (a) Exemple de DFN Poissonien avec orientations uniformes et une distribution des tailles en loi de puissance. (b) Modèles de DFN fractals en deux dimensions générés à partir d'un processus « en cascade ». Dans Darcel et al. (2003c). D *est la dimension fractale et* a *l'exposant de la distribution en loi de puissance des tailles.*

Modèles DFN génétiques

Afin d'introduire le réalisme manquant aux modèles stochastiques, des études proposent de générer des modèles DFN, en se basant sur des lois géomécaniques simplifiées. Une caractéristique particulièrement manquante aux modèles stochastiques est la manière dont les fractures s'intersectent en formant des intersections soit en « T » soit en « X », c'est-à-dire

en s'arrêtant sur une autre ou pas (Dershowitz & Einstein, 1988; Manzocchi, 2002). Davy et al. (2013) propose un modèle de génération de réseaux DFN en trois dimensions, basé sur des règles simples de nucléation, de croissance et d'arrêt. La nucléation suit un processus de Poisson avec un taux de nucléation $\dot{n}_N$ (nombre de nucléi généré par unité de temps). La croissance suit une loi fonction de la taille de fracture (relation de Charles (1958)) : $v(l) = C.l^a$. Ainsi, si les fractures n'ont pas de critère d'arrêt, la distribution de leurs tailles est :

$$n(l) = \frac{\dot{n}_N}{v(l)} = \frac{\dot{n}_N}{C}.l^{-a} \tag{1-8}$$

Le critère d'arrêt est l'élément qui introduit la hiérarchie et les corrélations entre fractures. Il introduit notamment les intersections en « T ». Il postule qu'une fracture s'arrête de croître lorsqu'elle croise une plus grande. Ce critère d'arrêt produit un régime quasi-universel (appelé UFM, *Universal Fracture Model*) avec pour distribution des longueurs :

$$n(l) = D\gamma^D l^{-(D+1)} \tag{1-9}$$

D est la dimension de l'espace, non-fractale car les nucléi suivent un processus de Poisson. γ est un paramètre géométrique sensible aux orientations de fractures. Les deux régimes décrits par les équations (1-8) et (1-9) sont respectivement appelés régimes dilués et régimes denses (Figure 1-7). La proportion d'intersections en « T » dépend du ratio $\frac{\dot{n}_N}{C}$. Si ce ratio est faible, alors les fractures grandissent et s'arrêtent les unes après les autres, produisant une majorité d'intersections en « T ». Si ce ratio est fort alors les fractures grandissent quasiment en même temps ce qui produit un nombre élevé d'intersections en « X ».

Le modèle UFM montre des différences avec un modèle Poissonien équivalent. Hope et al. (2015) étudient les deux modèles en utilisant la théorie des graphes et met en évidence des différences topologiques significatives (manière dont les fractures se connectent aux autres). Maillot et al. (2016) étudient leurs propriétés hydrauliques et montrent que les modèles UFM sont systématiquement moins connectés, moins perméables et présentent plus de flux chenalisés (concentrés sur un plus petit nombre de fractures) que leurs Poissoniens équivalents. Enfin, Lavoine (2020) étudie la manière dont les fractures occupent l'espace en trois dimensions, via l'utilisation du concept de « lacunarité ». Il montre que la surface totale de fracture est répartie de manière plus homogène dans l'espace dans le cas des UFM que dans celui des Poissoniens.

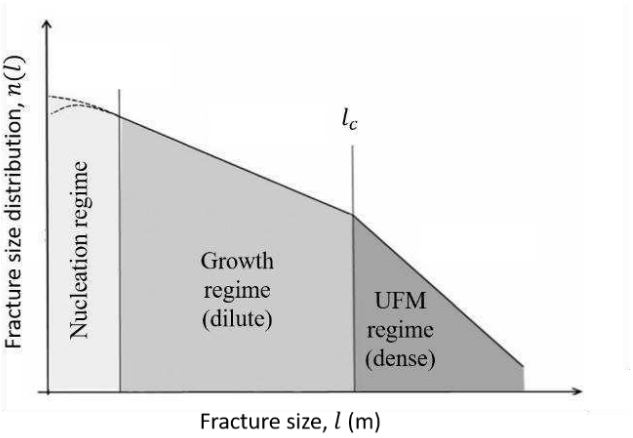


Figure 1-7 : Distribution des longueurs schématique du modèle de DFN génétique. Modifié d'après Davy et al. (2013).

1.2.2. Propriétés hydrauliques des réseaux de fractures

L'hétérogénéité hydraulique des milieux fracturés est d'abord due à sa structure géométrique complexe. En plus de la structure, les fractures ont elles même des propriétés hydrauliques (ou transmissivités) variables du fait de leurs ouvertures et de leurs rugosités (voir section 1.2.1.1.). Ces deux caractéristiques, structure géométrique et transmissivité de la fracture, ont un impact fort sur la chenalisation des écoulements et sur la manière dont les propriétés hydrauliques du milieu évoluent avec l'échelle. Nous apportons dans cette section une revue de ces éléments qui ont été largement étudiés jusqu'à aujourd'hui.

1.2.2.1. Données et approches de caractérisation hydraulique

De nombreuses mesures in-situ (Berkowitz, 2002; Cacas et al., 1990a; 1990b; Follin et al., 2014; Neuman, 2005) et expérimentales (Watanabe et al. (2009) ; voir Tsang and Neretnieks (1998) pour une revue) témoignent du caractère très hétérogène des milieux fracturés. L'augmentation du nombre d'études va de pair avec la multiplication du nombre de projets de stockages profonds de déchets nucléaires dans le monde. On peut citer, par exemple, le projet du site de Forsmark en Suède (Follin et al., 2014; Selroos & Follin, 2014), le projet Onkalo en Finlande (Ahokas et al., 2014; Darcel et al., 2015), ou le site de test de Grimsel en Suisse (Martinez-Landa & Carrera, 2005). Sur ces sites, des mesures de perméabilité et même de transmissivité quasiment à l'échelle de fractures isolées (p. ex. voir méthode des *Posiva Flow Logs* ; Oehberg and Rouhiainen (2000)) montrent qu'une très petite part du réseau transporte des flux, c'est-à-dire qu'il est chenalisé (Figure 1-8a). La chenalisation est liée à l'hétérogénéité du milieu, mais en plus de cela elle implique que des zones de fortes

perméabilités soient connectées entre elles, ce qui est critique dans le cadre du stockage de déchets nucléaires par exemple. Le Goc (2009) étudie ce phénomène via l'utilisation du problème inverse (De Marsily et al., 2000; Tarantola, 2005), c'est-à-dire que les paramètres d'un modèle (p. ex. la structure de perméabilité) sont contraints par des mesures hydrauliques. Cette méthode a beaucoup servi à la caractérisation hydrogéologique plutôt dans un contexte de modélisation continue des milieux, c'est-à-dire en cherchant des propriétés hydrauliques équivalentes à des cellules subdivisant de l'espace, que ce soit pour des milieux poreux (Jiménez et al., 2013; Tsai et al., 2003) ou fracturés (Larocque et al., 1999; Zha et al., 2015). Dans le cadre d'une modélisation discrète milieux fracturés, cette méthode a été appliquée à la caractérisation de la structure de transmissivités principalement dans des cas où la structure géométrique du réseau était simple et/ou déjà fixée (Bruyelle & Lange, 2009; Klepikova et al., 2020; 2013; 2014). Cependant, dès que la structure géométrique du réseau devient plus complexe ou inconnue, l'utilisation de la méthode inverse est encore aujourd'hui un défi (Borghi et al., 2016; Le Goc et al., 2010a). La caractérisation d'un réseau de fractures doit donc reposer à la fois sur des connaissances ou hypothèses préalables permettant de faire un (ou des) modèles conceptuels, et à la fois sur l'utilisation de données permettant d'ajuster et valider le modèle. Nous référons à des papiers tels que Davy et al. (2018b) ou encore Berkowitz (2002) pour l'approfondissement de ces questions.

Une autre information que révèlent les données est la manière dont la perméabilité semble augmenter avec la taille du volume de roche considéré. Cet effet d'échelle est souvent présent dans tout type de formation géologique mais est particulièrement marqué dans les milieux fracturés (Clauser, 1992; Guimerà et al., 1995; Martinez-Landa & Carrera, 2005). Cette augmentation semble atteindre un palier lorsque l'on traite d'échelles élevées (de l'ordre de centaines de mètres d'après Clauser (1992), Figure 1-8b), ce qui pourrait être une échelle d'homogénéisation. Les différentes échelles peuvent combiner des mesures en laboratoire, des mesures à l'échelle d'un puits (*single hole tests*), de plusieurs puits (*cross hole tests*), et des mesures à l'échelle du site. Certaines études avancent cependant qu'un biais dans l'estimation de l'effet d'échelle pourrait être dû aux différents types de mesures employées. Par exemple, les tests effectués à l'échelle d'un puits (par exemple les *pulse tests,* ou *slug tests*) seraient enclins à être facilement affectés par un mauvais développement du puits ou a un effet écran autour du puits (*skin effect*), alors que pour les tests longues portées (tests de pompage), ces effets sont filtrés par la méthode d'interprétation (Butler Jr & Healey, 1998; Martinez-Landa & Carrera, 2005; Rovey II & Niemann, 2001). Cependant, beaucoup d'études s'accordent sur le fait que l'effet d'échelle est bien réel (Martinez-Landa & Carrera, 2005). Dans la section suivante, nous abordons la question de la connectivité du réseau de fracture, c'est-à-dire comment la structure géométrique impacte les écoulements. Plusieurs études employant des modèles DFN évaluent comment celle-ci évolue avec l'échelle.

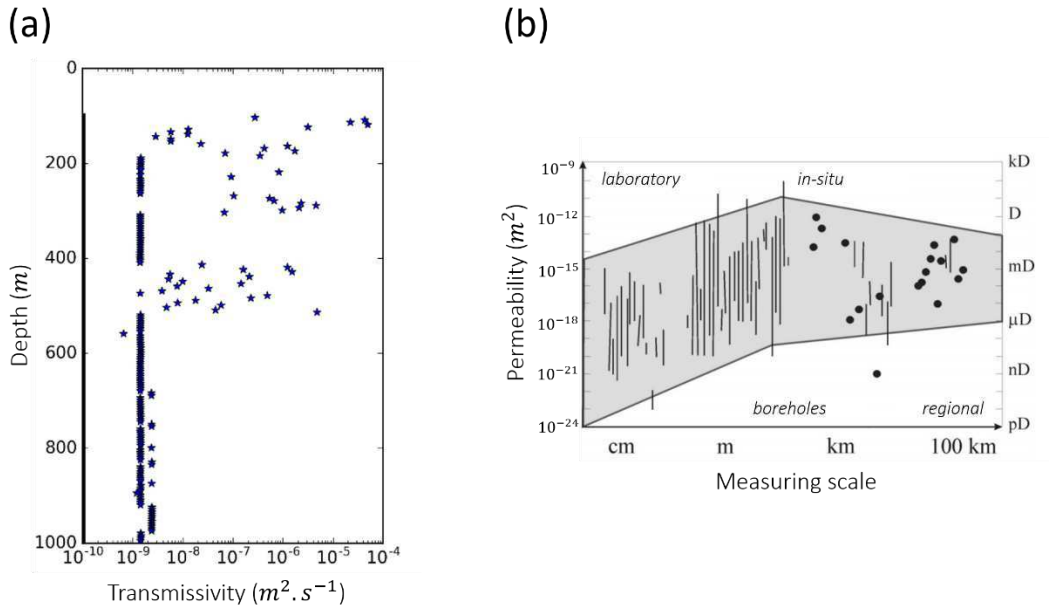


Figure 1-8 : (a) Transmissivités mesurées par méthode des PFL (Posiva Flow Logs) en fonction de la profondeur à Forsmark (Suède ; puits KFM02A). Modifié d'après Le Goc et al. (2018). (b) Données de perméabilités en fonction de l'échelle de mesure pour plusieurs études faites dans des milieux cristallins. Modifié d'après Clauser (1992).

1.2.2.2. Effet de la structure géométrique sur les écoulements

Connectivité et paramètre de percolation

Les propriétés hydrauliques d'un réseau de fracture sont corrélées à sa connectivité, c'est-à-dire comment la structure géométrique permet les écoulements. La connectivité d'un réseau peut être perçu comme le nombre de chemins du réseau pour aller d'un point à un autre, ou si l'on considère un système de taille L, pour aller d'un bord au bord opposé. Plus il existe de chemins plus le milieu est perméable. La transition entre l'absence de chemins et l'existence d'au moins un chemin est appelé le seuil de percolation. La théorie de la percolation s'applique aux systèmes où les flux sont concentrés dans une population d'éléments discrets. Elle a classiquement été étudiée pour quantifier la connectivité d'éléments tous très petits par rapport à la taille de système considéré (Berkowitz, 1995; Stauffer & Aharony, 2018). Dans ce cas, un paramètre de densité adimensionnel, appelé le paramètre de percolation, p, est défini comme : $p = \frac{Nl^2}{L^2}$, en deux dimensions, ou : $p = \frac{Nl^3}{L^3}$, en trois dimensions, avec N le nombre d'éléments, l leur taille (constante), et L la taille du système (Bour & Davy, 1997, 1998). Ce paramètre est défini comme l'union géométrique des volumes exclus autour des fractures (De Dreuzy et al., 2000). Le volume exclut est défini comme « le volume autour d'un objet dans lequel le centre d'un autre objet similaire ne peut entrer si on veut éviter une

intersection entre les deux » (Balberg et al., 1984). La théorie a été étudiée dans le cadre de réseaux de fractures avec la problématique de comment prendre en compte la large distribution de tailles de fractures, notamment des tailles plus larges que l'échelle L. Bour and Davy (1997, 1998) étudient cette question pour des réseaux en deux dimensions et en trois dimensions et définissent le paramètre de percolation comme :

$$p = \int_{l_{min}}^{L} n(l).l^D.dl + \int_{L}^{l_{max}} n(l).L^D.dl \tag{1-10}$$

où l est la taille de fracture, D est la dimension Euclidienne du système (2 ou 3), $n(l)$ la distribution des tailles de fractures (nombre divisé par L^D; voir équations (1-2) et (1-3)), et l_{min}, l_{max} les tailles minimum et maximum de fractures. Le premier terme à gauche correspond au concept de volume exclu énoncé plus haut et le deuxième terme à droite compte le nombre de fractures plus grandes que L, qui connectent automatiquement le système.

Selon la valeur de l'exposant a de la distribution des tailles en loi de puissance, différents régimes ont été mis en évidence sur la manière dont p évolue avec l'échelle L (Bour & Davy, 1997, 1998; De Dreuzy et al., 2001a) (Figure 1-9 et Figure 1-10). Ces différents régimes peuvent être divisés comme suit (nous montrons le cas pour des réseaux en deux dimensions, d'après De Dreuzy et al. (2001a)) :

$$p \sim d.l_{min} \qquad a > 3 \tag{1-11}$$

$$p \sim d.\frac{L^{3-a}}{l_{\min}^{2-a}} \qquad 2 < a < 3 \tag{1-12}$$

$$p \sim d.L \qquad a < 2 \tag{1-13}$$

Le cas $a > 3$ correspond à un réseau fait essentiellement de petites fractures, dont la majorité sont proches de la taille l_{min}. Dans ce cas, la théorie classique de la percolation peut s'appliquer et p est proportionnel à la densité d'éléments d et indépendant de l'échelle L. A l'inverse, pour $a < 3$ (et $a < 4$ en 3D), p augmente avec l'échelle L, avec un exposant qui dépend de a pour $2 < a < 3$. Le cas $a < 2$ (et $a < 3$ en 3D) correspond au cas où le réseau est essentiellement composé de fractures plus larges que le système. Dans ce cas, p augmente avec la probabilité qu'une fracture coupe le système. Cette probabilité est proportionnelle à d et à L. Ainsi, p augmente avec l'échelle (sauf dans le cas où $a > 3$), ce qui signifie qu'un réseau qui apparait en moyenne non connecté à des petites échelles d'observation, sera connecté à une plus large échelle.

L'estimation du seuil de percolation p_c, c'est-à-dire la valeur de p à partir de laquelle un réseau est statistiquement connecté, a fait l'objet de nombreuses études (Balberg, 1985; Robinson, 1984). De Dreuzy et al. (2000) étudient le cas de réseaux en trois dimensions faits

d'ellipses d'excentricités variables. Il montre notamment une valeur de $p_c \sim 2.6$ quelle que soit l'excentricité et quel que soit a, avec p défini comme dans l'équation (1-10).

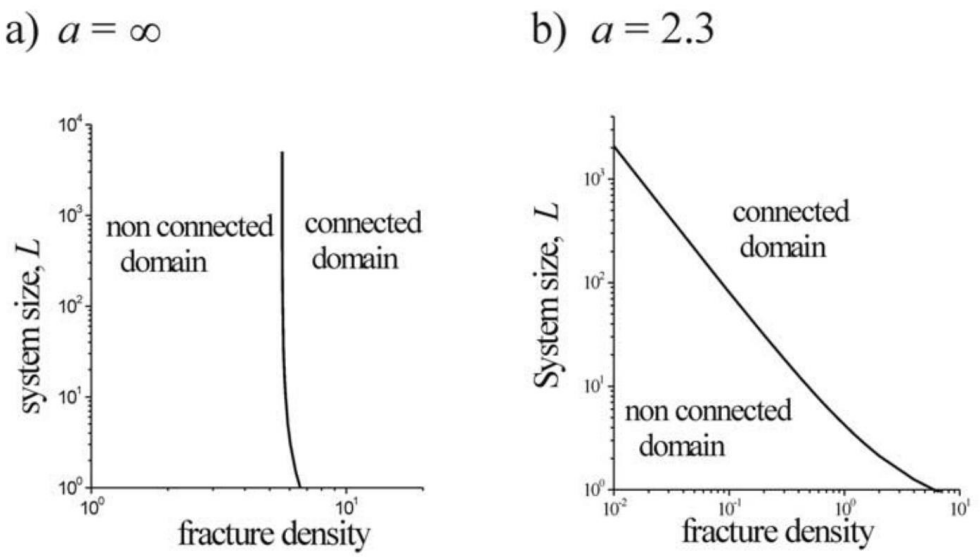


Figure 1-9 : Evolution de la taille du système L pour laquelle le seuil de percolation p_c est atteint en fonction de la densité de fracture, pour des réseaux en deux dimensions. (a) Cas où les fractures sont de tailles constantes et plus petites que la taille du système L. La connectivité ne dépend pas de l'échelle et la théorie classique de la percolation s'applique. (b) Cas avec une large distribution des tailles. Une dépendance avec l'échelle apparait. Dans Darcel et al. (2003c).

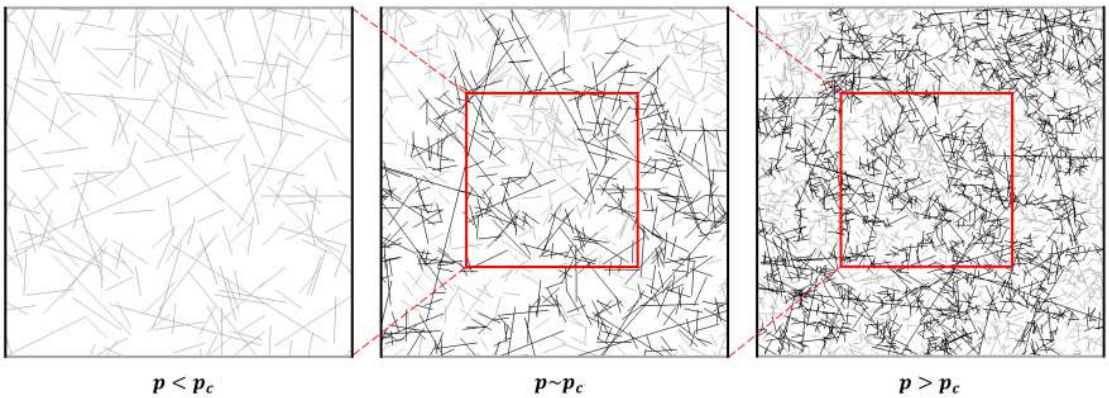


Figure 1-10 : Illustration de l'effet de l'échelle sur la connectivité des réseaux de fracture. La connectivité augmente avec la taille de l'échelle (de la gauche vers la droite). Dans Lavoine (2020), modifié d'après Davy et al. (2006a).

Impact sur l'évolution de la perméabilité avec l'échelle

Une problématique est de savoir si la structure du réseau et sa connectivité peuvent expliquer la croissance apparente de perméabilité avec l'échelle observée sur les données (section 1.2.2.1.) et si une échelle d'homogénéisation existe. Cette question a été étudiée à partir de simulations de flux sur des modèles DFN (principalement en deux dimensions) en considérant l'effet de l'exposant a de la distribution des tailles de fractures en loi de puissance. Nous rappelons ici quelques principaux résultats et référons aux études suivantes pour plus de détails : Davy et al. (2006a); De Dreuzy et al. (2001a, 2001b); De Dreuzy et al. (2002). Ces études calculent une perméabilité K moyenne à plusieurs réalisations et calculée pour plusieurs tailles de systèmes L.

Pour des réseaux où $a > 3$ (ou 4 en 3D), c'est-à-dire des réseaux essentiellement composés de « petites » fractures, le paramètre de percolation n'est pas influencé par l'échelle (théorie classique de la percolation ; voir section précédente). En dessous du seuil de percolation p_c, les réseaux ne sont pas connectés et donc la perméabilité K est statistiquement nulle. Pour des réseaux autour ou au-dessus de p_c, la perméabilité K décroit en moyenne avec l'échelle L jusqu'à une longueur de corrélation, $L = \xi$, à partir de laquelle K devient constante (échelle d'homogénéisation ; Figure 1-11). En dessous de cette échelle, les flux sont très chenalisés et au-dessus ils sont distribués de manière homogène. On peut comprendre la décroissance de K, en faisant l'analogie avec un réseau constitué d'une unique fracture (correspondant à un unique chenal). La perméabilité K peut être exprimée comme : $K \sim \frac{T}{L}$, où T est la transmissivité de la fracture. K évolue donc en L^{-1} (Davy et al., 2006a).

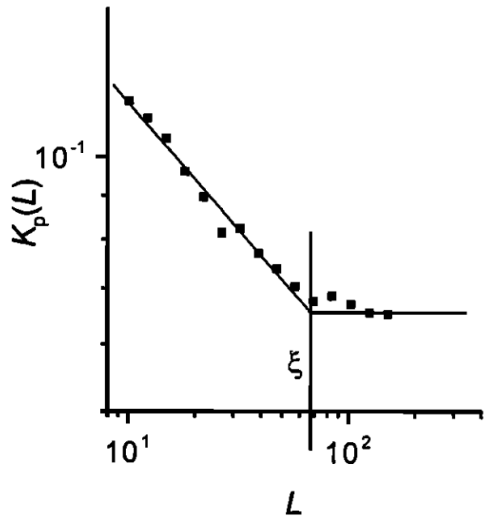


Figure 1-11 : Perméabilité (moyenne) en fonction de l'échelle de mesure L *dans des réseaux DFN en deux dimensions avec des fractures de tailles majoritairement petites par rapport à* L*. La perméabilité devient constante au-dessus de la longueur de corrélation* ξ*. Dans De Dreuzy et al. (2001a).*

Pour des réseaux avec $a < 3$, l'existence de grandes fractures qui peuvent parfois connecter le système en dessous de p_c fait que K baisse également en moyenne avec l'échelle L, jusqu'à atteindre la longueur de connectivité (Figure 1-12). La probabilité d'avoir cette fracture unique est proportionnelle à L^{3-a} si $2 < a < 3$, et à L si $a < 2$ (équations (1-12) et (1-13)). La perméabilité K ($\sim L^{-1}$ pour une fracture unique) décroit alors comme L^{2-a} si $2 < a < 3$. Elle est constante si $a < 2$, c'est-à-dire pour des DFNs composés uniquement de grandes fractures.

Lorsque L atteint la longueur de connectivité (ou la longueur de corrélation ξ pour $a > 3$), K arrête de diminuer avec L et plusieurs comportements sont possibles. Ces comportements dépendent de l'existence de valeurs extrêmes dans les différents chenaux. Si c'est le cas, alors la probabilité de rencontrer une valeur extrême dans la mesure de K augmente avec l'échelle L. Cette augmentation peut se poursuivre jusqu'à atteindre l'échelle de chenalisation, qui est la distance moyenne entre deux des chenaux les plus perméables du réseau (Figure 1-12). Cette échelle est assimilable à une échelle d'homogénéisation.

Les études mentionnées ci-dessus indiquent que la remontée de K avec L, après que la longueur de connectivité est atteinte, n'a lieu que lorsqu'on a une distribution des transmissivités par fracture. La structure géométrique à elle seule (transmissivités constantes) n'induit pas de valeurs extrêmes de flux assez fortes, et la longueur de connectivité et de chenalisation sont presque confondues. Ainsi, seule une distribution de transmissivité pourrait expliquer l'augmentation de K avec L, observée sur les données. Nous référons aux études de De Dreuzy et al. (2001b); (2002) pour comprendre l'impact du modèle de transmissivité sur cette augmentation de K. Différents modèles de transmissivités y sont exploités, à savoir des distributions log-normales ou en loi de puissance et corrélées ou décorrélées aux tailles de fractures, et sont mis en lien avec l'exposant a de la distribution des tailles. Certains modèles ne présentent pas de longueur de chenalisation (donc pas d'échelle d'homogénéisation) et K augmente continuellement avec l'échelle (Figure 1-12a ; ligne verte).

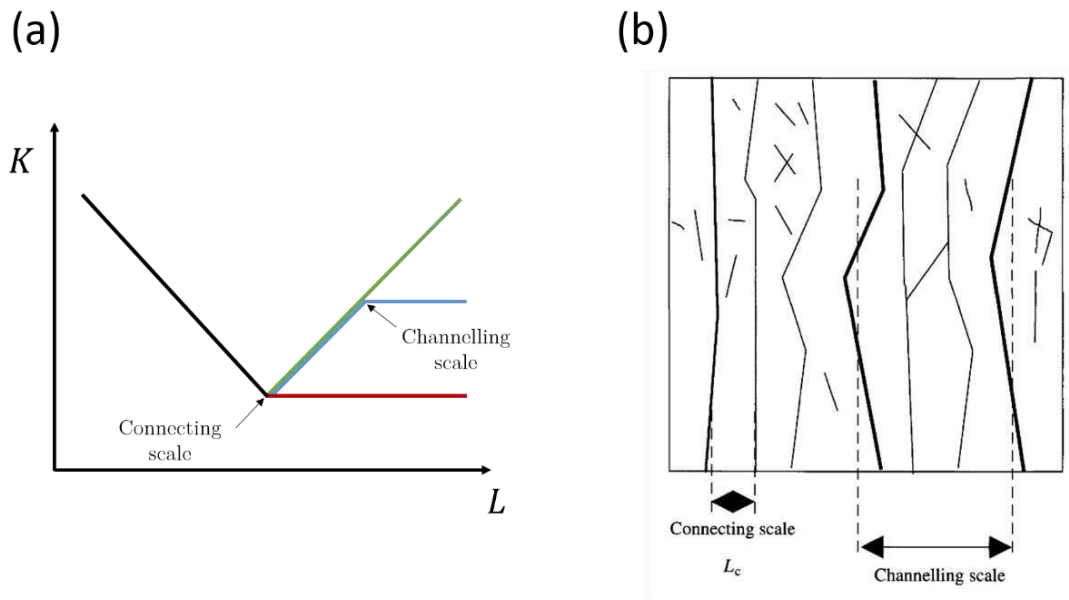


Figure 1-12 : (a) Illustration schématique des différents scénarios possibles pour l'évolution de la perméabilité K avec l'échelle de mesure L. Les trois ont en commun une décroissance de K jusqu'à la longueur de connectivité (connecting scale), puis divergent sur la manière dont K évolue ensuite : constant (rouge), augmente jusqu'à une longueur de chenalisation (bleu), ou augmente indéfiniment (vert). Ces différents scénarios dépendent de l'exposant a de la distribution des tailles et du modèle de transmissivité. (b) Illustration de la longueur de connectivité et de la longueur de chenalisation. Dans Davy et al. (2006a).

1.2.2.3. Modèles de transmissivités de fractures (HydroDFN)

En plus de la structure géométrique, la distribution des transmissivités de fractures est un paramètre essentiel à la définition des propriétés hydrauliques du réseau. La transmissivité d'une fracture ($m^2.s^{-1}$) est l'intégrale de la perméabilité sur l'ouverture de la fracture. Dans l'hypothèse d'un fluide laminaire s'écoulant entre deux plaques parallèles, l'ouverture b et la transmissivité T sont reliées par la loi cubique (Renshaw, 1995; Witherspoon et al., 1980) :

$$T = \frac{b^3.\rho.g}{12.\mu} \tag{1-14}$$

où μ ($Pa.s$) et ρ ($kg.m^{-3}$) sont respectivement la viscosité dynamique et la masse volumique du fluide, et g l'accélération de la pesanteur ($m.s^{-2}$). Classiquement, on prend des valeurs pour l'eau valable pour une température de $20°$ et sous une pression de 1 à 100 bars : $\rho = 10^3\ kg.m^{-3}$, et $\mu = 10^{-3}\ Pa.s$. La vitesse de flux locale q_y (intégrée sur l'épaisseur de la fracture ; en $m^2.s^{-1}$) est alors exprimée comme (loi de Darcy) :

$$q_y = T.\frac{dh}{dx} \tag{1-15}$$

où $\frac{dh}{dx}$ est le gradient de charge local et h la hauteur d'eau, exprimé en mètres. Il est courant de considérer la hauteur d'eau h en hydrogéologie plutôt que la pression de fluide p plus classique en mécanique des fluides, avec la relation : $h = \frac{p}{\rho.g} + z$, où z est l'élévation relative du point considéré (De Marsily, 1986). Dans le cas d'un modèle DFN en trois dimensions, la résolution du flux et du transport dans le plan de fracture se fait sur des plans en deux dimensions, en considérant des paramètres intégrés sur l'épaisseur de la fracture comme dans les équations ci-dessus ((1-14) et (1-15)) (Figure 1-13).

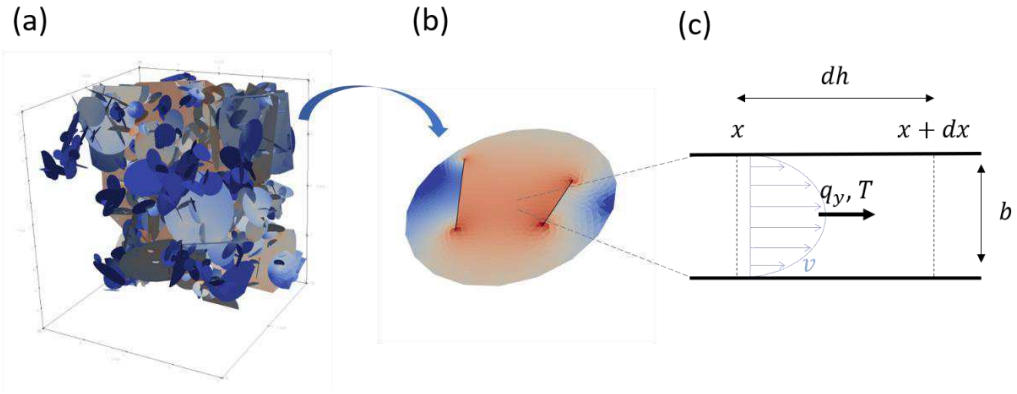


Figure 1-13 : (a) Simulation de flux dans un DFN et (b) sur une unique fracture en forme de disque avec deux intersections. La couleur représente l'intensité du flux, q_y, allant du bleu vers le rouge. (c) Représentation schématique du flux dans la fracture, avec l'hypothèse des plaques parallèles. Le profil de vitesse en bleu correspond à un écoulement de Poiseuille.

Plusieurs études s'intéressent à la validité de la loi cubique pour les fractures à cause de leurs ouvertures variables (rugosité). Cette rugosité influence les écoulements à cause des effets suivants : la tortuosité des flux sur le plan de fracture (Brown, 1987; Tsang, 1984), le profil de vitesse local, qui se fait alors dans un chenal plus qu'entre deux plaques, et qui peut donc influencer la vitesse moyenne q_y, et l'existence probable d'une ouverture minimale sur le chemin d'écoulement qui limite le flux (*critical neck* ; Pyrak-Nolte et al. (1988)). L'ouverture hydraulique d'une fracture, c'est-à-dire celle que l'on peut relier à sa transmissivité, est souvent différenciée des ouvertures géométriques et mécanique (Figure 1-14). Beaucoup d'études cherchent à évaluer le lien entre l'ouverture hydraulique et l'ouverture mécanique, afin d'évaluer l'impact du champs de contraintes sur les transmissivités (Bandis et al., 1986; Barton et al., 1985; Pyrak-Nolte & Morris, 2000; Pyrak-Nolte & Nolte, 2016; Witherspoon et al., 1980).

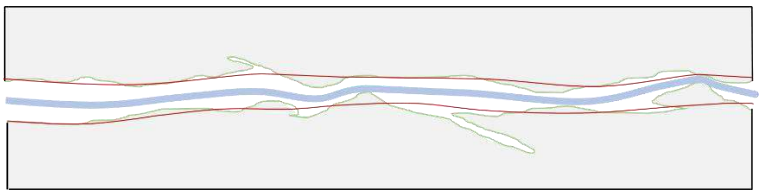


Figure 1-14 : Illustration schématique d'une fracture rugueuse et de ses différentes ouvertures : géométrique (vert), mécanique (rouge), et hydraulique (bleu).

Une autre question est de savoir si l'hypothèse des plaques parallèles a un impact sur les écoulements à l'échelle du réseau de fractures. De Dreuzy et al. (2012) étudient la question en comparant des simulations de flux sur des DFNs avec une distribution de transmissivités par fracture (Figure 1-15 - gauche) et sur des DFNs avec des transmissivités constantes par fractures et calculées pour être équivalentes aux transmissivités distribuées (Figure 1-15 - droite). Ils montrent en effet qu'un couplage existe entre les hétérogénéités de flux à l'échelle de la fracture et celles à l'échelle du réseau, et donc que la perméabilité du réseau ne peut pas forcément être estimée avec une hypothèse d'une transmissivité équivalente. Cependant, ce couplage devient faible si la taille du système est au moins 20 fois plus grandes que la longueur de corrélation de la distribution des transmissivités.

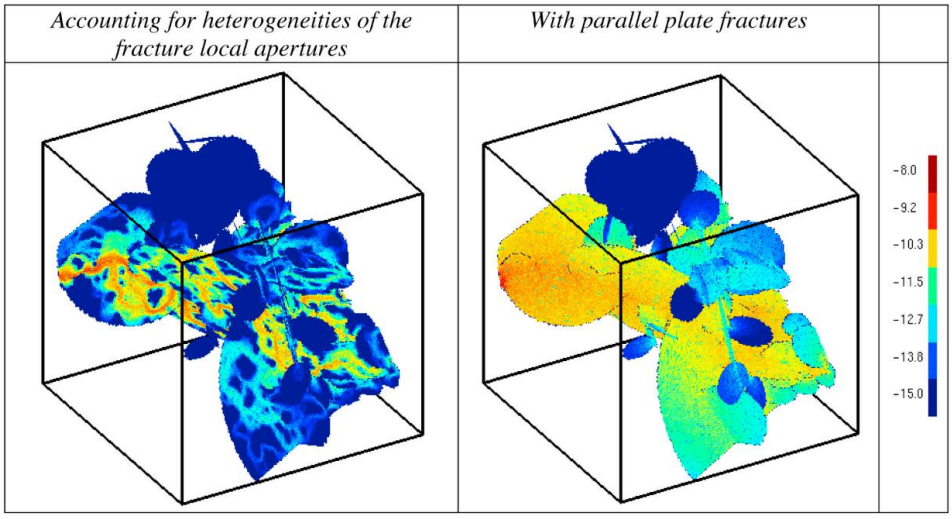


Figure 1-15 : Simulations d'écoulement sur un DFN avec un champ de transmissivités par fracture (gauche), et une transmissivité équivalente constante par fracture (droite). Dans De Dreuzy et al. (2012).

Les mesures d'ouvertures faites visuellement à partir des parois ou dans des puits indiquent plutôt une distribution en loi de puissance (Belfield & Sovich, 1995) alors que les mesures hydrauliques, qui donnent directement la transmissivité, indiquent plutôt une distribution log-normale (Cacas et al., 1990b; Dverstorp & Andersson, 1989). Cette différence

peut être due à l'effet de la rugosité de la fracture sur les écoulements. Les mesures montrent aussi une corrélation entre ouvertures et taille de fractures, comme le montre la compilation de donnée faite dans Klimczak et al. (2010) pour des fractures en mode I (*opening-mode*) (Figure 1-16). Ce type de corrélation peut avoir un effet important sur la chenalisation et la manière dont la perméabilité évolue avec l'échelle (voir section précédente). Pour donner une idée d'ordre de grandeur, à Forsmark en Suède, les transmissivités mesurées sont dans la gamme $10^{-9} - 10^{-5}\ m^2.s^{-1}$ (Figure 1-8a). Dans ce manuscrit, nous appelons HydroDFN, le modèle de transmissivité choisi dans un DFN.

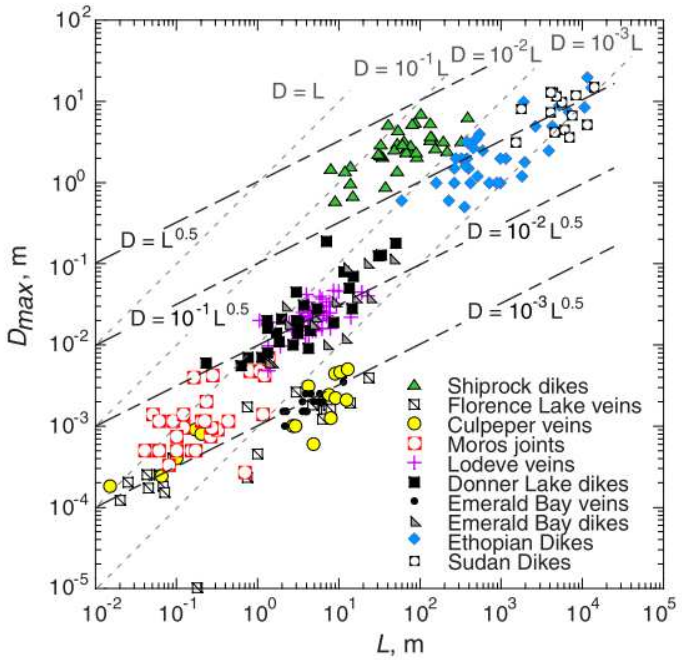


Figure 1-16 : Ensemble de jeu de données montrant les ouvertures maximales D_{max} de fractures en fonction de leurs tailles. Dans Klimczak et al. (2010).

Dans cette section, nous avons vu que la structure géométrique du réseau de fractures ainsi que les propriétés hydrauliques (transmissivités) de fractures avaient fait l'objet de nombreuses études, dans le but de caractériser les propriétés hydrauliques des milieux fracturés. Une propriété qui n'est aujourd'hui pas encore considérée dans ces analyses est la manière dont les surfaces de fracture qui sont colmatées (et donc imperméables au flux) sont distribuées dans le réseau. Dans les deux prochaines sections, nous introduisons cette problématique. Nous proposons d'abord un état de l'art sur les processus du colmatage appliqués aux fractures (section 1.3). Ensuite, nous positionnons le sujet pour le cas des réseaux de fractures (section 1.4).

1.3. Processus de colmatage des fractures

On distingue dans la littérature différentes communautés scientifiques qui s'intéressent aux processus de colmatage les fractures. La communauté des minéralogistes s'intéresse aux conditions pour qu'un minéral se forme, par exemple à des fins d'extraction de minerais (Blundell et al., 2003; Bouchot et al., 2005; Drake et al., 2009). La communauté des géophysiciens étudie les processus de « cicatrisation » (*healing*) des fractures, par exemple dans le but de prédire quand un séisme peut se réenclencher (Gratier, 2011), ou pour évaluer l'intégrité d'une barrière géologique pour le stockage de déchets nucléaires ou de CO_2 (Dobson et al., 2003; Elkhoury et al., 2015). Enfin, la communauté des hydrogéologues/géochimistes s'intéresse aussi à ce phénomène car il dépend des propriétés de réactivité et de transport du milieu (transport réactif ; Steefel and Maher (2009)), et vient lui-même en changer les propriétés hydrauliques. Concernant les fractures, la question est importante car leur perméabilité peut sensiblement baisser même pour une petite quantité d'élément précipité (Vaughn, 1987).

Le sujet est donc assez vaste et nous proposons dans cette section de résumer les différents paramètres qui influencent le colmatage dans les fractures et comment ceux-ci ont été modélisés jusqu'à aujourd'hui.

1.3.1. Processus physico-chimiques à l'interface fluide-roche

Le colmatage est défini de manière générale par la manière dont des éléments contenus dans un fluide viennent se solidifier sur la roche, modifiant ainsi sa porosité et sa perméabilité. Il s'agit d'un phénomène très répandu apparaissant dans des structures naturelles, telles que dans les lits de rivières (Cui et al., 2021; Schälchli, 1992), les aquifères (Baveye et al., 1998), mais aussi à des profondeurs plus élevées lors de circulations de fluides dans la croûte terrestre (Lowell et al., 1993). Le colmatage est aussi étudié pour prédire la viabilité de constructions anthropiques, par exemple des puits forés dans le cadre de pompages ou d'installations géothermales (Burté, 2018; Rinck-Pfeiffer et al., 2000) ou des barrages (Wu et al., 2008).

1.3.1.1. Réactions d'adsorption et de précipitation

Le colmatage résulte d'interactions entre le fluide et la roche, qui peuvent être d'ordre physique ou d'ordre chimique (Deschamps et al., 2006) (Figure 1-17). Dans les deux cas, on parle de processus de sorption, défini comme le phénomène où des éléments chimiques quittent la phase dans laquelle ils sont (ici liquide) afin de rejoindre une autre phase plus condensée (ici solide). On parle plus précisément d'adsorption dans le cas, où ces éléments s'accumulent

à la frontière entre ces deux phases (Goldberg et al., 2007; Milton & Brown, 1987; Sposito, 1986). Dans le cas d'interactions d'ordre physiques (physisorption), l'adsorption a lieu à cause d'interactions électriques faibles entre les éléments en suspension et la roche adsorbante, sans qu'aucune réaction chimique n'ait lieu. Ces interactions sont appelées forces de Van der Walls (Stone, 2013). Ce type d'interaction peut, par exemple, expliquer le dépôt de colloïdes (particules fines du nanomètre au micromètre en suspension) à la surface de la fracture (Chrysikopoulos & Abdel-Salam, 1997). Le transport de colloïdes en milieu poreux est d'ailleurs une thématique assez étudiée aujourd'hui car des contaminants peuvent s'y adsorber (p. ex. des radionucléides) (McCarthy & McKay, 2004; Zhang et al., 2012). Dans le cas d'interactions d'ordre chimique (chimisorption), l'adsorption est due à des liaisons chimiques fortes (liaisons covalentes, ioniques) qui se créent entre le solide et les espèces chimiques présentes dans le fluide. La précipitation est le processus par lequel un élément chimique soluble dans l'eau se transforme en un élément solide (minéral), soit en rencontrant un autre élément chimique, soit à cause de changement de gradient de solubilité dans le fluide (changement de température, de pression ou de pH). Sposito (1986) distingue le processus chimique de précipitation à la surface d'un solide du processus chimique d'adsorption. Il argumente que la précipitation concerne la croissance d'une phase solide ayant un arrangement moléculaire particulier qui va se répéter et s'étendre en trois dimensions, alors que l'adsorption forme des couches en deux dimensions sur la surface sans arrangement moléculaire en trois dimensions. Même si les deux mécanismes sont différents, la plupart des études que nous citerons ci-après utilisent le terme de précipitation pour caractériser génériquement la formation d'une couche solide sur la surface de fracture à partir d'éléments chimiques présents dans le fluide, modifiant ainsi son ouverture.

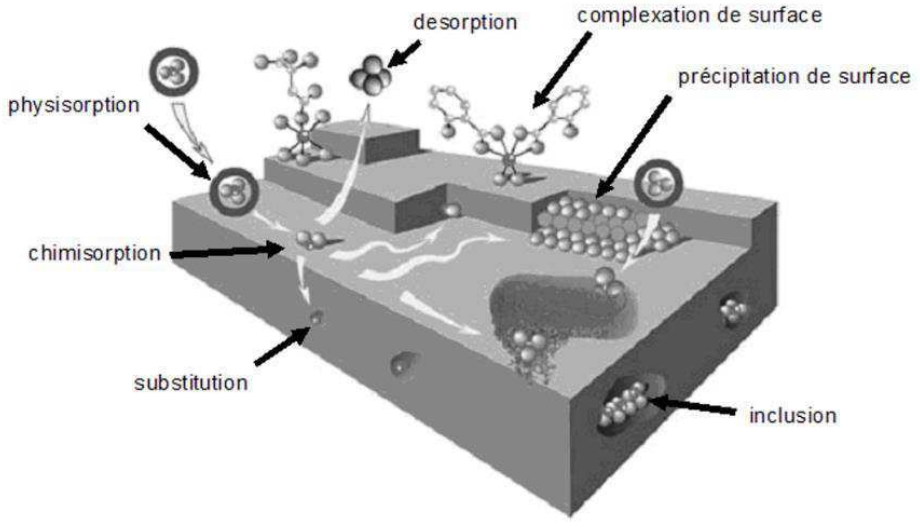


Figure 1-17 : Principales interactions entre un atome ou molécule et un solide à l'interface solide/liquide. Dans Deschamps et al. (2006).

A l'interface fluide-roche peuvent aussi se produire des processus par lesquels des éléments quittent la parois solide vers le fluide. On parle de désorption ou de dissolution (Detwiler et al., 2003; Detwiler & Rajaram, 2007; Durham et al., 2001). Ces processus peuvent également être d'ordre physique, c'est-à-dire que les liaisons électriques faibles se cassent. Ils sont aussi d'ordre chimique. Dans ce dernier cas, des minéraux solides réagissent avec le fluide et se transforment en élément solubles. Ce processus peut augmenter la porosité et donc la perméabilité de la roche, ou bien produire des éléments qui vont précipiter plus loin, ce qui peut à l'inverse réduire porosité et perméabilité. Nous verrons, par exemple, dans la section 1.3.2.3. que, sous l'action d'une contrainte normale à la fracture, la dissolution peut engendrer un réarrangement de la matière qui entraine une fermeture de la fracture.

Un autre phénomène associé à la dissolution, qui peut cette fois augmenter la perméabilité des milieux poreux, est la formation de chenaux très perméables, appelés *wormholes* (Golfier et al., 2002; Kalia & Balakotaiah, 2007; Steefel & Lasaga, 1990; Szymczak & Ladd, 2006, 2009) (Figure 1-18). Ces chenaux se forment lorsque des instabilités réactives apparaissent le long du front de dissolution (Ortoleva et al., 1987; Osselin et al., 2016) et sont renforcées par un effet *feed-back* positif entre la dissolution et le flux du fluide. Ce phénomène peut drastiquement augmenter la perméabilité d'un milieu poreux (Polak et al., 2004). Cette question est par exemple fortement étudiée dans le cadre du stockage de CO_2 sous une barrière géologique carbonatée fracturée, dont les minéraux de calcite peuvent être sujet à de la dissolution (Elkhoury et al., 2013; Elkhoury et al., 2015; Ellis et al., 2013; Ellis & Peters, 2016).

Dans ce chapitre, nous tentons de nous focaliser sur des processus de colmatage (précipitation, dépôt), mais il est important de noter que la dissolution peut engendrer de forts changement de perméabilité, et peuvent même être à l'origine de la fermeture d'une fracture, dans le cas où, par exemple, elle est associée à une contrainte normale à la fracture.

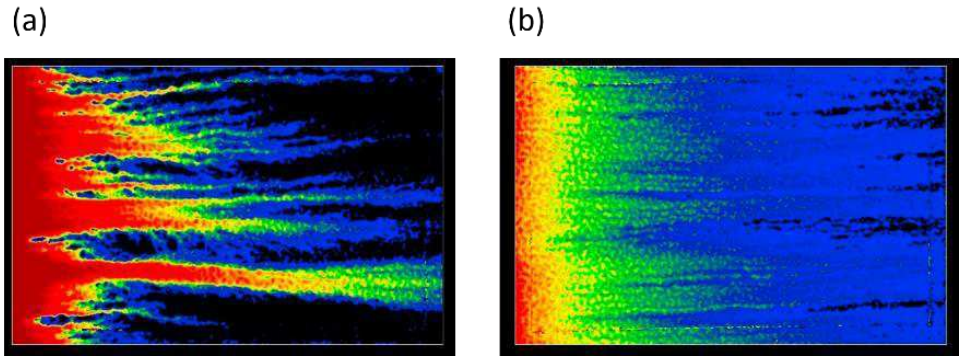


Figure 1-18 : Simulations numériques de dissolution associée à un flux, formant des chenaux appelés wormholes. Dans Szymczak and Ladd (2009). (a) Flux faibles. (b) Flux élevés. De gauche à droite, les différentes couleurs indiquent une profonde érosion (rouge), une érosion intermédiaire (jaune et vert), une érosion faible (bleu), et aucune érosion (noir).

1.3.1.2. Equilibre et cinétique des réactions d'adsorption/précipitation

L'équilibre est l'état vers lequel une réaction évolue. Pour une réaction chimique, p. ex. une réaction de précipitation, la « loi d'action des masses » prédit un équilibre thermodynamique qui dépend des paramètres de la réaction chimique. Une constante d'équilibre de la réaction est définie comme, $K = \prod a_i^{\nu_i}$, où a_i est l'activité de l'espèce chimique i, et ν_i son coefficient stœchiométrique (proportion de l'élément dans la réaction chimique). Pour une espèce chimique à l'état de soluté dans un fluide, l'activité est sa concentration c et pour une espèce à l'état solide l'activité vaut 1. L'équilibre d'une réaction chimique est également influencé par la température.

Un équilibre caractérise aussi des réactions d'adsorption à cause de considérations physiques. Des expériences d'adsorption montrent que la quantité d'éléments adsorbés à la surface du solide est fonction de la concentration dans le fluide. Cette fonction est appelée « isotherme d'adsorption ». On peut citer, par exemple, les isothermes théoriques de *Langmuir* et ceux de *BET* (Brunauer, Emmet et Teller) qui sont basés sur des paramètres physiques comme, par exemple, la proportion de sites adsorbants (voir Ayawei et al. (2017); Goldberg et al. (2007)). Les isothermes de *Freundlich* sont une formulation empirique de type : $Q = K.c^n$, où Q est la quantité d'éléments adsorbé, c la concentration dans le fluide, et n l'ordre de la réaction.

La cinétique de réaction est la vitesse avec laquelle la réaction atteint l'équilibre de réaction. Elle contrôle de nombreux processus à l'interface fluide-roche (Brantley et al., 2008). Si cette cinétique est lente relativement à d'autre processus, par exemple la vitesse avec laquelle les réactifs entrent en contact par diffusion, transport, mélange … etc., alors ces processus auront également un impact sur l'avancée de la réaction (voir plus bas section 1.3.2.1.). Pour une réaction chimique, la vitesse de réaction est souvent exprimée comme :

$$v = k.c^n \tag{1-16}$$

où c est la concentration d'un réactif, n l'ordre de la réaction et k une constante de vitesse. Ces paramètres sont établis à partir d'expériences, ou sont établis théoriquement. On citera par exemple Palandri and Kharaka (2004) pour une compilation d'ordres n pour la dissolution de minéraux par rapport à l'ion H+, ou encore McKibben and Barnes (1986) pour la dissolution de la pyrite par oxygène dissout ($n = 0.5$). Les réactions d'adsorption, qu'elles soient physiques ou chimiques, sont de manière générale également caractérisées par une cinétique avec une loi du même type (Goldberg et al., 2007).

1.3.2. Paramètres critiques

1.3.2.1. Impact des flux

Le transport réactif

Les flux (de fluide) jouent un rôle prépondérant sur la manière dont les réactions de colmatage vont se produire dans le temps et dans l'espace, puisqu'ils transportent les éléments du colmatage. De plus, si la cinétique de la réaction est relativement lente, alors les flux peuvent contrôler la vitesse de réaction. De manière générale, la majorité des interactions fluide-roche dans la subsurface doit être prise en compte en relation avec le transport. On parle de transport réactif (MacQuarrie & Mayer, 2005; Steefel, 2008; Steefel et al., 2005; Steefel & Maher, 2009).

Plusieurs études proposent des modèles simples de précipitation ou de dissolution sur les parois d'une fracture en deux dimensions couplés à un écoulement (Bekri et al., 1997; Dijk & Berkowitz, 1998; Mourzenko et al., 1996). Dans ces études, on assume un état stationnaire pour le flux dans la fracture, c'est-à-dire invariant dans le temps (*steady state* ; loi de Darcy, équation (1-15)), en faisant l'hypothèse que les changements géométriques (dus à la précipitation/dissolution) sont très lents relativement aux écoulements. L'équation du transport d'un soluté avec concentration c peut être écrite localement comme :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla.(cv - D\nabla c) = 0 \tag{1-17}$$

où v est la vitesse locale (stationnaire), D le coefficient de diffusion du soluté dans le fluide ($m^2.s^{-1}$), et $\frac{\partial}{\partial t}$, ∇, et $\nabla.$ sont respectivement les opérateurs de dérivée temporelle, gradient et divergence. Proche des parois de fractures, le terme 0, à droite de l'équation (1-17), est remplacé par un terme de flux de matière R, positif dans le cas de la dissolution et négatif dans le cas de la précipitation. Le terme R dépend de la cinétique de la réaction et est fonction de la concentration c dans le fluide (voir section 1.3.1.2. ; équation (1-16)). Pour modéliser des réactions de précipitation/dissolution dans les fractures, il a souvent été pris avec un ordre égal à 1 par rapport à la concentration (Ameli et al., 2014; Dijk & Berkowitz, 1998) :

$$R = k\,.\,(c_s - c) \tag{1-18}$$

où c_s est la concentration du soluté à l'équilibre dans le fluide (solubilité), et k la constante de vitesse de réaction.

La diffusion D dans le fluide est le paramètre physique qui amène plus ou moins rapidement le soluté vers les parois de la fracture, et peut donc aussi être un paramètre limitant la réaction. Le flux de matière par diffusion R_D est établi selon la loi de Fick (Steefel, 2008) : $R_D = D.\frac{\partial c}{\partial y}$, si on considère la diffusion selon l'axe y (Figure 1-19). Dans plusieurs études (Ameli et al., 2014; Detwiler & Rajaram, 2007; Elkhoury et al., 2013), les équations (1-17) et (1-18) sont intégrées sur l'axe transverse de la fracture, y (*depth-averaged*) :

$$\frac{\partial(bc)}{\partial t} + \nabla.\left(q_y.c\right) - \nabla.(b.D\nabla c) = R \tag{1-19}$$

où b est l'ouverture de la fracture et q_y le flux intégré (équation (1-15)). Dans ces études, la constante de vitesse k de l'équation (1-18) est parfois remplacée par une constante effective k_{eff} qui prend en compte la diffusion comme possible paramètre limitant la réaction.

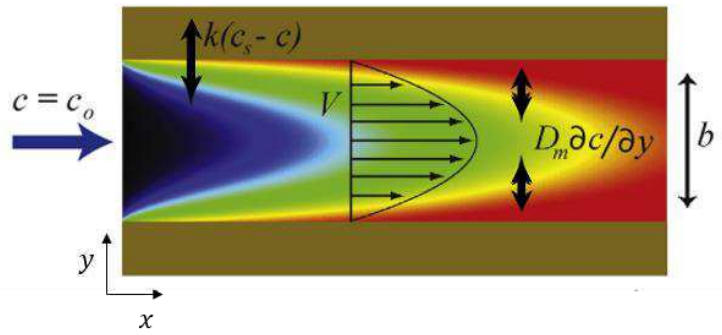


Figure 1-19 : Illustration du transport de concentration c dans une fracture avec deux parois parallèles (marrons), associées à des processus de diffusion entre le centre et la paroi, et à des processus de précipitation/dissolution au niveau des parois. Les couleurs correspondent aux valeurs de concentration. Modifié d'après Elkhoury et al. (2013).

Paramètres adimensionnels du transport réactif

L'importance relative des différents processus impliqués dans le transport réactif, à savoir le processus de réaction, de transport advectif, et de diffusion, est classiquement quantifiée avec les nombres adimensionnels de Damköhler (Steefel & Maher, 2009) :

$$Da_I = \frac{t_A}{t_R} \tag{1-20}$$

$$Da_{II} = \frac{t_D}{t_R} \tag{1-21}$$

où t_A, t_D, et t_R sont respectivement les temps caractéristiques d'advection, de diffusion et de réaction.

On utilise également le nombre de Péclet pour comparer advection et diffusion :

$$Pe = \frac{t_D}{t_A} \tag{1-22}$$

La définition de ces temps caractéristiques dépend du système étudié. Généralement, ils sont définis comme :

$$t_A = \frac{L}{v} \tag{1-23}$$

$$t_R = \frac{1}{k} \tag{1-24}$$

où L est une longueur caractéristique, par exemple la taille d'une fracture ou du système étudié. v est la vitesse moyenne du flux. k est la constante de vitesse de réaction, en s^{-1}. Concernant t_D, si on parle de diffusion selon l'axe transverse de la fracture (Figure 1-19), alors on le définit comme suit :

$$t_D = \frac{b^2}{D} \tag{1-25}$$

où D est le coefficient de diffusion. Dans certaines études, le nombre adimensionnel de Sherwood est utilisé ($S_h \sim 7.5$). Ce nombre permet de prendre en compte le transfert de masse entre des plaques parallèles (Detwiler & Rajaram, 2007; Szymczak & Ladd, 2012): $t_D = \frac{b^2}{Sh.D}$.

L'utilisation de ces paramètres adimensionnels permet de traiter de différents scénarios. Lorsque la réaction est contrôlée par le transport advectif (transport limitant par rapport à la cinétique de réaction, Da_I fort), alors la réaction sera localisée dans les principaux chenaux de flux. A l'inverse, si la réaction est contrôlée par la cinétique de réaction (cinétique limitante, Da_I faible), alors la réaction tend à être moins influencée par les hétérogénéités d'écoulement (Mourzenko et al., 1996; Steefel & Lasaga, 1990). Dans le cas où la cinétique n'est pas limitante, la réaction peut aussi être influencée par un contrôle du transport diffusif. Detwiler et al. (2003) étudie expérimentalement l'impact du nombre de Péclet (transport advectif vs diffusif ; équation (1-22)) sur l'évolution d'une fracture soumise à une réaction de dissolution.

Influence des hétérogénéités et des mélanges

L'hétérogénéité des milieux poreux implique que le transport de soluté soit impacté par une distribution des vitesses et donc par ce qu'on appelle la dispersion mécanique (Steefel & Maher, 2009). Dans les milieux fracturés, cette dispersion mécanique est due à la fois à la structure du réseau et à la rugosité de fracture (Hyman et al., 2019; Kang et al., 2015b). Elle va engendrer une dynamique de mélange, c'est-à-dire que différents chemins d'écoulements se forment et se rencontrent, ce qui influence les taux de réaction. Elle peut également augmenter

la taille d'un front de réaction, en créant des chenaux (*fingering* ; De Anna et al. (2014); Le Borgne et al. (2014); Nicolaides et al. (2015)). Pour des milieux poreux classiques, beaucoup d'études se sont penchées sur la question de comment quantifier des taux de réaction équivalents (problématique de l'*upscaling*) (Anna et al., 2014; Dentz et al., 2011; Le Borgne et al., 2010). Dans les milieux fracturés, l'impact de la structure géométrique du réseau sur les mélanges et sur les taux de réaction est une question assez nouvelle (Hyman & Jimenez-Martinez, 2018). Cette question concerne aussi la manière dont les mélanges se font au niveau des intersections entre fractures (Kang et al., 2015a).

En ce qui concerne les processus de colmatage, une problématique intéressante serait de prédire si certaines intersections entre fractures seraient plus sujettes à être fermées, étant donné qu'elles peuvent être le lieu de rencontre entre des fluides ayant potentiellement des propriétés chimiques différentes. Ceci doit dépendre de la structure géométrique du réseau et de la zone de contact entre des eaux d'origines différentes. A Forsmark (Suède), il a été montré que des précipitation minérales pourraient se produire autour du future site d'enfouissement, sous l'action notamment du mélange de différentes eaux (Serrano et al., 2008).

Effet de la rugosité de fracture

La rugosité de fracture peut impacter le transport réactif et les processus colmatage pour plusieurs raisons : 1) elle crée des zones de faibles ouvertures qui potentiellement colmateront plus vite (Dijk & Berkowitz, 1998) ; 2) elle augmente la surface de fracture disponible pour la réaction (par rapport à une paroi plane) ; 3) elle crée des hétérogénéités de flux qui, comme vu précédemment influencent la réaction.

Deng et al. (2018a) étudient ces deux derniers points (2 et 3) en réalisant des simulations de transport réactif dans une fracture rugueuse en deux dimensions. Il montre que le taux de réaction à l'échelle de la fracture augmente avec la rugosité (la surface disponible augmente), mais jusqu'à un certain point ou la présence de zones de faibles vitesses se créent et limitent la réaction (Figure 1-20). Un terme de correction est alors proposé pour prendre en compte ces effets. Dans cette étude, la réaction n'induit pas de précipitation ni de dissolution donc pas de changement géométrique de la fracture, mais elle montre comment la rugosité peut influencer les taux de réaction en comparaison à un modèle d'ouverture constante.

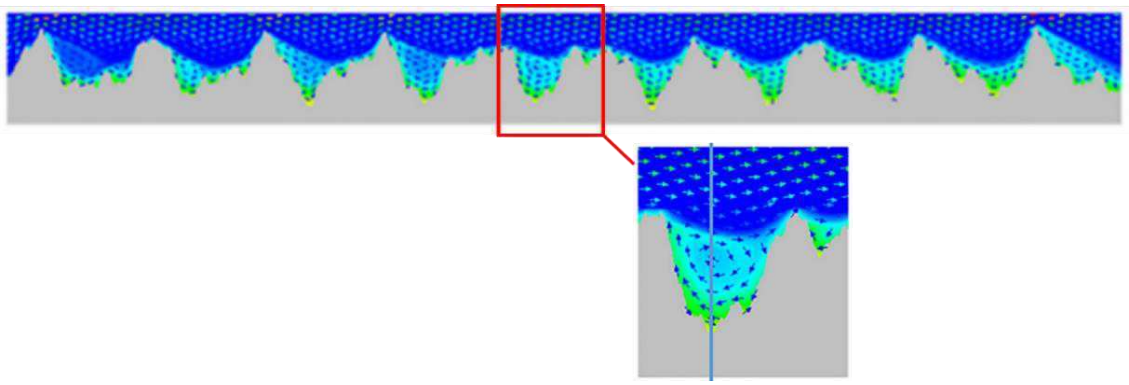


Figure 1-20 : Simulation de transport réactif sur une fracture rugueuse en deux dimensions. Les couleurs (du bleu foncé au rouge), lues sur les flèches, indiquent la vitesse des flux, et, lues sur le fond, indiquent l'indice de saturation de la réaction (Saturation Index, SI), c'est-à-dire là où la réaction se rapproche de l'équilibre et donc ralentit. Modifié d'après Deng et al. (2018a).

Dans le cas où la réaction induit un changement de géométrie, le problème a principalement été étudié pour des réactions de dissolution (Detwiler, 2008; Detwiler et al., 2003; Detwiler & Rajaram, 2007; Noiriel et al., 2013). Deng et al. (2018b) étudient différentes distributions d'ouvertures. Il montre notamment que cette distribution impacte peu la manière dont évolue la fracture et que le paramètre le plus impactant est l'intensité du flux relativement à la cinétique de réaction. Pour des faibles valeurs de flux, la fracture est soumise à une dissolution compacte et lente. Pour des forte valeurs de flux la dissolution est uniforme. Entre les deux des chenaux de dissolution se forment. Associée à une contrainte de confinement, ces différents scénarios peuvent engendrer de fortes différences sur la manière dont évolue la perméabilité de la fracture, et donc sur le risque de fuite dans le cadre d'un stockage sous-terrain (voir Figure 1-21). Notons qu'il pourrait être intéressant d'évaluer comment un tel modèle se comporte dans un réseau de fractures, avec des flux variables par fractures et des contraintes de confinement qui vont dépendre de l'orientation des fractures.

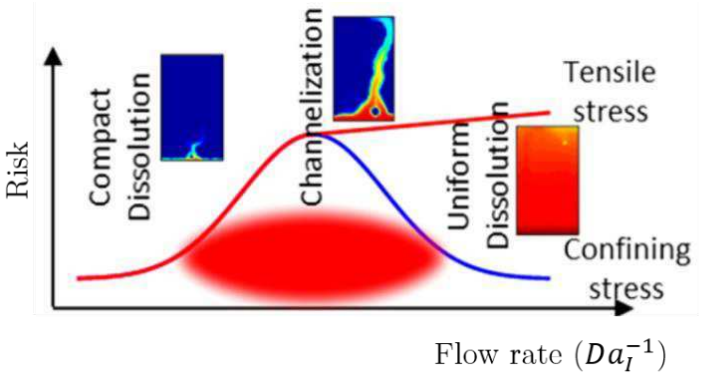


Figure 1-21 : Schéma interprétatif de l'évolution du risque de fuite en fonction du débit dans une fracture avec ouverture variable, soumise à de la dissolution. Da_I est le nombre de Damköhler (équation (1-20)). Dans Deng et al. (2018b).

L'impact de la précipitation sur le plan de fracture est plus complexe, car contrairement à la dissolution, le *feedback* avec les flux est négatif, et la perméabilité de fracture peut très vite être réduite avec peu d'éléments précipités (Vaughn, 1987). Singurindy and Berkowitz (2005) ont observé que la transmissivité de fracture baissait plus vite dans une fracture rugueuse que dans une fracture lisse. Chaudhuri et al. (2008) observent des bandes de précipitation perpendiculaires à la direction du flux dans des fractures avec distribution d'ouvertures et soumises à un gradient de température (Figure 1-23c – cas II). Ceci laisse de larges régions de la fracture ouvertes mais stagnantes (zéro flux).

1.3.2.2. Impact de la température

Les variations de températures ont généralement un impact fort sur les réactions chimiques, car la température modifie l'équilibre chimique. Ainsi un fluide initialement à l'équilibre, qui voit sa température modifiée lors de son transport, engendrera souvent de la précipitation ou de la dissolution. Ceci va dépendre de la solubilité du minéral dans l'eau. Par exemple, la silice et le quartz ont leur solubilité qui augmente avec la température, et auront donc tendance à précipiter lorsque le fluide refroidit. La calcite, à l'inverse, a sa solubilité qui diminue avec la température et précipite donc lorsque la température augmente (Bächler & Kohl, 2005). La question de l'impact des gradients de température sur l'évolution future des fractures est importante pour des application industrielles, telle que l'enfouissement de déchets radioactifs qui génèrent de la chaleur (Figure 1-22) (Serrano et al., 2008), ou dans les systèmes géothermiques (Bächler & Kohl, 2005; Griffiths et al., 2016).

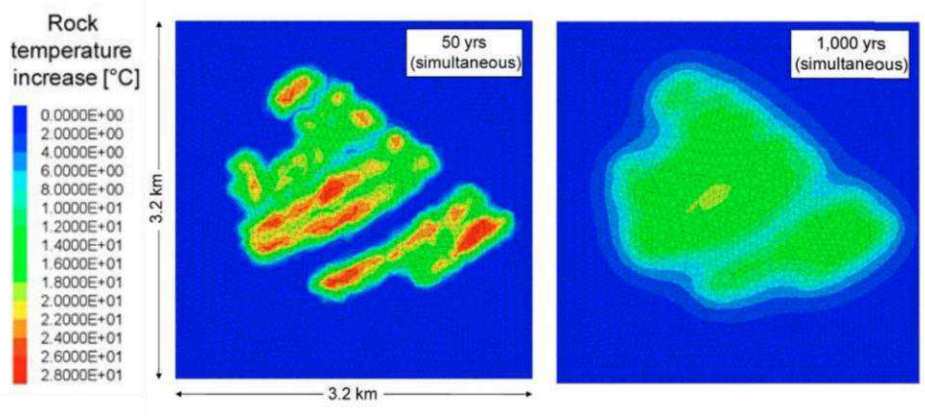


Figure 1-22 : Estimation de variation de températures autour des canisters contenant les déchets radioactifs à Forsmark. Une augmentation de 28 °C est prédite. Dans SKB (2011).

Une majorité de minéraux observés dans les fractures sont associés à des circulations hydrothermales, c'est-à-dire des fluides chauds provenant de la croute terrestre profonde et

qui remontent vers la surface plus froide. De nombreuses études évaluent les circulations hydrothermales en lien avec la structure géologique des fractures et failles, dans le but d'évaluer les gisements de minerais (Blundell et al., 2003; Bouchot et al., 2005; Chi & Xue, 2011). Certaines études montrent notamment que les dépôts hydrothermaux se forment principalement aux terminaisons des failles/fractures, là ou des conduits restent ouverts à cause de la concentration de contrainte et des interactions avec d'autres failles/fractures (*jogs*) (Curewitz & Karson, 1997; Sibson, 1996; Zhang et al., 2008).

Beaucoup d'expériences évaluent l'évolution de l'ouverture d'une fracture dans des conditions où un liquide chaud la traverse (Bourg et al., 1985; Moore et al., 1994; Okamoto et al., 2017; Vaughn, 1987) (Figure 1-23a). De manière générale, plus la température est élevée plus les changements sont rapides. Des expériences étudient aussi le couplage de la température avec d'autres paramètres comme la contrainte, et montrent qu'une fracture peut significativement se fermer sous ce type de couplage. On parle de couplage THMC (thermal, hydrologique, mécanique, et chimique) (Lima et al., 2019; Min et al., 2009; Rutqvist, 2015; Yasuhara et al., 2016).

Des modèles numériques sont également développés pour prédire l'impact de la température (Chaudhuri et al., 2008; Ghassemi & Kumar, 2007; Lowell et al., 1993). Lowell et al. (1993) et Martin and Lowell (2000) étudient les taux de fermeture par silice de fractures verticales correspondant aux zones de remontée des fluides hydrothermaux (Figure 1-23b). Ils proposent des solutions analytiques de ce taux de fermeture, où le flux ne change pas, et des simulations numériques intégrant la diminution des flux à mesure que la fracture se ferme. Chaudhuri et al. (2008) et Chaudhuri et al. (2012) étudient aussi l'impact des gradients de température mais sur des fractures rugueuses (Figure 1-23c). Ils évaluent notamment comment l'orientation de la direction de l'écoulement par rapport à celle du gradient de température impacte l'évolution de la fracture. Lorsqu'ils sont dans la même direction, des chenaux de dissolution se créent (cas I). En directions opposées, des bandes de précipitation réduisent drastiquement les flux (cas II). Orientés à 90°, précipitation et dissolution apparaissent et des chenaux se forment à 45° de la direction de l'écoulement (cas III).

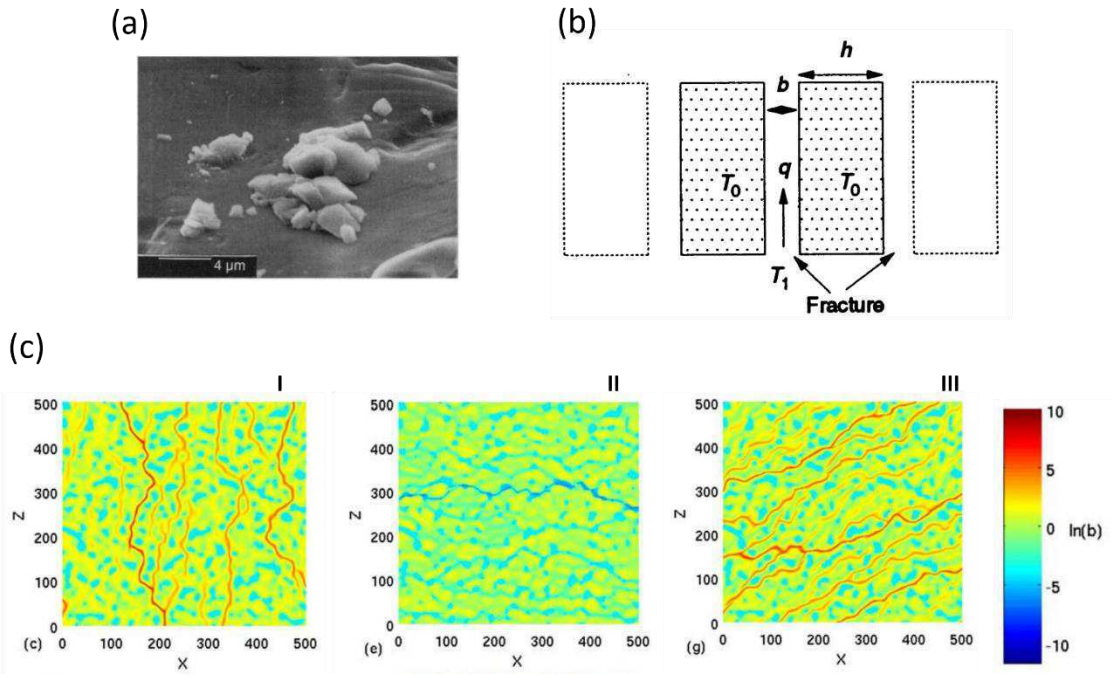


Figure 1-23 : Impact de la température sur l'évolution d'une fracture. (a) Cristaux d'albite déposés sur la surface d'une fracture. Dans Moore et al. (1994). (b) Illustration schématique montrant la remontée d'un fluide hydrothermal dans une fracture verticale. Dans Lowell et al. (1993). (c) Simulations de précipitation/dissolution dans une fracture rugueuse, pour différents angles entre la direction de l'écoulement et celle du gradient de température. Dans Chaudhuri et al. (2008). La couleur quantifie l'ouverture ***b****.*

1.3.2.3. Impact de la contrainte

La contrainte est une composante importante du colmatage des fractures puisque, appliquée perpendiculairement à la fracture (contrainte normale), elle les referme mécaniquement et engendre des processus de dissolution concentrés au niveau des aspérités de contact de la fracture (Figure 1-24b). De nombreuses expériences montrent ce phénomène en mesurant l'évolution de la déformation normale à la fracture en même temps que sa perméabilité, que ce soit pour des roches carbonatées (Durham et al., 2001; Elkhoury et al., 2013; Ellis et al., 2013; McGuire et al., 2013) ou des roches ignées (généralement granitiques) (Aben et al., 2017; Lima et al., 2019; Lu et al., 2018; Yasuhara et al., 2011). Globalement la perméabilité décroit drastiquement, mais certaines expériences montrent que des chenaux importants peuvent persister malgré le fait que la déformation n'évolue plus (Aben et al., 2017).

Deux phénomènes principaux en lien avec la contrainte sont explorés dans la littérature. Le premier, appelé « *self-healing* », est plutôt étudié pour des *micro-cracks*. Sous l'action de la contrainte, un réarrangement des masses très local apparait au niveau des bords (*tips*) des *micro-cracks* (Figure 1-24a) (Brantley et al., 1990; Hickman & Evans, 1987; Smith & Evans,

1984). Le second phénomène est la dissolution sous contrainte (« *pressure solution/dissolution* » en anglais) qui a lieu au niveau des aspérités (Figure 1-24b). Associé à des processus de transport diffusif et advectif, ce phénomène peut produire des éléments qui peuvent précipiter plus loin, tout en fermant la fracture sous l'effet de la contrainte (Gratier, 2011; Gratier et al., 2003; Gratier et al., 2014; Mahmoudzadeh et al., 2016; Neretnieks, 2014; Renard et al., 2000; Rutter, 1976).

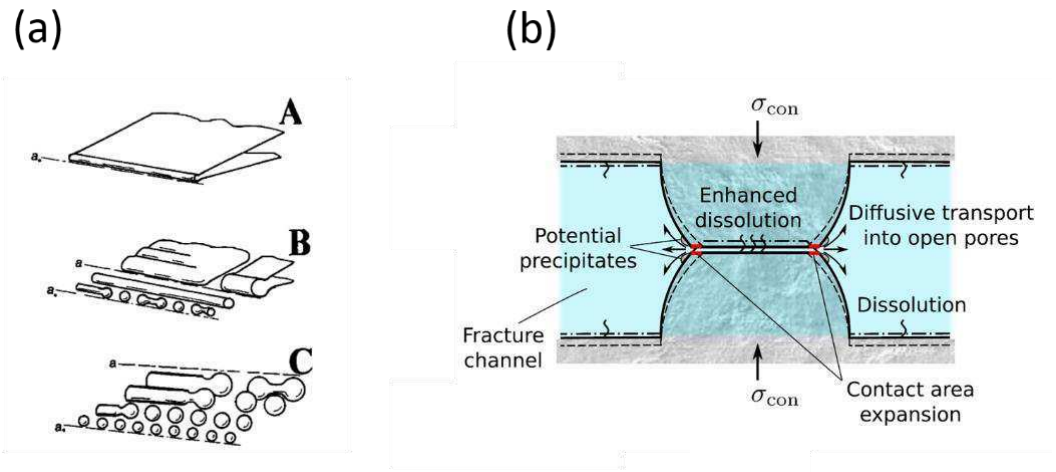


Figure 1-24 : Evolution d'une fracture sous l'effet de la contrainte. (a) Phénomène de « self-sealing » d'un micro-crack. Dans Smith and Evans (1984). (b) Dissolution sous contrainte (pressure solution/dissolution) au niveau d'une aspérité de fracture. Dans Lu et al. (2018).

Des modèles numériques permettent de prédire comment la perméabilité d'une fracture rugueuse évolue sous l'effet de la dissolution sous contrainte (Ameli et al., 2014; Lang et al., 2015; Lu et al., 2018). Ces modèles montrent une compétition entre différents effets qui peuvent à terme ralentir la fermeture de la fracture et laisser des chenaux ouverts : 1) l'augmentation des surfaces de contact, à mesure que la pression dissolution a lieu, diminue l'impact de la contrainte, 2) la création de chenaux et de zones stagnantes peut limiter la diffusion et la dissolution aux aspérités. Selon la cinétique de la réaction de dissolution (relativement aux flux), ce phénomène peut mener soit à une ouverture de la fracture, soit à une fermeture (Figure 1-25) (Ameli et al., 2014).

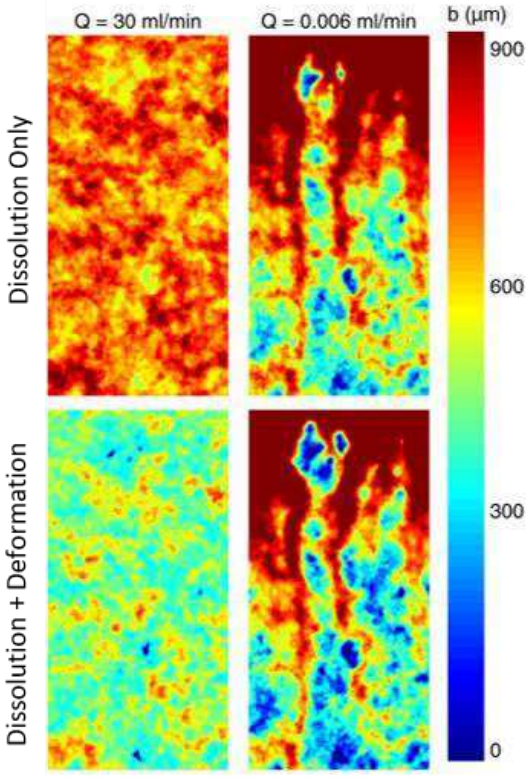


Figure 1-25 : Simulation numérique de l'évolution d'une fracture rugueuse sous l'effet de la dissolution sous contrainte (pression solution/dissolution). A gauche, le débit est élevé. A droite, le débit est faible. Dans Ameli et al. (2014).

1.3.3. Colmatage des fractures et déformations tectoniques : l'exemple du cycle sismique

Sous la surface, la manière dont sont distribuées les surfaces de fractures colmatées (ou à l'opposé, ouvertes) est potentiellement le résultat du cycle entre des processus de (ré)ouverture des fractures due à des contraintes mécaniques et des processus de fermeture des fractures dus à des processus de colmatage. Lei and Wang (2016) étudient l'hypothèse que les réseaux de fractures croissent jusqu'à atteindre le seuil de percolation, car l'énergie d'activation se dissiperait lorsque le système devient connecté. Ensuite, cette connectivité serait successivement réduite par des processus de colmatage et rétablie lors de nouveaux épisodes tectoniques.

Dans la littérature, l'étude du cycle sismique permet de comprendre et de modéliser de telles évolutions sur des échelles de temps relativement courtes (humaines). De nombreuses études enregistrent des évolutions de perméabilité caractéristiques (Manga et al., 2012; Montgomery & Manga, 2003; Xue et al., 2013) ainsi que des changement hydrogéochimiques des eaux (Claesson et al., 2004), qui prouvent que une partie des failles et des fractures se referment après un séisme (Figure 1-26). Les études attribuent cette récupération de la

perméabilité à des processus mécaniques (compaction), mais aussi à des processus de colmatage (Aben et al., 2017; Claesson et al., 2007; Gratier et al., 2003). Dans ces systèmes, les processus de colmatage assistés par la contrainte, comme la pression solution, semblent jouer un rôle très important (voir section 1.3.2.3.) (Gratier, 2011; Gratier et al., 2014; Yasuhara, 2005). Les temps caractéristiques du colmatage peuvent varier d'un site à l'autre ou d'un cycle à l'autre à cause des condition physico-chimiques : température, pression, nature des éléments chimiques (Gratier, 2011; Yehya & Rice, 2020). Ils sont aussi dépendants de l'ouverture des fractures/failles et de la manière dont les fluides circulent dans le réseau, ce qui nécessite de modéliser la géométrie du réseau de fracture/failles (Ben-Zion & Sammis, 2003; Caine & Forster, 1999; Zhu et al., 1995). Dans ce domaine d'application, l'étude de ces temps caractéristiques permet de prédire le temps nécessaire pour reconstruire la résistance mécanique du système et les pressions de fluides (lorsque le système devient faiblement connecté), afin de modéliser l'enclenchement d'un prochain séisme (Gratier, 2011; Gratier et al., 2003; Olson et al., 2009; Sibson, 1992; Sibson, 2003).

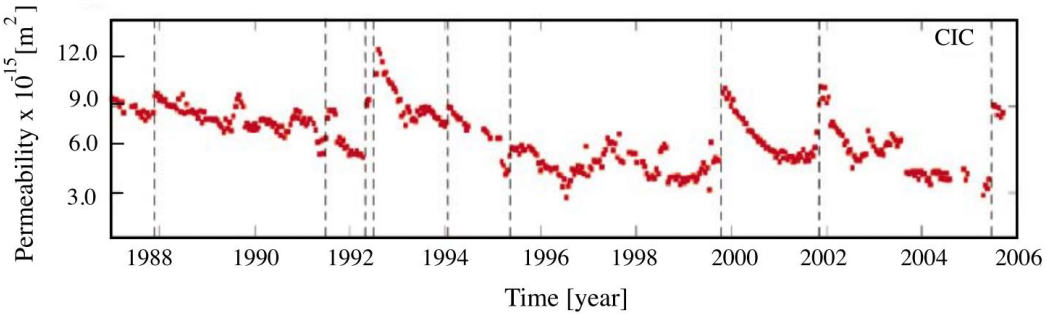


Figure 1-26 : Mesures de changement de perméabilité basée sur des réponses de niveau d'eau au cycle des marées en Californie du Sud. Les lignes verticales indiquent des seïsmes. Dans Manga et al. (2012).

1.4. Positionnement du sujet de thèse

Dans la section 1.2. , un état de l'art sur la manière de modéliser la géométrie des réseaux de fractures et leurs propriétés hydrauliques a été proposé. Nous y avons vu que la connectivité est une notion clé pour leur caractérisation. Celle-ci a principalement été étudiée en lien avec la géométrie de l'ensemble du réseau. Cependant, compte tenu de l'importance des processus de colmatage dans ces systèmes, il est probable que cette connectivité n'est qu'apparente et surestime la connectivité réelle.

La proportion de surfaces colmatées peut être facilement estimée à partir de données de terrain. Nous verrons que pour le site de Forsmark (site d'enfouissement Suèdois), les données de puits indiquent une proportion de surfaces colmatées d'environ 80% en moyenne (chapitre 4). Cependant, la manière dont elles sont distribuées dans le réseau reste inconnue et joue potentiellement un rôle critique sur la connectivité et les écoulements. La distribution peut être corrélée à des paramètres de fracture, tels que la taille ou l'orientation. Elle peut être également caractérisée par un colmatage partiel des fractures. Il est important de noter qu'une corrélation avec la taille de fracture devrait grandement influencer la connectivité du réseau. En effet, nous avons vu que le paramètre de percolation, qui quantifie cette connectivité, est proportionnel à la taille de fracture au cube (équation (1-10) pour un réseau en 3-dimensions). A proportion de surface colmatée égale dans le réseau, cette relation donne donc un poids fort des grandes fractures sur la connectivité, si celles-ci restent prioritairement ouvertes.

Un moyen pour contraindre la distribution du colmatage est de comprendre les conséquences sur les propriétés hydrauliques du réseau de fracture et de pouvoir les comparer à des données de flux. Ce type de méthode a déjà été exploitée dans certaines études. Le Goc et al. (2018) étudient un modèle DFN dans lequel les grandes fractures restent prioritairement ouvertes et montre notamment que ce modèle peut expliquer certains effets d'échelle mesurés sur les données de flux des puits de Forsmark (Figure 1-27a). Follin et al. (2014) optimisent la distribution des tailles dans des modèles DFN Poissoniens représentant les fractures ouvertes, en comparant, pour chaque modèle de tailles, la densité des fractures connectées dans les modèles DFN (celles qui relient le puits aux bords du système) à la densité de fractures ayant un flux dans les puits réels (Figure 1-27b). Ces études permettent de mieux comprendre comment le colmatage est organisé dans le réseau, et montrent l'importance de considérer une corrélation avec la taille de fracture. Cependant, les données de flux sont souvent assez éparses et rares en comparaison à la taille du domaine que l'on souhaite étudier et à la complexité du réseau de fractures. Il est donc nécessaire de combiner cette information à une compréhension des processus à l'origine de la distribution du colmatage et à des mesures directes des surfaces colmatées.

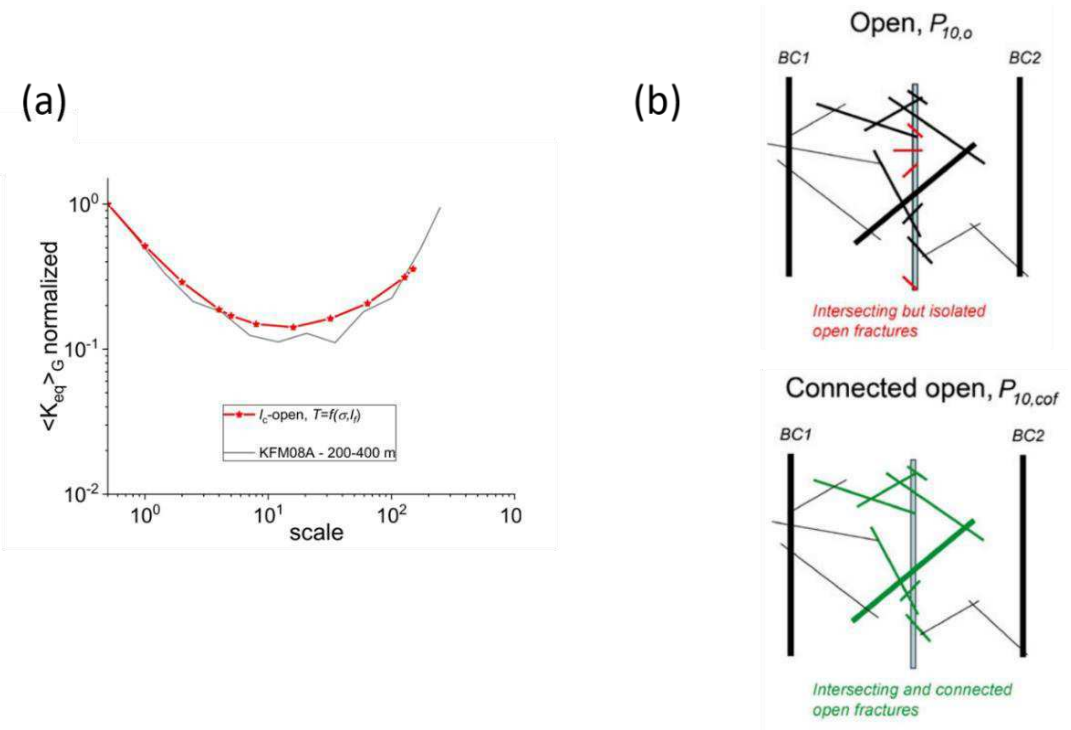


Figure 1-27 : (a) Comparaison d'effets d'échelle sur la perméabilité mesurés dans le puits KFM08A de Forsmark et dans des modèles DFN où la proportion de surfaces ouvertes est prioritairement dans les grandes fractures. Dans Le Goc et al. (2018). (b) Illustration de l'ensemble des fractures ouvertes (haut) et des fracture connectée (bas) intersectant un puits. Dans Follin et al. (2014).

Nous avons vu dans la section 1.3. que le colmatage pouvait s'organiser spatialement selon plusieurs paramètres physiques : flux, contrainte, température. Il peut laisser ouvert certains chenaux laissant donc la fracture transmissive, ou bien créer des barrières, réduisant les flux à zéro. Dans la littérature, la question est essentiellement étudiée à l'échelle de la fracture, et pratiquement pas à l'échelle d'un réseau de fractures. Les réseaux de fractures sont des structures complexes (section 1.2.1.2.), qui nécessitent des modèles capables de représenter les fractures à toutes les échelles, ce qui peut résulter en des simulations demandant de larges ressources numériques. Une difficulté est donc de simuler un modèle de colmatage à la fois assez simple pour qu'il ne soit pas numériquement trop mobilisant, et qui puisse modéliser des phénomène complexes, comme par exemple un *feed-back* entre les processus de précipitation et les flux. En plus des processus de colmatage, des processus d'ordre mécanique, liés aux épisodes de déformations tectoniques, sont également à prendre en compte puisqu'ils peuvent réactiver (donc réouvrir) les fractures (section 1.3.3.). Une motivation à l'étude de ces processus est d'évaluer de possibles corrélations avec la taille de fracture, car celles-ci sont difficilement mesurables directement à partir de données. Les données d'affleurement en 2-dimensions qui permettraient d'accéder à cette information sont trop

biaisées par l'effet de l'érosion naturelle ou du dynamitage (*blasting*) sur l'état des fracture intersectant les parois.

Au long de la section 1.2. , nous avons présenté les notions de GeoDFN, qui est le modèle géométrique de l'ensemble des fractures, et d'HydroDFN qui est le modèle de transmissivité des fractures. L'étape intermédiaire manquante est l'établissement d'un modèle des surfaces de fractures ouvertes (non-colmatées), appelé OpenDFN, qui consiste à modéliser leur proportion et leur distribution statistique dans le réseau (Figure 1-28). C'est sur cette étape que ce concentre ce manuscrit.

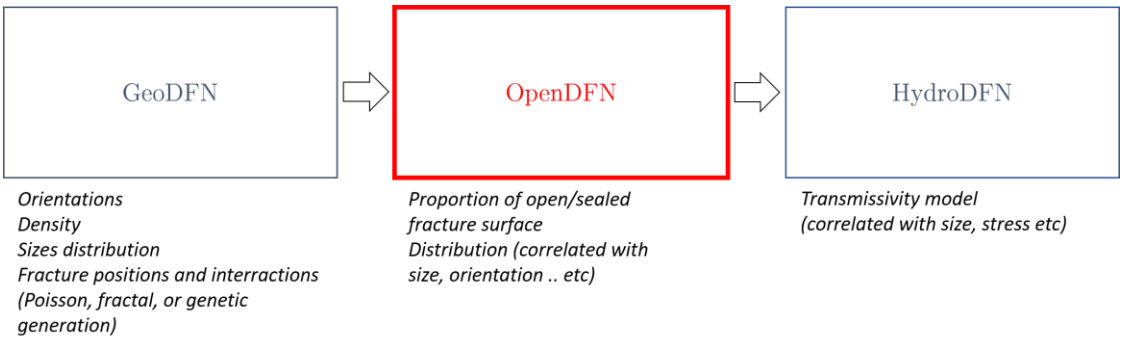


Figure 1-28 : Méthode des trois étapes pour établir un modèle hydrologique de réseau de fracture : modèle géométrique (GeoDFN), modèle des surfaces ouvertes (OpenDFN), modèle des transmissivités (HydroDFN).

Les objectifs de ce travail de thèse sont résumés comme suit :

- Identifier les processus majeurs à l'origine de la distribution des surfaces ouvertes/colmatées préexistantes, avec une attention donnée aux processus du site de Forsmark (Suède).
- Etudier des modèles numériques simples de calcul du colmatage qui pourront être appliqués à des modèles larges de réseaux de fractures.
- Proposer une (ou des) distribution(s) du colmatage dans des modèles de réseaux de fractures (OpenDFN).
- Evaluer les conséquences de ces distributions du colmatage sur la connectivité et les propriétés hydrauliques des réseaux de fractures.

1.5. Organisation du manuscrit

Ce manuscrit de thèse est organisé en deux grandes parties. La première porte sur l'utilisation des modèles numériques pour contraindre la distribution du colmatage. Un premier chapitre (chapitre 2) est consacré à la question de la simplification des calculs de flux dans un modèle de DFN via l'utilisation d'un graphe, structure faite de simples nœuds et liens, et permettant de préserver la topologie complexe du réseau. Ensuite, le second chapitre (chapitre 3) porte sur l'étude d'un modèle simple de précipitation dans les fractures, dans lequel les taux de précipitation sont calculés à partir d'un modèle de transport réactif. Notons que cette étude constitue une étude générique. Elle ne se base pas sur des processus précis identifiés sur le site de Forsmark. Dans ce chapitre, une première analyse porte sur comment ces taux de précipitations tendent à être corrélés à la taille de fracture. Ensuite, nous abordons la question de l'utilisation du graphe comme outil efficace pour modéliser le couplage entre les flux et les changements géométriques induits par la précipitation.

La seconde partie porte sur l'évaluation de la distribution du colmatage à partir de données de terrain. Le chapitre 4 porte sur l'analyse des données de puits du site de Forsmark. Dans ces analyses, nous observons que la distribution des surfaces ouvertes (complémentaire aux surfaces colmatées) est principalement impactée par des processus mécaniques de réouverture des fractures, qui sont relativement récents et postérieurs aux processus qui ont majoritairement colmaté les fractures. Nous proposons un modèle de cette distribution corrélé au champ de contraintes actuel appliqué à Forsmark. L'impact de ce modèle sur les propriétés hydrauliques des réseaux de fractures est évalué et discuté dans le chapitre 5.

Le chapitre 6 propose une synthèse et une discussion des travaux réalisés. Des perspectives de travail sont proposées, afin d'améliorer la modélisation de la répartition du colmatage dans les milieux fracturés.

Partie I :

Distribution du colmatage dans les réseaux de fractures. Eclairage à partir de modèles numériques

Chapitre 2

Estimation des flux dans les réseaux de fractures à partir d'une structure de graphe

Table des matières :

2.1. Introduction générale sur l'utilisation des graphes appliqués aux réseaux de fractures....52

2.2. Résumé de l'article....54

2.3. Article : „A graph-based flow modeling approach adapted to multiscale Discrete Fracture Network models "....56

1. Introduction....58
2. Methodology....60
3. Edge conductance....63
4. Ability of graphs to estimate flow in large DFN....68
5. Conclusion....76
6. Appendices....78

2.4. Travaux complémentaires....80

2.4.1. Répartition des flux sur une fracture ayant plusieurs intersections....80

2.4.2. Déconstruction du graphe des intersections pour éviter la redondance des liens....85

2.5. Conclusions et perspectives sur l'utilisation des graphes....88

2.1. Introduction générale sur l'utilisation des graphes appliqués aux réseaux de fractures

La topologie des réseaux de fractures, c'est-à-dire la manière dont les fractures sont connectées aux autres, est un élément clé à la description de la perméabilité et de l'organisation des chemins d'écoulement. Cette topologie est complexe car les tailles de fractures s'étendent sur plusieurs ordres de grandeur, rendant les propriétés hydrologiques de ce type de milieu très hétérogènes et multi-échelles (voir chapitre 1). Dans ce contexte, l'étude des réseaux de fractures par une approche dite de « graphe » fait l'objet de nombreuses recherches (Viswanathan et al., 2018). Les graphes sont des structures simples composées d'un ensemble d'éléments discrets, appelés « nœuds », reliés par un ensemble de « liens » selon des règles spécifiques (Figure 2-1a). Ils permettent une représentation simplifiée du réseau de fractures et de ses écoulements à l'échelle topologique (c'est-à-dire à l'échelle de la structure du réseau mais négligeant l'échelle détaillée des plan de fractures). Dans les réseaux de fractures, deux types d'éléments discrets peuvent être représentés par des nœuds : les fractures ou les intersections entre fractures. Les liens représentent alors respectivement les intersections reliant les fractures ou le plan de fracture reliant les intersections (Figure 2-1b,c). On utilisera dans ce chapitre le terme de « graphe des fractures » et « graphe des intersections » pour qualifier ces deux types de graphes.

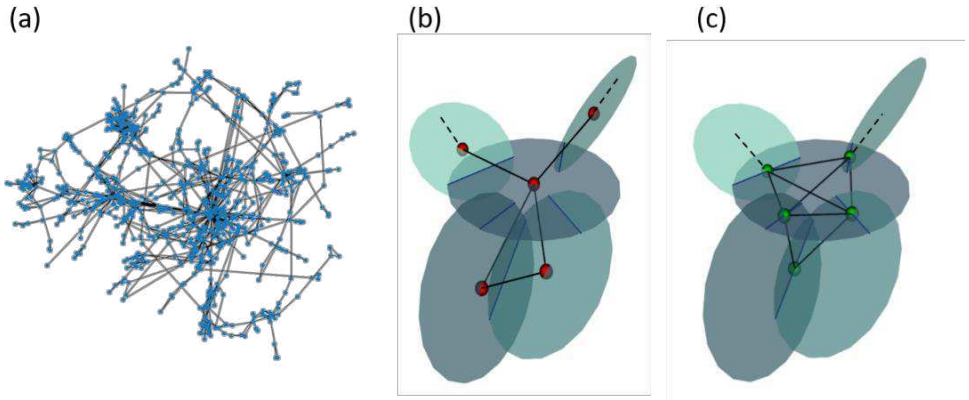


Figure 2-1 : (a) Exemple de graphe. (b) DFN avec un graphe des fractures et (c) avec un graphe des intersections.

Cette approche a d'abord permis la caractérisation topologique du réseau de fracture en ayant accès à une riche littérature issue de la Théorie des Graphes (Albert & Barabási, 2002). Ainsi, des indicateurs tels que, par exemple, le *clustering*, l'*efficiency* (Latora & Marchiori, 2001), ou l' *assortativity* (Newman, 2002) (Table 2-1) ont été utilisés pour caractériser des réseaux directement issus de données d'affleurement (Valentini et al., 2007a,

b), comparer ces données à des modèles DFN (Andresen et al., 2013; Vevatne et al., 2014), ou encore comparer différents modèles DFN entre eux (Hope et al., 2015). Par exemple, Valentini et al. (2007a, 2007b) et Andresen et al. (2013) montrent que les réseaux de fractures issus d'affleurement (en deux dimensions) sont caractérisés par une topologie dite « *small-world* » (Watts & Strogatz, 1998), c'est-à-dire caractérisée par des indicateurs d'*efficiency* et de *clustering* élevés, et donc capable de transférer rapidement une quantité (ici un fluide) d'un endroit à l'autre du réseau. Ces études montrent aussi que ces réseaux sont caractérisés par une topologie dite *dissassortative,* c'est-à-dire que les nœuds ayant un certain degré ne tendent pas à être connectés aux nœuds de même degré. Hope et al. (2015) montrent que cette caractéristique topologique est observée dans des modèles DFN où la position des fractures est contrainte par un modèle de croissance et d'arrêt lorsqu'elle rencontre une autre fracture (Davy et al., 2013) mais n'est pas observée dans les modèle DFN où la position des fractures est aléatoire (DFN Poissonien - Poisson (1837)).

Table 2-1: Quelques exemples d'indicateurs de graphe courants, utilisés pour l'analyse des réseaux de fractures. N *est le nombre total de nœuds.*

Indicateur	Formule	Description
Degré du nœuds, k_i	-	Nombre de voisins d'un nœud i. La distribution $p(k)$ est couramment utilisée.
Efficiency, E	$E = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{(i,j)\epsilon N,\ i\neq j} \frac{1}{d_{ij}}$	Mesure de l'efficacité du réseau à relier deux nœuds. d_{ij} est le nombre minimum de liens à traverser entre deux nœuds i et j.
Clustering, C	$C = \frac{1}{N} \sum_{i\in N} \frac{2.K_i}{k_i(k_i-1)}$	Mesure la probabilité que deux nœuds soient connectés sachant qu'ils ont un voisin commun. K_i est le nombre de connections directes entre les voisins du nœud i.
Assortativity, r	-	Mesure le mélange des degrés, c'est-à-dire si des nœuds de degré donné tendent à être connecté aux même degrés (*assortative*, $r > 0$) ou pas (*dissassortative*, $r < 0$).

L'approche graphe est aussi exploitée pour alléger les calculs numériques faits à partir de modèles DFN. En effet, la description d'un milieu géologique nécessite souvent un nombre très élevé de fractures, afin de représenter une large gamme de tailles de fractures ($m \rightarrow km$). Il est difficile de savoir à l'avance quelle gamme de tailles participe le plus à la connectivité et aux flux du réseau (Bour & Davy, 1997). Les problématiques liées au maillage de cette structure complexe (Fourno et al., 2019; Laug et al., 2018) et la simulation de flux et transport représente alors un calcul numérique lourd. De plus, les modèles DFN sont dans la majorité stochastiques. Plusieurs réalisations sont donc faites pour quantifier les incertitudes sur la quantité mesurée. Dans ce contexte, la transformation d'un DFN en un graphe permet

d'identifier rapidement l'ensemble des fractures portant les chemins d'écoulement les plus rapides en utilisant des algorithmes, dits « de plus courts chemins » (Dijkstra, 1959; Yen, 1971). L'ensemble de ces fractures forme ce qu'on appelle un « *backbone* » (Peacock et al., 2016). Cela permet d'effectuer des simulations sur un DFN réduit (Berrone et al., 2020; Hyman et al., 2018; Hyman et al., 2017).

Enfin, une autre méthode consiste à directement résoudre les flux et transport sur le graphe (Dershowitz & Fidelibus, 1999; Karra et al., 2018). Cette méthode, moins précise que la simulation complète DFN, produit cependant très rapidement des estimations de flux et de temps de transport qui peuvent être utilisées pour quantifier les incertitudes sur une quantité mesurée (*multi-fidelity Monte-Carlo* - Berrone et al. (2020); O'Malley et al. (2018)). La simulation de flux transitoire a également montré des résultats prometteurs avec cette technique (Srinivasan et al., 2020). Un point essentiel est d'attribuer aux liens du graphe des propriétés hydrologiques qui soient équivalentes aux fractures qu'ils représentent. Ceci est l'objet de l'article publié pendant ces travaux de thèse (Doolaeghe et al., 2020) et présenté dans les parties 2.2 et 2.3. La partie 2.4 présente des travaux complémentaires effectués pendant la thèse en lien avec cet article.

2.2. Résumé de l'article

Dans cette étude, nous explorons la possibilité d'utiliser un graphe pour estimer rapidement les flux d'un DFN, dans le cas où les ouvertures sont constantes par fracture. Une conductance ($m^2.s^{-1}$) est attribuée au liens du graphe pour les rendre hydrauliquement équivalents aux fractures. Cette grandeur représente la constante qui relie un flux à un différentiel de charge. Nous proposons une nouvelle définition analytique de cette conductance qui inclut notamment la taille de fracture (Figure 2-4) et est plus fidèle à la surface d'écoulement du plan de fracture que dans des études précédentes (Dana et al., 2020; Karra et al., 2018; Srinivasan et al., 2020). La solution est validée en la comparant à des simulations numériques dans lesquelles une unique fracture avec deux intersections est maillée, et le flux est calculé entre ces intersections. Plusieurs géométries faisant varier la position et la taille des intersections, ainsi que la distance entre elles, sont testées, et montrent l'efficacité de cette solution pour une fracture ayant deux intersections.

La conductance est ensuite testée pour de larges DFNs (de 10^3 à 10^5 fractures). Un graphe des fractures et un graphe des intersections, dans lesquels la nouvelle conductance est assignée aux liens, sont dérivés des DFNs et utilisés pour calculer les flux (voir Karra et al. (2018) pour la méthode). Les résultats sont comparés aux simulations complètes DFN à deux

échelles : à l'échelle du réseau entier, en comparant les perméabilités équivalentes K, et à l'échelle de chaque fracture, en comparant les flux totaux par fracture Q_f (équation (9)). Cette dernière mesure permet de vérifier si la topologie des écoulements est reproduite par le graphe. Une hypothèse est que la nouvelle conductance que nous avions définie et validée pour un cas simple de fracture avec deux intersections puisse présenter des résultats biaisés pour des DFNs fortement connectés dans lesquels les fractures ont beaucoup d'intersections. Cet effet serait dû au partage des flux sur la surface de fracture entre les différentes intersections. Pour évaluer cette hypothèse, la méthode est testée sur un ensemble de DFNs, en faisant varier leur structure topologique et leur densité.

Nous montrons que selon le type de graphe utilisé les résultats sont assez différents. Le graphe des fractures présente des résultats peu biaisés en ce qui concerne la mesure de la perméabilité K même pour les réseaux les plus connectés. Cependant, à cause de son architecture, il ne respecte pas la structure les écoulements et crée parfois des bras-morts ($Q_f = 0$) là où il ne devrait pas y en avoir. A l'inverse, le graphe des intersections préserve la structure complète des écoulements, mais surestime systématiquement les flux même pour les DFNs peu connectés. Cette surestimation est due à la forte redondance des liens, qui forment des cliques sur une fracture (tous les nœuds étant tous connectés deux à deux). Pour remédier à ce problème, nous introduisons un facteur de correction de la conductance (« *Multiple-Paths* » correction), qui permet alors d'obtenir des estimations de flux correctes avec le graphe des intersections.

Les résultats obtenus montrent donc que le modèle de conductance reste robuste même pour des DFN très connectés, avec des prédictions de flux par le graphe très raisonnables ($\sim \times 2 - 2.5$ au maximum). L'article préconise plutôt l'utilisation d'un graphe des intersections pour reproduire la structure complète des écoulements.

2.3. Article : „A graph-based flow modeling approach adapted to multiscale Discrete Fracture Network models "

Les résultats de cet article ont été présentés sous forme d'un oral lors du congrès international AGU (*American Geophysical Union*) qui a eu lieu à San Francisco du 9 au 13 décembre 2019 (lien vers l'abstract :
https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019AGUFM.H34A..01D/abstract).

Dans le cadre de cette étude, les outils numériques, tels que la construction des graphes et la résolution des flux sur un graphe, ont été développés par le doctorant au sein du logiciel *DFN.Lab*
(lien vers le tutoriel d'utilisation des graphes :
https://nbviewer.jupyter.org/urls/gitlab.com/fractorylab/dfnlab/-/raw/master/Tutorials/013-Graphs.ipynb/%3Fflush_cache%3Dtrue).

A Graph-based flow modeling approach adapted to multiscale Discrete-Fracture-Network models

Diane Doolaeghe[1,2,*], Philippe Davy[1], Jeffrey D. Hyman[3],
Caroline Darcel[2]

[1] Géosciences Rennes, OSUR, Université de Rennes 1, 35042 Rennes, France
[2] Itasca Consultants S.A.S., Ecully, France
[3] Computational Earth Science Group (EES-16), Earth and Environmental Sciences Division, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, USA

Article published in Physical Review E
Received the 7 July 2020 and published the 20 November 2020

doi: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.053312

Abstract

Fractured rocks are often modeled as multiscale populations of interconnected discrete fractures (Discrete Fracture Network, DFN). Graph representations of DFN reduce their complexity to their connectivity structure by forming an assembly of nodes connected by links (edges) to which physical properties, like a conductance, can be assigned. In this study, we address the issue of using graphs to predict flow as a fast and relevant substitute to classical DFN. We consider two types of graphs, whether the nodes represent the fractures (fracture-graph) or the intersections between fractures (intersection-graph). We introduce an edge conductance expression that accounts for both the portion of the fracture surface that carries flow and fracture transmissivity. We find that including the fracture size in the expression improves the prediction of flow compared to expressions used in previous studies that did not. The two graph types yield very different results. The fracture graph systematically underestimates local flow values. In contrast, the intersection graph overestimates the flow in each fracture because of the connectivity redundancy in fractures with multiple intersections. We address the latter issue by introducing a correction factor into the conductances based on the number of intersections on each fracture. We test the robustness of the proposed conductance model by comparing flow properties of the graph with high-fidelity DFN simulations over a wide range of network types. The good agreement found between the intersection graph and test suite indicates that this representation could be useful for predictive purposes.

1. Introduction

Graphical representations of complex systems have seen rapidly growing interest over the last few decades (Albert & Barabási, 2002). Graphs are mathematical structures where a set of discrete entities are represented as nodes connected by a set of edges based on a particular rule. This compact mathematical structure enables the detailed study of the connectivity of an ensemble of connected discrete objects and has been applied to a wide range of fields including, for example, the World Wide Web (Barabási et al., 2000), scientific collaborations networks (Newman, 2001), and biologic systems (Jeong et al., 2001).

Recently, graphs have gained attention in the scientific field of subsurface fracture network modeling (Andresen et al., 2013; Hope et al., 2015; Valentini et al., 2007b). In environments where the matrix permeability is negligible, like in crystalline rocks, fracture networks define permeability and flow path organization. These fracture networks are complex and are composed of intersecting discrete fractures, that are characterized by a wide distribution of sizes and apertures. More specifically for crystalline rocks, fracture sizes likely follow a power-law distribution (Bonnet et al., 2001). The resulting multiscale structure makes it difficult to define a characteristic length scale and perform a classic hydraulic characterization with continuum approaches (Freeze, 1975; Long et al., 1982; Wong et al., 2020). In contrast to more homogeneous subsurface systems, details of the network structures are a principal control of the flow of fluids therein (Davy et al., 2006a; Hyman et al., 2019). The critical role played by the network structure on the flow brings, therefore, a growing interest to use graphs for querying the fracture network hydraulic properties. Graphs provide a compact framework for improved characterization of the structure of fracture networks, which is critical for numerous applications including the disposal of spent nuclear fuel (Selroos & Follin, 2014), hydrogeology (Neuman, 2005), geothermal (Doe et al., 2014), and petroleum resources (Hyman et al., 2016; Karra et al., 2015).

The use of graphs is all the more necessary as the number of fractures required to describe a geological environment is huge. Due to the multiscale nature of fracture networks, it may be necessary to model billions of fractures to understand which fractures are significant. For instance, a realistic fracture network with conditions described in Davy et al. (2010) (power-law size distribution exponent of -4, dimensionless density of 3) has 10^9 fractures with sizes ranging from 1 m (a size that cannot be considered negligible) to 1 km (a typical size of domains for most of groundwater applications). This back-of-the-envelope calculation gives an idea of the complexity of the networks that need to be managed. The discretization of the full fracture network, as it is done in Discrete Fracture Network models (see Lei et al. (2017) for a review) poses computational problems. This is not the only reason why graphs are interesting intermediate steps in the modeling of fractured media, but it is already a strong enough reason.

Several studies have investigated the possibility of using a graph to decrease the computational burden associated with DFN flow and transport simulations. In the past, when technological progress did not afford the numerical resources necessary for DFN modeling, pipe-networks, analogous to graphs, were used as alternative supports (Cacas et al., 1990a; Cacas et al., 1990b; Dershowitz & Fidelibus, 1999; Nordqvist et al., 1992). A major issue was to render the pipe-network, composed of one-dimensional pipes hydraulically equivalent to DFN. Therefore, mixed analytical-numerical technics have been developed, like technics using the Boundary Element Method to deduce pipe conductances (Dershowitz & Fidelibus, 1999), or using the Image theory to account for impermeable fracture borders on the flow (Long et al., 1985). More recently, graphs have been used as a complement to DFN flow and transport simulations (Viswanathan et al., 2018). They have been successfully used to identify the DFN backbone, i.e. fractures participating to shortest travel times or carrying the major flows (Hyman et al., 2018; Hyman et al., 2017; Srinivasan et al., 2018; Srinivasan et al., 2019; Valera et al., 2018). They have also

been used to directly solve flow and transport (Karra et al., 2018) in order to reduce the cost associated with uncertainty quantifications (e.g. multi-fidelity Monte Carlo - O'Malley et al. (2018) - and Multilevel Monte Carlo - Berrone et al. (2020)). In these recent studies, simple analytical definitions were given as edges hydraulic attributes to preserve the rapidity (quasi-immediate) of the graph computations. A key element in creating a graph that provides similar predictions of flow and transport to the higher fidelity DFN is assigning an edge conductance that is equivalent to the fracture surface in the DFN. Previous definitions have included the physical distance between nodes (Hyman et al., 2018), and the intersection sizes (Karra et al., 2018), to simplify the flowing regions between fractures. These geometric simplifications resulted in marked differences between the DFN and graph flow models. To date, few efforts have been made to include higher-order geometric information into the graph edge conductance properties.

In the present study, we address the issue of defining an equivalent conductance for graph edges in the case of disk-shaped fractures with constant transmissivities by fracture. DFN can be transformed into two graph types: a fracture graph (Cacas et al., 1990a; Cacas et al., 1990b; Hyman et al., 2017), in which vertices represent fractures, and edges connect two intersecting fractures; and an intersection graph (Dershowitz & Fidelibus, 1999; Karra et al., 2018), in which nodes represent intersections and edges connect two intersections of the same fracture. Another possible type is the bipartite graph, in which two disjoint sets of nodes, one representing fractures and the other intersections, are connected and the former two graph types can be readily obtained (Hyman et al., 2018). In this study, we focus on the first two graph representations. We provide analytical formulations of the equivalent conductance between two fractures (for the fracture graph edges) and between two intersections (for the intersection graph edges). The conductance ($m^2.s^{-1}$) measures how effectively the fluid, subjected to a potential difference, is transported through a medium. It is related to the flow, Q ($m^3.s^{-1}$) and the hydraulic potential (head) difference, ΔH (m), with the formulation, $Q = C\Delta H$. By observing that the fracture flow field is often limited by the fracture impervious borders, we propose formulations that include fracture sizes in addition to the physical distances, intersections sizes, and fracture apertures. Considering the wide range of fracture sizes in nature, this definition can make large differences compared to previous presented ones.

Our conductance is verified against classical DFN flow simulation via comparison with flow on entirely meshed fracture surfaces. It is first verified locally using a single fracture with two intersections but varying geometries. Next, we consider DFN composed of hundreds to tens of thousands of fractures. We transform large DFN into equivalent fracture graphs and intersection graphs and resolve the flow on the graphs and DFN. The graph estimations are compared to the classic DFN flow solving at two scales: at the DFN scale, by comparing equivalent permeabilities, and at the fracture scale, by comparing the total flow exchanged by fractures (Maillot et al., 2016). The verification at the fracture scale allows us to evaluate if the internal network flowing structure is being properly represented by the graphs. As the conductance is originally defined for ideal cases of fractures having two intersections, there are biases in the graph due in part to the DFN connectivity; fractures having more than two intersections and participating in many structural paths. Therefore, we test the method on several DFN types with increasing connectivity complexity: constant fracture size DFN, powerlaw size distributed DFN, and genetic networks with small intersections (UFM – Universal Fracture Model) (Davy et al., 2013; Davy et al., 2010).

The remainder of the manuscript is organized as follows. Section 2 describes the technical aspects of the study: graph constructions, flow solving, and measurement of the flow metrics. Section 3 presents the developments of the equivalent conductances for both graph types. Section 4 presents and analyses the results for the different DFN types mentioned above. Finally, conclusions are drawn in section 5.

2. Methodology

DFN models are explicit representations of fracture networks and can be used as a support for physical simulations, including flow and transport. The way the fractures, represented by finite planar objects, intersect in the three-dimensional volume, impacts the hydrological properties of the network (Hyman et al., 2019; Maillot et al., 2016). A DFN can be either stochastically generated with probability distribution derived from the field (densities, size distribution, set of orientations - Dershowitz and Einstein (1988)) or with models mimicking the geological fracturing process (UFM - Davy et al. (2013); Davy et al. (2010)). In this study, we use the computational suite *DFN.lab* (Pinier et al., in prep.) to generate DFN in cubic systems. We generate DFN with varying properties, like the fracture size distribution or the connectivity quantified by the percolation parameter. More details on the DFN generated for this study are given later in section 4.

DFN lend themselves to the construction of graphs. Graphs are representations consisting of nodes connected by edges. One edge connects two nodes if an exchange physically exists between these nodes. The exchange intensity can be modulated by assigning attributes to the edges, like a conductance. We present in the next section the details of the construction of two graph types from a DFN, a fracture graph and an intersection graph, and the notations that we use to qualify nodes, edges, and their attributes.

2.1. Graph constructions

2.1.1. Fracture graph

Let $F = \{f_i\}$ for $i = 1,\dots,n$ denote a DFN composed of n fractures. We define a mapping φ, that transforms F into a graph $G(U,E)$. For every $f_i \in F$, there is a unique vertex $u_i \in U$:

$$\varphi: F \rightarrow u_i. \tag{1}$$

If two fractures, f_i and f_j, intersect ($f_i \cap f_j \neq \emptyset$), then there is an edge in E connecting the corresponding vertices,

$$\varphi: I = (f_i \cap f_j) \neq \emptyset \rightarrow e_{ij} = (u_i, u_j). \tag{2}$$

For every intersection between a fracture f_i and a plane boundary L, there is a unique vertex $u_{iL} \in V$,

$$\varphi: (f_i \cap L) \neq \emptyset \rightarrow u_{iL}, \tag{3}$$

and a unique edge e_{iL},

$$\varphi: (f_i \cap L) \neq \emptyset \rightarrow e_{iL} = (u_i, u_{iL}). \tag{4}$$

For every $(f_i, f_j) \in F$ and $f_i \cap f_j \neq \emptyset$, we attribute to each edge $e_{ij} \in E$ an attribute called conductance C_{ij}. A definition of C_{ij} is presented later in section 3. An image of the graph mapping φ is presented in Figure 2-2a.

2.1.2. Intersection graph

We define a second mapping ψ, that transforms F into a graph $G(V,E)$. For every $(f_i, f_j) \in F$, there is a unique vertex $v_{ij} \in V$,

$$\psi: I = (f_i \cap f_j) \neq \emptyset \rightarrow v_{ij}. \tag{5}$$

If a fracture f_i intersects two fractures f_j and f_k ($f_i \cap f_j \neq \emptyset$ and $f_i \cap f_k \neq \emptyset$), then there is an edge in E connecting the corresponding vertices,

$$\psi: \Big((f_i \cap f_j) \neq \emptyset \text{ and } (f_i \cap f_k) \neq \emptyset\Big) \rightarrow e^i_{jk} = \big(v_{ij}, v_{ik}\big). \tag{6}$$

For every intersection between a fracture f_i and a boundary L, there is a unique vertex $v_{iL} \in V$,

$$\psi: (f_i \cap L) \neq \emptyset \rightarrow v_{iL}, \tag{7}$$

and a unique edge e^i_{jL},

$$\psi: (f_i \cap L) \neq \emptyset \text{ and } (f_i \cap f_j) \neq \emptyset \rightarrow e^i_{jL} = \big(v_{ij}, v_{iL}\big). \tag{8}$$

We attribute to each edge $e^i_{jk} \in E$ a conductance C^i_{jk}. A definition of C^i_{jk} is presented later in section 3. An image of the graph mapping ψ is presented in Figure 2-2b.

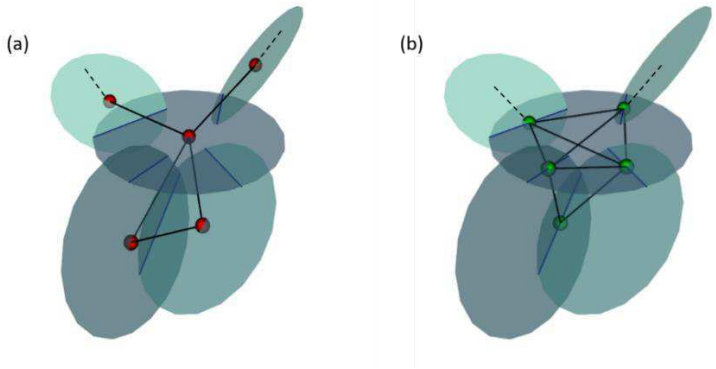


Figure 2-2: DFN and equivalent graphs. a) fracture graph, b) intersection graph.

2.2. Flow and metrics

In this section, we present how we solve flow within the DFN and graphs. Once the steady-state flow fields are obtained, we compute the following flow indicators: the bulk permeability K $(m.s^{-1})$ and the total flow exchanged by fracture Q_f $(m^3.s^{-1})$ for comparison (Maillot et al., 2016).

2.2.1. Flow solution

Steady-state flow is simulated with permeameter-like boundary conditions, i.e., two opposite faces of the system are assigned fixed head boundary conditions, and the remaining face a zero flow condition. For the reference computation, the DFN are entirely meshed and the flow is solved using a mixed hybrid

finite element method. We refer to Pinier et al. (in prep.) for details about mesh generation and flow solving. The equivalent graph flow is solved by using the methodology described in Karra et al. (2018). Below we present an outline of the method and refer to Karra et al. (2018) for more information. Boundary conditions are first provided, i.e., constant heads are attributed to the boundary vertices, and vertices corresponding to a no-flow boundary are deleted from the graph. Heads (m) are solved in the vertex set by solving the flow conservation at each vertex. Finally, edge flows ($m^3.s^{-1}$) are deduced from the edge adjacent vertex heads and the edge conductances.

In the remainder of the manuscript, we use the terminologies "complete simulation" and "graph simulation" to qualify the flow solved with respectively the complete meshed DFN and the equivalent graphs.

2.2.2. Flow metrics

In this study, we compare flow between the graph simulations and the complete simulations at two scales. At the larger of the two, the DFN scale, we compute the bulk permeability K ($m.s^{-1}$). At the smaller of the two, that of the fracture scale, we compute the total flow exchanged by fracture Q_f ($m^3.s^{-1}$),

$$Q_f = \frac{1}{2}\sum_j Q_{ij}, \tag{9}$$

with Q_{ij} ($m^3.s^{-1}$) the flow exchanged through the intersection between f_i and f_j. These metrics are provided by the *DFN.lab* suite (Pinier et al., in prep.).

In the graph simulations, the bulk permeability K is deduced from the network total flow, Q_T, and system dimensions. In the following, we give details on how we compute the fracture flow Q_f in the graphs, because the method is different in each graph type. In the fracture graph, the Q_f are deduced from the edge flows, $Q(e_{ij})$, directly equal to the intersection flows,

$$\varphi: Q_{ij} = Q(e_{ij}) \tag{10}$$

In the intersection graph, the intersection flow Q_{ij} is obtained differently because in this graph type intersections are represented by a vertex. Besides, a share of the total flow that moves through the vertex may remain on the same fracture, so physically, it doesn't cross the intersection represented by this vertex (an example is illustrated in Figure 2-3). To compute Q_{ij}, we select the edges on one side of the intersection so either belonging to fracture f_i or to fracture f_j. Then, we add positively all the edge flows directed toward the vertex and we subtract the ones directed away from it. Finally, we take the absolute value of the result. On a fracture f_i, the flow Q_{ij} through an intersection with fracture j, is computed in the intersection graph as,

$$\psi: Q_{ij} = \left|\sum_k \hat{Q}(e_{jk}^i)\right| \tag{11}$$

$\hat{Q}(e_{jk}^i)$ is the edge e_{jk}^i directed flow. The direction of the flow depends on the adjacent vertex heads, $H(v_{ij})$ and $H(v_{ik})$,

$$\psi: \begin{cases} \hat{Q}(e_{jk}^i) = +\ Q(e_{jk}^i)\ if\ H(v_{ij}) > H(v_{ik}) \\ \hat{Q}(e_{jk}^i) = -\ Q(e_{jk}^i)\ if\ H(v_{ij}) < H(v_{ik}) \end{cases} \tag{12}$$

where $Q(e_{jk}^{i})$ is the edge e_{jk}^{i} flow magnitude. The equivalent permeability K and the total flow by fracture Q_f will be used later in section 4 to compare the graph simulations to the complete simulations.

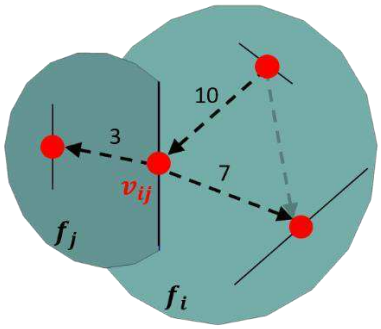


Figure 2-3: Example of DFN equivalent intersection graph with the oriented flow edge attribute Q ($m^3.s^{-1}$) being indicated. The flow values in this example don't rely on any physical simulations but serve at illustrating how, in this graph type, a share of vertex total flows can remain on the same fracture. Here, from the edge with flow equal to 10 $m^3.s^{-1}$ only 3 $m^3.s^{-1}$ cross the intersection represented by the vertex v_{ij} while 7 $m^3.s^{-1}$ remain on the same fracture f_i.

3. Edge conductance

In this section, we provide new analytical developments of the graph edge conductance with the aim of them being equivalent to the fracture flowing surface that the edge represents. By observing that the fracture flow field is often limited by the fracture impervious borders, we propose a definition of the conductance that includes the fracture size. This section is organized as follow, after presenting the schematical representations that support our developments (section 3.1.1), we derive the conductance definition, first, for edges in the fracture graph (section 3.1.2) and, second, edges in the intersection graph (section 3.1.3). Finally, we verify the analytical developments by comparing them to high-fidelity simulations of the flow on a fracture with two intersections (section 3.2).

3.1. Analytical definition

3.1.1. Schematical representation of the fracture flowing surface

In this study, fractures are modeled by disks. Thus, the diameter is the appropriate length to include in the modified definition of conductance. For both graph types, we include the fracture diameter into the conductance definitions by schematically representing the flowing area as a series association of two trapezoids, presented in Figure 2-4a for the fracture graph and Figure 2-4b for the intersection graph. We derive an expression of the conductance C ($m^2.s^{-1}$) between the large base and the small base of one trapezoid to be

$$C = T \cdot \frac{l_B - l_b}{x_{Bb}\,(\ln(l_B) - \ln(l_b))} \tag{13}$$

where l_B, l_b, x_{Bb} (m) are respectively the larger base size, the smaller base size, and the height of the trapezoid, and T is the plane hydraulic transmissivity $(m^2.s^{-1})$. The function $\ln(x)$ is the base e logarithm. Additional details on how equation (13) is derived are presented in Appendix 6.1.

Let's note that the schematic representations of Figure 2-4 are ideal geometrical cases, where intersections are parallel. In reality, more complex geometries are found in DFN as intersections are often not parallel, possibly crossing, and their positions can be anywhere on the fracture plane. Later in section 3.2, we verify how the simplification proposed here works for intersections randomly placed on a fracture. However, this verification is limited to the case where the two intersections do not cross on the fracture plane because, in the numerical set-up of section 3.2, the two intersections have different boundary conditions and can not share a common point. As the conductance is inversely proportional to the distance between intersections, the equivalent conductance in a configuration when intersection do cross should be underestimated by the conductance definition based on parallel and non-crossing intersections.

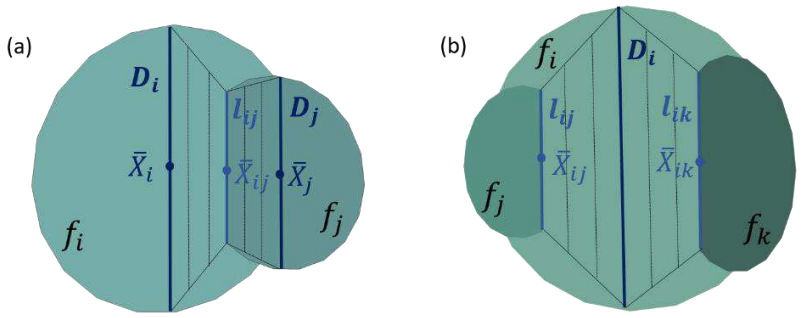


Figure 2-4: Schematical representation of the fracture(s) flowing area(s) using trapezoïds. The notations used in the analytical developments of the conductance are also presented. (a) refers to the fracture graph and (b) to the intersection graph.

3.1.2. Fracture graph

The equivalent conductance C of two conductance C_1 and C_2 in series association is $C = \left(\frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2}\right)^{-1}$. From equation (13), we derive an expression of the conductance C_{ij} $(m^2.s^{-1})$ attributed to the edge e_{ij} in the fracture graph,

$$\varphi: C_{ij} = \left(\frac{\|\bar{X}_i - \bar{X}_{ij}\| * \ln\left(\frac{l_{ij}}{D_i}\right)}{T_i * (l_{ij} - D_i)} + \frac{\|\bar{X}_j - \bar{X}_{ij}\| * \ln\left(\frac{l_{ij}}{D_j}\right)}{T_j * (l_{ij} - D_j)} \right)^{-1} . \tag{14}$$

$\bar{X}_i$, D_i and T_i $(m^2.s^{-1})$ are respectively the fracture f_i center, size, and transmissivity. $\bar{X}_{ij}$ and l_{ij} are respectively the intersection $(f_i \cap f_j \neq \emptyset)$ center and size (Figure 2-4a).
For every intersection between a fracture f_i and boundary L, if $f_i \cap L \neq \emptyset$, we attribute to each edge $e_{iL} \in E$ a conductance C_{iL}.

$$\varphi: C_{iL} = \left(\frac{\|\bar{X}_i - \bar{X}_{iL}\| * \ln\left(\frac{l_{iL}}{D_i}\right)}{T_i * (l_{iL} - D_i)} \right)^{-1} \tag{15}$$

$\bar{X}_{iL}$ and l_{iL} are respectively the intersection ($f_i \cap L \neq \emptyset$) center and size.

3.1.3. Intersection graph

Based on the same reasoning as for the fracture graph, we derive an expression of the conductance C_{jk}^{i} attributed to the edge e_{jk}^{i} in the intersection graph,

$$\psi: C_{jk}^{i} = \frac{2.T_i}{\left\|\bar{X}_{ik} - \bar{X}_{ij}\right\|} * \left(\frac{\ln\left(\frac{D_i}{l_{ij}}\right)}{(D_i - l_{ij})} + \frac{\ln\left(\frac{D_i}{l_{ik}}\right)}{(D_i - l_{ik})} \right)^{-1}. \quad (16)$$

D_i and T_i ($m^2.s^{-1}$) are respectively the fracture f_i size, and transmissivity. $\bar{X}_{ij}$ and l_{ij} are respectively the intersection ($f_i \cap f_j \neq \emptyset$) center and size (Figure 2-4b). In this formulation, the position of the fracture center is not required. We choose to use the direct distance between the intersections $\left\|\bar{X}_{ik} - \bar{X}_{ij}\right\|$, because it better represents the flowing distances.

Another adjustment is made possible in the intersection graph by the fact that the two intersections are directly connected. It regards the case where the two intersections are close enough so that the use of the fracture diameter D_i overestimates the flowing surface and thus the conductance. In Figure 2-5, is schematically represented the flowing area between two close intersections. In this case, instead of D_i, a smaller size d_i is more appropriate to schematize the flowing surface. Therefore, we replace D_i by $\widehat{D}_i$ in the formulation of C_{jk}^{i} with,

$$\widehat{D}_i = \min(D_i, d_i). \quad (17)$$

d_i is a function of intersection sizes and intersection distance,

$$d_i = \frac{l_{ij} + l_{ik}}{2} + B\left\|\bar{X}_{ij} - \bar{X}_{ik}\right\|. \quad (18)$$

In equation (18), we adjust the coefficient B by comparing our analytical definition to real numerical simulations of the flow between two intersections on a fracture, by varying intersection sizes and distance. It is found to be equal to ~1.5.

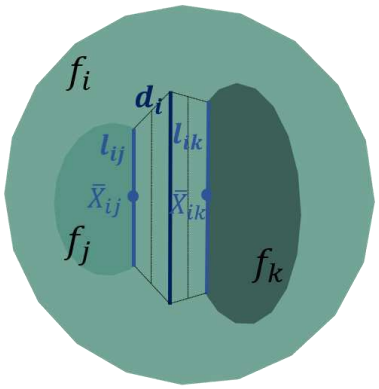


Figure 2-5: Schematical representation of the flowing surface between two intersections in the case of close intersections.

3.1.4. « Multiple-Paths » correction in the intersection graph

For fractures with more than two intersections, the intersection graph represents the fracture as a n-clique with n being equal to the number of intersections on the fractures. A n-clique is a subset of n vertices such that every two vertices in the clique are adjacent. The problem is that this specific architecture creates a multiplicity of paths from one intersection-vertex to another on the same fracture, thereby artificially increasing the equivalent volume through which the fluid flows. The effect of multiple-paths is illustrated in Figure 2-6 where a fracture with four intersections is represented with the fracture graph mapping (Figure 2-6a) and the intersection graph mapping (Figure 2-6b), along with edge flow intensities, line width, and directions, arrows. In the example, there is one principle flow path formed by two intersections (thick intersections) among the four intersections. In the fracture graph (a), a unique path is possible between the two intersections. In the intersection graph (b), possible secondary paths are passing through other vertices in addition to the direct path between the two intersection-vertices, which increases the amount of flow between the two intersections. To correct for this effect in the intersection graph, we reduce each edge conductance C_{jk}^{i} of a fracture f_i by a factor based on the number of intersections on that fracture, n_i. In the intersection graph, a vertice v_{ij} $(f_i \cap f_j \neq \emptyset)$ has a degree equal to $n_i - 1$ on the fracture f_i,

$$\psi:\ d\left(v_{ij}|_{e_{jk}^{i} \in f_i}\right) = n_i - 1. \tag{19}$$

Therefore, for each edge $e_{jk}^{i} \in f_i$, we reduce the conductance C_{jk}^{i} as follow,

$$\psi:\ \hat{C}_{jk}^{i} = \frac{C_{jk}^{i}}{n_i - 1}. \tag{20}$$

Note that the correction only changes the conductances for fractures with more than two intersections. Later in section 4, we observe the efficiency of this correction for large DFN.

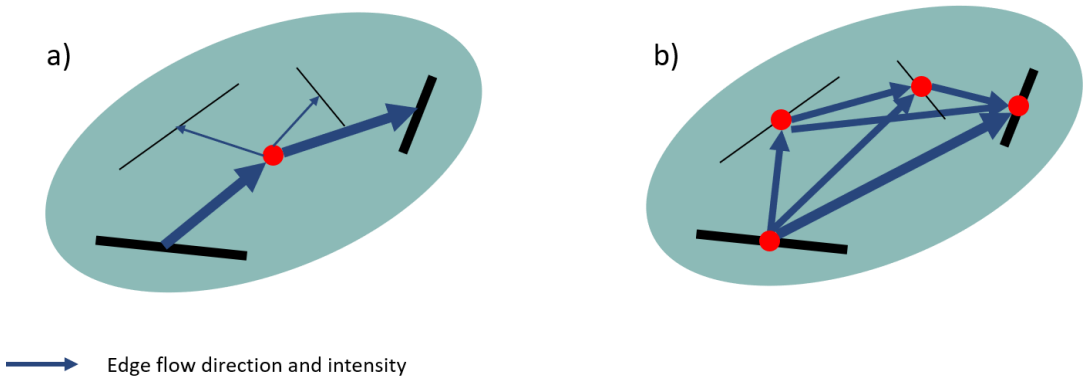


Figure 2-6: Fracture with four intersections and equivalent fracture graph (a) and intersection graph (b). The two thick intersections are the most flowing on the fracture. The edge thicknesses and arrows represent the intensity and direction of the edge flows.

3.2. Verification on a fracture with two intersections

The conductance definitions developed in section are verified using a single fracture with two intersections (Figure 2-7). Steady-state flow is resolved on a computational mesh representation of that fracture, with head boundary conditions fixed on the two intersection segments (1 and 0). With this set-up, we only compute the equivalent conductance between two intersections and not between two fractures. However, as the two conductance definitions are based on the same reasoning, the conclusions presented at the end of this section hold for both graph types.

To vary intersection geometries, we randomize the two intersection positions and orientations on the fracture plane and we fix their size to 0.1, 0.3, and 0.5 normalized by the fracture size. For each intersection size, a thousand realizations are performed to obtain a large dataset covering various distances between intersections centers. The realizations where the two intersections cross on the fracture plane are rejected during generation because different heads can't be imposed on the intersections if they share a common point as previously discussed. A real estimation of the equivalent conductance is computed from the numerical simulations as $C_{num} = \frac{Q}{\Delta H}$, where Q $(m^3.s^{-1})$ is the flow and ΔH the head difference between intersections (m), and is compared to the analytical conductance, C_{jk}^i, defined in section 3.1.3 (Figure 2-8 – solid lines). In addition, we compare C_{num} to the lower-order conductance definition used in Karra et al. (2018) (Figure 2-8 – dashed lines), which, unlike our definition depending on fracture size, relies on the intersection geometry only:

$$C_{jk}^i = T_i * \frac{l_{ij} + l_{ik}}{2 * \left\| \bar{X}_{ij} - \bar{X}_{ik} \right\|}, \tag{21}$$

with T_i the fracture transmissivity $(m^2.s^{-1})$, and l_{ij}, $\bar{X}_{ij}$ the size and center of the intersection $f_i \cap f_j \neq \emptyset$.

The benefit of the conductance definitions developed in section 3.1.3 over the classic definition of equation (21) is demonstrated in Figure 2-8. For all the intersection sizes, the presented conductance definition of section 3.1.3 performs well (solid lines), with however a slight under-estimation, that we attribute to the geometrical simplification of the flowing area proposed in section 3.1.1 (Figure 2-4). Larger under-estimation and more variability are observed when intersections get closer, possibly due to the angle between the intersections. When the two intersections are close and not parallel, high-pressure gradients may concentrate on some of their tips, creating a higher conductance than in the analytical solution. It is worth noting that the benefit of these developments over the lower order definition used in Karra et al. (2018) is larger for smaller intersections. We can observe this by comparing, for example, the results for sizes equal to 0.1 times the fracture diameter (blues lines), for which the classic definition is under-estimated by a factor ~ 5.

These observations are important for natural fracture networks, which are characterized by powerlaw distributions of fracture sizes (Bonnet et al., 2001). Regarding the intersection sizes, we can note a lack of information since they are not measurable on the field. However, in DFN models, they usually also range over several orders (Alghalandis et al., 2011; Zhan et al., 2016). In some models, they can also be very small compared to the fracture sizes, like in the Universal Fracture Model (UFM, (Davy et al., 2013; Davy et al., 2010)) in which fractures grow and stop on other fractures creating small intersections.

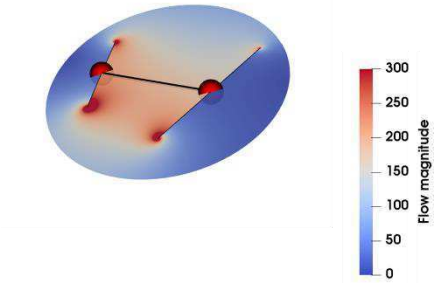


Figure 2-7: Flow magnitude ($m^3.s^{-1}$) numerically solved (software DFNlab) in a single fracture having two intersections. The fracture diameter (m) and transmissivity ($m^2.s^{-1}$) are both equal to one. Constant heads (m) are fixed on each intersection and the head difference is equal to one. An equivalent intersection graph is also represented (red vertices).

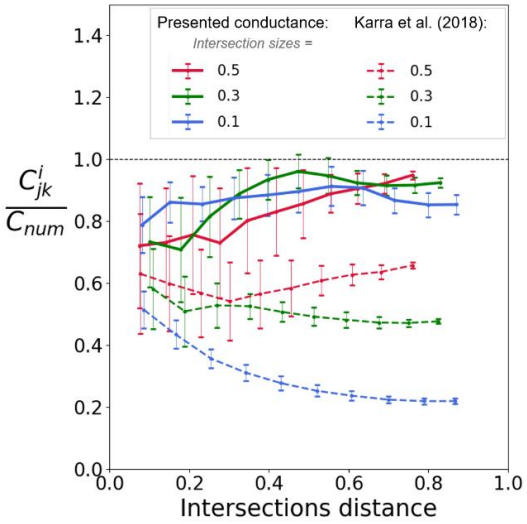


Figure 2-8: Ratio between analytical and numerically solved conductances between two intersections on the same fracture plane as a function of the distance between intersection centers. Intersection sizes equal both 0.1, 0.3, *and* 0.5 *normalized by the fracture size. The comparison is presented for the conductance developed in section 3.1 (solid lines) and for the conductance used by Karra et al. (2018) (dashed lines).*

4. Ability of graphs to estimate flow in large DFN

In this section, we evaluate the ability of graphs using the conductance defined in section 3 to estimate flow in large DFN. We perform comparisons at both the DFN scale (permeability) and at the fracture scale (total flow exchanged by fracture – section 2.2.2). In this study, all DFN have a constant fracture transmissivity, equal to $1\ m^2.s^{-1}$.

In section 3, we have defined the conductance for the ideal case of fractures in series, i.e. fractures have two intersections with other fractures and carry a unique flowing path. In reality, DFN are characterized by a complex connectivity. Therefore, DFN fractures can have more than two intersections and carry many flowing paths, which could induce biases in the graph flow estimations. To evaluate these biases, we apply the methodology defined in section 2 to different DFN types, that are characterized by different topologies. Along the section, we increase the network topological complexity, by looking, first at stochastics DFN with constant fracture sizes (section 4.1), second at stochastics DFN with a powerlaw size distribution (section 4.2), and finally at genetic models, called UFM, which are powerlaw size distributed networks with a specific spatial organization of the fractures (section 4.3).

The stochastic DFN are generated with a targeted density, i.e. fractures are placed one by one into the system until the desired density value is obtained. In this study, we use the percolation parameter, p, as a dimensionless measure of density, instead of the classic measure of total fracture

surface per unit volume (P_{32} (m^{-1}) - (Dershowitz & Herda, 1992)). The dimensionless density is defined (Bour & Davy, 1997, 1998; De Dreuzy et al., 2000):

$$p = \frac{1}{V}\frac{\pi^2}{8}\sum_i . l_i^3 . \tag{22}$$

where V is the system volume and l_i the fracture size. The percolation parameter is a good indicator of DFN connectivity, regardless of the fracture size distribution (Bour & Davy, 1997). Networks are connected when the percolation parameter is larger than the percolation threshold, estimated at 2.5 by De Dreuzy et al. (2000). For the stochastic DFN (section 4.1 and 4.2), we create twenty realizations of each network at the percolation parameter values: 3, 4, 5, 6, and 7 (Table 2-2). The UFM networks (section 4.3) are generated with fracture nucleation, growth, and arrest protocol described in (Davy et al., 2013; Davy et al., 2010; Maillot et al., 2016). Their properties will depend on the nucleation rate relative to the fracture growth rate and on the growth time. We vary the targeted growth time to have UFM with a certain range of percolation parameters (Table 2-2). More information about the generated UFM networks is provided in section 4.3.

Table 2-2: DFN generation parameters

	1-Poisson – Constant size	2-Poisson – Powerlaw size distribution	3-UFM
Cubic system size	50	50	50
Fracture size, l (m)	3	[1-50]	
Powerlaw size distribution exponent, a		4	
Target percolation parameter, p $(-)$	[3,4,5,6,7]	[3,4,5,6,7]	
Initial nuclei size (m)			1
Fracture growth stops on system borders			yes
Nucleation rate, $\dot{n}$ (s^{-1})		-	0.01
Growth exponent, e	-	-	3
Growth rate parameter, C	-	-	1
Target growth time t (s)	-	-	[0.5, 1, 3, 7, 10]
Total number of realizations	20 for each percolation	20 for each percolation	5 for each time
Number of unconnected realisations	0	8 for $p = 3$	1 for $t = 0.5$

Before performing the complete and graph flow simulations, DFN backbones are identified and isolated. We defined the backbone as the part of the network that carries flow. To this end, we first remove all clusters of fractures that are not connected to any constant head boundaries, and, second, we remove all the network dead-ends, by iteratively removing fractures having only one intersection with another fracture.

In Table 2-3, we present some characteristics of the simulated DFN. In addition to the DFN percolation, we also measure some topological indicators to characterize the DFN connectivity, like the average fracture degree, $\bar{n}$, and the maximum fracture degree, n_{max}. The fracture degree is equal to the

number of intersections on the fracture, calculated here after selecting the DFN backbone. The complete fracture degree distributions are also presented in Appendix 6.2.

Table 2-3: Statistics of geometrical and topological metrics of the simulated DFN. Averages and standard deviations of the different realizations are presented for the two extreme targeted parameters: $p = 3$ *and* 7 *for the stochastic DFN, and* $t = 0.5$ *and* $t = 10$ *for the UFM.*

	1-Poisson – Constant size		2-Poisson – Powerlaw size distribution		3-UFM	
	$p = 3$	$p = 7$	$p = 3$	$p = 7$	$t = 0.5$	$t = 10$
Measured percolation, p	3.1 ± 0.0	7.1 ± 0.0	3.1 ± 0.1	7.3 ± 0.1	5.0 ± 0.5	15.4 ± 0.8
Total fracture number	11761 ± 10	27448 ± 21	33068 ± 1910	73070 ± 5842	691 ± 17	8381 ± 74
Fracture number in backbone	8042 ± 99	27103 ± 25	2214 ± 750	42946 ± 6819	49 ± 6	5661 ± 96
Average fracture degree in backbone, $\bar{n}$	3.7 ± 0.0	7.1 ± 0.0	3.5 ± 0.1	4.2 ± 0.1	3.5 ± 0.1	4.7 ± 0.1
Max fracture degree in backbone, n_{max}	12 ± 1	21 ± 1	110 ± 34	494 ± 132	12 ± 1	310 ± 76

4.1. Poissonian DFN with constant fracture size

The DFN tested in this section have constant fracture sizes (Table 2-2). They are characterized by a "quasi" regular structure, with fracture degrees being overall low (Appendix 6.2 - Figure 2-17a). We represent the averaged ratio of the permeabilities estimated from the graph (K_G) simulations and the complete simulations (K_{DFN}) as a function of the DFN percolation parameter (Figure 2-9). The results show that almost no biases are observed in the graph predictions relative to the complete simulations. The fracture graph and the intersection graph present similar results (respectively blue squares and blue triangles). For the intersection graph, we present the permeability results with and without the "multiple-paths" correction of the edge conductance defined in section 3.1.4 (respectively full and empty triangles in Figure 2-9). Without the correction, the graph flow predictions over-estimate the complete simulation values. The magnitude of the over-estimation increases with the percolation parameter. However, the graphs with the "multiple-paths" correction are in better agreement with the complete simulations, regardless of the percolation parameter.

We also compare the fracture total exchanged flow, Q_f (section 2.2.2) estimated by the complete and graph flow simulations (Figure 2-10). Some very small values of Q_f are measured in the complete and graph simulations (Figure 2-10a, $[10^{-15} - 10^{-17}]$), which are below machine precision and thus numerically zero. In the complete simulations, these values correspond to non-flowing fractures that remain in the DFN after the backbone selection, e.g. dead-ends finishing with a loop. In the graph simulations, they can correspond to the same structures. However, the graphs predict zero flow in some fractures that do contain flow in the complete simulation (Figure 2-10a). We think that the flow on these fractures enters and exit through the same intersection, but the fractures are not part of a structural path. Therefore, the graphs predict zero flows.

We select the fractures that contain significant flow in both the complete and graph simulations to estimate the biases as a function of the fracture flow, $Q_{f,DFN}$ (Figure 2-10b). As we wish to focus on

the structure of the DFN flows rather than on their magnitudes, the $Q_{f,DFN}$ are normalized by the complete simulation total flow (marked by * in Figure 2-10b). Over ~2 orders of magnitudes, $Q_{f,DFN}$ is well estimated by the graph flow simulation, and the variability remains low. But for lower values of $Q_{f,DFN}$, the graphs over-estimates on average the results, and the variability gets stronger.

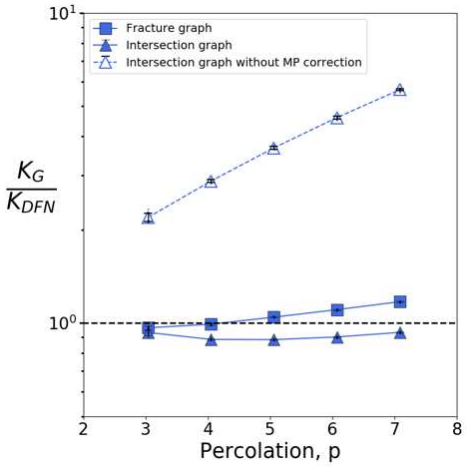


Figure 2-9: Averaged ratio between graph and complete simulations permeability (resp. K_G and K_{DFN}), as a function of network percolation. The DFN have constant fracture sizes. Twenty DFN realizations are performed for each percolation value (3,4,5,6,7). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. For the intersection graph, the results without the "multiple path" correction (section 3.1.4) are also presented with empty triangles.

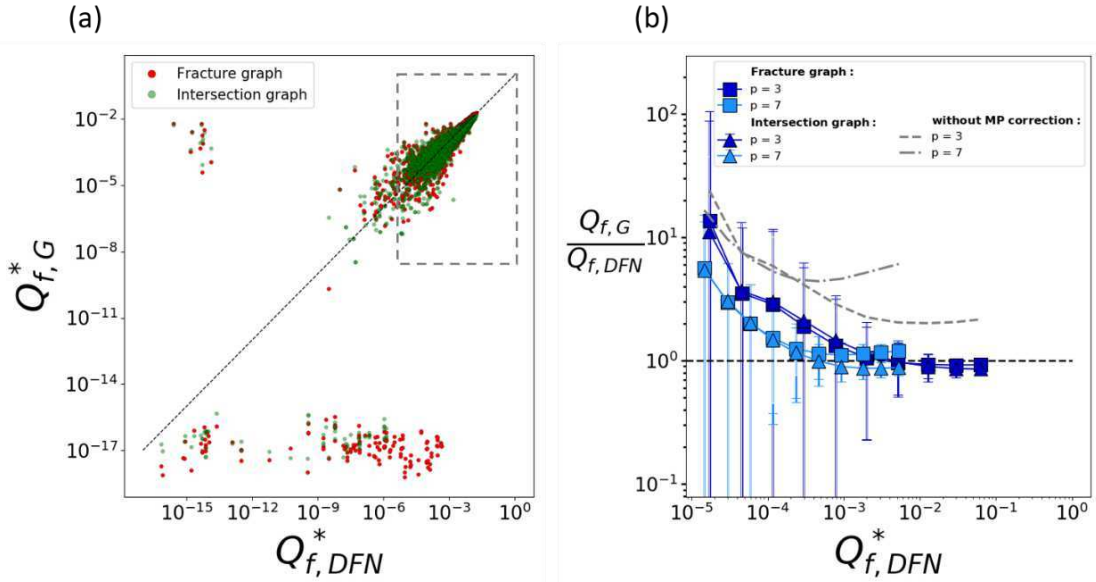


*Figure 2-10: Fracture total exchanged flow, Q_f ($m^3.s^{-1}$), in DFN with constant fracture sizes. a) Comparison between graph ($Q_{f,G}$) and complete simulations ($Q_{f,DFN}$) in one DFN realization with percolation 5. b) Fracture with major flows are selected (dashed square on Figure a)) and the averaged ratio between $Q_{f,G}$ and $Q_{f,DFN}$ is represented as a function of $Q_{f,DFN}$. Twenty DFN realizations are performed for each percolation value (3, 7). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. The results are normalized by the total flow from the complete simulation (marked by *).*

4.2. Poissonian DFN with powerlaw size distribution

The DFN in this section are characterized by a powerlaw density distribution of fracture sizes,

$$n(l) = \alpha . l^{-a},$$

$n(l)dl$ the number of fractures per unit volume, whose size is in the range $[l, l + dl]$, a the exponent, fixed to 4 and α the density term. Such DFN are also characterized by a powerlaw distribution of the fracture degree (Appendix 6.2 - Figure 2-17b), which indicates that a few fractures have a very high connection number (J. D. Hyman et al., 2019).

In this complex structure, the permeability from the graph simulation (K_G) is slightly larger than the permeability from the complete simulation (K_{DFN}), and the difference increases with the DFN percolation parameter (Figure 2-11). In the fracture graph, the over-estimation (quantified by the ratio $\frac{K_G}{K_{DFN}}$) ranges on average from ~ 1.5 for the lowest percolation to ~ 2.1 for the highest percolation (Figure 2-11 - yellow squares). It is slightly smaller in the intersection graph, from ~ 1.2 to ~ 1.8 (Figure 2-11 - yellow triangles) after applying the "multiple-paths" correction (section 3.1.4).

By comparing the fracture total exchanged flow, Q_f, we observe that there are a large number of fractures that do not have flow within them in the fracture graph (Figure 2-12a - red dots) but are flowing in the complete simulation. This difference is not observed in the intersection graph (green dots). Therefore, this bias results from the fracture graph architecture. One can explain this by considering the alternative flowing paths formed by small fractures around a unique large fracture. The structures formed by these fractures are not necessarily dead-ends. They can also be a loop structure with their flowing entrance and exit located on a single large fracture. In this case, the edges formed by fractures-nodes create structures that cannot flow because they are linked to the same fracture-node. This effect is more pronounced in the DFN with powerlaw size distribution because a lot of flowing structures tend to be connected to a unique large fracture. These differences and discrepancies highlight an important limitation of using the fracture graph to resolve fracture network flow.

Next, we isolate fractures that have flow both in the complete and graph simulations and plot the graph biases ($\frac{Q_{f,G}}{Q_{fDFN}}$) as a function of the real fracture flow, $Q_{f,DFN}$ (Figure 2-12b). The plots present the same trends as in the constant sized networks, i.e., good predictions are obtained for larger flows ($Q^*_{f,DFN} > 10^{-3}$; * means normalized by the DFN total flow) and over-estimations for small flow ($Q^*_{f,DFN} < 10^{-3}$). In the intersection graph, the fracture flow distribution is improved by the "multiple-paths" correction defined in section 3.1.4. Without this correction, major flows present stronger graph biases than smaller flows (gray dashed lines - Figure 2-12b), thereby indicating that this correction is critical in the intersection graph, not only to estimate properties at a large scale, like DFN permeability but also to estimate properties at a smaller scale, like the correct fracture flow distribution, Q_f.

The over-estimations of the graph simulations relative to the complete simulations can be attributed to the fact that the edge conductances have been defined for a case of fracture with two intersections and do not consider that this surface may have to be shared between several flowing intersections. In this latter case, the edge conductance should over-estimate the flow on the fracture plane. To check if a positive correlation exists between the intersection number on the fracture and the graph biases, we plot the ratio $\frac{Q_{f,G}}{Q_{fDFN}}$ as a function of the fracture degree, n_i (Figure 2-13). However, even if the fracture degree distribution is very wide in this DFN type, no positive correlation is observed: the highest over-estimations are observed for the smallest degrees, similar to the comparison with fracture

flow in Figure 2-12b. A possible explanation for this result is that, in one realization, major flow biases happening in fractures with high connectivity, influence the rest of the fractures.

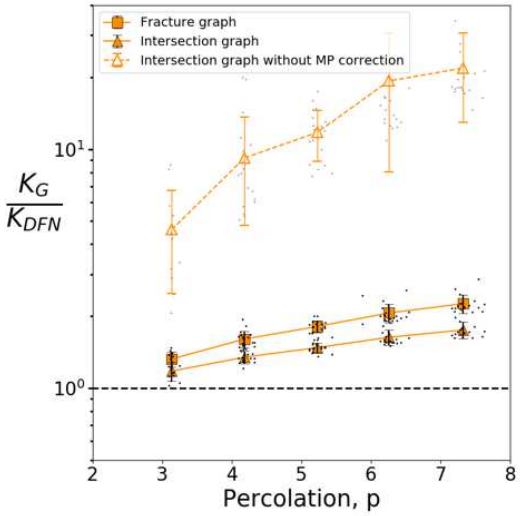


Figure 2-11: Averaged ratio between graph and complete simulations permeability (resp. K_G and K_{DFN}), as a function of network percolation. The DFN have a powerlaw size distribution with exponent 4. Twenty DFN realizations are performed for each percolation value (3,4,5,6,7). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. For the intersection graph, the results without the "multiple path" correction (section 3.1.4) are also presented with empty triangles.

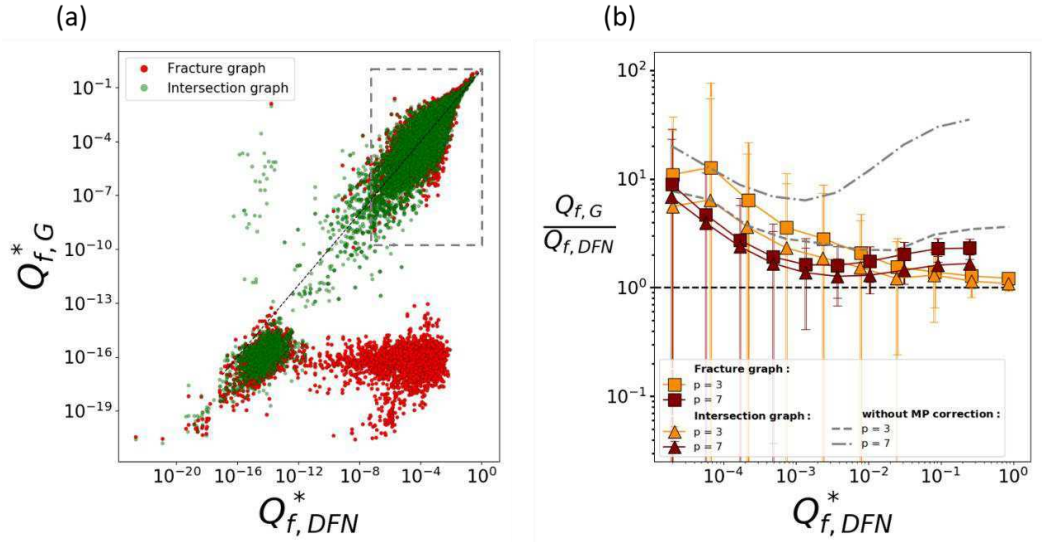


*Figure 2-12: Fracture total exchanged flow, Q_f ($m^3.s^{-1}$), in DFN with powerlaw fracture size distribution. a) Comparison between graph ($Q_{f,G}$) and complete simulations ($Q_{f,DFN}$) in one DFN realization with percolation 5. b) Fracture with major flows are selected (dashed square on Figure a)) and the averaged ratio between $Q_{f,G}$ and $Q_{f,DFN}$ is represented as a function of $Q_{f,DFN}$. Twenty DFN realizations are performed for each percolation value (3, 7). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. The results are normalized by the total flow from the complete simulation (marked by *).*

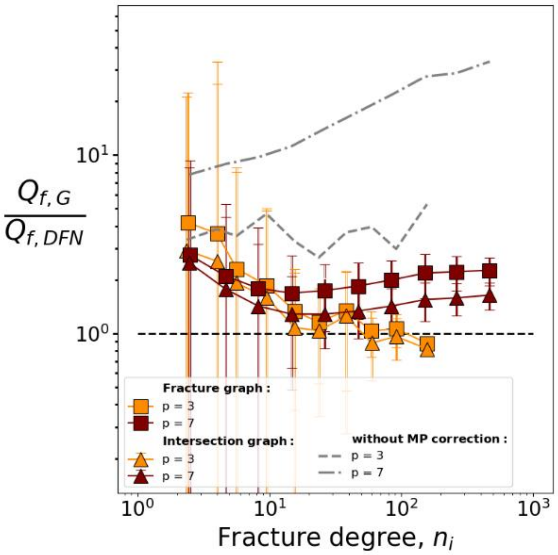


*Figure 2-13: Fracture total exchanged flow, Q_f ($m^3.s^{-1}$), in DFN with powerlaw fracture size distribution. Fractures with major flows are selected (dashed square on Figure 2-12a) and the averaged ratio between $Q_{f,G}$ and $Q_{f,DFN}$ is represented as a function of the fracture degree. Twenty DFN realizations are performed for each percolation value (3, 7). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. The results are normalized by the total flow from the complete simulation (marked by *).*

4.3. UFM networks

UFM is a genetic fracture network model, where fractures are generated with nucleation, growth, and arrest processes (Davy et al., 2013; Davy et al., 2010). The nucleation consists of generating fracture nuclei with a Poissonian process for their position and orientations, at a given rate $\dot{n}$ (s^{-1}). Then, fracture nuclei grow with at a rate v ($m.s^{-1}$) that is function of the fracture size l: $v(l) = C.l^e$, where e is the growth exponent and C the growth rate parameter. Fractures stop growing if they cross another fracture with a larger size. In this study, $\dot{n}$ is chosen very small relative to C (Table 2-2) so that fractures grow and stop one after the other. The process leads to fractures with a powerlaw size distribution with an exponent of -4, and a large number of T intersections (one fracture abutting another) (Maillot et al., 2016). Regarding the topology, the degree distribution is also powerlaw-shaped (Appendix 6.2), but fractures present a lower degree (fewer intersections) than in an equivalent Poissonian network (Maillot et al., 2016). The UFM is also characterized by numerous intersections whose size is much smaller than the fracture size because of the arrest rule. We take UFM networks as examples of complex structures with characteristics different from the Poissonian networks described in the previous section.

As for the Poissonian network with powerlaw size distribution, permeabilities from the graph simulations (K_G) are over-estimated relative to the complete simulation (K_{DFN}) and the over-estimation increases with the DFN percolation parameter (Figure 2-14a). However, the comparison with the other DFN types (section 4.1 and 4.2) indicates that the percolation parameter doesn't explain the over-estimation because the evolution of $\frac{K_G}{K_{DFN}}$ with this parameter is different within each DFN types.

As stated earlier in section 4.2, the conductance defined for a fracture case with two intersections hypothetically over-estimates the complete flow simulation in DFN having fractures with many flowing intersections. However, there is no correlation between the graph flow biases measured at fracture scale with the intersection number on the fracture, or fracture degree (Figure 2-13), because the flow is mostly influenced by the best connected fractures present in the DFN. A better way to obtain a correlation between the graph biases and the fracture degree is to observe the effect of these most connected fractures on the graph biases. To this end, we represent, $\frac{K_G}{K_{DFN}}$ as a function of the maximum fracture degree present in the DFN, n_{max}, for the three DFN types (Figure 2-14b). The results indicate a positive correlation between $\frac{K_G}{K_{DFN}}$ and n_{max}, which is common to the three DFN types. This confirms that the conductance defined in section 3 over-estimates the flow when fractures have many intersections. However, this result also indicates that the over-estimation is rather slight: it reaches only values of ~ 2.2 and ~ 1.8 respectively for the fracture graph and the intersection graph, for fractures that are highly connected ($n_i \sim 400$). The method can thus still predict correct flow orders, even when the DFN have some highly connected fractures. Besides, the correlation can be quantified by a powerlaw relationship with exponents ~ 0.22 for the fracture graph and ~ 0.19 for the intersection graph (gray dashed lines in Figure 2-14b), which could be used as an additional correction factor based on the highest fracture degree measured in the DFN.

Similar to the Poissonian powerlaw network (section 4.2), a comparison of the total flow exchanged by fracture indicates that some zero-flow artifacts are observed for the fracture graph (red dots - Figure 2-15a). After selecting the flowing fractures (Figure 2-15b), the graph estimations are close to the complete simulation values over 2 orders of magnitude. However, as in Poissonian DFN, both graphs over-estimate the results for lower values of $Q_{f,DFN}$.

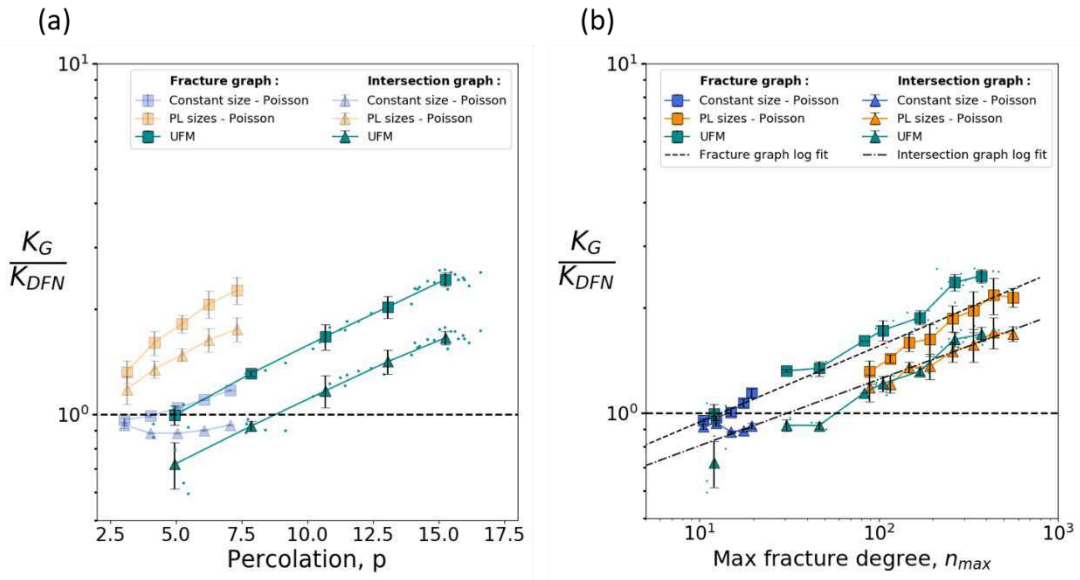


Figure 2-14: Averaged ratio between graph and complete simulations permeability (resp. K_G and K_{DFN}), as a function of network percolation (a), and as a function of the network maximum fracture degree (b). The DFN are UFM networks (cyan). The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles.

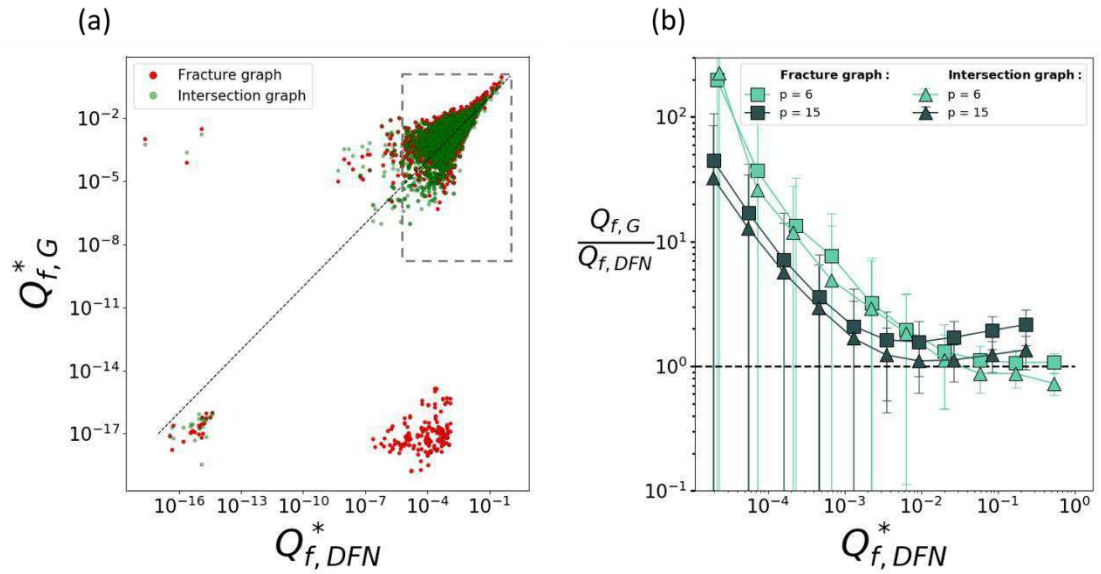


*Figure 2-15: Fracture total exchanged flow, Q_f ($m^3.s^{-1}$), in UFM networks. a) Comparison between graph ($Q_{f,G}$) and complete simulations ($Q_{f,DFN}$) in one UFM realization. b) Fracture with major flows are selected (dashed square on Figure a)) and the averaged ratio between $Q_{f,G}$ and $Q_{f,DFN}$ is represented as a function of $Q_{f,DFN}$. The results of the fracture graph are presented with squares, and for the intersection graph with triangles. The results are normalized by the total flow from the complete simulation (marked by *).*

5. Conclusion

We have developed an analytical definition of the edge conductance for use in resolving flow in graphs that are equivalent to three-dimensional DFN, in the case where the transmissivity by fractures is constant. Two graph types were analyzed in this study, a graph of fractures and a graph of intersections. In both graph types, we have derived an edge conductance equivalent to the fracture flowing surface by including the fracture size in the definition. We have observed, first at a single fracture scale, that this definition of the conductance is adapted to predict the flow through one fracture with two intersections across a wide range of intersection configurations. Besides, this definition is more accurate than previous definitions (Karra et al., 2018), mostly when the intersections are small compared to the fracture size.

The fracture graph and the intersection graph are two possible simplified representations of a DFN, however, the way they are constructed causes different issues when solving flow directly with the graph. The intersection graph creates a n-clique on each fracture having n intersections (a clique is characterized by every two nodes being connected). This feature implies that, as soon as the number of intersections is higher than two on a fracture, many graph paths exist from one intersection-node to another on this fracture. In turn, the equivalent flowing surface artificially increases and produces strong biases in the graph estimations. Therefore, in the intersection graph, the initial conductance definition is completed by including a correction factor that accounts for the number of intersections on a fracture ("multiple paths correction"). This correction markedly improves the intersection graph flow estimations in every DFN type that were tested in this study. In the fracture graph, no such multiple paths exists and a correction of this type is therefore not needed. However, a disadvantage of using the fracture graph

is that particular regions of the DFN are no-flow when they should not be. We have observed that this graph type doesn't permit to solve the flow in parts of the DFN that are connected to a large unique fracture, which is often the case in DFN with powerlaw fracture size distribution. In turn, the local flow exchange rates are incorrect in these regions.

The robustness of the conductance definitions was tested in a suite of large networks, by comparing both graph flow simulations to the complete DFN flow simulation. DFN exhibit a range of connectivity complexity, which, in turn, can induce graph flow over-estimations because fracture surfaces have to be partitioned into several flowing paths. We have evaluated these potential graph biases for DFN with increasing connectivity complexity: stochastics DFN with constant fracture sizes, stochastics DFN with a powerlaw size distribution, and UFM networks. Two scales were evaluated: the DFN scale and the fracture scale. At the DFN scale, the topology, i.e., how fractures relate to each other, explains the measured flow biases in both graph types. A common positive correlation between the graph biases and the DFN maximum fracture degree was observed and quantified. However, these biases are relatively small in both graph types ($\times \sim[1-2.5]$) compared to the range of equivalent permeabilities that have been computed (on average $K \in [10^{-3}-10^{-1}\ m.s^{-1}]$), which makes the method promising for a quick estimate of large DFN equivalent permeabilities. At the fracture scale, no correlation could be highlighted between the fracture degree and graph flow biases. We have also evaluated the ability of the graph to reproduce the DFN flowing structure by comparing graph flow and DFN flow at the fracture scale. In all the DFN, the flow structure was respected in the graph over ~ 2 magnitude orders. However, for fractures carrying smaller flows ($Q_f^* < \sim 10^{-2}-10^{-3}$), the variability inevitably increases and the graphs on average over-estimate the flow results.

An advantage of the graph is the reduced computational time required for the graph simulations. For example, the Poissonian DFN with power-law size distribution and percolation 7 (section 4.2) has on average 43 000 fractures. In the complete flow simulations, each network is meshed with about 5×10^6 cells, and it takes around $500s$ to mesh and solve the flow. In the equivalent graphs, the complexity is reduced to average numbers of 44 000 vertices in the fracture graph and 97 000 in the intersection graph. The CPU times to generate one graph from the DFN and solve the flow are reduced to $3s$ for the fracture graph, and $40s$ for the intersection graph, which translates to speed-ups of 10^2 and 10 times respectively. If the flow is adequately estimated by the graph-based models, they can be used to reduce the cost of DFN modeling with little loss of information, thus making possible the calculation of flow in DFN models with fracture sizes spanning multiple orders of magnitude. The practical applications with graph-based models are to simplify the DFN structure before calculating flow or transport properties (e.g. selecting the network backbone or important paths), or to consider very large ensembles of DFN models with both high and low-fidelity descriptions to quantify the variability and uncertainty in these systems (O'Malley, et al. [33] and Berrone, et al. [46]).

6. Appendices

6.1. Analytical definition of conductance between two parallel lines (trapezoid)

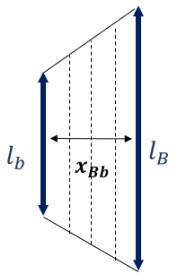


Figure 2-16: Schema and notations used for the analytical definition of flow conductance between two parallel lines.

We set $x \in [0, x_{Bb}]$. We set constant heads (m), H_B at the base of size l_B, and H_b at the base of size l_b, and make the hypothesis that equipotential lines between l_b and l_B are parallel (dashed lines in Figure 2-16). The total flow Q from l_b to l_B ($m^3.s^{-1}$) can be written from Darcy's law as:

$$Q = T.l(x).\frac{dh}{dx} \tag{23}$$

with $l(x)$, the width through which the fluid flows at location x, is defined as:

$$l(x) = l_b + \frac{x}{x_{Bb}}(l_B - l_b) \tag{24}$$

T is the fracture transmissivity ($m^2.s^{-1}$) and $\frac{dh}{dx}$ the head gradient along x. We can write:

$$h_B - h_b = \int_0^{x_{Bb}} dh \tag{25}$$

Combining (23) and (25) we obtain:

$$h_B - h_b = \frac{Q}{T}\int_0^{x_{Bb}} \frac{dx}{l(x)} \tag{26}$$

The equivalent conductance C ($m^2.s^{-1}$) between both bases is defined as:

$$C = \frac{Q}{h_B - h_b} \tag{27}$$

Combining (24), (26) and (27) we obtain:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{T}\int_0^{x_{Bb}} \frac{dx}{l_b + \frac{x}{x_{Bb}}(l_B - l_b)} \tag{28}$$

Solving the integral leads to the following expression:

$$C = T \cdot \frac{l_B - l_b}{x_{Bb}\,(\ln(l_B) - \ln(l_b))} \tag{29}$$

$\ln(x)$ is the base e logarithm.

6.2. DFNs' fracture degree distribution

For each DFN type simulated in the present study, we provide in Figure 2-17 the average and standard deviation of the degree distributions computed in the different realisations. These representations highlight the different topological structures of the simulated DFNs.

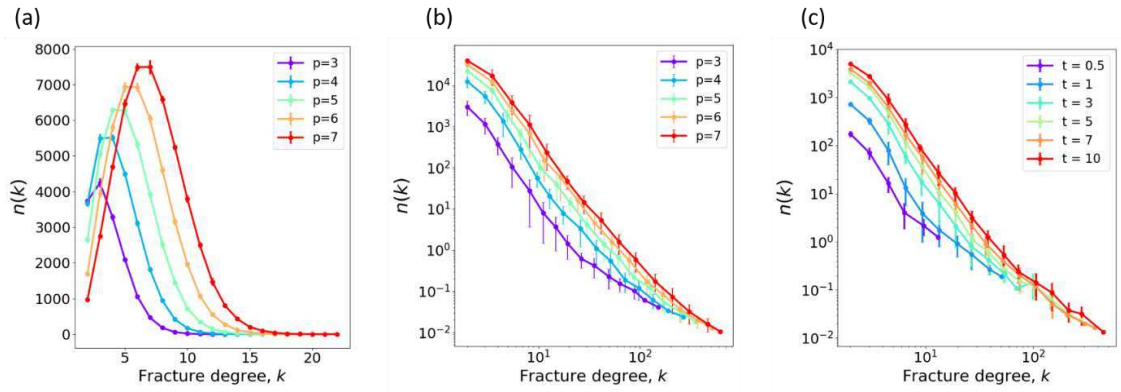


Figure 2-17: Averaged fracture degree distribution in (a) Poissonian DFN with constant fracture size, (b) Poissonian DFN with powerlaw size distribution, and (c) UFM. The fracture degree is computed after backbone selection; isolated clusters and dead ends are removed from the network. Results are presented for different DFN percolations p, except for the UFM, in which results are presented for the different network growth times we have simulated.

Fin de l'article

2.4. Travaux complémentaires

2.4.1. Répartition des flux sur une fracture ayant plusieurs intersections

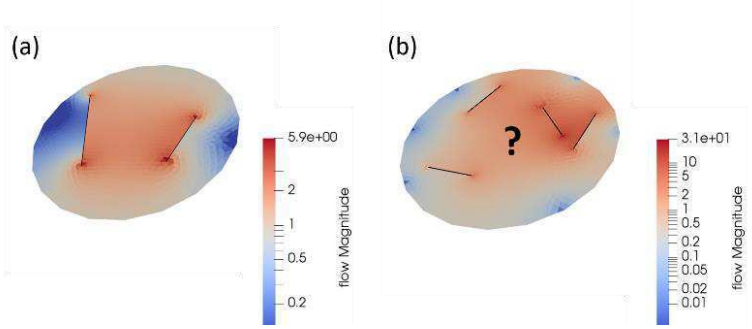


Figure 2-18: Flux calculés sur une fracture ($m^3.s^{-1}$). Des conditions limites de charge (m) sont fixées sur les intersections (traits noirs). La différence entre les charges fixées entraine un flux d'une intersection à l'autre. (a) Cas avec deux intersections, (b) cas avec plusieurs intersections (ici quatre). Logiciel DFN.Lab.

L'article présenté en section 2.3 introduit une solution analytique de conductance ($m^2.s^{-1}$) permettant de quantifier le flux entre deux intersections sur une fracture avec une ouverture constante, ceci dans le but d'attribuer un poids aux liens d'un graphe. Les analyses faites dans cet article ont cependant montré que cette formulation analytique surestime les flux dans le cas de modèles de DFN ayant une connectivité élevée et que cela était corrélé au nombre d'intersections par fracture. Cette surestimation peut atteindre dans l'article des valeurs de $\sim \times 2 - 2.5$ par rapport à une simulation complète de flux sur le DFN maillé (Figure 2-14). Dans le cadre d'un travail complémentaire à l'article, nous avons exploré plus en détail l'impact que pouvait avoir le nombre d'intersections sur les écoulements d'une fracture (Figure 2-18).

La configuration géométrique est la suivante. Une unique fracture de diamètre unitaire est générée et un nombre N d'intersections de taille l_I sont aléatoirement positionnées sur la fracture. Les intersections sont faites via la génération de polygones rectangulaires dont la largeur contrôle la taille de l'intersection. Des conditions limites de charges sont directement fixées sur les intersections. Une intersection choisie aléatoirement a une charge h_1 et toutes les autres une charge h_2 (Figure 2-19). La transmissivité du plan de fracture est fixée à 1 $m^2.s^{-1}$. Les flux ainsi produits sont uniquement entre l'intersection choisie et les autres mais aucun flux n'est possible entre les autres intersections. Notons que la configuration choisie est un cas idéal, et les échanges sont généralement plus complexes entre les intersections d'une fracture dans un réseau. Cependant, si nous avions choisi plusieurs intersections avec charge h_1, il aurait alors été difficile avec un calcul de

flux de savoir le flux échangé entre deux intersections données. Un calcul de transport de particule pourrait être un moyen d'aborder des configurations plus compliquées.

Le flux Q_I mesuré à une intersection h_2 permet de calculer une conductance entre cette intersection et l'intersection h_1, $C_{num} = \frac{Q_I}{|h_2 - h_1|}$. La valeur de C_{num} est alors comparée à la valeur analytique C_{th} établie dans l'article de la section 2.3. (section 3.1.3). La comparaison est présentée Figure 2-20. Notons que les réalisations à deux intersections sont donc bien estimées par C_{th} (points violets). Dans toutes les autres géométries d'intersection explorées (tailles $l_I = \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \frac{1}{12}\right]$ et nombre $N \epsilon [3:10]$), les résultats montrent que C_{th} surestime C_{num} non pas d'un facteur multiplicatif mais plutôt d'un terme additionnel qui dépendrait du nombre d'intersections, soit

$$C_{num} = C_{th} - F(N). \tag{2-1}$$

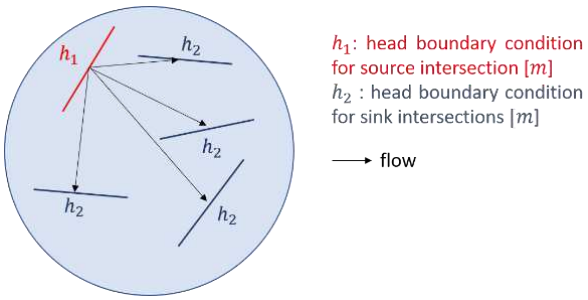


Figure 2-19: Modèle utilisé pour évaluer l'influence du nombre d'intersection sur le partitionnement des flux et des conductances sur le plan de fracture. Une unique intersection porte une charge constante h_1 (rouge) et le reste des intersections porte une charge constante h_2 (bleu), ainsi les échanges de flux ne se font qu'entre l'intersection h_1 et les autres intersections.

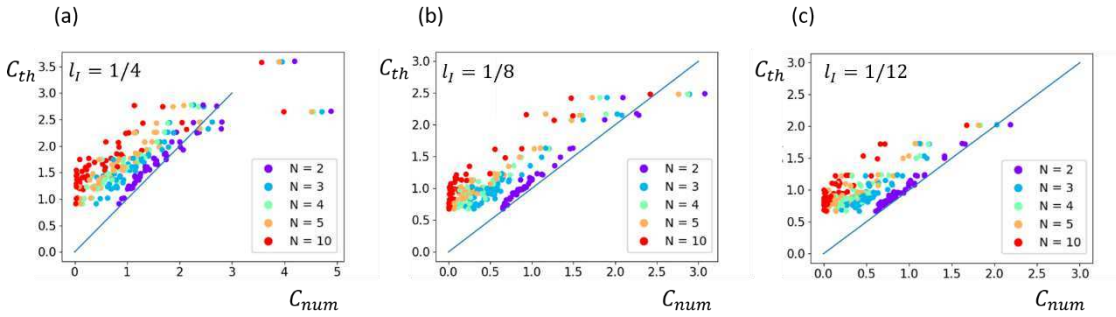


Figure 2-20: Conductance analytique C_{th} en fonction de la conductance calculée numériquement C_{num} pour plusieurs réalisations de fracture ayant un nombre d'intersection $N = [2,3,4,5,10]$ (modèle numérique présenté Figure 2-19). Le diamètre de fracture vaut 1 et les tailles d'intersection l_I sont constantes. (a) $l_I = 1/4$, (b) $l_I = 1/8$, (c) $l_I = 1/12$. La ligne bleue représente $y = x$.

Le flux total qui traverse la fracture Q_{tot} est mesuré dans la simulation numérique par le flux total de l'unique intersection h_1 et est comparé au flux total théorique $Q_{tot,th} = |h_2 - h_1| \sum C_{th}$ (Figure 2-21a). La manière dont le flux total Q_{tot} est réparti entre les flux Q_I des différentes intersections h_2 est mesuré par

$$f = \frac{Q_I}{Q_{tot}}. \tag{2-2}$$

Cette répartition mesurée dans le cas numérique, f_{num}, est comparée à la mesure théorique, f_{th} (Figure 2-21b). Nous observons qu'en utilisant la conductance analytique, les flux sont distribués de manière plus égalitaire entre les différentes intersections h_2 qu'ils ne le sont dans la réalité, c.-à-d. le cas numérique (distribution des f_{th} plus resserrée que celles des f_{num}). Ce résultat montre que si l'on souhaite corriger les conductances analytiques pour prendre en compte l'effet du nombre d'intersections, il est préférable de ne pas utiliser un facteur multiplicatif qui ne changerait pas cette distribution. Cette observation rejoint l'hypothèse de plutôt utiliser un terme de soustraction (équation (2-1)). Nous montrons que ce terme de soustraction $F(N)$ est le même pour toutes les intersections h_2 quelle que soit leur distance à l'intersection h_1, et varie très peu avec la taille d'intersection considérée (Figure 2-22).

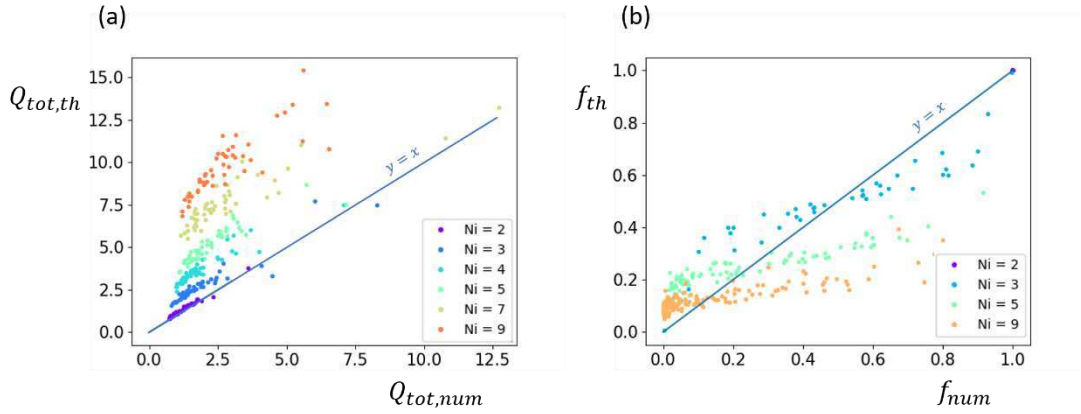


Figure 2-21: (a) Flux total théorique $Q_{tot,th}$ en fonction du flux calculé numériquement $Q_{tot,num}$, et (b) fractionnement théorique f_{th} en fonction du fractionnement calculé numériquement f_{num}, pour plusieurs réalisations de fracture ayant un nombre d'intersection $N_i = [2,3,4,5,7,9]$.

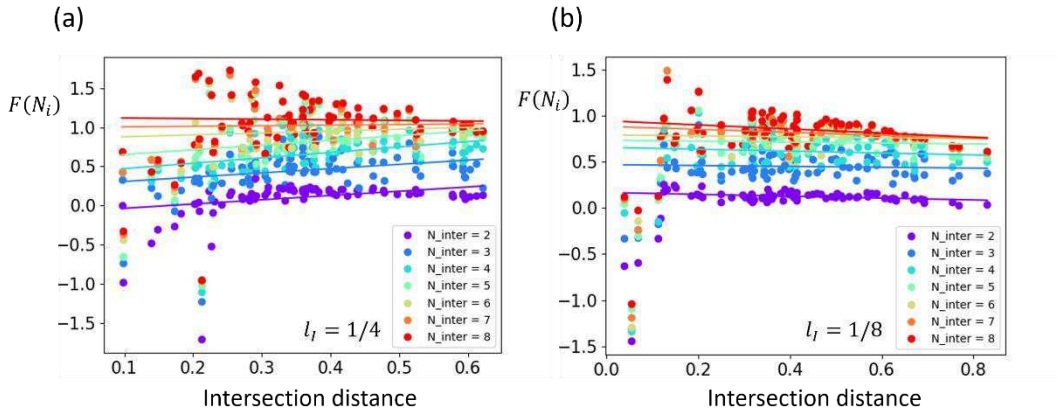


Figure 2-22 : Terme de différence $F(N_i) = C_{th} - C_{num}$ *en fonction de la distance entre intersections pour plusieurs réalisations de fracture ayant un nombre d'intersection* $N = [2,3,4,5,6,7,8]$ *(modèle numérique présenté Figure 2-19). Le diamètre de fracture vaut 1 et les tailles d'intersection* l_I *sont constantes. (a)* $l_I = 1/4$ *et (b)* $l_I = 1/8$.

Dans la suite de cette section, nous présentons des développements afin d'estimer le terme de soustraction $F(N)$. Le flux total calculé par la simulation numérique s'exprime comme

$$Q_{tot,num} = \sum C_{num} \,.|h_1 - h_2|. \tag{2-3}$$

Si le terme $F(N)$ est le même pour toutes les intersections h_2, alors on peut écrire à partir de l'équation (2-1)

$$\sum C_{num} = \sum C_{th} - (N-1).F(N) \tag{2-4}$$

où $(N-1)$ est le nombre d'intersection h_2. En combinant les équations (2-3) et (2-4), nous obtenons

$$F(N) = \frac{1}{N-1}.\left(\sum C_{th} - \frac{Q_{tot,num}}{|h_1 - h_2|}\right) \tag{2-5}$$

Nous faisons l'hypothèse que, dans la simulation numérique, le flux total est majoritairement influencé par l'intersection h_2 ayant la conductance la plus élevée avec l'intersection h_1. Ainsi,

$$\frac{Q_{tot,num}}{|h_1 - h_2|} \sim \max(C_{th}) \tag{2-6}$$

En combinant les équations (2-5) et (2-6), nous obtenons une expression pour le terme correctif $F(N)$ qui ne dépend que des conductances théoriques et du nombre d'intersections

$$F(N) \sim \frac{1}{N-1} \cdot \left(\sum C_{th} - \max(C_{th}) \right). \quad (2\text{-}7)$$

Après avoir soustrait le terme $F(N)$ à chaque conductance analytique C_{th} d'une réalisation nous obtenons une formulation analytique corrigée des conductance $\widehat{C_{th}} = C_{th} - F(N)$ (équation (2-1)), qui permet d'approcher la conductance réelle C_{num} quel que soit le nombre d'intersections sur la fracture (Figure 2-23). Notons que si $C_{th} - F(N) < 0$, alors $\widehat{C_{th}} = 0\, m^2.s^{-1}$.

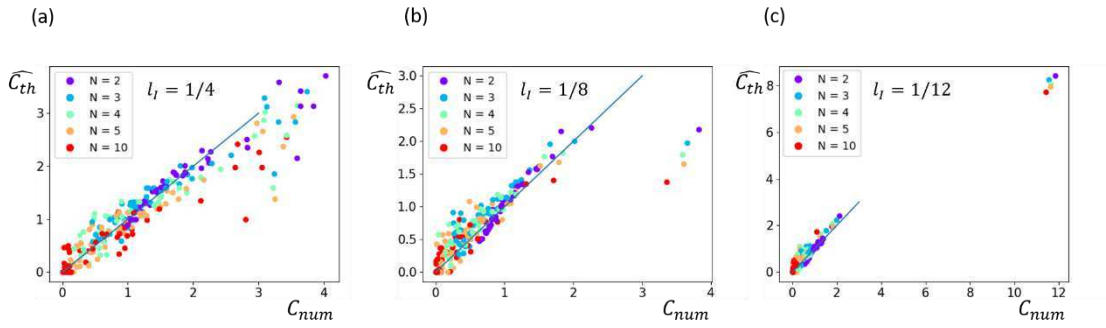


Figure 2-23 : Conductance analytique corrigée $\widehat{C_{th}}$ en fonction de la conductance calculée numériquement C_{num} pour plusieurs réalisations de fracture ayant un nombre d'intersection $N = [2,3,4,5,10]$. (a) $l_I = 1/4$, (b) $l_I = 1/8$, (c) $l_I = 1/12$. La ligne bleue représente $y = x$.

Les résultats obtenus sont satisfaisants mais se limitent pour le moment à la configuration simple que nous avons étudiée, à savoir une seule intersection de charge h_1 échange des flux avec toutes les autres de charge h_2. Pour aller plus loin, il faudrait étudier des cas plus complexes où, par exemple, plusieurs intersections portent une charge h_1 et plusieurs autres une charge h_2, ou encore, un cas où la charge attribuée à chaque intersection est tirée aléatoirement.

2.4.2. Déconstruction du graphe des intersections pour éviter la redondance des liens

Commentaire : la méthode proposée dans cette section a été développée par le doctorant dans le module d'utilisation des graphes du logiciel *DFN.Lab.*

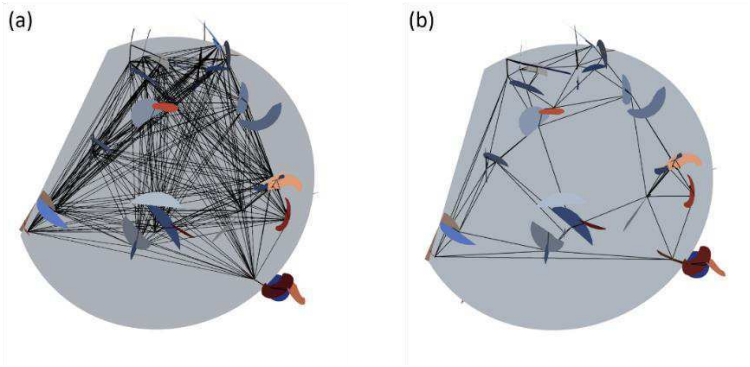


Figure 2-24: Fracture isolée à partir d'un DFN et graphe des intersections (liens noirs) complet (a) et déconstruit (b).

L'article de la section 2.3. présente l'utilisation de deux types de graphes, un graphe des fractures et un graphe des intersections. Ce dernier relie toutes les intersections d'une fracture deux à deux. Ceci engendre des flux qui sont drastiquement surestimés à cause de la multiplicité des chemins possibles d'un nœud/intersection à l'autre sur une même fracture (Figure 2-6b). Cette architecture rend le graphe très redondant par rapport à la réalité physique des flux sur le plan de fracture (Figure 2-24a). L'article propose alors une solution à ce problème consistant à réduire les conductances de tous les liens par un facteur de correction (« *Multiple-paths* », section 3.1.4). Lors de ces travaux de thèse, nous avons exploré une autre méthode de correction qui consiste à enlever certains liens du graphe des intersections. L'hypothèse est que certains liens n'ont pas de réalité physique, par exemple, deux liens qui se croisent sur le plan de fracture, ou encore un lien reliant deux intersections qui soient toutes les deux des entrées (ou des sorties) pour le flux de la fracture. La méthode est d'autant plus intéressante que le nombre de liens d'une fracture ayant N intersections vaut $\frac{N(N-1)}{2}$, ce qui peut rendre le graphe des intersections finalement assez lourd numériquement (par exemple, 100 intersections → 4950 liens - Figure 2-24a).

La méthode de « déconstruction » que nous avons testée consiste à comparer deux à deux tous les liens d'une fracture, qui n'ont pas d'intersection en commun. Si les deux liens se croisent, alors on compare leurs conductances. Le lien avec la conductance la plus basse est sélectionné. A la fin du processus de sélection, tous les liens sélectionnés sont supprimés du graphe. On obtient alors un graphe beaucoup moins redondant (Figure

2-24b). La méthode est appliquée à des DFN Poissoniens de différentes connectivités. Les DFN sont générés dans un volume de taille $30\,m$, et la taille de fracture varie de $1m$ à $30m$ en suivant une loi de puissance d'exposant -4. Le paramètre de percolation p est le paramètre cible de la génération (voir article de la section 2.3). Les différentes valeurs de p testées sont $4, 5, 6$ et 7. Pour chaque valeur de p, cinq réalisations de DFN stochastiques sont générées. Un graphe des intersections est alors créé à partir de chaque DFN en utilisant pour les liens la conductance établie dans l'article (section 3.1.3) et non-corrigée par la correction « *Multiple-paths* » (section 3.1.4). Ensuite, la méthode de déconstruction décrite ci-dessus est appliquée au graphe.

La méthode de déconstruction réduit drastiquement le nombre de liens du graphe. Alors qu'initialement le nombre de liens d'une fracture avec N nœuds/intersections était égal à $\frac{N(N-1)}{2}$, nous observons dans tous les DFNs générés que, après déconstruction, ce nombre suit une loi proche de $2N$ (Figure 2-25). En suivant la méthode utilisée dans l'article de la section 5.3., nous estimons une perméabilité équivalente du graphe initial et du graphe déconstruit. Les deux résultats sont comparés à la perméabilité calculée par simulation complète sur DFN maillé (Figure 2-26). La méthode de déconstruction (lignes oranges) permet de réduire drastiquement la surestimation de perméabilité dans le graphe initial (lignes bleues). Une faible surestimation estimée à 2.3 demeure dans le graphe déconstruit, et la particularité est qu'elle n'est plus corrélée au paramètre de percolation p, c'est-à-dire à la connectivité du DFN. Si ce biais reste constant quel que soit la géométrie d'un DFN, alors il sera facile de corriger à postériori un calcul de perméabilité avec cette méthode.

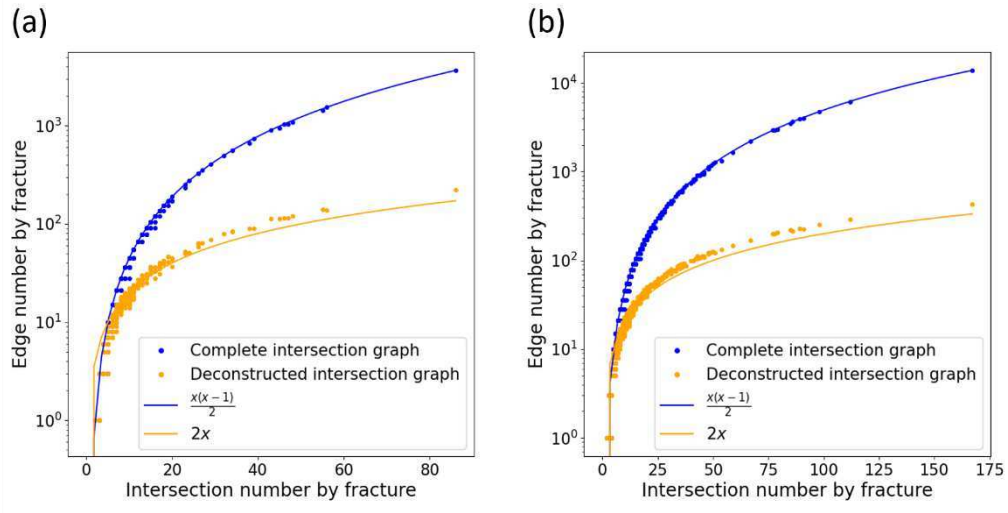


Figure 2-25: Nombre de liens en fonction du nombre de nœuds (ou intersections) par fracture, pour un graphe des intersections. (a) une réalisation de DFN avec faible paramètre de percolation ($p = 4$) et (b) une réalisation de DFN avec fort paramètre de percolation ($p = 7$). Le cas pour un graphe des intersections entier est en bleu et pour un graphe des intersections déconstruit est en orange.

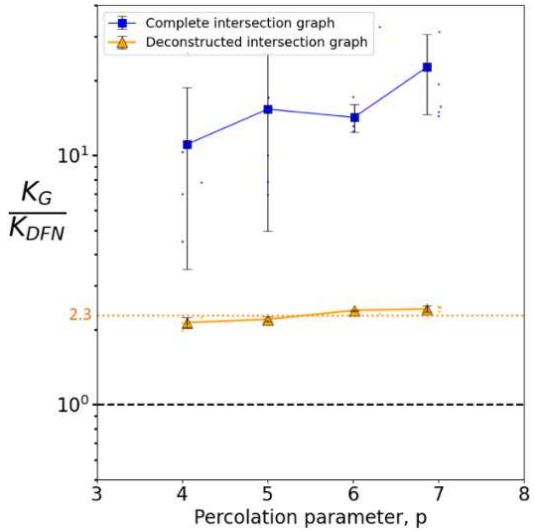


Figure 2-26: Ratio moyen entre perméabilité calculée à partir d'une simulation de graphe, K_G, et d'une simulation de flux complète, K_{DFN}, en fonction du paramètre de percolation. Le cas pour un graphe des intersections entier est en bleu et pour un graphe des intersections déconstruit est en orange. Pour chaque paramètre de percolation, 5 réalisations sont effectuées (points bleus et oranges).

2.5. Conclusions et perspectives sur l'utilisation des graphes

Dans ce chapitre, nous avons montré les différentes utilisations que l'on peut faire d'un graphe dans le but de réduire les modèles de DFN et simplifier l'analyse d'un réseau de fractures. Plus précisément, dans le cadre du travail de thèse, nous nous sommes attardés sur l'utilisation du graphe comme une structure simple permettant de calculer rapidement les flux à l'échelle topologique, sans passer par un calcul complet sur un DFN maillé. La nouveauté dans notre travail porte sur ces différents points :

- une définition analytique des conductances des liens du graphe plus fidèle à la quantité d'écoulement sur le plan d'une fracture avec ouverture constante ;
- la comparaison des résultats entre simulation de graphe et simulation complète DFN, à l'échelle du réseau mais aussi à l'échelle locale des flux par fracture ;
- la reconnaissance des erreurs du graphe induit par la géométrie complexe du DFN (effet nombre d'intersections par fracture sur le flux). La surestimation du graphe reste cependant faible ($\times \sim 2$ pour les DFN testés les plus connectés) ;
- la reconnaissance des erreurs du graphe induites par son architecture (redondance des liens dans le graphe des intersections ; mauvaise reproduction des flux locaux dans le graphe des fractures) ;
- la proposition de méthodes pour contourner les erreurs énoncées ci-dessus (réduction des conductances selon le nombre d'intersections, suppression de liens dans le graphe des intersections) ;

Le travail présenté dans ce chapitre n'a pas traité de cas où les ouvertures, constantes par fracture, étaient distribuées dans le DFN (p. ex. corrélée à la taille de fracture). Une étude complémentaire consisterait à vérifier les estimations de flux du graphe dans ce type de modèle de DFN.

La définition analytique de conductance a été développée pour un cas idéal d'ouverture constante par fracture. Cependant, les modèles montrent que l'ouverture distribuée (rugosité) du plan de fracture chenalise les flux et donc modifie la surface d'écoulement et son intensité (De Dreuzy et al., 2012; Larsson et al., 2012). Dans la suite de ce travail, il faudrait prendre en compte ces effets dans la définition de la conductance des liens.

Finalement, nous avons principalement traité des questions de flux dans ce chapitre mais il serait intéressant de simuler du transport de particules avec un graphe. C'est l'objet de l'étude de Karra et al. (2018), qui montre que les temps de transport sont en moyenne

plus longs dans le graphe que dans la simulation complète. Cette étude utilise une conductance plus simple et moins fidèle à la géométrie de l'écoulement sur le plan de fracture. Il serait donc intéressant de comparer leurs résultats à des simulations de transports en utilisant la conductance développée dans notre étude. Une difficulté est de représenter la variabilité des temps de transports d'une fracture dans un lien unique. En effet, même pour un cas de fracture avec une ouverture constante, on aura des flux localement très rapides et des zones plus lentes, alors qu'un lien aura une unique valeur moyenne de flux.

Chapitre 3

Analyse de la distribution du colmatage dans les réseaux de fractures à partir d'une modélisation numérique de réactivité chimique couplée aux flux

Table des matières :

3.1. Introduction 92

3.2. Résumé de l'article 93

3.3. Projet d'article : « Analysis of sealing distribution in Discrete Fracture Networks by a first-order reactive transport model » 94

1. Introduction 95

2. Theoretical developments 96

3. Pre-analysis of the sealing rate and time as a function of fracture aperture and surface 104

4. Distribution of sealing in discrete fracture networks: correlation with fracture size 109

5. Conclusion and discussion 123

6. Appendices 124

3.4. Résolution de modèle de colmatage avec une structure de graphe 125

3.4.1. Méthode de calcul 126

3.4.1.1. Schéma de résolution 126

3.4.1.2. Matrice de résolution des concentrations 127

3.4.1.3. Pas de temps intelligent 129

3.4.2. Résultats préliminaires 129

3.5. Conclusion et discussion 130

3.1. Introduction

Actuellement, les modèles numériques calculant des processus réactifs aux parois des fractures, comme la dissolution ou la précipitation, portent principalement sur l'étude de fracture unique (Ameli et al., 2014; Chaudhuri et al., 2008; Lang et al., 2015; Mourzenko et al., 1996), mais très peu d'études proposent une modélisation ces processus à l'échelle de réseaux de fractures complets. Pourtant, ces réseaux présentent des propriétés variables d'une fracture à l'autre (p. ex. le flux, l'ouverture, ou la taille). Il est donc probable que les processus de précipitation/dissolution se distribuent de manière hétérogène dans le réseau de fractures. Dans le cas du colmatage des fractures, le flux est une composante importante puisqu'il transporte les composants qui vont se déposer ou précipiter (Bekri et al., 1997; Mourzenko et al., 1996). Cependant, la complexité des réseaux de fractures, notamment le nombre de fractures, fait qu'un modèle de précipitation couplé aux flux nécessite des ressources numériques élevées. Dans ce chapitre, nous adressons cette problématique en analysant comment un modèle simple de ce type se distribue dans un réseau de fractures ayant des ouvertures et tailles variables. Notons que nous négligeons l'impact de la rugosité de fracture et ne considérons que des ouvertures constantes par fracture.

Les sections 3.2. et 3.3. présentent un projet d'article dans lequel des taux de précipitation sont estimés par fracture, en fonction de leurs ouvertures, leurs tailles et leurs flux. Ce projet d'article a été démarré, alors qu'aucun outil permettant des calculs plus complexes n'avait été encore développé. Dans la section 3.4. , nous présentons des résultats préliminaires sur l'utilisation d'une structure de graphe pour résoudre des calculs plus complexe. L'outil a été développé plus tardivement dans la thèse. De par sa simplicité, le graphe permet des calculs de flux plus rapides qu'un DFN maillé (voir chapitre 2). Ceci permet de résoudre un processus dans lequel les flux évoluent à mesure que le colmatage ferme des parties du réseau de fractures, sans que les ressources numériques demandées et les temps de calculs ne soient trop importants.

3.2. Résumé de l'article

Un modèle de précipitation aux parois des fractures est calculé dans des réseaux DFNs. Ce modèle repose sur une réaction de cinétique du premier ordre, dont la vitesse dépend de la manière dont le soluté est transporté dans les fractures. Des simulations de flux sont réalisées dans des DFNs. Un taux de précipitation moyen, noté $\dot{b_f}$, est ensuite défini en fonction des paramètres de fracture suivant : son flux total, sa surface et son ouverture.

Dans cette étude, deux scénarios pour la source du soluté sont explorés : un premier dans lequel la source est introduite à l'entrée du système, et un deuxième où la source est disséminée sur le plan de fracture, reproduisant des zones ponctuelles de dissolution. Le but est d'évaluer la manière dont la localisation de la source peut impacter la distribution des précipitations dans le réseau de fractures ainsi que la distribution des temps de fermetures des fractures.

Dans le modèle, trois mécanismes sont pris en compte : la cinétique de la réaction, le transport du soluté, et la diffusion qui amène le soluté aux parois de la fracture. Chaque mécanisme peut potentiellement limiter et donc contrôler la réaction. Une simplification de la formulation de $\dot{b_f}$ est proposée pour chaque mécanisme limitant.

L'étude se focalise sur des corrélations possibles entre les temps de fermeture et la taille de fracture. En effet, une corrélation de ce type devrait fortement influencer la connectivité du réseau, car si les grandes fractures sont fermées les premières alors la connectivité devrait fortement baisser. A l'inverse, elle sera maintenue longtemps si les grandes fractures sont fermées les dernières.

Le modèle est d'abord testé pour des DFNs avec ouvertures de fractures constantes. Dans ces réseaux, aucune corrélation n'est mesurée entre la taille de fracture et les temps de fermetures. Ensuite, le modèle est testé dans des DFNs avec ouvertures corrélées aux tailles de fractures. Dans ce cas, la corrélation dépend du mécanisme de précipitation limitant et du type de source. Si la source est introduite en entrée du système, alors les temps de fermetures sont positivement corrélés à la taille des fractures seulement dans le cas où le mécanisme limitant est la diffusion. Si la source est disséminée sur le plan de fracture, alors une corrélation positive est toujours observée quel que soit le mécanisme limitant. Ces corrélations positives indiquent que les grandes fractures seront les dernières à être fermées et donc que la connectivité du réseau sera maintenue longtemps.

3.3. Projet d'article : « Analysis of sealing distribution in Discrete Fracture Networks by a first-order reactive transport model »

Diane Doolaeghe[1,2], Philippe Davy[1], Caroline Darcel[2]

[1] Géosciences Rennes, OSUR, Université de Rennes 1, 35042 Rennes, France
[2] Itasca Consultants S.A.S., Ecully, France

Abstract

A first-order reactive transport precipitation model is simulated in Discrete Fracture Network models, by defining an average sealing rate by fracture ($\dot{b_f}$). This latter depends on fracture parameters: the fracture surface, aperture, and flow. The present analyses focus on how these relationships can induce correlation with the fracture size. Predicting this type of correlation is critical because it likely impacts network connectivity. In the sealing model, two scenarios for the source of elements in the fluid are proposed: one where the chemical source is introduced at the system boundary and another where the sources are disseminated on the fracture planes. Different precipitation regimes are also identified depending if the precipitation is limited by the solute transport, the diffusion to the fracture walls, and the reaction kinetics. In the DFNs, two models for the fracture apertures are tested: one constant and one positively correlated to the fracture size. No correlation between the sealing rates and times and the fracture size is measured in the constant aperture model. In the correlated aperture models, correlations are identified and depend on the precipitation regime and the type of source. If the source is introduced at the system boundary, a positive correlation between the sealing time and the fracture size is only if the fractures are in the regime diffusion-limited. If the source is disseminated on the fracture planes, a positive correlation is always observed, indicating that the largest fractures should always be the last to be sealed.

1. Introduction

In geological systems, fractures provide pathways for flow. Since their transmissivity is a non-linear function of the fracture aperture, any modification of the fracture aperture by sealing or erosion processes have drastic consequences on flow (McGuire et al., 2013; Moore et al., 1994; Polak et al., 2003). In this paper, we focus on sealing processes caused by mineral precipitation (chemical adsorption - Chaudhuri et al. (2008); Dijk and Berkowitz (1998); Jones and Detwiler (2016)) or elements deposition (physical adsorption - Chrysikopoulos and Abdel-Salam (1997)) on the fracture wall, which decreases the fracture apertures. The motivation is to understand if these processes will seal the preferential flow paths, that are typical of fractured systems, or leave them open (Serrano et al., 2008).

Sealing is a process, whose occurrence is controlled by thermodynamic conditions and rates by thermodynamics, flow and fracture geometries. The role of flow is twofold: it transports dissolved minerals over a certain distance if the precipitation is not instantaneous, entailing a distribution of reaction rates that may vary with the flow intensity distribution; it induces chemical gradients that favor reaction rates (Dentz et al., 2011). In addition to controlling flow distribution (Davy et al., 2006a; Le Borgne et al., 2007; Le Goc et al., 2010b), the fracture geometry controls the reaction surface in any solid/liquid reaction and therefore precipitation. Since sealing modifies the fracture geometry, sealing and flow process are coupled processes that may result in unevenly distributed patterns. This is all the more the case as the flow is naturally very heterogeneous in the fracture networks.

Evaluating the sealing rate distribution in fracture networks is important to predict the long term evolution of flowing paths in geological engineered and natural systems. Examples are the long term evolution of a deep nuclear waste repository (Selroos & Follin, 2014), the yield of geothermal reservoirs (Griffiths et al., 2016), or the time of recovery of fracture network permeability after an earthquake (Gratier, 2011; Yehya & Rice, 2020). The sealing distribution has been to date rather well studied in single fractures by considering the effect of variable apertures on reaction rates and fracture aperture evolution (Deng et al., 2018a; Deng et al., 2018b; Detwiler & Rajaram, 2007). However, to our knowledge, it has barely, if ever, been studied in fracture networks.

Fracture networks are commonly characterized by a wide distribution of sizes and apertures, which confer to the network a multi-scale structure and highly heterogeneous flow rates per fracture (Bonnet et al., 2001; Bour & Davy, 1998; Davy et al., 2006a). The present study aims at evaluating how sealing is distributed in this multi-scale structure. Considering the large distribution of fracture size, a special focus will be on correlations between sealing rates and fracture characteristics, in particular their fracture size. How the connectivity of the network will decrease by sealing depends greatly on the type of fractures that preferentially seal. If the largest fractures remain open, they can enable global connectivity by themselves.

In addition, the way clogging is distributed in the network as a function of fracture size strongly controls network connectivity and flow even at the same open fraction (Le Goc et al., 2018).

The flow in the fracture network is calculated from a DFN – Discrete Fracture Network – approach, where the network is made of a large number of interconnected fractures (Davy et al., 2018b; Lei et al., 2017). The sealing model is a first-order reactive transport precipitation model, which includes solute transport, reaction kinetics, and transverse diffusion to the fracture walls. We calculate the average sealing rate per fracture, $\dot{b_f}$, as a function of the fracture characteristics (surface S_f directly related to the size l_f, and average aperture b_f) and of the flow rate Q_f $[m^3.s^{-1}]$ through the fracture. The model is simplified by not considering the variations of sealing rate $\dot{b_f}$ within the fracture.

The $\dot{b_f}$ distribution is evaluated in DFN with power-law size distributions and different aperture distributions: constant and correlated to fracture size. We consider different kinetics of reaction relative to the flow rate and diffusion parameter. Finally, we consider two scenarios for the solute source: a constant concentration at the flowing inlet of the system (external source), and a production rate, R_p, on fracture surfaces (internal source). This later represents an enhanced dissolution at the contacting asperities by an effect of stress (pressure solution), or of a particular mineral with high solubility on the fracture surface.

The manuscript is organized as follows. We first detail the theoretical developments to establish the fracture sealing rate $\dot{b_f}$ (section 2). Then, we propose a pre-analysis on how $\dot{b_f}$ is likely to evolve as a function of fracture aperture, surface, and flow (section 3). Finally, we evaluate how the sealing rate $\dot{b_f}$, the sealing times t_f, and the proportion of open surfaces, f_{op}, are evolve as a function of fracture size, by performing DFN flow simulations (section 4). Discussion and conclusion are drawn in section 5.

2. Theoretical developments

2.1. Transport equations in a fracture equivalent pipe

In the case of a fracture with constant aperture and only two intersections, the flow Q $(m^3.s^{-1})$ can be approximated by a pipe-like model joining both intersections along the axis x with a varying width $W(x)$ and a wetted surface $S = \int_0^L W(x)dx$ (Figure 3-1a) (Doolaeghe et al., 2020). The pipe has a transmissivity T $(m^2.s^{-1})$, which is related to the fracture hydraulic aperture b as:

$$T = \frac{b^3.g.\rho}{12.\mu} \tag{8}$$

where g, ρ and μ are respectively the acceleration due to gravity ($m.s^{-2}$), the water bulk density ($g.m^{-3}$), and the water dynamic viscosity at 20°C ($g.m^{-1}.s^{-1}$). In rough fractures, the hydraulic aperture is likely to be smaller than the mechanical (true aperture), the one from which sealing rates should be calculated (Brown, 1987; Molron et al., submitted). In the present study, we consider parallel plate fractures and neglect the effect of a difference between hydraulic and mechanical aperture on sealing rates estimations.

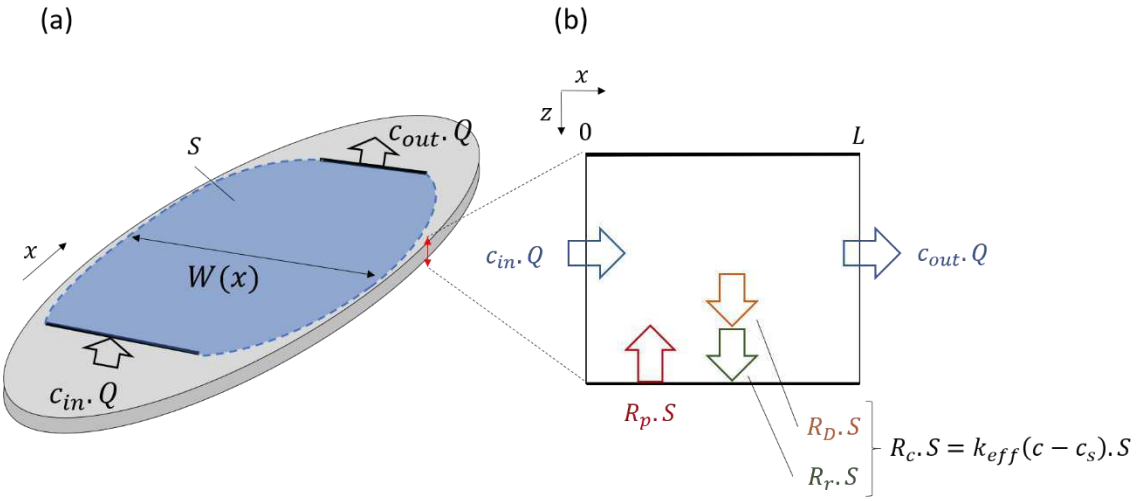


Figure 3-1 : (a) Illustration of a flowing fracture with two intersections (thick black lines). The blue area is the flowing surface S. It has a width $W(x)$ varying along the flowing axis x. (b) Illustration of the flowing system from a side angle. The different quantities involved in the solute mass balance (in $mol.s^{-1}$) are represented by large arrows: the transported solute (blue), the solute diffusing to the walls (orange), precipitating at the walls (green). The solute can also be produced by dissolution from the fracture walls (red arrow) (see section 2.3).

Transport of a dissolved mineral can be formulated using a depth-averaged equation ($b.c$ is the number of mol in the solute per fracture unit surface),

$$\frac{D(b.c)}{Dt} = \frac{d(b.c)}{dt} + v.\frac{d(b.c)}{dx} = R, \tag{9}$$

where x is the advective flow direction (see Figure 3-1a), v is a local fluid velocity ($m.s^{-1}$), c the mineral concentration ($mol.m^{-3}$) and R the source/sink term ($mol.m^2.s^{-1}$) that, in our case, is due to the fracture reactive walls. $\frac{D}{Dt}$ represent the Lagrangian derivative. In the present study, we neglect the effect of diffusion on transport in the x direction, so that only an advective term is considered in equation (9). The local velocity can be expressed as $v =$

$\frac{Q}{b.W(x)}$. In steady-state conditions and b being constant by fracture, we re-write the transport equation as:

$$\frac{dc}{dx} = \frac{R.W(x)}{Q}. \tag{10}$$

2.2. Precipitation reaction at the fracture walls

Reactions occurring at the fracture walls lead to the precipitation/deposition of the mineral in the solution, which in turn decreases the fracture aperture with a rate $\dot{b}$ $(m.s^{-1})$. In the present study, we consider an idealized case of a first-order reaction between fluid and solid. The flux of reaction R_r $(mol.m^2.s^{-1})$, consumed from the fluid at the fracture walls is defined as

$$R_r = b.k.(c_w - c_s), \tag{11}$$

where k is the reaction rate coefficient (s^{-1}), c_w the concentration at the fracture walls, and c_s the saturation or equilibrium concentration.

In the model, we consider the effect of a transverse diffusive flux, R_D, that brings the transported concentration c to the walls (c_w). Indeed, the consumption of solute at the walls can create concentration gradients along the transverse axis (z axis), which in turn creates a diffusive flux (Figure 3-2a). If the reaction kinetics is relatively fast, then diffusion becomes the limiting process to the reaction. If the reaction kinetics is relatively slow, then the reaction kinetics is limiting, and the transported concentration c and the concentration at the fracture walls c_w are quasi the same (Figure 3-2b).

Transverse diffusive flux R_D is commonly modeled by Fick's law,

$$R_D = -D.\frac{dc}{dz}, \tag{12}$$

but it can be also approximated in the case of parallel plates by an effective mass transfer relationship (Ameli et al., 2014; Detwiler & Rajaram, 2007),

$$R_D = \frac{D.Sh}{b}.(c - c_w). \tag{13}$$

D is the diffusion coefficient $(m^2.s^{-1})$ and Sh the dimensionless Sherwood number, equal to ~ 7.5 (Detwiler & Rajaram, 2007). As diffusive flux and reaction flux occur in series and both

fluxes are linear expressions of the concentration, an effective reaction coefficient k_{eff} $(m.s^{-1})$ accounting for diffusion and reaction can be written as

$$k_{eff} = \left(\frac{1}{bk} + \frac{b}{D.Sh}\right)^{-1} \tag{14}$$

The total flux of reactive elements, consumed from the transported concentration c, can now be expressed as

$$R_c = k_{eff}(c - c_s). \tag{15}$$

The fracture sealing rate $\dot{b}$ is related to the consumed flux R_c by

$$\dot{b} = \frac{R_c}{\rho_s}, \tag{16}$$

where ρ_s is the number of mol of solute per solid volume $(mol.m^{-3})$.

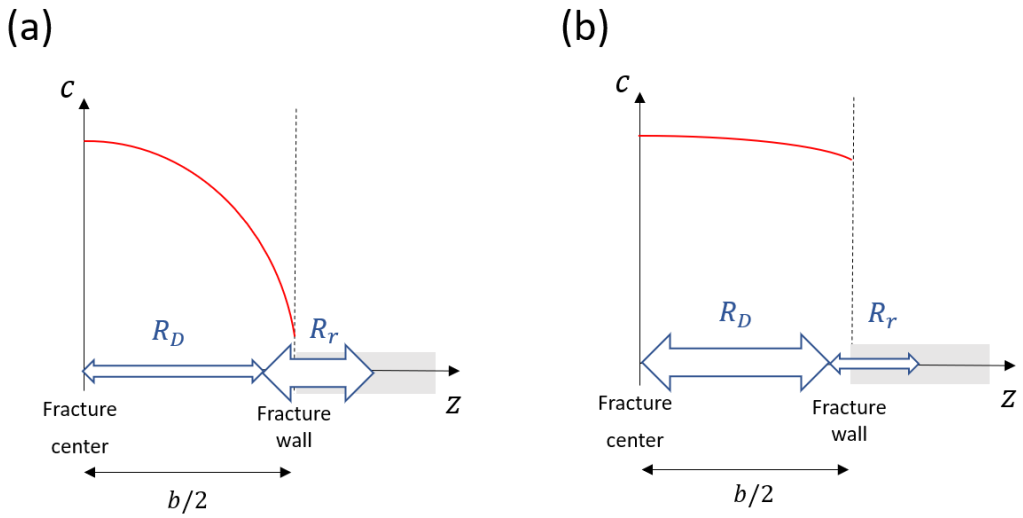


Figure 3-2: Schematical representation of the evolution of the solute concentration c as a function the z-axis (transverse axis), from the fracture center (between the two walls) to one of the walls. (a) Case where the diffusion flux R_D is limiting. (b) Case where the precipitation reaction flux R_r is limiting.

2.3. Models for the source of solute

In the present study, we consider two different scenarios for the source of the transported solute. The first scenario aims at reproducing the penetration of a "reacting" fluid (i.e., in chemical disequilibrium with the solid) into a system. We define c_s as the equilibrium concentration and $c_{in} \neq c_s$ the concentration of the reacting fluid. For this scenario that

mimics the sealing by an external source, the initial conditions are: $c(x = 0) = c_{in} > c_s$, and $c(x > 0) = c_s$. The second scenario aims at modeling reactivity induced by reactive sources at disseminated points of the fracture surfaces. This is the case of the dissolution of the solid that releases chemical elements in the water that will precipitate further downstream. Stress-enhanced dissolution at contact asperities (i.e., *pressure solution/dissolution*; Lang et al. (2015); Lu et al. (2018)), or the dissolution of specific minerals with large solubility are examples of such sources. We consider that this second scenario, where dissolution occurs, does not increase the fracture aperture b. The second scenario is modeled by introducing a production flux R_p $(mol.m^{-2}.s^{-1})$:

$$R_p = \frac{dM}{dt} \tag{17}$$

where M is the number of mols produced per unit surface of fracture. We consider that the kinetics of this production reaction is fast so that it does not depend on the transported solute concentration. It is only impacted by a local rise of the chemical potential (due to stresses or the presence of some solid minerals). These factors may vary from one fracture to another (e.g. the normal stress related to fracture orientation), but, as a first approximation, we consider R_p constant in the entire DFN.

The sink/source term R in the right-hand side of the transport equation (10) is now:

$$R = -R_c + R_p. \tag{18}$$

An illustration schematizing the fracture solute mass balance (in $mol.s^{-1}$) with the different sources and sinks terms is presented in Figure 3-1b. Rewriting the equation (10) by using equations (15) and (18) leads to:

$$\frac{dc}{dx} = \frac{\left(k_{eff}(c_s - c) + R_p\right).W(x)}{Q}. \tag{19}$$

2.4. Fracture sealing rate

Solving the differential equation (19) leads to a decreasing exponential function for the concentration as a function of x:

$$c(x) = \left(c_{in} - \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right)\right).\exp\left(-\frac{k_{eff}.S(x)}{Q}\right) + \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right) \tag{20}$$

$S(x)$ is the fracture surface swept by flow: $S(x) = \int_0^x W(x).dx$ (see Figure 3-1a).

The sealing rate $\dot{b}$ is proportional to the concentration c by the factor $\frac{k_{eff}.c}{\rho_s}$ (see equation (15) and (16)), so it also has a decreasing exponential shape as a function of x. In Figure 3-3, we present schematical curves on how the fracture flow Q impacts $\dot{b}(x)$, in the case where the source is a constant concentration at the entrance (c_{in} ; Figure 3-3a) and in the case where the source comes from the fracture plane (R_p; Figure 3-3b). Note that the flow Q only increases the deposition distance. In the first source case (c_{in}), at a given position, $\dot{b}$ increases with Q. In the second source case (R_p), at a given position, $\dot{b}$ decreases with Q.

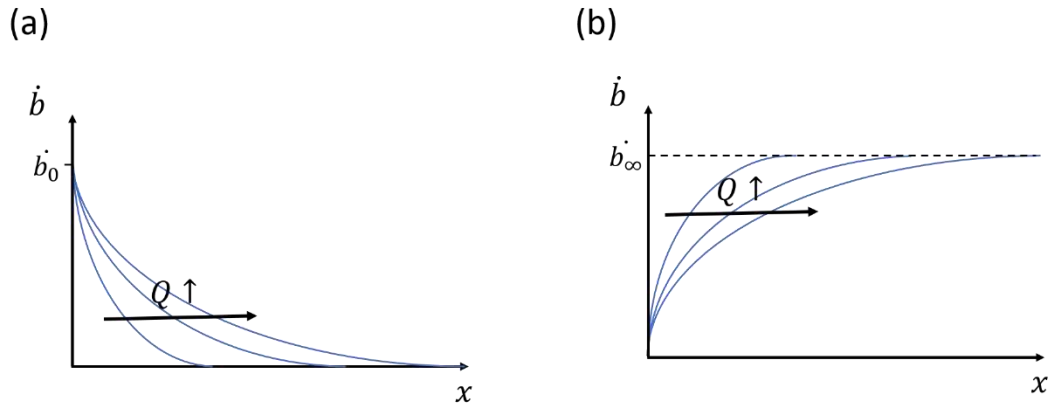


Figure 3-3: Schematical representation of how $\dot{b}(x)$ evolves the fracture flow Q. (a) Case with a constant concentration source c_{in} at the inlet of the fracture. (b) Case with a source produced by the fracture surface, R_p.

At the intersection where the flow exits the fracture ($x = L$), we can define the exiting concentration c_{out} as:

$$c_{out} = c(L) = \left(c_{in} - \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right)\right).\exp\left(-\frac{k_{eff}.S}{Q}\right) + \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right) \quad (21)$$

where the total fracture flowing surface $S = \int_0^L W(x).dx$ (see Figure 3-1a).

In the present study, we make the approximation of a constant sealing rate averaged over the surface S, noted $\bar{\dot{b}}$. We can derive it from the fracture solute mass balance (all the terms are presented in Figure 3-1b):

$$\bar{\dot{b}} = \frac{R_c}{\rho_s} = \frac{(c_{in} - c_{out}).Q}{S.\rho_s} + \frac{R_p}{\rho_s} \quad (22)$$

Replacing c_{out} by the expression (21) leads to the following expression:

$$\bar{\dot{b}} = \frac{Q}{S.\rho_s}\left(c_{in} - \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right)\right).\left(1 - \exp\left(-\frac{k_{eff}.S}{Q}\right)\right) + \frac{R_p}{\rho_s}. \quad (23)$$

2.5. Fracture with many intersections

In the common case where the fracture has more than two intersections, the fracture plane can be represented by a complex network of pipes i, each of them having a surface S_i, a flow Q_i (Figure 3-4). Note that, here, not all pairs of intersections are connected by a pipe, like it has been done in equivalent pipe-networks representations (Doolaeghe et al., 2020; Karra et al., 2018). The way intersections are connected depends on the flow organization on the fracture plane.

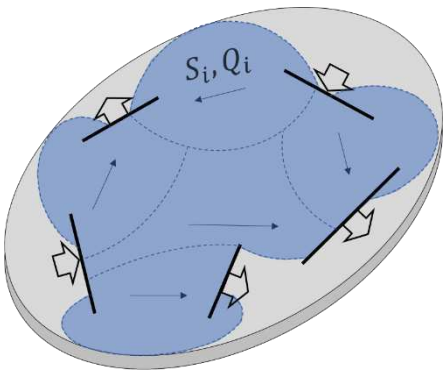


Figure 3-4: Illustration of how a fracture plane with more than two intersections can be shared by different flowing paths, each one having a flow Q_i and a surface S_i. Black thick lines represent the intersections. Blue dashed lines delimitate the different flowing paths and the blue arrow the flow direction. Large black arrows indicate how the flows enter and exit the fracture.

When the fracture has many flowing paths, it is likely that some of them seal faster than others because they have different properties (flow, surface, etc.), which possibly leaves some parts of the fracture open and other parts sealed. In the present study, we simplify this fracture-scale complexity by assuming that an average sealing rate is representative of how the fracture evolves in the fracture network. This fracture average sealing rate, noted $\dot{b_f}$, is defined as:

$$\dot{b_f} = \frac{\sum_i \left(\bar{\dot{b}}_i.S_i\right)}{S_f} \quad (24)$$

where i denotes one pipe (or flowing path) on the fracture. S_f is the total fracture surface. $\bar{\dot{b}}_i$ is defined in equation (23) by adding a subscript i to the flow Q, the surface S and the entering concentration c_{in} of the pipe i. We consider the other quantities involved in equation (23), R_p, c_s, k_{eff} and ρ_s constant on the fracture.

To obtain an expression of $\dot{b}_f$ as a function of fracture scale parameters, we define the fracture total flow Q_f, from each pipe's flow Q_i:

$$Q_f = \sum_i Q_i \tag{25}$$

with Q_i always counted as a positive quantity. This expression is equivalent to the one used by Maillot et al. (2016), where Q_f is the sum over the intersections of the absolute values of the flow divided by two. In this case with many flowing entrances, c_{in}, the total solute concentration entering the fracture is defined as:

$$c_{in} = \frac{\sum_i c_{in,i}.Q_i}{Q_f} \tag{26}$$

where $c_{in,i}$ is the pipe i entering concentration.

We also make the following approximations:

- The sum of the pipe surfaces equals the fracture total surface S_f :

$$\sum_i S_i = S_f \tag{27}$$

- The pipe flows Q_i are related to the total flow Q_f and to the surfaces as follows:

$$\frac{Q_i}{S_i} = \frac{Q_f}{S_f} \tag{28}$$

Note that the later approximation (equation (28)) postulates that the proportion of fracture surface occupied by a pipe, $\frac{S_i}{S_f}$, is proportional to its flow, Q_i, which is not necessarily true. This equality is however required to establish the equation (29) below.

Replacing now the term $\bar{\dot{b}}_i$ in equation (24) by its definition presented in equation (23), and including the equations (25), (26), (27), and (28), we derive an expression for the fracture sealing rate $\dot{b}_f$:

$$\dot{b}_f = \frac{Q_f}{S_f.\rho_s}\left(c_{in} - \left(c_s + \frac{R_p}{k_{eff}}\right)\right).\left(1 - \exp\left(-\frac{k_{eff}.S_f}{Q_f}\right)\right) + \frac{R_p}{\rho_s} \tag{29}$$

where Q_f is the total fracture flow, S_f the total fracture surface, and c_{in} the total solute concentration entering the fracture.

3. Pre-analysis of the sealing rate and time as a function of fracture aperture and surface

In this section, we evaluate how the fracture sealing rate's definition of equation (29) can be simplified, depending on the mechanism controlling (or limiting) the precipitation reaction. These mechanisms, defined throughout section 2, are the transport, the reaction kinetics, and the transverse diffusion. We use adimentionnal numbers, called Damkhöler numbers, which are classically used to quantify the control of one mechanism relatively to another (Steefel & Maher, 2009). The first Damkhöler number, Da_I, quantifies the control of the reaction kinetics versus the transport, defined here as:

$$Da_I = \frac{k.b.S_f}{Q_f} \tag{30}$$

and the second Damkhöler number, Da_{II}, the control of the reaction kinetics versus diffusion, defined here as:

$$Da_{II} = \frac{b^2.k}{D.S_h} \tag{31}$$

3.1. Characteristic aperture b_c and surface S_c

The mechanism controlling the reaction (see previous paragraph) depends on the fracture surface S_f and the fracture aperture b. We define fracture characteristic aperture b_c and surface S_c, which are used as threshold values to separate fractures that will be likely controlled by one mechanism or another.

The characteristic aperture b_c is defined as the fracture aperture for which the precipitation mechanism switches locally from being controlled by the reaction kinetics ($k_{eff} = k.b$) to being controlled by the transverse diffusion ($k_{eff} = \frac{D.S_h}{b}$). b_c corresponds to $Da_{II} = 1$ so that:

$$b_c = \sqrt{\frac{D.Sh}{k}} \tag{32}$$

and one can rewrite Da_{II}:

$$Da_{II} = \left(\frac{b}{b_c}\right)^2 \tag{33}$$

The characteristic surface S_c is defined as the fracture surface threshold, under which the precipitation mechanism is reaction-limited (or diffusion-limited depending on the fracture Da_{II}), and above which it is transport limited:

$$S_c = \frac{Q_f}{k_{eff}} \tag{34}$$

Note that $S_c = \frac{Q_f}{k.b}$ for low Da_{II} and $S_c = \frac{Q_f.b}{D_m.Sh}$ for high Da_{II}. Combining equations (14), (31), and (34), S_c can be written as:

$$S_c = \frac{Q_f}{k.b}(1 + Da_{II}). \tag{35}$$

Equation (35) is equivalent to:

$$\frac{S_f}{S_c} = \frac{Da_I}{1 + Da_{II}}. \tag{36}$$

3.2. Case with external solute source, c_{in}

In the case where the source of solute is only a constant concentration c_{in} (i.e. $R_p = 0$) at the entrance of the fracture, $\dot{b_f}$ can be written from equation (29) as:

$$\dot{b_f} = \frac{Q_f.c_{in}}{S_f.\rho_s}.\left(1 - \exp\left(-\frac{S_f}{S_c}\right)\right) \tag{37}$$

where S_c, the characteristic surface, is defined in equation (34). The equilibrium concentration c_s is equal to 0.

We analyse the asymptotes of equation (37). If $\frac{S_f}{S_c} > 1$, then $\left(1 - \exp\left(-\frac{S_f}{S_c}\right)\right) \sim 1$. If $0 < \frac{S_f}{S_c} < 1$, then $\left(1 - \exp\left(-\frac{S_f}{S_c}\right)\right) \sim \frac{S_f}{S_c}$ (see Appendix 6.1). Two regimes can therefore be highlighted:

$$\dot{b_f} = \frac{Q_f.c_{in}}{S_f.\rho_s} \qquad \text{if} \quad S_f > S_c \tag{38}$$

$$\dot{b_f} = \frac{k_{eff}.c_{in}}{\rho_s} \qquad \text{if} \quad S_f < S_c \tag{39}$$

In equation (38) ($S_f > S_c$), the sealing rate $\dot{b_f}$ is transport-limited and the local effects of reaction kinetics and diffusion can be neglected. In equation (39), the sealing rate $\dot{b_f}$ is either reaction or diffusion limited, but the effect of the flow Q_f is neglected. In this latter case, depending on the aperture b, we can define $\dot{b_f}$ as:

$$\dot{b_f} = \frac{k.b.c_{in}}{\rho_s} \qquad \text{if} \quad S_f < S_c \quad \text{and} \quad b < b_c \tag{40}$$

$$\dot{b_f} = \frac{D.Sh.c_{in}}{b.\rho_s} \qquad \text{if} \quad S_f < S_c \quad \text{and} \quad b > b_c \tag{41}$$

In this study, we make the hypothesis that the sealing rate $\dot{b_f}$ does not change over time, neglecting the fact that it could change as aperture and flow decrease. We estimate a fracture sealing time as $t_f = \frac{b}{\dot{b_f}}$. The different regimes presented above and their associated equations for $\dot{b_f}$ and t_f are summarized in Figure 3-5. In red, we highlight the fracture parameters: $b, Q_f,$ and S_f.

This analysis indicates that if the fracture surface S_f is smaller than the characteristic surface S_c, the sealing rate does neither depend on the flow Q_f nor on the fracture surface S_f, but only on fracture aperture b. In this case, a correlation with fracture size is thus only possible if the aperture b is correlated to fracture size. In the case where $b < b_c$ (reaction limited), the sealing time t_f does not depend on any fracture parameters, so it can never be correlated with fracture size in this model. When S_f is larger than S_c, $\dot{b_f}$ is proportional to the fracture flow Q_f and inversely proportional to the fracture surface S_f. In other terms, the ratio $\frac{Q_f}{S_f}$ is small enough (transport limited) and all the entering solute precipitates in the fracture (the fluid is completely depleted in solute when it leaves the fracture). In this case, the approximated time for a fracture to seal, t_s, is proportional to the ratio $\frac{b.S_f}{Q_f.c_{in}}$, which can be interpreted as the time to fill the fracture volume, $b.S_f$, by the quantity of solute entering the fracture $Q_f.c_{in}$.

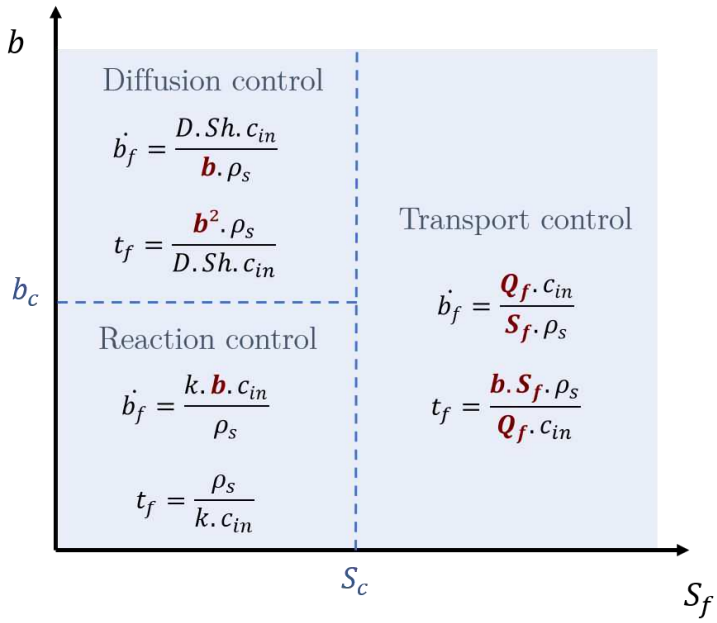


Figure 3-5: Graphical representation of the different approximations of the fracture sealing rate, $\dot{b_f}$, and the fracture sealing time, t_f, depending on fracture aperture b and fracture surface S_f. The different precipitation mechanisms, either controlled by diffusion, reaction, or transport, are also indicated. b_c and S_c are respectively the characteristic aperture (equation (32)) and a characteristic surface (equation (34)).

3.3. Case with internal solute source, R_p

In the case where the source of solute is only due to dissolution on the fracture plane (i.e. $R_p \neq 0$, and $c_{in} = 0$), $\dot{b_f}$ can be written as:

$$\dot{b_f} = \frac{R_p}{\rho_s}.\left(\frac{S_c}{S_f}.\left(\exp\left(-\frac{S_f}{S_c}\right) - 1\right) + 1\right) \tag{42}$$

where S_c, the characteristic surface, is defined in equation (34). Again, the equilibrium concentration c_s is chosen equal to 0. Equation (42) can be simplified by two asymptotes. If $\frac{S_f}{S_c} > 2$, then the factor in parenthesis of equation (36) approaches 1. If $0 < \frac{S_f}{S_c} < 2$, the factor in parenthesis approaches $\frac{1}{2}\frac{S_f}{S_c}$ (see Appendix 6.1). Two regimes can therefore be highlighted depending on the fracture surface S_f:

$$\dot{b_f} = \frac{R_p}{\rho_s} \qquad \text{if} \quad S_f > 2.S_c \tag{43}$$

$$\dot{b_f} = \frac{R_p.S_f.k_{eff}}{2.\rho_s.Q_f} \qquad \text{if} \quad S_f < 2.S_c \tag{44}$$

Depending on the aperture b, equation (44) is written as:

$$\dot{b_f} = \frac{R_p . S_f . k . b}{2 . \rho_s . Q_f} \qquad \text{if} \quad S_f < 2 . S_c \quad \text{and} \quad b < b_c \tag{45}$$

$$\dot{b_f} = \frac{R_p . S_f . D . Sh}{2 . \rho_s . Q_f . b} \qquad \text{if} \quad S_f < S_c \quad \text{and} \quad b > b_c \tag{46}$$

The different regimes presented above and their associated equations for $\dot{b_f}$ and sealing time t_f are summarized in Figure 3-6. In red, we highlight the fracture parameters: $b, Q_f,$ and S_f.

For this type of source, the dependency of $\dot{b_f}$ with the flow Q_f is now when the fracture surface is relatively small ($S_f < 2 . S_c$) and it is negative. $\dot{b_f}$ tends to a constant when the fracture surface S_f is large enough ($S_f > 2 . S_c$). In other terms, if the flow Q_f is relatively large ($S_f < 2 . S_c$), a part of the solute produced by the fracture precipitates in the fracture itself, and a part of it exits the fracture, in proportions depending on the flow Q_f. If the flow Q_f is relatively small ($S_f > 2 . S_c$), all the solute produced directly precipitates in the fracture and $\dot{b_f}$ depends only on the production rate R_p.

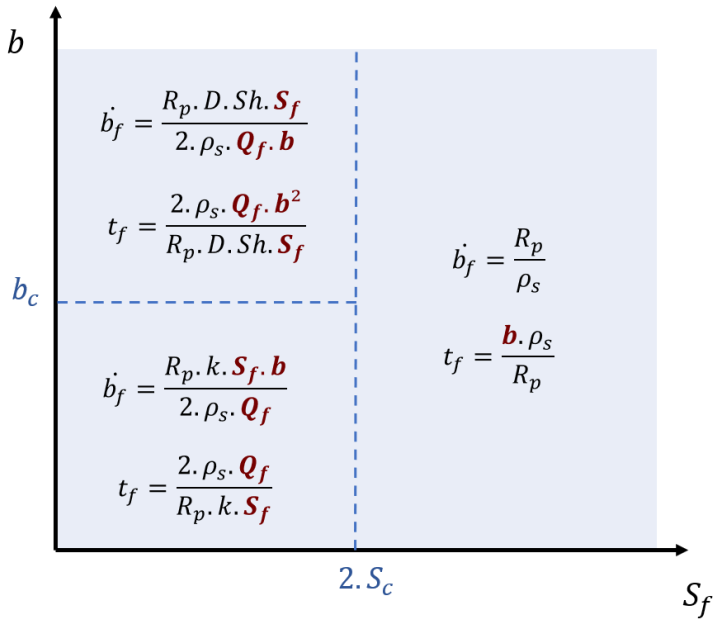


Figure 3-6: Graphical representation of the different approximations of the fracture sealing rate $\dot{b_f}$ and the fracture sealing time, t_f, depending on fracture aperture b and fracture surface S_f. b_c and S_c are respectively the characteristic aperture (equation (32)) and a characteristic surface (equation (34)).

The goal of this section was to provide some pre-analysis of the fracture sealing rate and time depending on its surface S_f and aperture b. In the next section, we analyze the sealing rates $\dot{b_f}$ in DFN with power-law size distribution. We have observed that in some cases, $\dot{b_f}$ is proportional (Figure 3-6) or inversely proportional (Figure 3-17) to the ratio $\frac{Q_f}{S_f}$, so we analyse which correlation this ratio induces with the fracture size, by simulating flow in DFN.

4. Distribution of sealing in discrete fracture networks: correlation with fracture size

4.1. DFN geometry and flow

Flow is simulated in DFN models with power-law size distribution using the software *DFN.lab* (Le Goc et al., 2019) (Figure 3-7a). Fractures are disk-shaped with a power-law size distribution: $n(l) = \alpha . l^a$, with $n(l).dl$ the number of fractures per unit volume, whose size is in the range $[l, l + dl]$. a is the exponent and α a density term (Bonnet et al., 2001). We use $a = 4$, which characterizes fracture networks in which the connectivity is equally controlled by large and small fractures (Bour & Davy, 1997). Ten realizations of DFN are generated in a cubic system with size $L = 50$ m, and fracture sizes spanning from 1 to 50 m. The surface density per volume, P_{32}, equals 1 $m^2.m^{-3}$, which produces DFNs with ~ 50000 fractures each.

Permeameter conditions are applied to simulate the flow, which means that constant heads h_1 and h_2 are applied to two opposing faces of the system. The fracture clusters that are not connected to these two borders are removed from the DFN, such as dead-ends, to keep the DFN backbone (flowing fractures).

For the aperture b distribution, two models are simulated: a model with constant aperture $b = 10^{-4}$ m, and a model with aperture correlated to the fracture size l_f. A relationship commonly measured between b and l_f is a powerlaw relationship:

$$b = A.\left(\frac{l_f}{2}\right)^B \tag{47}$$

Klimczak et al. (2010) indicates measured values for the exponent B between 0.5 and 1. In our models, we use $B = 0.66$, which translates in the transmissivity being related to fracture size by an exponent 2. The parameter A equals 10^{-4}.

In the correlated model, the aperture b spans from $6{,}3 \times 10^{-5}$ m for the smallest fractures (1 m) to $8{,}5 \times 10^{-4}$ m for the largest fractures (50 m). Orders of 10^{-5} to 10^{-3} m for the aperture are commonly measured in nature (Molron et al., submitted).

In Figure 3-7b, fracture flow Q_f distributions are presented for the two aperture models. The flow is normalized by the DFN total flow, Q_{tot}:

$$\widehat{Q_f} = \frac{Q_f}{Q_{tot}} \tag{48}$$

Note that the distribution is performed on $\log(\widehat{Q_f})$ to better highlight the group of very small flows around $\widehat{Q_f} = 10^{-15}$. These very small flows correspond to particular dead ends, that remain after the backbone selection (dead-ends finishing with a loop), and can produce very small head gradients in 3-dimentional networks (Doolaeghe et al., 2020) In our next analyses, fractures with $\widehat{Q_f} < 10^{-12}$ are removed from the DFNs, to keep only the group of $\widehat{Q_f}$ on the right in the distribution (see Figure 3-7b). Results without the normalization by Q_{tot} are also presented in Appendix 6.2.

On average, $\widehat{Q_f}$ is increasing with fracture size l_f as a power law with an exponent 1.8 for the constant aperture models and 2.6 for the correlated aperture model (Figure 3-8a). This leads to a flow per unit surface, $\frac{Q_f}{S_f}$, which decreases as $\frac{Q_f}{S_f} \sim l_f^{-0.2}$ for the constant aperture models, or increases as $\frac{Q_f}{S_f} \sim l_f^{0.6}$ for the correlated aperture models (see Figure 3-8b). Note that for the constant aperture model, the flow per unit surface tends to a constant for large fracture sizes.

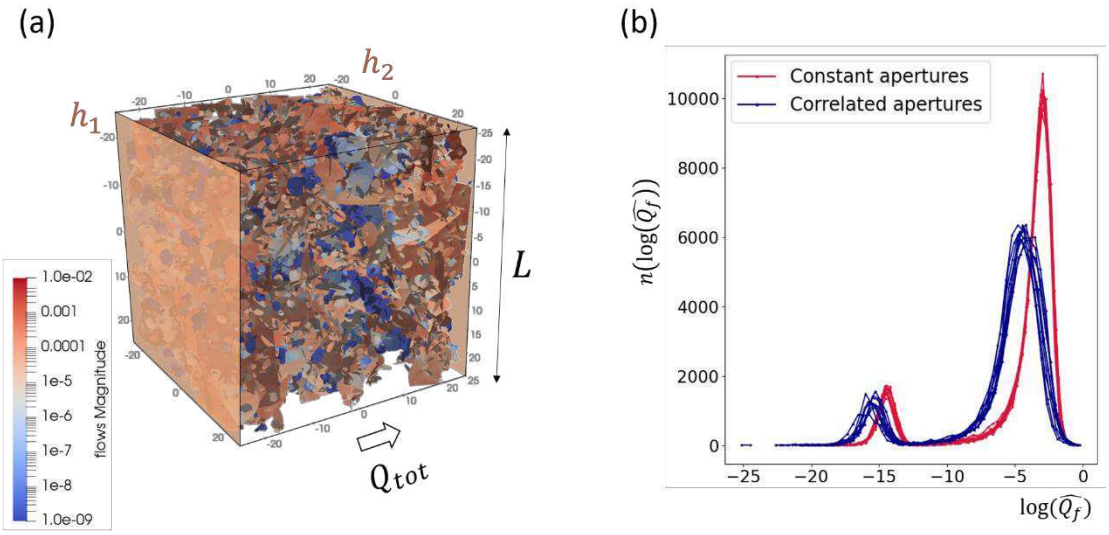


Figure 3-7 : (a) Flow simulation in a DFN with power-law size distribution and constant apertures. (b) Distribution of the normalized fracture flow logarithm $log(\widehat{Q_f})$.

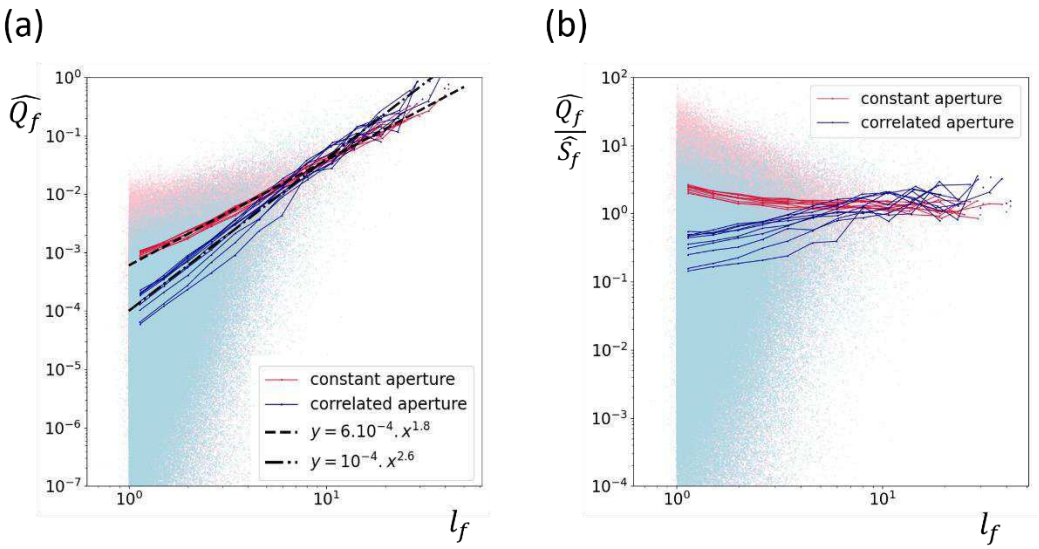


Figure 3-8: (a) Average fracture flow $\widehat{Q_f}$ *(normalized by* Q_{tot}*) as a function of fracture size* l_f*. (b) Average ratio of fracture flow* $\widehat{Q_f}$ *and fracture surface* $\widehat{S_f}$ *(normalized by the square of the system size,* L^2*).*

4.2. Reaction parameters

The reaction parameters are defined to cover the different controlling mechanisms analysed in section 3 (transport, reaction kinetics and transverse diffusion). In a DFN, it is likely these different controlling regimes coexist at the same time because fractures have different flows, apertures and surfaces. The Damkhöler numbers defined in section 3.1 are fracture scale number and are likely distributed in a DFN, so that one need to define DFN scale Damkhöler numbers to defined the reaction parameters. This is done as follows. The

fracture flow Q_f is normalized by the total flow Q_{tot} (see equation (48)). The fracture surface S_f is normalized as: $\widehat{S_f} = \frac{S_f}{L^2}$ with L the system size. Finally, the fracture aperture is normalized as: $\hat{b} = \frac{b}{\bar{b}}$ where $\bar{b}$ is the average aperture in the DFN. Using these normalizations, the DFN scale first Damköhler number is defined as:

$$Da_I^* = \frac{L^2.\bar{b}.k}{Q_{tot}} \tag{49}$$

and a second number as:

$$Da_{II}^* = \frac{\bar{b}^2.k}{D.Sh}. \tag{50}$$

The fracture scale Damköhler numbers (equation (30), and (31)) are related to the DFN scale numbers as:

$$Da_I = \frac{\widehat{S_f}.\hat{b}}{\widehat{Q_f}}.Da_I^* \tag{51}$$

$$Da_{II} = \hat{b}^2.Da_{II}^* \tag{52}$$

where $\widehat{Q_f}$, $\widehat{S_f}$ and $\hat{b}$ are the normalized fracture parameters.

In the two next sections, we analyze the sealing rate $\dot{b_f}$ for a wide range of Da_I^* and Da_{II}^*, so that, on average in the DFN, $\dot{b_f}$ is either controlled by the reaction ($Da_I^* < 1$ and $Da_{II}^* < 1$), by the diffusion to the fracture walls ($Da_I^* < 1$ and $Da_{II}^* > 1$), or by the transport of solute ($Da_I^* > 1$). In practice, the diffusion coefficient D is fixed to $10^{-9}\ m^2.s^{-1}$, which is a common order for diffusion (Xu et al., 2017; Yasuhara et al., 2004), and the average aperture $\bar{b}$ is chosen as to $10^{-4}\ m$. Then, the kinetics coefficient k and the total flow Q_{tot} vary according to the chosen values of Da_I^* and Da_{II}^* (see Table 3-1). The fracture flows Q_f are linearly proportional to the total flow Q_{tot}, which means that the normalized flows $\widehat{Q_f}$ do not change with Q_{tot}. For each Q_{tot} values, the fracture flows Q_f are computed as: $Q_f = \widehat{Q_f} \times Q_{tot}$.

Table 3-1: Damköhler numbers, Da_I^* and Da_{II}^*, chosen for the analysis of the sealing rate $\dot{b_f}$ with fracture size, and associated values of reaction kinetics constant k (s^{-1}) and total flow Q_{tot} $(m^3.s^{-1})$. Da_I^* quantifies the control of reaction versus flow and Da_{II}^* the control of reaction versus diffusion. (see equation (49) and (50)).

Da_I^* / Da_{II}^*	0.01	0.1	1	10	100
0.1	$k = 0.075$ $Q_{tot} = 1.9$	$k = 0.075$ $Q_{tot} = 0.19$	$k = 0.075$ $Q_{tot} = 0.019$	$k = 0.075$ $Q_{tot} = 0.0019$	$k = 0.075$ $Q_{tot} = 0.00019$
1	$k = 0.75$ $Q_{tot} = 19$	$k = 0.75$ $Q_{tot} = 1.9$	$k = 0.75$ $Q_{tot} = 0.19$	$k = 0.75$ $Q_{tot} = 0.019$	$k = 0.75$ $Q_{tot} = 0.0019$
10	$k = 7.5$ $Q_{tot} = 190$	$k = 7.5$ $Q_{tot} = 19$	$k = 7.5$ $Q_{tot} = 1.9$	$k = 7.5$ $Q_{tot} = 0.19$	$k = 7.5$ $Q_{tot} = 0.019$

Note that the values of k and Q_{tot} used here over-estimate values usually measured on the field or in experiments. For example, values for k between 10^{-12} and 10^{-1} are indicated in Deng et al. (2018b) and Yasuhara et al. (2004) depending on the mineral type and fluid temperature, whereas in Table 3-1 the values are in the range $10^{-1} - 10^{1}$. This means that in a fracture with aperture $b = 10^{-4}$ m and with diffusion coefficient $D = 10^{-9}$ (and if the transport is not the limiting process), the precipitation should be commonly controlled by the reaction kinetics and diffusion should be negligible ($Da_{II}^* \ll 1$). If the fracture aperture is larger, e.g., $b = 10^{-3}$ m, a control of diffusion can appear if $k > 0.0075$ ($Da_{II}^* > 1$), which now corresponds to the range indicated above (10^{-12}- 10^{-1}).

4.3. Correlation of $\dot{b_f}$ with fracture size

4.3.1. Case with external solute source, c_{in}

In the DFN models with constant apertures, there is no significant correlation between the sealing rate $\dot{b_f}$ and fracture size l_f whatever the Damköhler numbers are (Figure 3-9). The averages are constant with fracture size, l_f, and the standard deviation quantified by vertical error bars is high. The only correlation could have come from a correlation with the ratio $\frac{Q_f}{s_f}$, when transport is limiting (high Da_I^*, see Figure 3-5), but the average of $\frac{Q_f}{s_f}$ is quasi constant with l_f for the constant aperture models (see Figure 3-8b).

When the transport is not limiting, $Da_I^* < 1$, the variability of $\dot{b_f}$ decreases a lot as it is less impacted by the variability of the fracture flows. It approaches the constants $k.b$ in the reaction-limited case (Figure 3-9a) and $\frac{D.Sh}{b}$ in the diffusion-limited case (Figure 3-9c). Note that for the sealing time t_f, the average (thin lines in Figure 3-9d,e,f) is highly influenced by

some very high values when the fracture size l_f is small. These extreme values should result from fractures with a high ratio $\frac{S_f}{Q_f}$. The median of t_f is also represented to avoid the effect of these extreme values.

In DFNs with apertures correlated to fracture size, we note important correlations (Figure 3-10). Again, when the transport is limiting (high Da_I^*), the variability of $\dot{b_f}$ is quite large but on average, $\dot{b_f}$ increases with fracture size (purple and red lines in Figure 3-10a,b,c). This increase was predicted by the increasing average of the ratio $\frac{Q_f}{S_f}$ with l_f (see Figure 3-8b, blue lines). For the sealing time t_f, the average decreases with l_f (purple and red lines in Figure 3-10d,e,f), indicating that large fractures should be sealed first in this system.

When the transport is not limiting ($Da_I^* < 1$), the variability of $\dot{b_f}$ decreases and the correlation of $\dot{b_f}$ with fracture size switches from positive to negative depending on the fracture aperture and if the fracture is reaction-controlled or diffusion-controlled (orange and blue lines in Figure 3-10a,b,c). The sealing time t_f switches from a constant to a positive correlation (orange and blue lines in Figure 3-10d,e,f), as it was predicted in Figure 3-5 (see formulations when $S_f < S_c$).

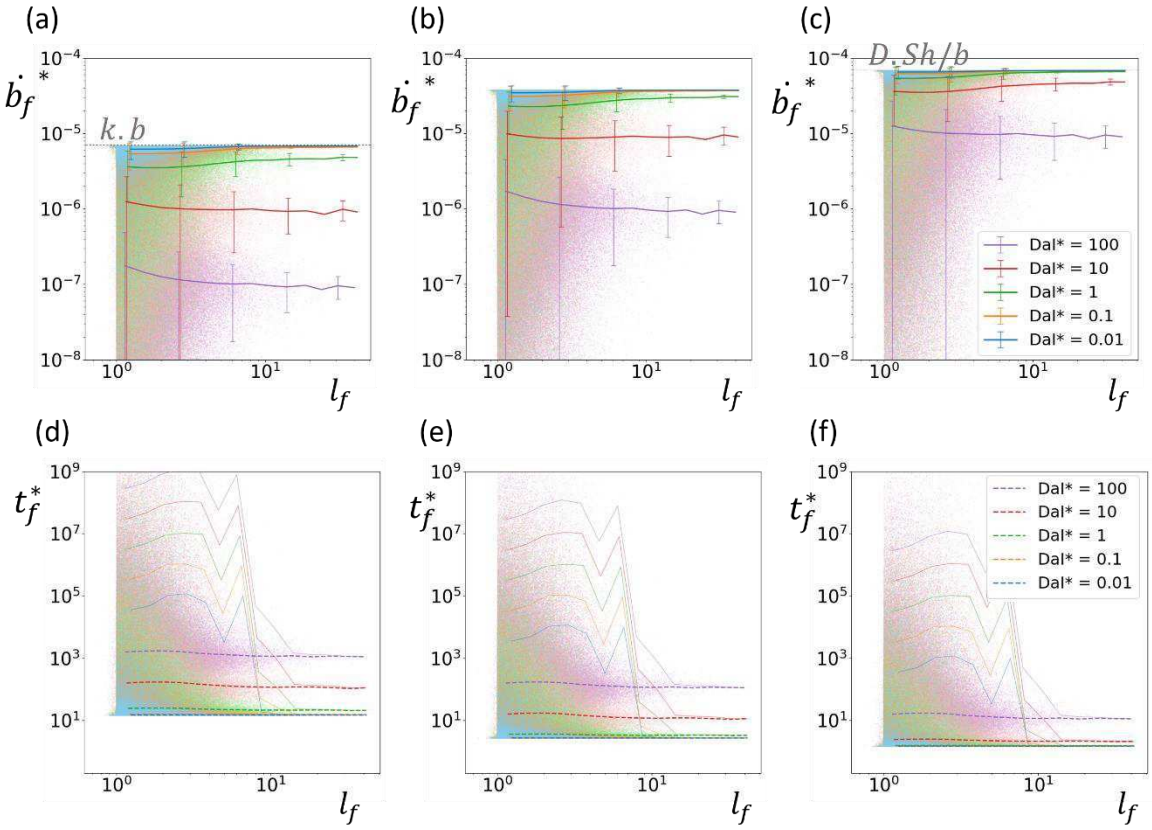


Figure 3-9: First row ((a), (b), and (c)), average sealing rate $\dot{b_f}$ *as a function of fracture size* l_f *in constant aperture DFN, and with external solute source* c_{in}*. The exponent * indicates that* $\dot{b_f}$ *is normalized as* $\dot{b_f}^* = \frac{\dot{b_f}.\rho_s}{c_{in}}$*. Second row ((d), (e), and (f)), median sealing time* $t_f = \frac{b}{\dot{b_f}}$ *as a function of fracture size* l_f *(dashed lines). The exponent * indicates that* t_f *is normalized as* $t_f^* = \frac{t_f.c_{in}}{\rho_s}$*. Thin full lines represent the average of* t_f^**, highly influenced by some very large values. (a) and (d),* $Da_{II}^* = 0.1$ *(reaction control). (b) and (e),* $Da_{II}^* = 1$*. (c) and (f),* $Da_{II}^* = 10$ *(diffusion control). The colors from blue to purple indicate an increasing* Da_I^**, i.e. from reaction/diffusion control to transport control.*

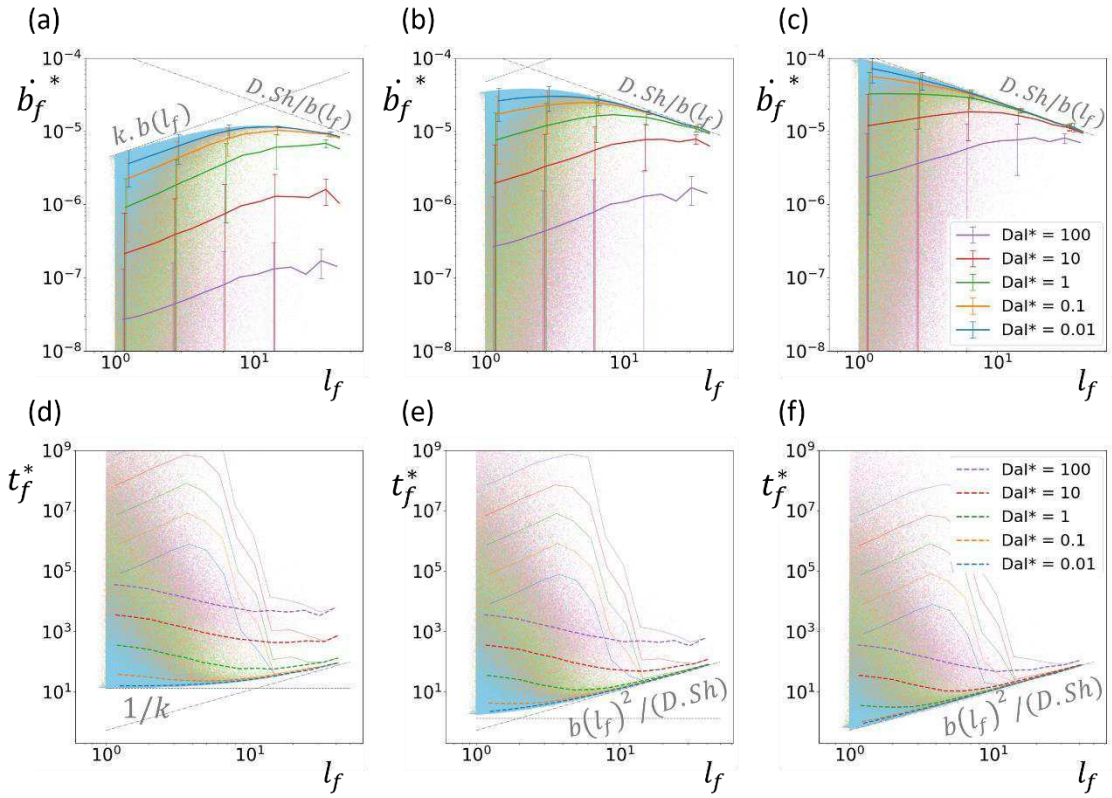


*Figure 3-10: First row ((a), (b), and (c)), average sealing rate $\dot{b}_f$ as a function of fracture size l_f in DFN with apertures correlated to fracture size, and with external solute source c_{in}. The exponent * indicates that $\dot{b}_f$ is normalized as $\dot{b}_f{}^* = \frac{\dot{b_f}.\rho_s}{c_{in}}$. Second row ((d), (e), and (f)), average sealing time $t_f = \frac{b}{\dot{b}_f}$ as a function of fracture size l_f. The exponent * indicates that t_f is normalized as $t_f^* = \frac{t_f.c_{in}}{\rho_s}$. Thin full lines represent the average of t_f^* highly influenced by some very large values. (a) and (d), $Da_{II}^* = 0.1$ (reaction control). (b) and (e), $Da_{II}^* = 1$. (c) and (f), $Da_{II}^* = 10$ (diffusion control). The colors from blue to purple indicate an increasing Da_I^*, i.e. from reaction/diffusion control to transport control.*

4.3.2. Case with internal solute source, R_p

In the constant aperture DFN models, the results with internal source R_p are similar to the previous section, i.e. no correlation can be measured with fracture size whatever the Damköhler numbers (Figure 3-11). When Da_I^* is large, the variability decreases and $\dot{b}_f$ tends to $\frac{R_p}{\rho_s}$ and t_f to $\frac{b.\rho_s}{b}$, as predicted by the approximations made in section 3.3 (see Figure 3-6; $S > 2.S_c$). Note that the average of $\dot{b}_f$ (thin lines) can be highly influenced by some very extreme values when l_f is small. The median is more appropriate in this case (dashed lines).

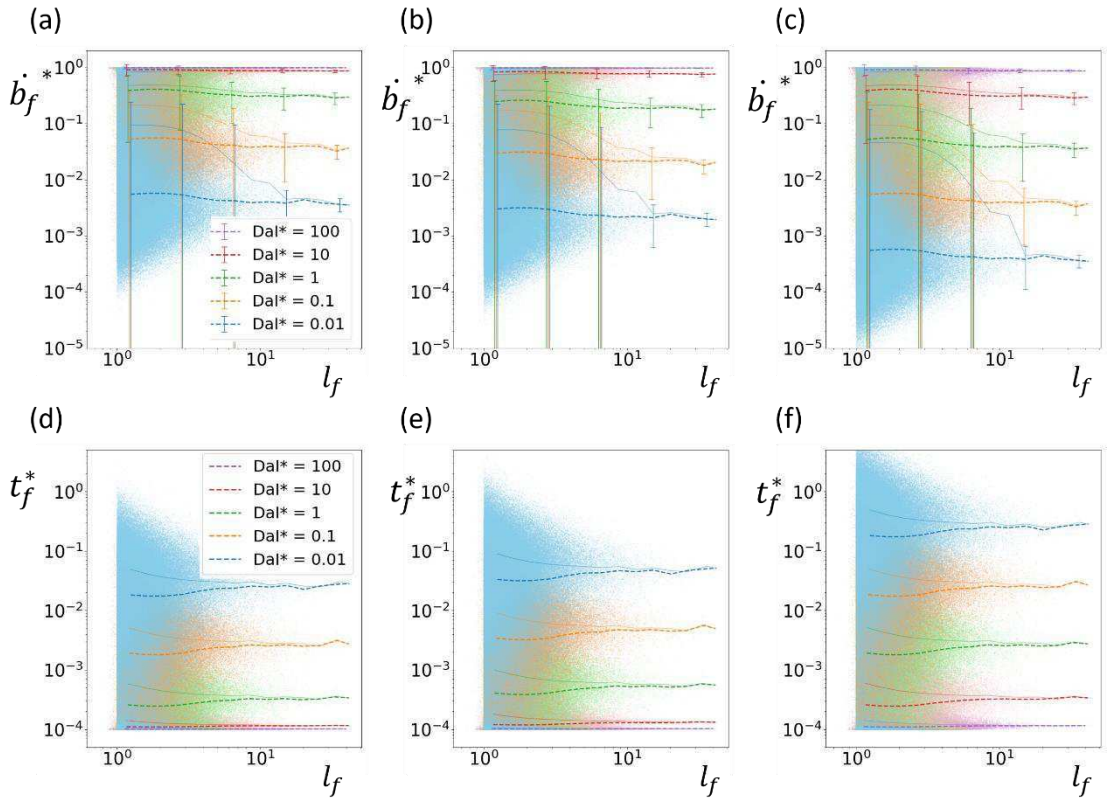


Figure 3-11: First row ((a), (b), and (c)), median sealing rate $\dot{b}_f$ *as a function of fracture size* l_f *(dashed lines) in constant aperture DFN, and with internal solute source* R_p*. The exponent* * *indicates that* $\dot{b}_f$ *is normalized as* $\dot{b}_f{}^* = \frac{\dot{b}_f \cdot \rho_s}{R_p}$*. Thin full lines represent the average of* $\dot{b}_f{}^*$*, highly influenced by some very large values. Second row ((d), (e), and (f)), median sealing time* $t_f = \frac{b}{\dot{b}_f}$ *as a function of fracture size* l_f *(dashed lines). The exponent* * *indicates that* t_f *is normalized as* $t_f^* = \frac{t_f \cdot R_p}{\rho_s}$*. (a) and (d),* $Da_{II}^* = 0.1$ *(reaction control). (b) and (e),* $Da_{II}^* = 1$*. (c) and (f),* $Da_{II}^* = 10$ *(diffusion control). The colors from blue to purple indicate an increasing* Da_I^**, i.e. from reaction/diffusion control to transport control.*

In the correlated aperture DFN models, strong correlations can be measured with fracture size (Figure 3-12). When $Da_I^* < 1$, the sealing rate $\dot{b}_f$ is negatively correlated with fracture size. When Da_I^* increases, $\dot{b}_f$ increases and reaches a threshold $\dot{b}_f = \frac{R_p}{\rho_s}$. The small fractures reach this threshold before the large ones. In turn, the sealing time t_f is positively correlated to l_f. When Da_I^* increases (i.e. the flow decreases), t_f reaches a threshold, $t_f = b.\frac{\rho_s}{R_p}$, that is a positive function of l_f due to the correlation of aperture with fracture size $b(l_f)$.

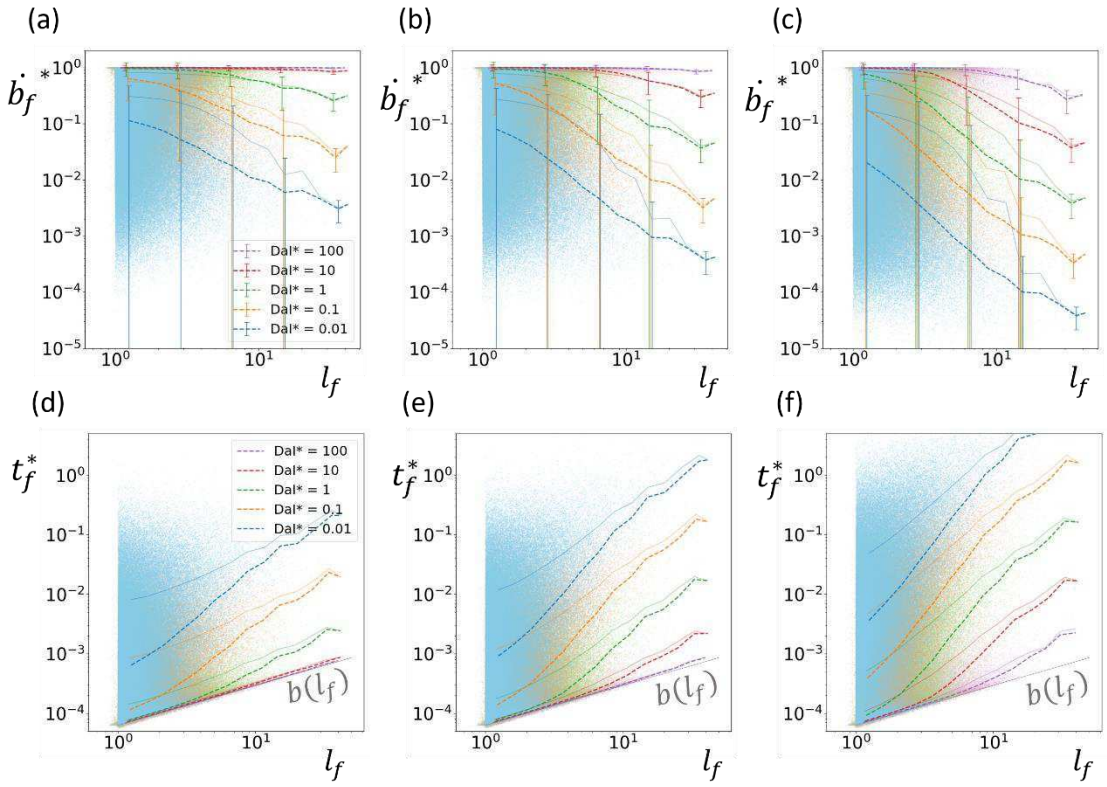


Figure 3-12: First row ((a), (b), and (c)), median sealing rate $\dot{b_f}^*$ *as a function of fracture size* l_f *(dashed lines) in DFN with apertures correlated to fracture sizes, and with internal solute source* R_p*. The exponent* * *indicates that* $\dot{b_f}$ *is normalized as* $\dot{b_f}^* = \frac{\dot{b_f}.\rho_s}{R_p}$*. Thin full lines represent the average of* $\dot{b_f}^*$*, highly influenced by some very large values. Second row ((d), (e), and (f)), median sealing time* $t_f = \frac{b}{\dot{b_f}}$ *as a function of fracture size* l_f *(dashed lines). The exponent* * *indicates that* t_f *is normalized as* $t_f^* = \frac{t_f.R_p}{\rho_s}$*. (a) and (d),* $Da_{II}^* = 0.1$ *(reaction control). (b) and (e),* $Da_{II}^* = 1$*. (c) and (f),* $Da_{II}^* = 10$ *(diffusion control). The colors from blue to purple indicate an increasing* Da_I^**, i.e. from reaction/diffusion control to transport control.*

4.4. Distribution of open surfaces as a function of fracture size

The way the open surfaces are distributed in a fracture network is critical for its connectivity. In this section, we analyze how the open surfaces tend to be distributed relative to fracture size with the sealing model of the previous sections. The fracture sealing times t_f are used to estimate the chronological order in which the fractures get sealed. We take $t_f = b/\dot{b_f}$, with $\dot{b_f}$ the initial sealing rate. This assumption does not take into account possible changes of sealing rates due to the flow redistribution.

The distribution is analyzed at different steps of the closure process, when the remaining open surface fraction, noted f_{op}, is 0.25, 0.5, and 0.75. To do so, all the fractures are sorted by their sealing times, t_f, so that the first fractures are the first to get sealed. Considering

this order, the fracture surfaces are cumulated until the desired fraction of sealed surfaces $(1 - f_{op})$ is reached. The fractures coming after this threshold form the group of open fractures. Then, all the fractures are sorted into bins of fractures size, l_f, and the open surface fraction $f_{op}(l_f)$ is computed in each bin (i.e. the ratio of the total surface of fractures labeled as open versus the total surface of all fractures).

4.4.1. Case with external solute source, c_{in}

The constant aperture DFN models result in the same $f_{op}(l_f)$ whatever the Damköhler numbers are. The chronological order in which fractures get sealed does not change with the reactivity parameters. The result, same to all cases, is presented in Figure 3-13. Even if, on average, the sealing time t_f was constant with l_f (Figure 3-9), $f_{op}(l_f)$ present an increasing trend when the total f_{op} is high (0.75) - the few large fractures are not sealed yet (blue line) -, and a decreasing trend when the total f_{op} is low (0.25) – large fractures are all sealed (red line).

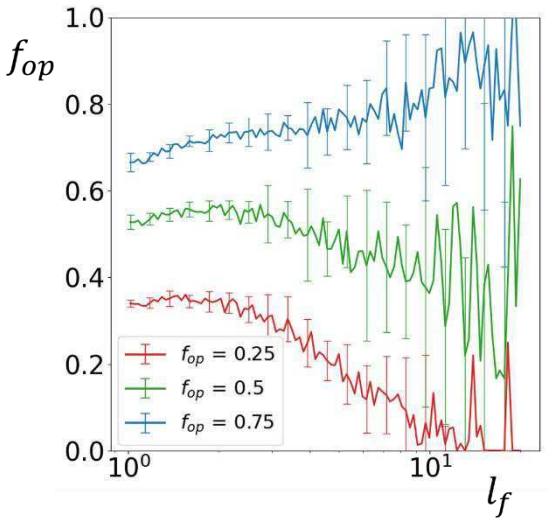


Figure 3-13: Open fracture surface proportion as a function of fracture size, $f_{op}(l_f)$, in DFN with constant apertures, in the case of an external solute source c_{in}. The total open surface proportion f_{op} equals 0.75, 0.5, and 0.25. The result is the same whatever the parameters of the sealing model. The vertical error bars quantify the standard deviation of the different DFN realizations.

In DFNs with apertures correlated to fracture size, $f_{op}(l_f)$ evolution changes with the Damköhler numbers (Figure 3-14). Important positive correlations are observed when fractures are in the diffusion-limited mode ($Da_I < 1$ and $Da_{II} > 1$), which is the case for all fractures in Figure 3-14b, and the case for large fracture sizes in Figure 3-14a and Figure 3-14d. In the diffusion-limited mode, the sealing time is proportional to b^2 (see Figure 3-5).

Due to the positive correlation between b and l_f, large fractures are nearly the last to be sealed. In Figure 3-14c, all fractures are rather in the transport-limited mode. In this latter case, $f_{op}(l_f)$ is negatively correlated to fracture size.

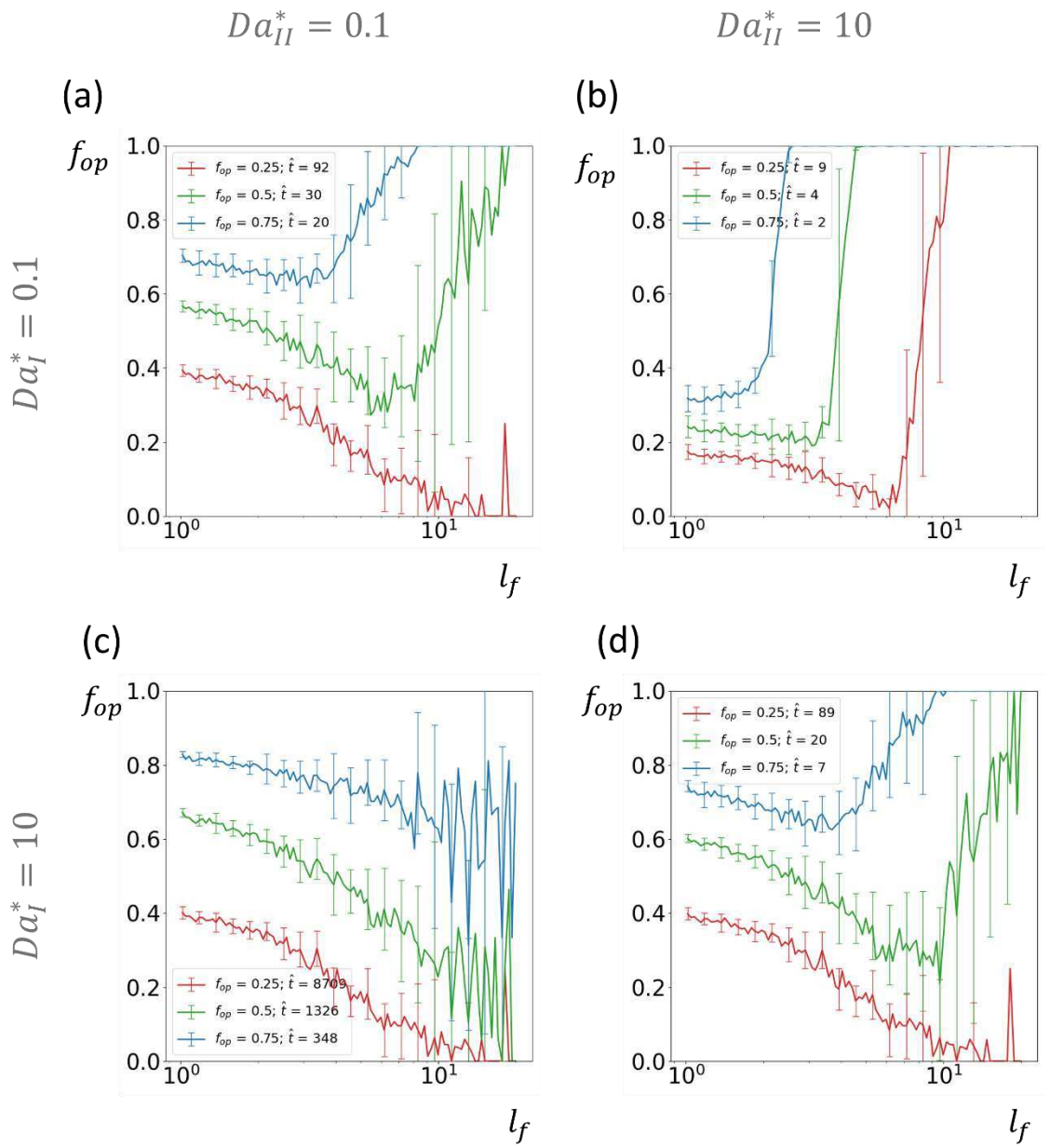


Figure 3-14: Open fracture surface proportion as a function of fracture size, $f_{op}(l_f)$, in DFN with apertures correlated with fracture size, in the case of an external solute source c_{in}. The total open surface proportion f_{op} equals 0.75, 0.5, and 0.25. The time after which the total f_{op} is reached is indicated in the legend. It is normalized as: $\hat{t} = \frac{t.c_{in}}{\rho_s}$. (a) $Da_{II}^* = 0.1$ and $Da_I^* = 0.1$. (b) $Da_{II}^* = 10$ and $Da_I^* = 0.1$. (c) $Da_{II}^* = 0.1$ and $Da_I^* = 10$. (d) $Da_{II}^* = 10$ and $Da_I^* = 10$. The vertical errorbar quantifies the standard deviation of the different DFN realizations.

4.4.1. Case with internal solute source, R_p

In the scenario with internal solute source R_p, constant aperture DFN present nearly the same f_{op} trends as in the external source c_{in} scenario, except that large fractures seem to get sealed slightly later (Figure 3-15).

The DFN models with correlated apertures present always a positive correlation between f_{op} and l_f (Figure 3-16), reflecting the fact that large fractures are always the last to get sealed. The effect is the most pronounced when $Da_I^* > 1$ (Figure 3-16c,d), where the sealing time is only proportional to the aperture $b(l_f)$ (see Figure 3-6).

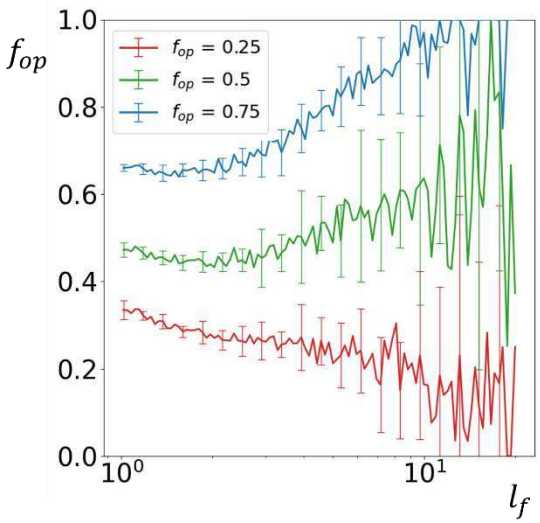


Figure 3-15: Open fracture surface proportion as a function of fracture size, $f_{op}(l_f)$, in DFN with constant apertures, in the case of an internal solute source R_p. The total open surface proportion f_{op} equals 0.75, 0.5, and 0.25. The result is the same whatever the parameters of the sealing model. The vertical error bars quantify the standard deviation of the different DFN realizations.

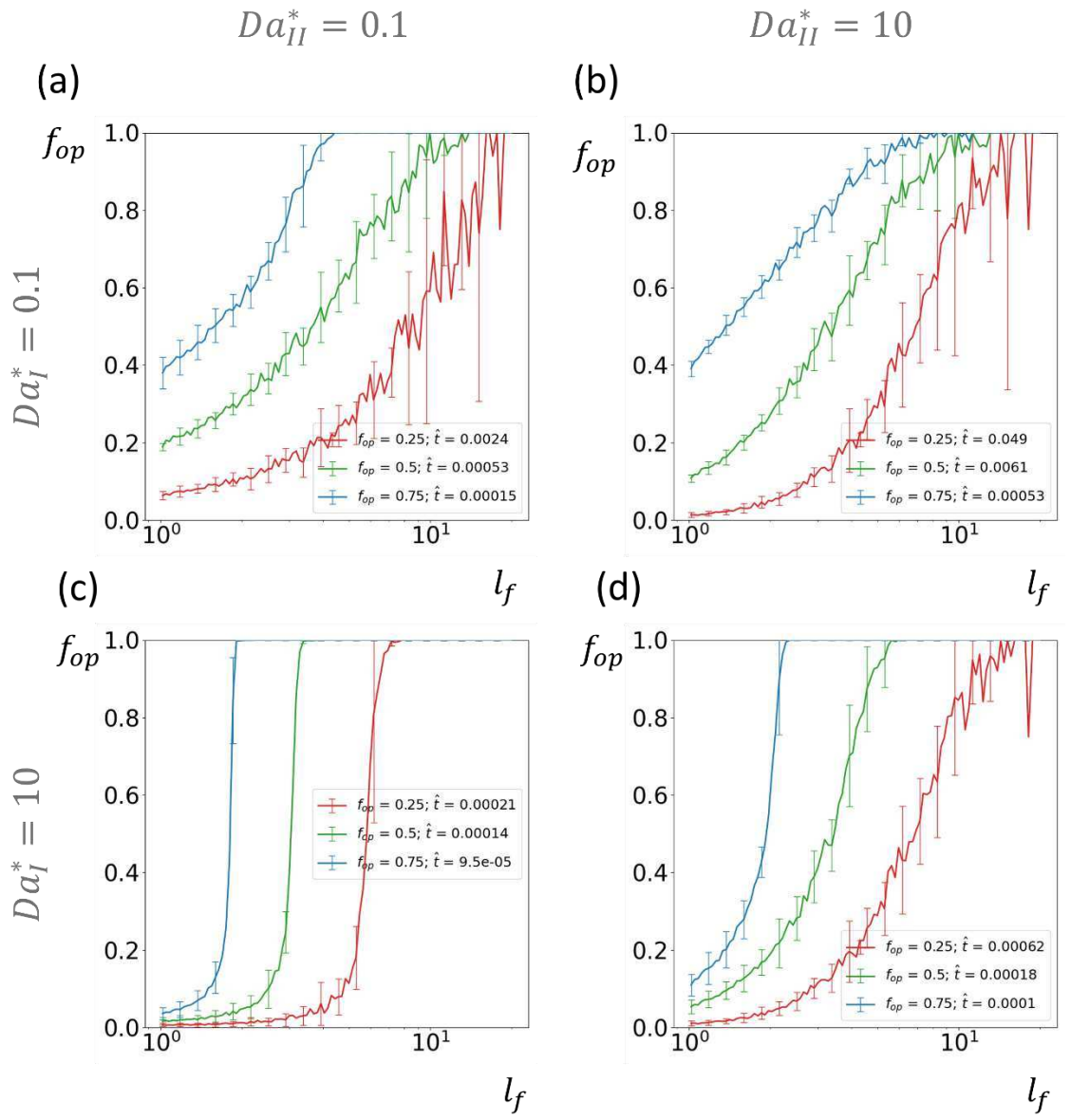


Figure 3-16: Open fracture surface proportion as a function of fracture size, $f_{op}(l_f)$, in DFN with apertures correlated with fracture size, in the case of an internal solute source R_p. The total open surface proportion f_{op} equals 0.75, 0.5, and 0.25. The time after which the total f_{op} is reached is indicated in the legend. It is normalized as: $\hat{t} = \frac{t.c_{in}}{\rho_s}$. (a) $Da_{II}^* = 0.1$ and $Da_I^* = 0.1$. (b) $Da_{II}^* = 10$ and $Da_I^* = 0.1$. (c) $Da_{II}^* = 0.1$ and $Da_I^* = 10$. (d) $Da_{II}^* = 10$ and $Da_I^* = 10$. The vertical error bars quantify the standard deviation of the different DFN realizations.

5. Conclusion and discussion

We have performed a parametric study of fracture sealing rates and sealing distribution in Discrete Fracture Networks as a function of the nature of the sealing process and fracture geometries and flows. Fracture average sealing rates ($\dot{b_f}$) were formulated based on a first-order reactive transport precipitation model, implying mechanisms of solute transport, diffusion to the fracture walls, and reaction kinetics at the walls. A special focus was given on how the model produces correlations between sealing and fracture sizes because this correlation can have a major impact on network connectivity. Different scenarios were analyzed. First, we varied the transport, diffusion, and kinetics parameters in order to assess the impact of the limiting mechanism. Second, we studied the effect of different types of sources of solute, one where the chemical source is introduced at the system boundary and another where the sources are disseminated on the fracture planes. In this model, the fracture sealing rate depends on the fracture aperture, surface but also on the fracture flow. To evaluate the effect of the flow distribution, we investigated a DFN model in which apertures were constant, and another one, in which apertures were positively correlated to fracture size. Both models presented different flow distributions, with a stronger correlation between fracture size and flow in the correlated model.

The main observations relative to sealing distributions are the following. No correlation between sealing rates and fracture size was observed in the constant aperture model. In the correlated aperture models, the correlations depend on the mechanism limiting the precipitation (transport, diffusion, or kinetics) and the type of source. If the source is introduced at the inlet, a positive correlation between the sealing time and the fracture size is only if the fractures are in the regime diffusion-limited. If the source is from disseminated points on the fracture surface, a positive correlation is always observed, indicating that the largest fractures should always be the last to be sealed.

In further work, other DFN geometries should be investigated. For example, the fracture size distribution exponent a is likely to change the way flow is distributed relative to fracture size (Bour & Davy, 1997), so that it should impact the sealing distribution. It could be also relevant to evaluate how these distributions are sensitive to the fracture density (Sherman et al., 2020).

In our model, the solute transport was not solved on the entire DFN, which neglects the fact that the concentration entering fractures (c_{in}) depends on the reactions in the upstream fractures (i.e solute precipitated and produced upstream). Also, we neglected variations of sealing rates due to flow changes during the sealing process. Further studies should evaluate how these mechanisms can impact the sealing distribution.

6. Appendices

6.1. Function asymptotes, used for $\dot{b_f}$ simplification

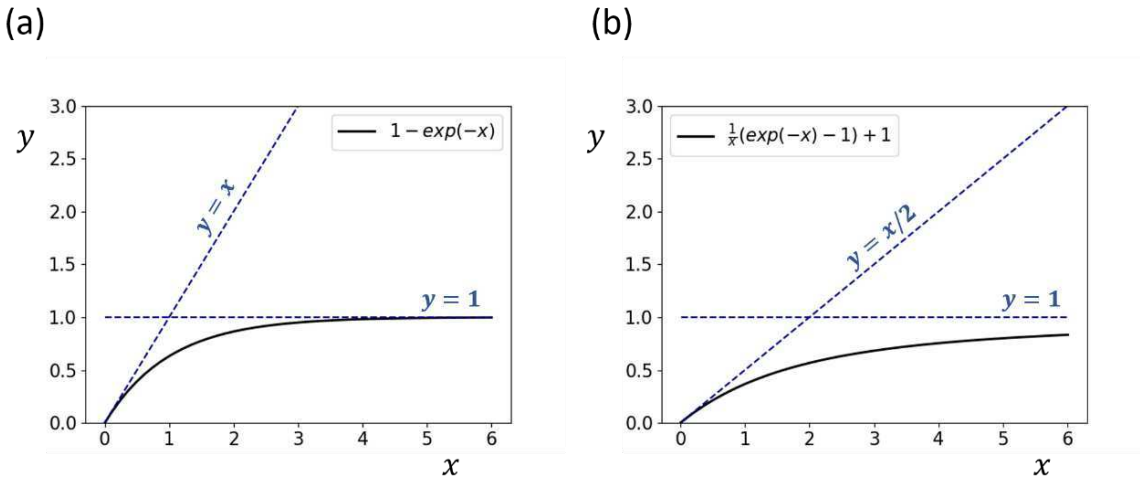


Figure 3-17: (a) $f(x) = 1 - exp(-x)$ *and (b)* $f(x) = \frac{1}{x}(exp(-x) - 1) + 1$ *. Their asymptotes, represented in dashed blue, are used to provide aproximations of the fracture sealing rate* $\dot{b_f}$ *in section 3.2 (a) and 3.3 (b).*

6.2. Flow Q_f

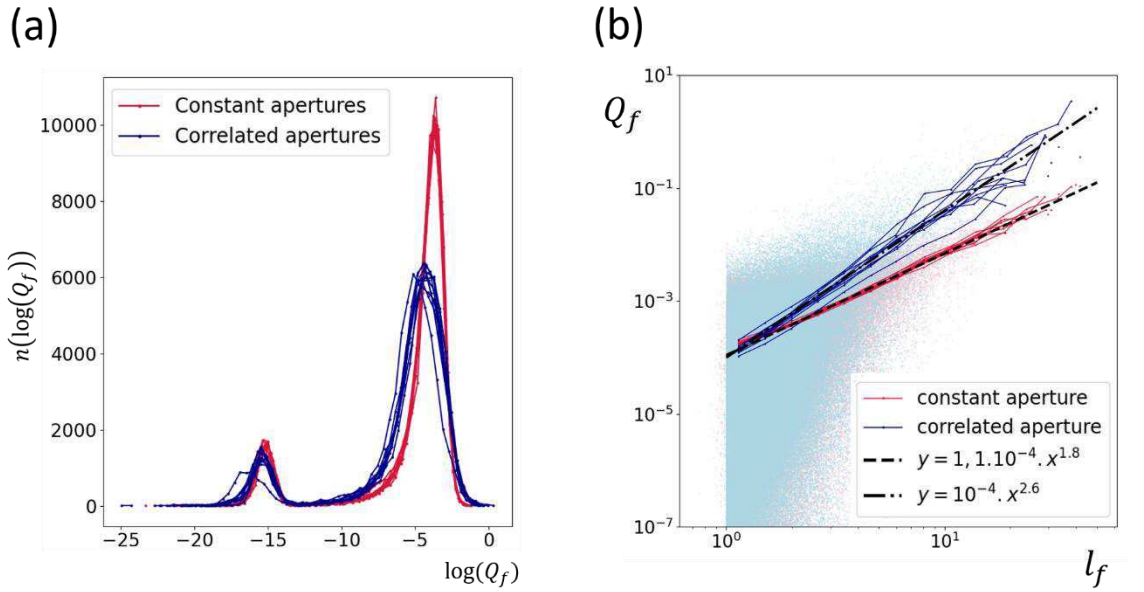


Figure 3-18 : (a) Distribution of the fracture flow logarithm $log(Q_f)$*. (b) Average fracture flow* Q_f *as a function of fracture size* l_f*.*

Fin de l'article

3.4. Résolution de modèle de colmatage avec une structure de graphe

Dans l'article de la section précédente, un modèle de précipitation basé sur le transport réactif était présenté et analysé dans le but d'établir des corrélations entre paramètres de fractures (flux, ouverture, et taille) et les temps de fermeture. Les corrélations ont été analysées dans les modèles de DFN, principalement en fonction de la taille de fracture, car ce type de corrélation impactera l'évolution de la connectivité du réseau.

Cependant, certains processus ont été négligés dans ce modèle. Premièrement, le modèle ne prend pas en compte la manière dont les concentrations de soluté entrantes (c_{in}) peuvent évoluer d'une fracture à l'autre à cause de la quantité déjà précipitée ou dissoute dans les fractures en amont. Ensuite, le modèle néglige le *feedback* (couplage) entre la précipitation et les flux. En effet, les changements géométriques induits par la précipitation peuvent changer les flux et les flux à leur tour modifient les taux de précipitations. A l'échelle d'une fracture ce *feedback* est négatif, car plus le colmatage a lieu, plus l'ouverture de fracture diminue et plus les flux baissent. Cependant à l'échelle d'un réseau de fracture, il est possible que le colmatage et donc la fermeture d'une partie du réseau augmente les flux dans une autre partie, ce qui pourrait résulter en un *feedback* positif. La dynamique peut donc être complexe et il est donc intéressant de proposer des modèles où la précipitation est couplée aux flux.

Plutôt qu'un DFN maillé complet qui demandera de larges ressources numériques, nous proposons d'utiliser une structure de graphe. Nous avons vu dans le chapitre 2, qu'avec une conductance adéquate attribuée aux liens du graphe, les flux pouvaient être estimés de manière assez précise avec cette méthode, même les flux à l'échelle des fractures. Cette section présente la méthode de résolution du processus de précipitation couplé aux flux du graphe, ainsi que quelques résultats préliminaires. Les équations théoriques utilisées sont les mêmes que dans l'article de la section 3.3. , mais elles sont adaptées aux liens du graphe plutôt qu'aux fractures directement.

Le type de graphe utilisé dans ces travaux est le graphe des intersections. Dans ce graphe, les nœuds représentent les intersections et les liens la portion de plan de fracture qui les relie (voir chapitre 2).

3.4.1. Méthode de calcul

3.4.1.1. Schéma de résolution

Le schéma de résolution du couplage entre flux et précipitation est détaillé à la Figure 3-19. D'abord, les flux sont calculés pour chaque lien du graphe avec la méthode présentée au chapitre 2. Ensuite, en se basant sur ces flux et sur le modèle de précipitation dans les liens, les concentrations sont estimées à chaque nœud du graphe. La matrice de résolution des concentrations est détaillée dans la section suivante. Connaissant les concentrations à chaque nœud, des taux de précipitation sont calculés pour chaque lien. Les liens ayant les temps de fermeture les plus petits sont enlevés du graphe. Les ouvertures des liens restant sont recalculées en fonction du temps écoulé et de la quantité précipitée dans ces liens. La définition d'un pas de temps intelligent pour chaque itération est détaillée ci-dessous, à la section 3.4.1.3. . Dans la boucle de résolution, des étapes intermédiaires sont réalisées (accolades bleues dans la Figure 3-19). Ces étapes permettent d'enlever les liens avec zéro flux, notamment les *dead-ends* (bras morts) et les *clusters* non-connectés qui apparaissent à mesure que certaines parties du réseau se ferment.

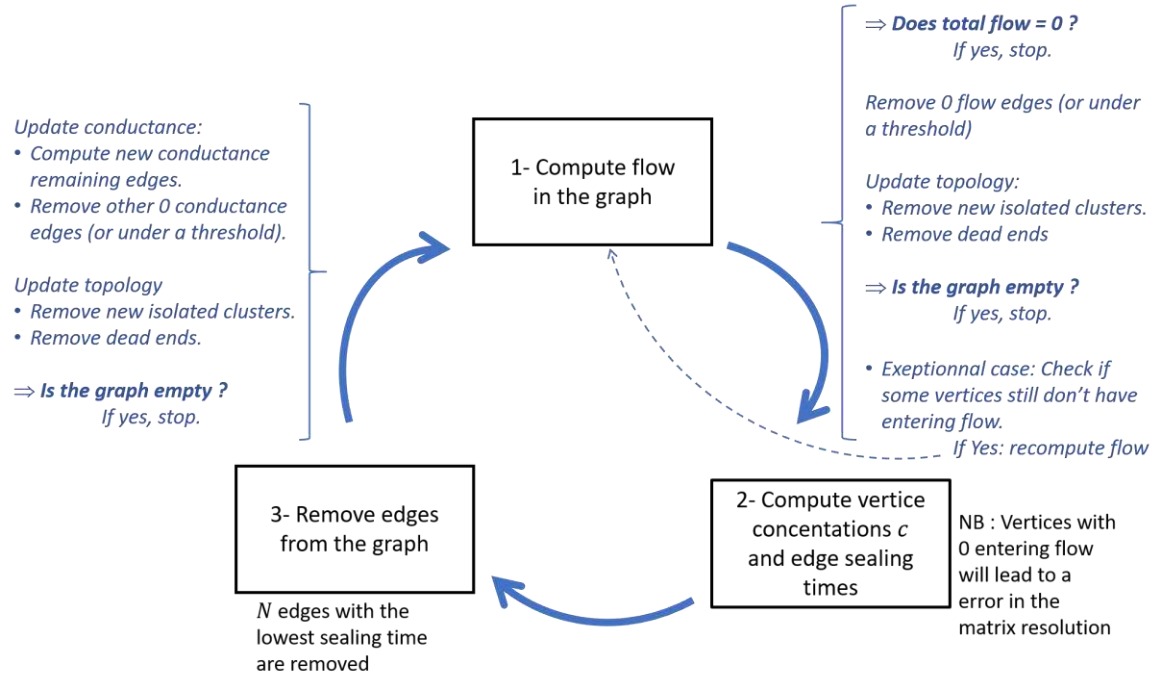


Figure 3-19 : Schéma de résolution du couplage entre flux et colmatage dans une structure de graphe. Les termes « vertex » et « edge » sont les noms anglais pour « nœud » et « lien ».

3.4.1.2. Matrice de résolution des concentrations

Nous reprenons le même modèle de précipitation que celui présenté dans le projet d'article (section 3.3.). Pour un lien reliant un nœud j et un nœud i, et le flux allant de j vers i, la concentration du soluté en sortie après précipitation, $c_{j,out}$, est reliée à la concentration en entrée, c_j, comme suit (Figure 3-20a) :

$$c_{j,out} = \left(c_j - \frac{R_p}{k_{eff}}\right).\exp\left(-\frac{k_{eff}.S_{ij}}{Q_{ij}}\right) + \frac{R_p}{k_{eff}} \tag{53}$$

où S_{ij} et Q_{ij} sont respectivement la surface et le flux du lien (voir équation (21) pour la description des différents paramètres de la réaction). Dans un nœud i, la conservation de la masse de soluté entraine la relation :

$$\left(\sum_{j\epsilon e} Q_{ij}\right) \times c_i = \sum_{j_e} (Q_{ij}.c_{j,out}) \tag{54}$$

où e est l'ensembre des nœuds en amont du nœud i, c'est-à-dire que les flux s'écoulent de e vers i. $\sum_{j\epsilon e} Q_{ij}$ est donc la somme des flux entrant le nœud i (Figure 3-20b). c_i est la concentration du nœud i.

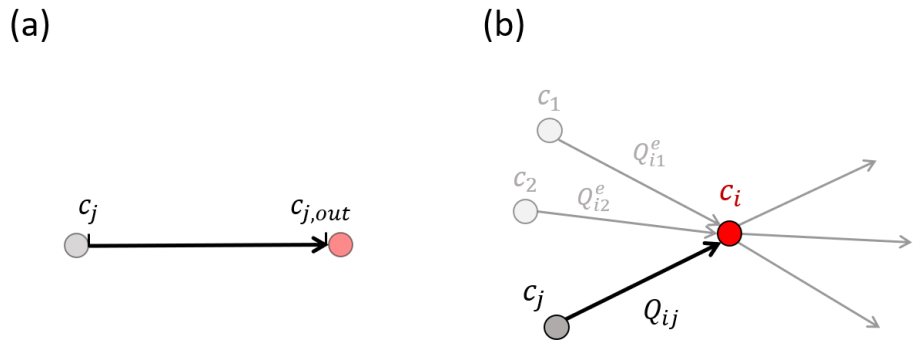


Figure 3-20 : (a) Schéma illustrant les notions de concentrations en amont d'un lien (c_j) et en aval d'un lien après précipitation ($c_{j,out}$). (b) Schéma représentant les flux entrants Q_{ij} d'un nœud c_i. Les notations sont utilisées dans la description de la matrice de résolution.

En combinant les équations (53) et (54), on peut écrire :

$$\left(\sum_{j\epsilon e} Q_{ij}\right) \times \boldsymbol{c_i} - \sum_{j\epsilon e}\left(Q_{ij} \times f_{ij} \times \boldsymbol{c_j}\right) = \sum_{j\epsilon e}\left(\frac{R_p}{k_{eff}} \times (1 - f_{ij}) \times Q_{ij}\right) \quad (55)$$

où $f_{ij} = \exp\left(-\frac{k_{eff}.S_{ij}}{Q_{ij}}\right)$.

La résolution des concentrations sur l'ensemble des nœuds du graphe revient donc à résoudre le système matriciel :

$$M.c = b \quad (56)$$

où $\boldsymbol{c}$ est le vecteur inconnu des concentrations des nœuds, de taille N (nombre de nœuds dans le graphe). La matrice M est de taille $N \times N$ et ses éléments sont noté m_{ij}. Notons que s'il n'y a pas de connexion entre deux nœuds i et j, ou si le flux ne va pas de j vers i, alors $m_{ij} = 0$. Autrement, les éléments de la matrice M sont définis comme :

$$m_{ii} = \sum_{j\epsilon e} Q_{ij} \quad (57)$$

$$m_{ij} = -f_{ij} \times Q_{ij} \quad (58)$$

Le vecteur $\boldsymbol{b}$ est de taille N et ses éléments b_i sont définis comme :

$$b_i = \sum_{j\epsilon e} \frac{R_p}{k_{eff}} \times (1 - f_{ij}) \times Q_{ij} \quad (59)$$

Si le nœud i correspond à une condition limite de concentration c_0, alors :

$$\begin{cases} m_{ii} = 1 \\ m_{ij} = 0 \\ b_i = c_0 \end{cases} \quad (60)$$

Après avoir résolu le système de l'équation (56), c'est-à-dire le vecteur des concentrations $\boldsymbol{c}$, un taux de précipitation moyen $\bar{\dot{b}}$ est calculé pour chaque lien (voir équation (23)) :

$$\bar{\dot{b}} = \frac{Q_{ij}}{S_{ij}.\rho_s}\left(c_j - \frac{R_p}{k_{eff}}\right).\left(1 - \exp\left(-\frac{k_{eff}.S_{ij}}{Q_{ij}}\right)\right) + \frac{R_p}{\rho_s},$$

c_j étant la concentration du nœud j, en amont du lien. Le temps de fermeture du lien est défini comme : $t = b/\bar{\dot{b}}$.

3.4.1.3. Pas de temps intelligent

A chaque cycle, le pas de temps est adapté aux temps de fermeture des liens du graphe. Les deux paramètres qui définissent ce pas de temps sont le nombre de liens que l'on souhaite enlever simultanément, n, et le seuil de précipitation des liens restant dans le graphe, ϵ. Pour un lien donné, ϵ est la quantité déposée d (m) divisée par l'ouverture initiale b (m) : $\epsilon = \frac{d}{b}$. Ce seuil sert à vérifier que les liens restant dans le graphe ne puissent pas être fermés trop vite, afin de conserver le couplage avec les flux. En pratique, les temps de fermeture de chaque lien sont calculés, $t = \frac{b}{\dot{b}}$ (b est l'ouverture au début d'un cycle), puis ils sont rangés dans l'ordre croissant (t_1, t_2, t_3 ... etc). Le pas de temps intelligent est donc défini à chaque cycle comme :

$$dt = \epsilon * t_{n+1} \tag{61}$$

où t_{n+1} est le temps de fermeture du lien venant juste après les n liens à enlever. Notons qu'il est possible que les n liens ne soient pas tous retirés du graphe, si finalement $d_t < t_{1\ldots n}$.

3.4.2. Résultats préliminaires

Des résultats de simulations effectués sur un petit cas test sont présentés dans cette section. Ils sont effectués sur le graphe des intersections d'un DFN ayant 40 fractures environ et d'ouvertures de fracture constantes (Figure 3-21). Dans ces exemples, une condition limite c_0 est fixée à l'entrée du système. La Figure 3-22 présente des résultats de la dynamique que l'on peut obtenir avec cet outil.

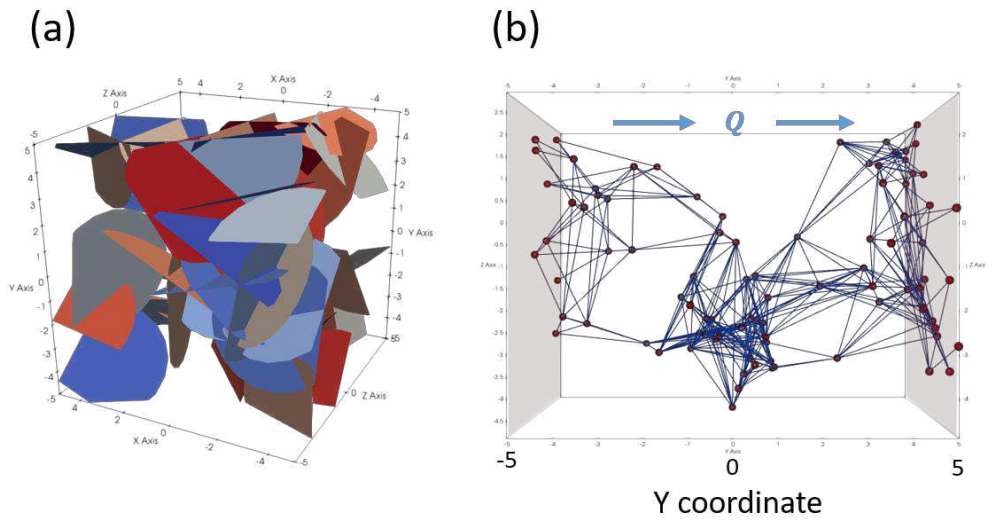


Figure 3-21: (a) DFN avec 40 fractures environ. (b) Graphe des intersections équivalent.

La concentration dans chaque nœud décroit exponentiellement à partir de l'entrée avec une distance de dépôt qui varie selon le chemin emprunté et selon la cinétique de la réaction (coefficient k) (Figure 3-22a). Cette distance de dépôt diminue dans le temps car les flux diminuent (les différentes couleurs correspondent aux étapes de temps).

Les temps de fermeture des liens augmentent à mesure que l'on s'éloigne de l'entrée (Figure 3-22a), car la concentration en entrée du lien diminue. Dans le temps, la majorité des temps de fermeture augmente, sauf pour certains liens localisés proche de l'entrée du système. Cet effet est interprété comme étant dû aux flux qui diminuent dans le système à mesure que le colmatage s'effectue, sauf en entrée, où la fermeture de certains liens entraine une augmentation des flux dans d'autres. Cependant, dans le cas montré ici, cet effet semble minoritaire.

La Figure 3-22c montre les temps de fermeture des liens enlevés du système, c'est-à-dire colmatés. Ceux-ci sont tous positionnés en entrée du système. Ceci montre que la connectivité du graphe est réduite par une distribution de la précipitation localisée entrée du système.

3.5. Conclusion et discussion

La distribution du colmatage à l'échelle du réseau de fractures a été analysée à partir d'un modèle numérique simple reproduisant une réaction de précipitation du premier ordre couplée aux écoulements dans la fracture. Dans un premier temps (section 3.3.), nous avons évalué comment la distribution des flux dans le réseaux peuvent produire des corrélations avec la taille de fracture. Ensuite, un modèle plus complexe utilisant le graphe (voir chapitre 2) permet de prendre en compte le transport de soluté d'une fracture à l'autre et la variation des flux à mesure que le réseau se ferme.

Ce dernier modèle plus complexe a été testé uniquement avec une source de concentration c_0 à l'entrée du système. Il indique que le colmatage se concentre près de la source, ce qui finit par déconnecter le système avant que des phénomènes corrélés à la taille de fracture puissent se mettre en place. Dans une prochaine analyse, il serait utile de tester le modèle avec une source disséminée sur le plan des fractures, comme cela était fait dans la section 3.3. (voir terme de source R_p). De plus, le modèle a été testé avec un DFN ayant initialement des ouvertures de fractures constantes. Un modèle d'ouverture corrélé à la taille pourrait engendrer une autre dynamique.

Le graphe des intersections était favorisé pour cette application car le graphe des fractures sous-estime beaucoup de flux locaux (voir chapitre 2). Cependant, quelques problèmes ont aussi été rencontrés dans le graphe des intersections à cause de la manière d'attribuer les surfaces aux liens. Le graphe des intersections a la particularité de générer beaucoup de liens redondants sur une même fracture car toutes les intersections sont reliées

deux à deux (chapitre 2). Ceci entraine une surface totale de liens bien plus élevée que la surface réelle de la fracture. Pour ce type d'application où la surface joue un rôle important sur les quantité échangées entre la paroi de fracture et le fluide, il serait préférable de corriger la surface totale des liens d'une fracture de manière à ce qu'elle ne dépasse pas la surface de la fracture.

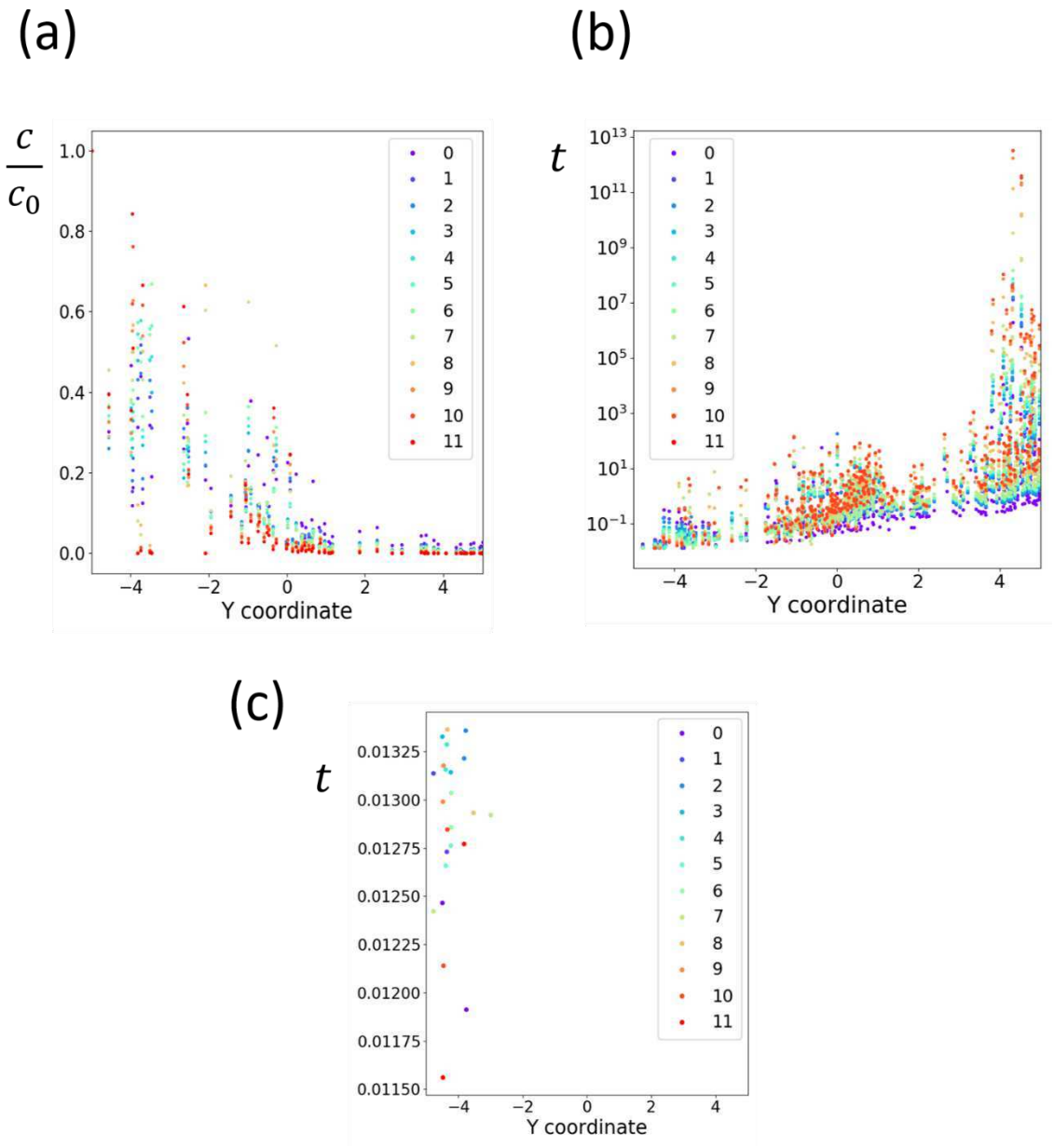


Figure 3-22 : Résultats d'une simulation de réaction de précipitation couplée aux flux, utilisant le graphe. (a) Evolution de la concentration c *calculée aux nœuds normalisée par la concentration en entrée* c_0*. (b) Evolution des temps de fermeture des liens du graphe. (c) Temps de fermeture des liens enlevés du graphe. L'axe y correspond au sens de l'écoulement. La légende indique les différentes étapes du calcul.*

Partie II :

Distribution du colmatage dans les réseaux de fractures. Données de terrain

Chapitre 4

Distribution de la fraction ouverte des réseaux de fractures par une analyse des données de puits du site de Forsmark (Suède)

Table des matières :

4.1. Introduction 136

4.2. Résumé de l'article 137

4.3. Projet d'article : „Controls of the distribution of the open fraction of fracture networks. Results from core-log analyses (Forsmark, Sweden)“ 140

1. Introduction 141
2. Site and material description 142
3. Methodology 145
4. Results 147
5. Discussion about fracture reactivation 161
6. Conclusion 167
7. Appendices 168

4.4. Travaux complémentaires. Méthode de « *Machine Learning* » appliquée aux données de puits de Forsmark : les arbres aléatoires 170

4.4.1.1. Construction du modèle de *random forests* 170
4.4.1.2. Résultats : importance des attributs et matrice de confusion 172
4.4.1.3. Résultats : métriques de validité du modèle 174

4.5. Figures annexes 180

4.1. Introduction

Dans beaucoup de systèmes naturels, seulement un faible pourcentage de la surface totale des fractures est ouvert et donc peut porter des flux, le reste étant colmaté. Dans ce chapitre, la distribution des surfaces colmatées/ouvertes évaluée statistiquement à partir de données de terrain. Le jeu de données étudié provient des nombreuses campagnes d'investigation réalisées par SKB (*Swedish Nuclear Fuel and Waste Management and Co*) dans le but de caractériser la géologie et l'hydrogéologie du futur site Suédois d'enfouissement de déchets nucléaires à grande profondeur ($\sim 400 - 500$ m), localisé à Forsmark (Follin et al., 2007; Olofsson et al., 2007). Une description du site est faite dans le projet d'article présenté dans ce chapitre (section 2). La base de données très riche nous offre la possibilité d'analyser la distribution du colmatage à l'échelle du site.

Les analyses sont faites sur des données provenant de l'interprétation de carottes de puits (Figure 4-2a). Ces puits sont distribués sur l'ensemble du site (voir Figure 4-4 dans projet d'article) et atteignent des profondeurs allant de 100 mètres à 800 mètres environ. Des études ont été réalisées à partir de ces données dans le but de caractériser la géométrie du réseau de fracture (Darcel et al., 2009; Darcel et al., 2014). Cependant aucune étude n'a encore porté sur la caractérisation statistique du colmatage.

Le jeu de donnée fournit le caractère ouvert/partiellement-ouvert/fermé de l'ensemble des fractures interceptées par les puits (Figure 4-2b). Notons que les fractures partiellement ouvertes sont intégrées au groupe des fractures ouvertes dans ces analyses. Lors de ces travaux, il a aussi été considéré d'utiliser des données d'affleurements provenant des parois des tunnels du site d'Äspö, laboratoire sous-terrain servant de prototype pour le futur site de Forsmark (Molron, 2021; Molron et al., 2020). Ce type de données aurait pu nous informer sur des corrélations entre colmatage et tailles de fractures, et potentiellement sur la taille des *patch* de colmatage dans le cas où la fracture est partiellement colmatée. Cependant, l'interprétation ouvert/fermé des traces de fractures dans ces données peut être fortement biaisé par l'effet du dynamitage (*blasting*) lors de la construction des tunnels, ce qui a écarté leur utilisation.

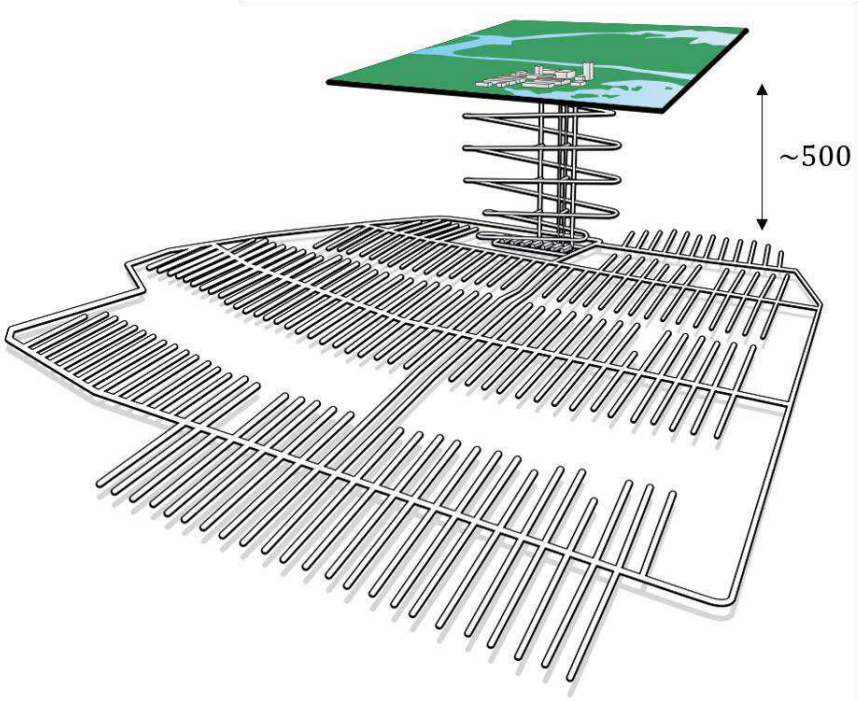


Figure 4-1 : Prototype du site final de stockage à haute profondeur. Modifié d'après SKB (2019).

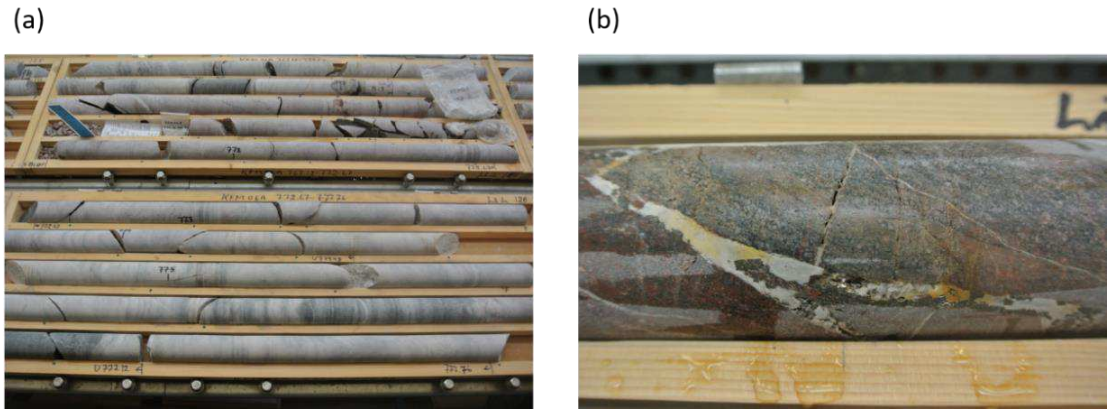


Figure 4-2 : (a) Sections de carottes du puits KFM06A, entre 767 *et* 777 *m. (b) Fracture colmatée par de la calcite et de la pyrite et fracture partiellement ouverte (puits KFM11A,* ~454 *m).*

4.2. Résumé de l'article

Dans cette étude, la proportion de surfaces de fractures ouvertes au sein du réseau de fractures (ou fraction ouverte, notée f_{op}) est estimée à partir de données de carottes de puits. Une correction angulaire est appliquée à chaque fracture (Terzaghi, 1965) afin de prendre en compte des biais d'échantillonnage dus à l'orientation de la fracture par rapport au puits.

Les motivations de l'article sont les suivantes :

- Quantifier f_{op} et évaluer sa distribution par rapport à des paramètres de fractures : profondeur, orientation, densité, minéraux de remplissage, et contraintes appliquées à la fracture. Le but est de proposer un modèle statistique de distribution des surfaces ouvertes à Forsmark.
- Comprendre les mécanismes à l'origine de la distribution de f_{op}.

La valeur de f_{op} est évaluée à **0.22** pour l'ensemble du jeu de données. Des corrélations importantes sont observées avec la profondeur et les orientations de fractures. f_{op} décroit à mesure que l'on s'éloigne de la surface, mais la manière de décroitre dépend de l'orientation de la fracture. Les fractures horizontales sont les plus ouvertes, et f_{op} décroit quasi-linéairement de la surface à 800 mètres (Figure 4-11b). Les fractures verticales sont en moyenne moins ouvertes, et f_{op} est principalement essentiellement élevé en surface dans ce groupe de fracture (<100 m de profondeur) (Figure 4-12b).

Les analyses réalisées sur la densité de fracture ne révèlent pas de corrélation entre la fraction open, f_{op} et la densité, p_{32}. Concernant les domaines de fracturation, nous utilisons la catégorisation du site en zones de déformation (volumes fortement fracturés) et en différents domaines de fracture (volumes fracturés entre les zones de déformation) (Figure 4-3; Follin et al. (2007); Olofsson et al. (2007)). La fraction ouverte f_{op} diffère en moyenne très peu entre les zones de déformations et les domaines de fractures, et ce même en considérant leur profondeur. Le domaine de fracture le plus étendu sur le site (FFM01) (Figure 4-3) et qui accueillera le futur site a une valeur moyenne de f_{op} égale à 0.14.

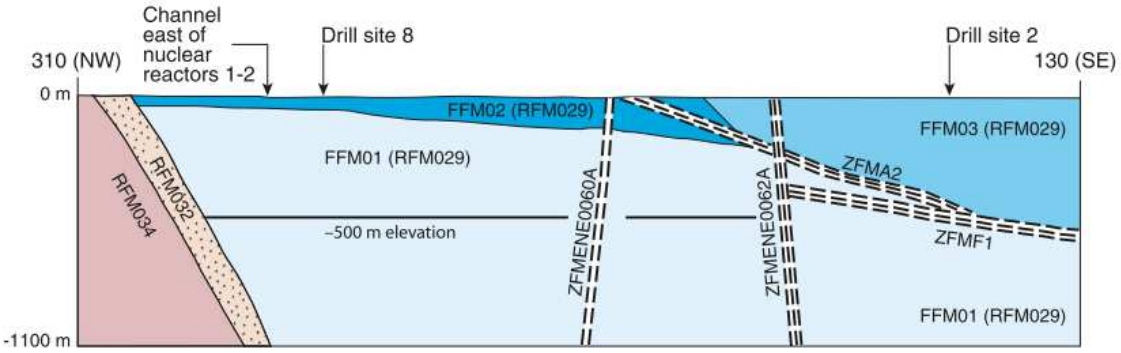


Figure 4-3 : Profile simplifié du site de Forsmark, indiquant des zones de déformations (ZFM), des domaines de fractures (FFM) et domaine de roche (RFM). Dans Olofsson et al. (2007).

L'état de contrainte de chaque fracture (contrainte normale σ_n et contrainte cisaillante τ) est mesuré en fonction du champ de contrainte éloigné mesuré à Forsmark (disponible dans le rapport (Martin, 2007)) (Figure 4-14). Il révèle une corrélation forte entre σ_n et f_{op}. La corrélation est analysée spatialement et en fonction de l'orientation. Elle reste la même quels que soient la profondeur de la fracture, son orientation et son appartenance à une zone de déformation ou un domaine de fractures (Figure 4-16 et Figure 4-17). De plus, elle diffère très peu d'un puits à l'autre. Ceci permet de comprendre que le mécanisme principal distribuant les surfaces de fractures ouvertes est d'ordre mécanique.

Nous observons que la corrélation entre σ_n et f_{op} diffère selon les minéraux de remplissage (Figure 4-18). Une hypothèse est que cela est dû à la nature du minéral, qui change les propriétés mécaniques de la fracture et donc potentiellement impacte sa réactivation. Les minéraux sont également analysés selon l'âge approximatif de leur formation (Sandström, 2009). Cette analyse montre que plus la minéralisation est ancienne, plus les fractures sont fermées.

Finalement, nous approfondissons l'hypothèse de la réactivation des fractures en questionnant le rôle joué par les pressions de fluides sur la croissance et la réactivation du réseau de fractures. A Forsmark, très peu de fractures semblent être en état de contrainte critique, c'est-à-dire ne dépassent pas le seuil de rupture de Mohr-Coulomb (Figure 4-15). La pression de fluide réduit la contrainte normale effective ce qui peut amener la fracture à dépasser ce seuil et donc à être réactivée. Nous analysons f_{op} en fonction de la pression fluide nécessaire pour causer la rupture P_f^c. Cette dernière est comparée à la pression hydrostatique et à la pression lithostatique, mesurées en chaque fracture. La première correspond au poids de la colonne de fluide au-dessus de la fracture et correspond à l'hypothèse d'une bonne connectivité dans le réseau. La seconde correspond à la pression de la matrice rocheuse et correspond à l'hypothèse d'une connectivité faible du réseau. Nous observons que f_{op} décroit exponentiellement quand P_f^c varie de la pression hydrostatique à la pression lithostatique, puis reste constante au-delà, à une valeur que nous qualifions de résiduelle.

4.3. Projet d'article : „Controls of the distribution of the open fraction of fracture networks. Results from core-log analyses (Forsmark, Sweden)"

Les résultats de cet article ont été présentés sous la forme d'un poster lors du congrès international EGU (*European Geosciences Union*) qui a eu lieu à Vienne du 7 au 12 avril 2019 (lien vers l'abstract : https://eds.a.ebscohost.com/eds/detail/detail?vid=0&sid=138f91bf-7e84-4e04-841359bbd9452861%40sessionmgr4007&bdata=Jmxhbmc9ZnImc2l0ZT1lZHMtbGl2ZQ%3d%3d#AN=140483134&db=asx).

D. Doolaeghe[1,2], P. Davy[1], C. Darcel[2], J.-O. Selroos[3], D. Mas Ivars[3,4]

[1]Univ Rennes, CNRS, Géosciences Rennes, UMR 6118, Rennes, France,

[2]Itasca Consultants SAS, Écully, France,

[3]Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, SKB, Stockholm, Sweden,

[4]KTH Royal Institute of Technology, Sweden

Abstract:

Fracture networks, which control flow in crystaline rock, are partly sealed by mineralization and the distribution of open and sealed patches is a critical parameter to evaluate fracture network flow properties. In this study, we address this issue by analyzing the extensive core-log database of the Forsmark site (Sweden) with more than 90,000 fracture traces between 0 and 800 m depth where fractures are classified as open, partly open or closed. The proportion of open fracture traces observed in the core-logs gives an estimate of the fraction of open fracture surfaces in the network, noted f_{op}. We evaluate how f_{op} is distributed relative to several parameters: depth, orientation, fracture density, mineral fillings, and fracture stresses. The main correlations observed are with depth, fracture orientation and filling mineralogy (on average, the older the mineralization is, the more the fractures are sealed). In contrast, f_{op} depends very little on fracture density and there is little or no difference between deformation zones and fracture domains. The correlations with depth and fracture orientation are consistent with a strong control of σ_n, the stress normal to the fracture

plane on f_{op}, computed from the current remote stress field. Based on this observation and on previous studies that suggest potential increase in fluid pressure due to glaciation and deglaciation episodes, we question if and how fractures may have been reactivated recently by analyzing the open portion of fractures as a function of the fluid pressure required to cause fracture plane rupture P_f^C. We observe that f_{op} decreases exponentially when P_f^C varies from hydrostatic to lithostatic conditions and remain constant above. This last analysis is a first attempt to differentiate between the initial sealing and reactivation processes due to overpressure.

1. Introduction

In low permeability rocks, like crystalline rocks, fracture networks constitute the basic structure defining permeability and flow path organization (Berkowitz, 2002; Davy et al., 2006a; Maillot et al., 2016). Fractures are discontinuities in the rock matrix that formed during past geodynamical events, increasing the matrix open voids and permeability (Bandis et al., 1983; Gratier, 2011; Lang et al., 2018). However, after they were formed, other processes, usually slow, tend to clogg fractures by mineral precipitations possibly up to the point where they are completely sealed. In many natural systems, few fractures are open. This observation cannot be neglected in hydraulic characterization and modeling of the fractured media. Besides, considering the complex multi-scale structure of fracture networks (Bonnet et al., 2001; Davy et al., 2006a), the way the open fracture surfaces are distributed should significantly impact the network connectivity properties.

The sealing processes are due to chemical or mechanical mechanisms, and often to a complex combination of both (Lima et al., 2019; Min et al., 2009; Renard et al., 2000). A common example of sealing process is the precipitation in the fracture of an external dissolved mineral transported by the fluids. The conditions for the mineral to precipitate and the rate of precipitation depends on a combination of many factors, like the temperature changes (e.g. hydrothermal fluids - Chaudhuri et al. (2008, 2012); Lowell et al. (1993); Polak et al. (2003)), fluid and solid composition (Deng et al., 2018b), and the geometry of the flow creating heterogeneity in the precipitation rates (Deng et al., 2018a; Dijk & Berkowitz, 1998; Yehya & Rice, 2020) and mixing zones (Dentz et al., 2011). Another well-studied sealing process is the more local rearrangement of mass (dissolution and precipitation) triggered by the stress applied to the fracture, i.e. by self-healing (Brantley et al., 1990; Hickman & Evans, 1987; Smith & Evans, 1984) or by pressure-solution (Ameli et al., 2014; Lang et al., 2015; Rutter, 1976; Yasuhara & Elsworth, 2008). Considering the many factors involved, the time-scale for fracture sealing to occur is very broad (Gratier, 2011). At a human scale, direct observation of the fracture evolution is conducted by recording permeabilities during seismic cycles. The

quick increase in permeability during earthquakes is followed by a slow recovery, which attests to fracture aperture decrease and sealing (Claesson et al., 2004; Claesson et al., 2007; Xue et al., 2013). These observations indicate that fracture networks are, in fact, a succession of open and sealed paths, resulting from a complex interplay between the history of deformation and sealing processes.

In the present study, we aim at evaluating how the open fracture surfaces are distributed in a fractured system. We focus on the fractured crystalline rocks of Forsmark (Sweden), which have been chosen to host a future deep nuclear waste repository. In this industrial context, a long-term hydrogeological assessment is required for evaluating the integrity of the geological barrier. The study relies on the analysis of the entire core-log database from the Forsmark site, as provided by SKB (*Swedish Nuclear Fuel and Waste Management and Co*), with data from 0 to ~800 m depth. In this database, only a small proportion (~25%) of fracture traces are open. We evaluate correlations of the open surface fraction (f_{op}) with fracture parameters: orientation, depth, density, lithology, stresses, mineral fillings. Our first goal is to constrain the distribution of the open surfaces that could serve as input for further flow modeling of the fracture network. Then, we propose to better understand the processes that led to the present open surface distribution. The Forsmark rocks are some of the oldest on earth and have a long deformation history, which suggests that fractures were repeatedly open and sealed (Lei & Wang, 2016). As the current stress field is the last event potentially opening the fractures, it likely influences the open surface distribution (Barton et al., 1995; Mattila & Follin, 2019; Moon et al., 2020). We wish to examine if this distribution is only impacted by the current stress field, or if it is also affected by other processes, e.g. past processes or heterogeneous sealing.

The remainder of the manuscript is organized as follows. In section 2, we provide information relative to Forsmark: geological history and description of the dataset. In section 3, we present the methodology used to compute the open surface fraction, f_{op}, from the core-logs data and how we correlate it with fracture parameters. Section 4 presents the results of the analyses. In section 5, we discuss the role of fracture reactivation. Finally, conclusions are drawn in section 6.

2. Site and material description

Forsmark, located about 150 km north of Stockholm (Sweden), has been chosen to host a future nuclear waste repository lying between about 400 and 500 meters underground. Investigation campaigns have been performed to characterize the geology and hydrogeology of the site. This includes the acquisition of a collection of interpreted core materials and

borehole optical imaging, whose total length is nearly 18 km, and reaching depths from 0 to ~800 meters (Stephens et al., 2007).

Forsmark's crystalline rocks are some of the oldest rocks on earth. Forsmark is located on a tectonic lens formed between ductile deformation bands, about 1.8 Ga ago (1 Ga = 1 billion years) during the Svecocarelian orogeny. Since then, the rocks were repeatedly fractured by brittle deformation during several tectonic episodes: the Gothian orogeny ($1.7 - 1.5$ Ga), the Sveconorvegian orogeny (1 Ga), and the far Caledonian orogeny ($500 - 400$ Ma; 1 Ma = 1 million years). Fracturing was also activated by loading and unloading episodes from sedimentary layers deposition/erosion and glaciation/deglaciation, for example, the formation of a sedimentary basin between 1.5 and 1.27 Ga, a glaciation episode around 600 Ma, a sedimentary cover during the Paleozoïc, and numerous glaciations during the Quaternary (Stephens et al. (2007) – see 5.2.3; Sandström (2009)). All these stress changes have led to either the creation of new fractures or the reactivation of old ones. Along with these tectonic episodes, fluid migration has caused the precipitation of minerals in the fractures. In total, four main generations of mineralization have been interpreted by dating the fracture filling materials (Sandström, 2009; Sandström & Tullborg, 2008). Two of these generations are associated with hydrothermal activities between 1.8 and 1 Ga and the two others occurred at lower temperatures, influenced by sedimentary covers and glaciations (Sandström & Tullborg, 2009).

The cored boreholes consist mainly of a series of shallow and deep boreholes (*KFM01-KFM12*) drilled between 2002 and 2006 and distributed all over the area of the future repository site (Figure 4-4). Also, we include two series of shallow boreholes, drilled in 2005 (*KFM90A-F*) and between 2011 and 2016 (*KFM13-KFM23*). These later series are located in the north-west of the area, near the nuclear power station (Figure 4-4). The core diameter is 4.8 cm. Along with core mapping, borehole imaging (BIPS – Borehole Image Processing System) was also performed and interpreted in these boreholes. The results of the interpretations are available in the SKB database, *SICADA*. Our dataset is composed of the following fracture information: fracture position, orientation, open/partly-open/sealed interpretation, and mineral and wall alteration types. In the remainder of the manuscript, we use the term filling minerals for both the fracture minerals and wall alterations.

To decide if a fracture was open, partly-open, or sealed before the drilling, the following classification system was used. Fractures were first classified into broken/unbroken fractures directly from the core observation. Broken fractures were classified as open if one of the following criteria was fulfilled: distinguishable aperture in the borehole image, weathered or altered fracture surfaces, or a poor fit of the fracture planes. Otherwise, it was classified as sealed. Unbroken fractures were mostly classified as sealed, except if an aperture was distinguishable, in which case it was classified as partly-open (SKB (2013) – see 1.6.5,

Nomenclature). Partly-open fractures represent 2% of the dataset. We choose to include them in the group of open fractures.

The database provides also lithological information about the rock type, that are classified into interpreted rock domains (see section 4 in Stephens et al. (2007)). In this classification, one rock domain (*RFM029*) dominates the studied area. It is composed mostly of metamorphic, medium-grained granite. In addition, the many deformation zones crossing the area have been identified (Follin et al., 2007). They consist of thin, extended, and highly fractured volumes. In between them, the geological formations have been divided into six fracture domains based on several characteristics, essentially the fracture frequency, but also alteration marks and rock composition (see section 5 in Olofsson et al. (2007)). In the present study, we focus only on this later lithological categorization, i.e. deformation zones and fracture domains, to characterize the open fracture surface distribution. Note that some parts of fracture domains have been interpreted as influenced by deformation zones. We do not include them in our analysis of the fracture domains.

Finally, numerous stress measurement campaigns have been undertaken at Forsmark to establish the current in-situ stress state from 0 to 1000 m depth, using, for example, overcoring and hydraulic fracturing methods. From these measurements, a stress model with three principal stress components has been estimated in terms of stress magnitudes and orientations, and as a function of depth. The maximum and intermediate stresses are horizontal and increase with depth. The maximum stress is striking roughly in the NW-SE direction. The minimum stress is vertical and corresponds to the weight of the overburden. More information about the surveys, the limitations of the different measurement technics, the assumptions and the derivation of the stress model are available in Martin (2007). In the present study, we use this model to compute the fracture normal and shear stresses.

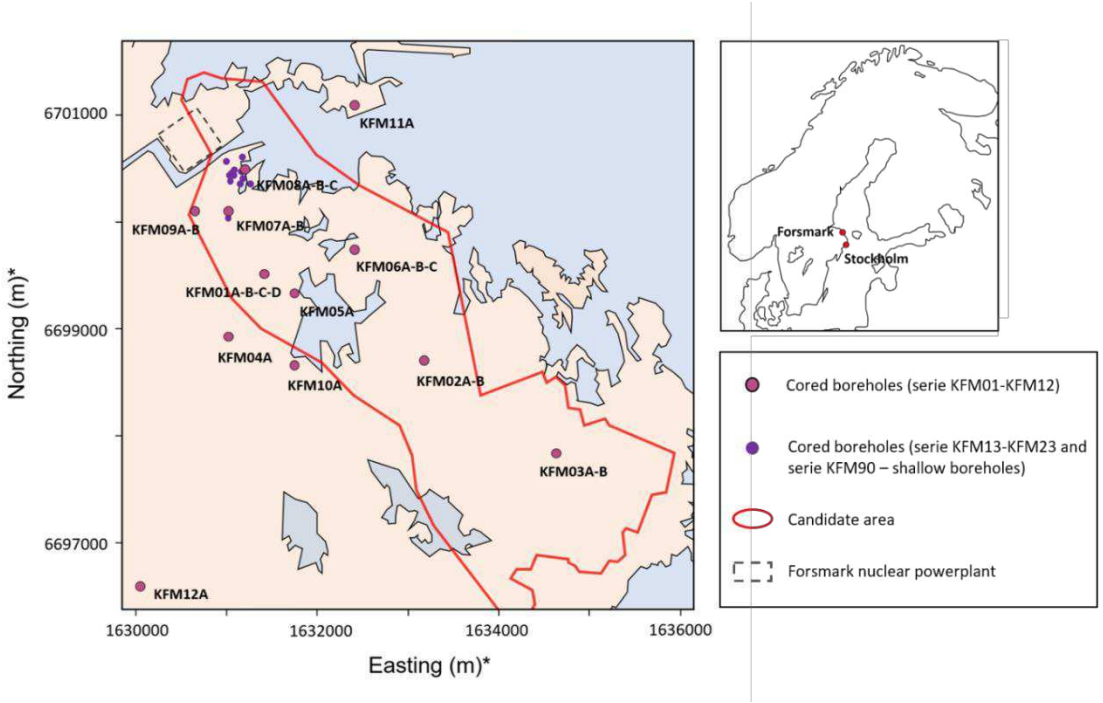


*Figure 4-4: Positions of the cored boreholes heads in the Forsmark site. These positions are plotted from the SICADA database. The other elements, i.e. coast-line, candidate area, and power-plant, are plotted by using a combination of figures from the report R-07-45 (Stephens et al., 2007). * Easting and northing are measured in the RT90 coordinate system.*

3. Methodology

The core-log data provide one-directional information with an apparent fracture intensity (m^{-1}). A well-known assumption is that this intensity statistically quantifies the total fracture surface per unit volume, called the density p_{32} ($m^2.m^{-3}$), when an angular correction is applied to the fracture (Dershowitz & Herda, 1992; Terzaghi, 1965). This angular correction avoids undersampling due to the fracture orientation relative to the borehole direction. Similarly, we assume that the proportion of open fracture measured in the core-log data can provide, with the angular correction, an estimate of the open fracture surface fraction in the fracture network. We note this fraction f_{op}. Two methods for measuring f_{op} are presented hereafter.

As f_{op} represents a fraction, it does not necessarily rely on a spatial measuring scale (unlike densities in m^{-1}). It can be computed in any subset of fractures. We apply the following angular correction to each fracture, $C_f = \frac{1}{\sin(\alpha_f)}$, with α_f the acute angle between the fracture f and the borehole direction, deduced from the trace. To avoid infinite correction values when fractures are quasi-parallel to the borehole, we assume that α_f cannot be less than $5°$, which accounts for orientation uncertainty measurement. p_{32} is the sum of C_f along

a borehole normalized by the borehole length. We define the surface ratio of open fractures f_{op} as:

$$f_{op} = \frac{\sum_{f\in[F_{op}]} C_f}{\sum_{f\in[F]} C_f}, \tag{62}$$

$[F]$ is a selected set of fracture intersections and $[F_{op}]$ is the subset of $[F]$ that are classified open. Note that $[F]$ is not necessarily the total set of observed intersections, but it can be any subset selected by lithologies (fracture domains and deformations zones), orientations, filling minerals, or stresses (see respectively sections 4.1, 4.3, 4.4, and 4.5).

We also compute $f_{op}(x,s)$ along boreholes, with x the position along the borehole and s a sampling scale, as the ratio between open fracture density, $p_{32,o}(x,s)$, and all fracture density, $p_{32}(x,s)$:

$$f_{op}(x,s) = \frac{p_{32,o}(x,s)}{p_{32}(x,s)} \tag{63}$$

In practice, we convolved the discrete values of C_f by a Gaussian function centered in x with a standard deviation $s/2$. This is done for both p_{32} and $p_{32,o}$ so that f_{op} is defined continuously along the borehole. We take the sampling scale s of 10 m in Figure 4-5a. More computational details are provided in Appendix 7.1. The advantage of the method is its adaptability to any configuration. It deals easily with finite-size effects near the extremities of the entire borehole or the borehole selected section (see Appendix 7.1), which are common problems in classical sampling. In Figure 4-5a and Figure 4-5b, an example of the measure is presented (solid lines) and compared with a classic "hat" sampling method (dots). The measurements along the different boreholes are analyzed as a function of absolute depth (see Appendix 7.2 for the conversion method) with origin at the zero sea level reference.

We carried out the method for different lithologies, i.e. fracture domains and deformation zones (section 4.1). In this case, f_{op} and p_{32} are measured in the sections of the borehole corresponding to the selected lithology. When we compute the average and standard deviation with depth, only the portions with measurements are considered. We also perform measurements of f_{op} and p_{32} along boreholes by selecting poles of orientations (section 4.3). In this case, f_{op} and p_{32} are measured all along the boreholes but by selecting only fractures belonging to a chosen pole of orientation. Finally, the measured signals along the boreholes serve also at analyzing the correlations between f_{op} and the density p_{32} (section 4.2).

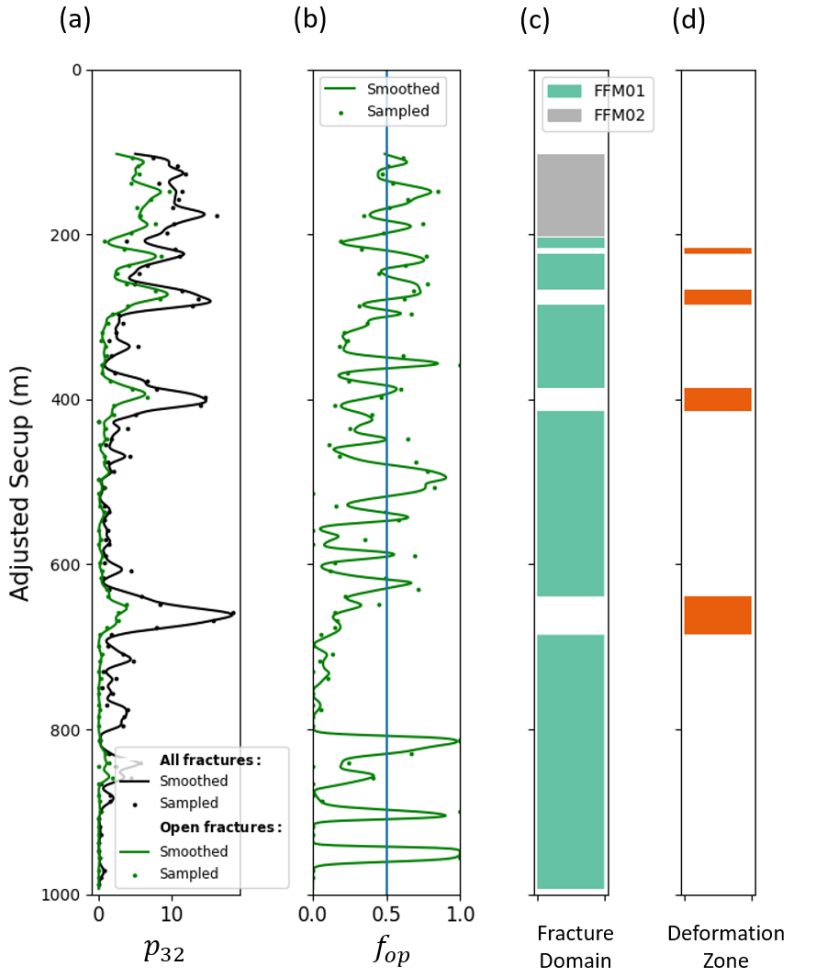


Figure 4-5: Measures along borehole KFM01A. The adjusted secup is the position along the borehole. (a) Fracture density p_{32} for all fractures (black) and open fractures (green). (b) Open fraction f_{op}, which is the ratio $\frac{p_{32,o}}{p_{32}}$. In (a) and (b), the lines present the results of the smoothing method with $s = 10\,m$ (section 3 and appendix 7.1), and the dots present the result of the classic sampling method with sample size $s = 10\,m$. (c) Fracture domains and (d) deformation zones.

4. Results

The open surface fraction f_{op} is estimated at 0.22 in the entire dataset (using equation (62)). In this section, we present how f_{op} evolves with spatial parameters (section 4.1), with the fracture density (section 4.2), with fracture orientations (section 4.3), with the type of mineral filling (section 4.4), and with the current estimated normal and shear stresses (section 4.5).

4.1. Distribution of f_{op} in space: with depth and lithologies (fracture domains and deformation zones)

The fracture density p_{32} is on average constant for the site at depths above $700\,m$, with an average of 12 m^{-1} (Figure 4-6a – black line). Under $700\,m$, p_{32} is much smaller around 3-5 m^{-1}, but the measurement relies on very little borehole data available at that depth (Figure 4-6c). On the contrary, the open fraction, f_{op}, decreases continuously with depth (Figure 4-6b – black line) with two regimes (Figure 4-7): between 0 and $150\,m$, f_{op} decreases exponentially from 0.45 to 0.25 with a characteristic scale of ~200 ~m ($f_{op} \sim \exp\left(-\frac{depth}{200}\right)$); between 150 and $800m$, f_{op} decreases more slowly with depth down to 0.13 with a characteristic scale of ~1000 m ($f_{op} \sim \exp\left(-\frac{depth}{1000}\right)$).

p_{32} and f_{op} are also computed in portions of the boreholes corresponding to lithological domains, fracture domains and deformation zones. The average and standard deviation with depth are represented in Figure 4-6 (blue and red lines). Unsurprisingly, the density p_{32} is very much higher in deformation zones than in fracture domains (Figure 4-6a) with average values of $7\ m^{-1}$ and $17\ m^{-1}$, respectively. On the contrary, no difference is observed for f_{op} for both domains whatever the depth (Figure 4-6b).

We compute f_{op} in each of the six fracture domains and each deformations zone (Figure 4-8). No major differences are observed among fracture domains, except in the shallow domain *FFM02*, located at depths between, 0 and 150 m, and characterized by a high transmissivity. In this domain, f_{op} equals 0.36. The domain *FFM01* located just below *FFM02*, at depths between $\sim 150\,m$ and $\sim 1000\,m$, is the most widespread of the site, and is the target for hosting the repository. In this domain, f_{op} equals on average 0.14 (Figure 4-8a). In deformation zones, the f_{op} values are characterized by a strong variability, with extreme values of 0,05 and 0.77. Some of this variability can be explained by the correlation with depth for the values lying in the range 0.13 - 0.45 (Figure 4-6b). Values outside of this range could be explained by other factors, e.g. orientation or remote stress field.

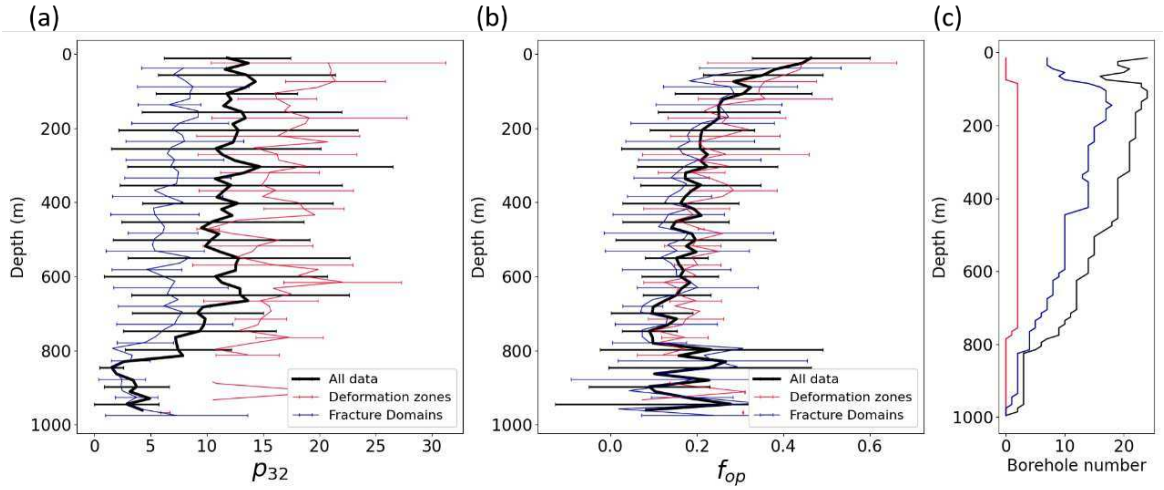


Figure 4-6 : (a) Average fracture p_{32} density as a function of depth, (b) average open fraction f_{op} as a function of depth, (c) borehole number as a function of depth. The measures are performed for all fractures (black), fractures in Deformation zones (red), and fractures in Fracture domains (blue). Horizontal error bars indicate the standard deviation of P_{32} and f_{op} signals measured by boreholes. The depth is measured relative to the sea level.

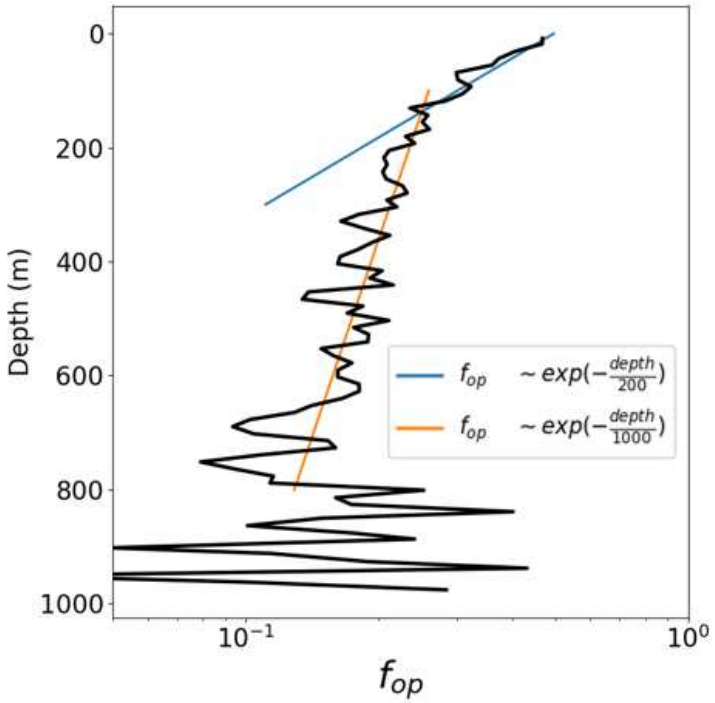


Figure 4-7: Exponential fits on the average open fraction f_{op} as a function of depth.

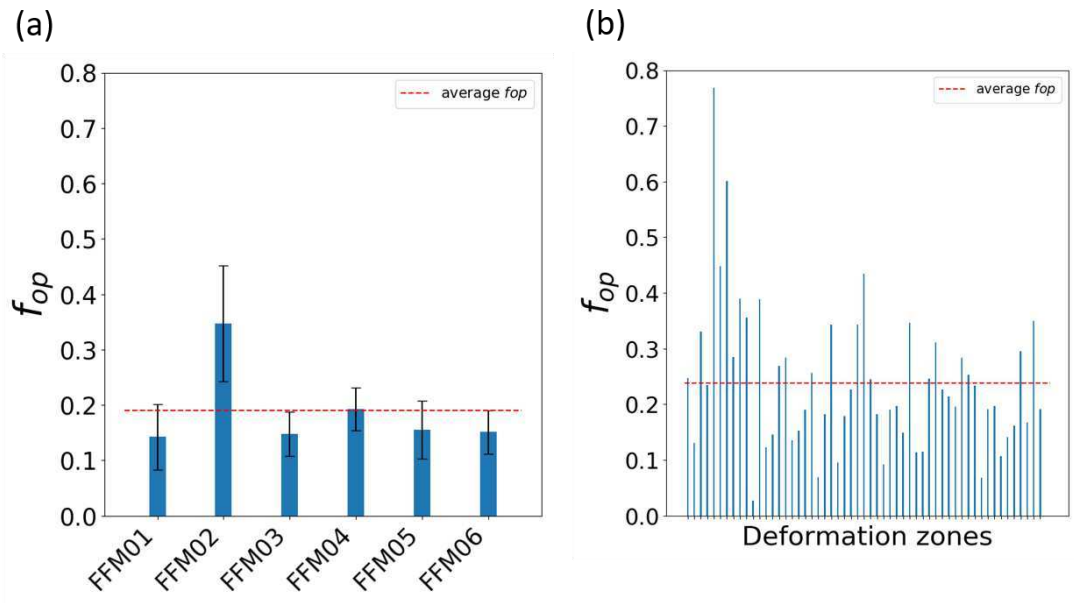


Figure 4-8: (a) Open fraction f_{op} in the different interpreted Fracture domains at Forsmark. The vertical error bar indicates the standard deviation of the measure by boreholes. (b) Open fraction f_{op} in the different interpreted Deformation zones at Forsmark. The average f_{op} (red dashed line) is the arithmetic average of the values measured in each fracture domain and each deformation zone.

4.2. Correlation of f_{op} with the fracture density p_{32}

In this section, we analyze the dependency of f_{op} with fracture density (p_{32}) for different sets of fractures (Figure 4-9). We take the database of p_{32} and $p_{32,o}$ values calculated along the boreholes (equation (63) and Figure 4-6), and then we bin the p_{32} scale range to calculate the average and standard deviation of f_{op} for each bin. The p_{32} distribution (number of data points per bin, normalized by the bin size) is also considered in order to assess the statistical relevance of f_{op} (lower subplots in Figure 4-9). The procedure is performed for the entire dataset (Figure 4-9a), but also by selecting borehole portions corresponding to deformation zones and fracture domains (Figure 4-9b-e).

Whatever the fracture domains, there is no significant correlation between f_{op} and p_{32}. In the ranges of p_{32} values where the number of data is large enough to make the average statistically relevant, f_{op} does not vary with p_{32} but the variability is high. We can note that deformation zones tend to present a positive correlation for $p_{32} > 25\ m^{-1}$ (Figure 4-9b), however, the observation relies on very little data. Only the shallow fracture domain $FFM02$ presents a slight negative correlation between the open fraction f_{op} and the density p_{32}. Note that some very large p_{32} have been measured locally along the borehole mostly in deformation zones, $p_{32} > 30\ m^{-1}$, which corresponds to distances between fractures smaller than $3\ cm$ or to large – and thus rather uncertain –angular correction.

Figure 4-9 also shows that the results discussed above are independent of the sampling scales, s (see section 3 and Appendix 7.1 for the definition of s) even if the variability is slightly increasing when decreasing s.

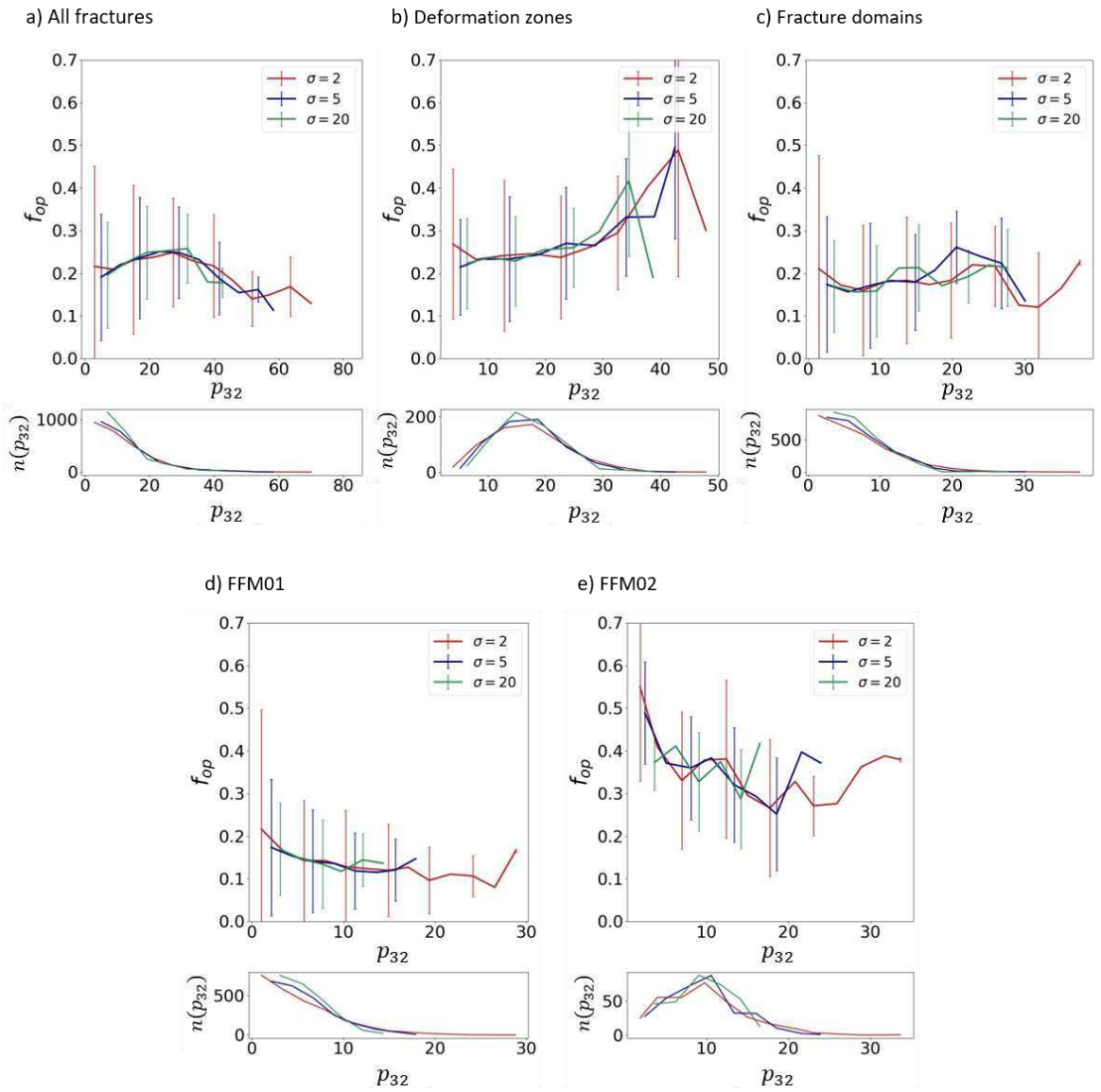


Figure 4-9: Open fraction f_{op} as a function of fracture density p_{32}. The signals f_{op} and p_{32} are measured along borehole with measuring scales $\sigma = 2, 5$ and 20 m (method in appendix 7.1). Average and standard deviation of f_{op} are computed in equal bins of p_{32}. (a) Measure performed for all fractures, (b) for deformation zones, (c) for all fracture domains, (d) for fracture domain FFM01, and (e) for fracture domain FFM02. Lower subplots indicate the p_{32} distribution.

4.3. Correlation of f_{op} with fracture orientations

Fracture orientations at Forsmark can be categorized into three major fracture subsets: a horizontal subset and two vertical subsets with fracture striking in the NE-SW and the NW-SE directions (stereonet in Figure 4-10a). The strike direction is at +90° from the pole direction read on the stereonet. The NE-SW vertical subset is the densest of the three.

First, to evaluate how f_{op} evolves with orientations, we create subsets of fractures based on regular binings of the fracture dip θ, and the fracture pole direction, φ, and compute f_{op} in these subsets. The results are projected in a stereonet plot using an equal-area projection (see Terzaghi (1965) for the projection method) and a color-contouring is applied to the values (Figure 4-10b). The results reveal that the horizontal set ($\theta < 20°$) is the most open, with $f_{op} \sim 0.4 - 0.5$. This is in agreement with the current stress model in which the minimum stress is vertical. Besides, fractures striking in the NW-SE direction are more open than the fractures NE-SW. Again, this can be interpreted as an effect of the stress field, whose major component is roughly in the NW-SE direction (σ_H, see arrows in Figure 4-10a). We can note more precisely that f_{op} is actually larger for fracture striking in a SE direction, $f_{op} \sim 0.2 - 0.4$.

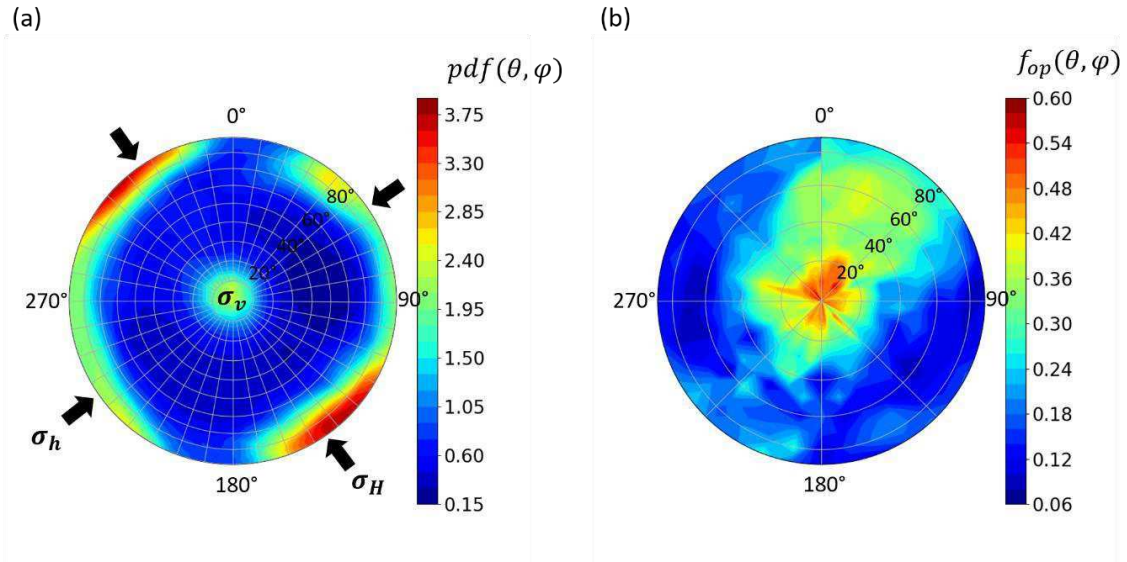


Figure 4-10: Stereonet representations using an equal projection area on a lower hemisphere. (a) Stereonet of all the fractures of the dataset. The density color scale represents the fracture density distribution according to orientation units, $pdf(\theta,\varphi)$. (b) Stereonet representing the open fraction as a function of the fracture pole orientation, $f_{op}(\theta,\varphi)$. In (a) and (b), as per the stereonet plot convention, the fracture pole downward direction is read around the polar grid, with North being up (0°), and the fracture dip is indicated from the middle (0°) to the edge of the stereonet (90°). We recall that in (a) and (b), the fractures are weighted with a Terzaghi correction. In (a), the directions of the three principal stress components, σ_v, σ_h and σ_H are indicated.

Now, we categorize the fractures into three orientation subsets interpreted from the three main poles observed in the stereonet of Figure 4-10a and we evaluate how p_{32} and f_{op} evolves with depth in these subsets (equation (63)). Note that in the database, some boreholes, mostly the shallow boreholes, do not have the fracture orientation information. This is explained by the lack of measurements in the first $100\,m$ (Figure 4-11c and Figure 4-12c). In the horizontal subset, mostly present above $200\,m$ (Figure 4-11a), the open fraction is rather high at all depths and decreases on average linearly from ~ 0.55 close to the surface to ~0.25 at 800 m depth (Figure 4-11b). In the vertical sets, whose density is high and constant with depth (and Figure 4-12a), f_{op} is mostly present above the first 100 meters and then decreases on average linearly from ~0.22 at 100 m to ~0.1 at 800 m depth (and Figure 4-12b). Note that, whatever the depth, f_{op} is slightly higher in the subset striking NW-SE (green lines) than in the subset NE-SW (yellow lines). Interestingly, it is the contrary when we compare the density p_{32}. This observation could have resulted in a negative correlation between f_{op} and p_{32} but this was not identified by our analyses in section 4.2.

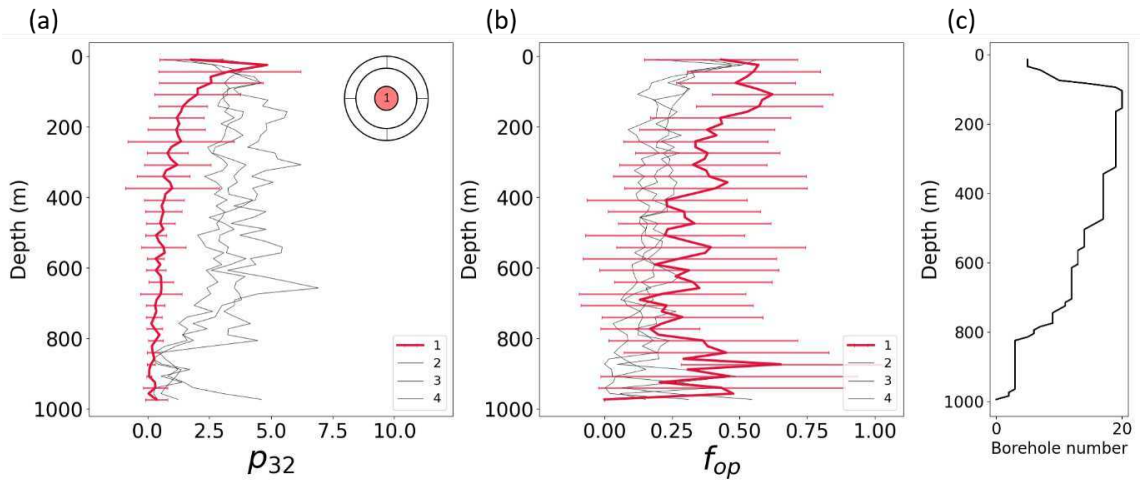


Figure 4-11: (a) Density p_{32} and (b) open fraction f_{op} in the horizontal set (dip $\theta < 20°$) as a function of depth. (c) Borehole number with depth. Horizontal error bars indicate the standard deviation of p_{32} and f_{op} signals measured by boreholes.

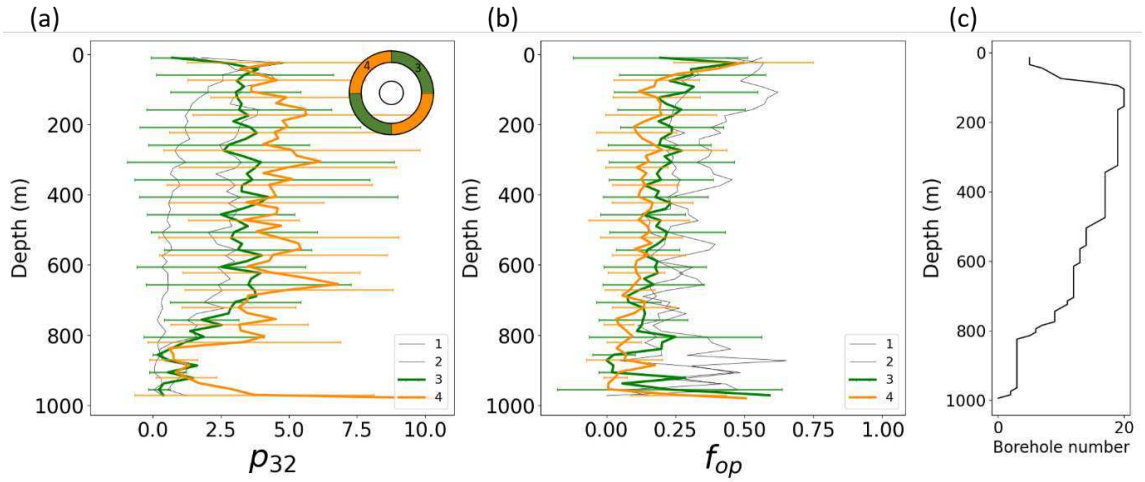


Figure 4-12: (a) Density p_{32} and (b) open fraction f_{op} in the two vertical fracture sets as a function of depth. In the first vertical set (green lines), dip $\theta > 65°$ and pole direction $\varphi \in ([0°, 90°] \cup [180°, 270°])$. In the second vertical set (yellow lines), dip $\theta > 65°$ and pole direction $\varphi \in ([90°, 180°] \cup [270°, 360°])$. (c) Borehole number with depth. Horizontal error bars indicate the standard deviation of p_{32} and f_{op} signals measured by boreholes.

4.4. Correlation of f_{op} with filling minerals

Fracture filling minerals are present both in sealed and open fractures. In open fractures, this can either attest to an incomplete deposition process or the reactivation of a fracture that was previously sealed. Only 1% of the fracture traces have been interpreted as no-mineral fractures (Claesson et al. (2011); Table 4-1). Note that, in the dataset, several minerals are usually present in one fracture. Also, no quantification regarding the mineral importance (volume, order of importance in one fracture trace) is provided. A quantitative mapping is only available for open fractures (Löfgren & Sidborn, 2010). Therefore, our analyses are based on a binary interpretation by fracture: present and not present.

In addition to the dataset, we use the interpretations of Sandström (2009), which performed dating measurements on a subset of fractures and categorized the different filling minerals into four main generations. These generations are described in terms of minerals, age, fluid origin, formation temperature, and spatial distribution in Table 4-1. The mineral distribution with depth and orientations is available in supplemental materials. For each mineral that is significantly present in the dataset ($\sim > 1\%$), we compute its occurrence and its f_{op} (Table 4-1). The f_{op} of a mineral is computed by selecting all the fractures having this mineral and applying equation (63).

The most present fracture minerals are calcite, chlorite, and oxidized walls, each of them being present in $\sim 40\%$ of the dataset. Oxidized-walls are associated with old hydrothermal events, i.e. generation 1 and 2 ($1.8 - 1$ Ga). This marker can be a good indicator

to differentiate old fractures formed during these old hydrothermal episodes from more recent fractures, as long as we make the hypothesis that all these old fractures were marked by this type of alteration. Calcite and chlorite are associated with both old hydrothermal and lower temperature recent generations. It is thus difficult to differentiate the age and nature of the sealing process in these fractures. Other minerals having a small occurrence are specific to a generation. For example, epidote, adularia, laumontite, prehnite, and hematite are associated with generation 1 or 2. Pyrite and asphalt are associated with generation 3 (influence of a sedimentary cover). Clay minerals are associated with the recent generation 4.

f_{op} varies a lot with the fracture minerals. Overall, f_{op} is correlated with the mineral generation age (Figure 4-13). Fractures with generation 1 and 2 minerals are less open than the average, for example, oxidized-walls are associated with f_{op} equal to 0.08. On the contrary, fractures with generation 3 and 4 seem to be more open, as attested by the f_{op} values measured in fractures with pyrite (0.52) and clay minerals (0.87). Calcite and chlorite fractures have f_{op} values rather in the average, which is surely due to their belonging to both old and recent generation. Even if these results are not surprising considering the certain higher sealing rates during generations 1 and 2 (hydrothermal) than in the more recent generations 3 and 4, they indicate that the past sealing episodes influence the present open fracture distribution. Another factor that may explain the differences among the mineral f_{op} is the mechanical recovery (healing) associated with this type of sealing. This will surely influence how much the fracture can be reactivated by later deformations episodes. For example, high-temperature sealing may have promoted a better fracture mechanical recovery (Gratier, 2011; Yehya & Rice, 2020), which explains why these fractures are today more sealed. Another more specific example is the case of laumontite fractures, which may be more open than other minerals of generation 2 because laumontite is characterized by low mechanical strength and tend to disaggregate in dry environments.

Table 4-1: Description of the different generations of fracture mineralization in terms of age, origin, temperature, and spatial distribution (depth, orientations) after (Sandström, 2009; Sandström & Tullborg, 2009). Gray boxes indicate minerals belonging to the corresponding generation. The occurrence is the percentage of fracture trace having this mineral in the core-logs. f_{op} *is the open fraction computed with equation (62).*

Generation	**1**	**2**	**3**	**4**		
Age	1.8-1.1 Ga	1.1 – 1 Ga	460-270 Ma	250 Ma to today		
Origin	Hydrothermal	Hydrothermal	Organic-rich sedimentary cover	Sedimentary covers and glaciations		
Temperatures	>200°C	150°-250°	60°-95°	50°		
Orientations*	Vertical NW-SE	Vertical NE-SW, mildly NW-SE	Vertical NE-SW, horizontal	Horizontal, mildly vertical NW-SE		
Depths	Depleted in shallow formation, evenly distributed under ~150 m	Depleted in shallow formation, evenly distributed under ~150 m	Apparent negative gradient from the surface to 1000 m	Mainly present above 150 m		
Minerals					Occurrence	f_{op}
Oxidized Walls	■	■			39%	0.08
Adularia		■			10%	0.09
Epidote	■				4%	0.09
Quartz	■		■		9%	0.13
Prehnite		■			3%	0.14
Laumontite		■			14%	0.19
Calcite		■	■	■	45%	0.28
Hematite		■			10%	0.30
Chlorite	■	■		■	42%	0.36
Pyrite			■		4%	0.52
Asphalt			■		0.6%	0.85
Clay Minerals				■	6%	0.87
No mineral					1%	0.41
No record					5%	0.31

**The orientation is indicated with the strike azimuth.*

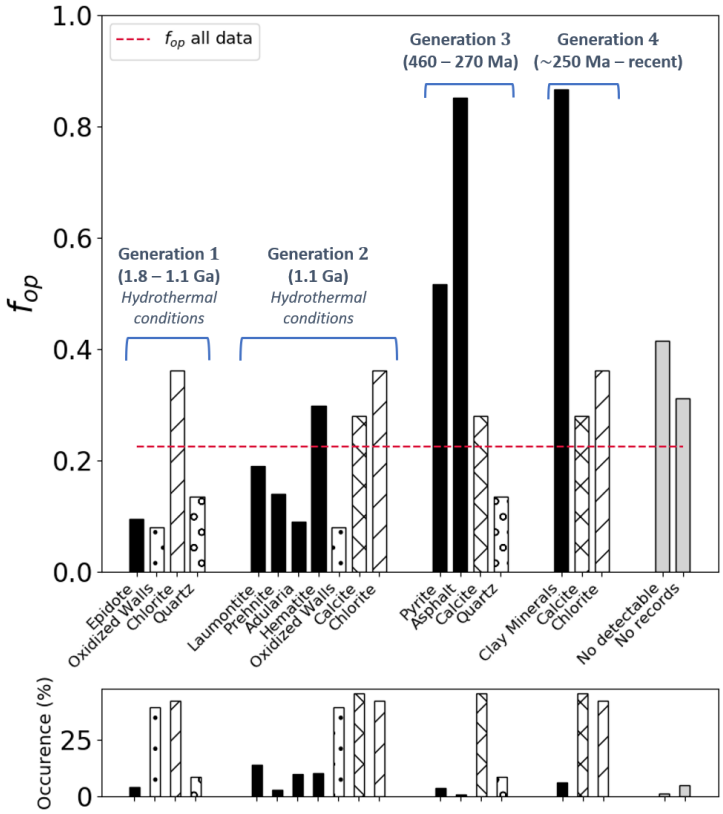


Figure 4-13: Open fraction f_{op} by fracture filling minerals. It is computed in subsets selected by the presence of a mineral in the fracture. The results are gathered by generations. A pattern (dots, circles, stripes) identifies the results repeated in several generations. The lower subplot indicates mineral occurrence.

4.5. Correlation of f_{op} with normal and shear stresses currently applying to fracture planes

We use the site depth-dependent stress model detailed in Martin (2007) (Figure 4-14 and Figure 4-10a) to estimate the normal and shear stress, σ_n and τ, of each fracture. We represent open and sealed fractures as a function of σ_n and τ (Figure 4-15a). Then, fractures are sorted in equal bins of σ_n and τ and $f_{op}(\sigma_n, \tau)$ is computed for each bin using equation (63) (Figure 4-15b). Mohr-coulomb failure envelopes models ($\sigma_n = \mu \times \tau + c$) are represented in dashed lines. For the coefficients of friction μ and cohesion c, we use values that are measured on open and sealed fractures at Forsmark. For open fractures, these coefficients were estimated as $\mu = 0.73$ and $c = 0.7$, and for sealed fractures, $\mu = 1.33$ and $c = 4$ (see Glamheden et al. (2007), p. 59-61). Most of the fractures are under the failure envelopes. The

few fractures that are above are associated with some strong values of f_{op} (0.6 - 1), which suggests that these values are impacted by critical-stress. High f_{op} values are however also observed under the failure envelops (Figure 4-15b).

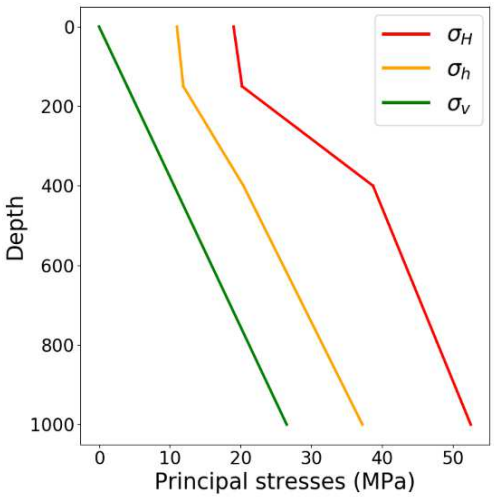


Figure 4-14: Magnitudes (MPa) of the principal Forsmark stress components, σ_H, σ_h, and σ_v, as a function of depth.

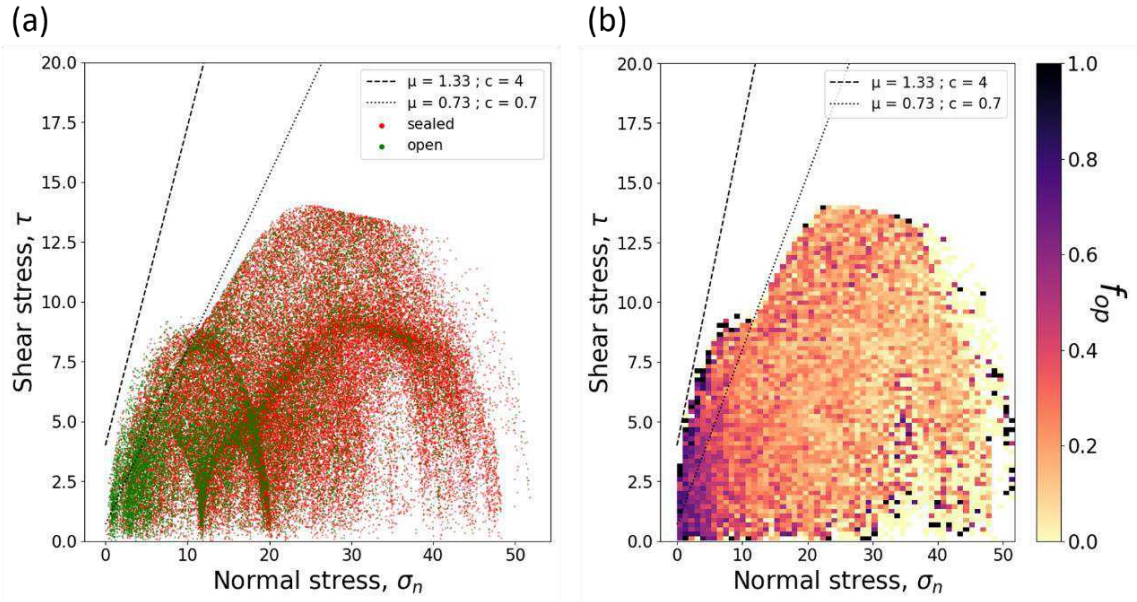


Figure 4-15: (a) Sealed and open fractures (respectively red and green dots) represented as a function of their computed normal stress σ_n and shear stress τ. (b) Open fraction computed as a function of normal and shear stresses, $f_{op}(\sigma_n, \tau)$. In (a) and (b), dashed lines represent Mohr-Coulomb failure envelop models measured for sealed (μ = 1.33, c = 4) and open fractures (μ = 0.73, c = 0.7).

f_{op} is represented as a function of σ_n, τ, and $\frac{\tau}{\sigma_n}$ which estimates the distance to the critical-stress (by neglecting the cohesion) (Figure 4-16). f_{op} increases with $\frac{\tau}{\sigma_n}$, which supports an effect of critical-stress. However, for low values of $\frac{\tau}{\sigma_n}$, f_{op} is still on average equal to 0.4 in horizontal fractures and 0.2 in intermediate and vertical fractures (Figure 4-16c). In fact, there is a strong negative correlation between f_{op} and the normal stress σ_n, which does not depend on fracture orientations (Figure 4-16a). It suggests that σ_n calculated for remote conditions (i.e., not including local stress fluctuations) is a strong quantitative control parameter to predict the open/sealed distribution at Forsmark. The correlation is characterized by two regimes: a steep linear decrease of f_{op} from 0.75 to 0.25 above 10 MPa and a slighter linear decrease from 0.25 to 0.08 up to 50 MPa.

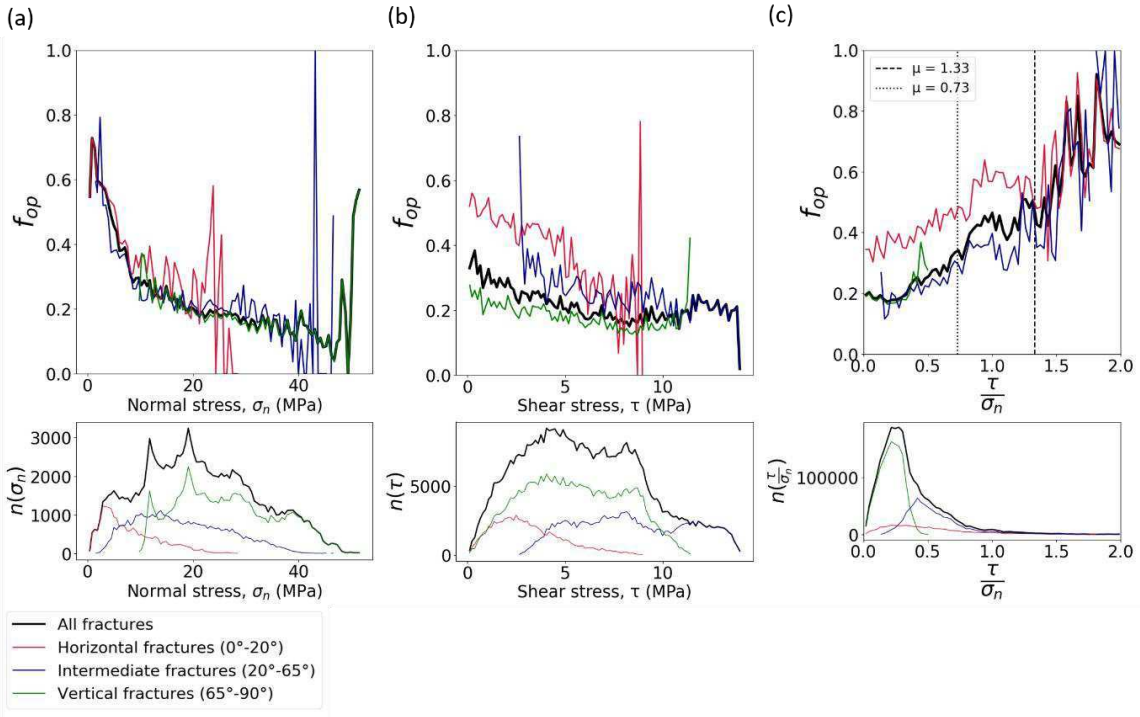


Figure 4-16: (a) Open fraction f_{op} as a function of fracture normal stress, σ_n, (b) as a function of fracture shear stress, τ, and (c) as a function of $\frac{\tau}{\sigma_n}$, ratio quantifying the proximity to the two Mohr-Coulomb failure envelop models with frictions, $\mu = 1.33$ and $\mu = 0.73$ (dashed lines). In (a), (b), and (c), the measure is represented for all fractures in black, for horizontal fracture (dip $\theta < 20°$) in red, for intermediate fractures ($20° < \theta < 65°$) in blue, and for vertical fractures ($\theta > 65°$) in green. In (a), (b), and (c), lower subplots represent the distributions of σ_n, τ, and $\frac{\tau}{\sigma_n}$ computed by fracture.

We extended the analyses of the correlation between f_{op} and σ_n by looking at how the correlation evolves in space (Figure 4-17). We measure f_{op} as a function of σ_n in each borehole (colored lines in Figure 4-17a) and compute the average and standard deviations as a function

of σ_n (black lines and vertical error bars in Figure 4-17a). The measured standard deviation ($\sim 0.1 - 0.15$) indicates that the correlation varies slightly from one borehole to another, but it is not strong enough to question the correlation. The correlation between f_{op} and σ_n is the same when considering fracture selections based on depth ranges (Figure 4-17b) and the same in Deformation zones and Fracture domains (Figure 4-17c).

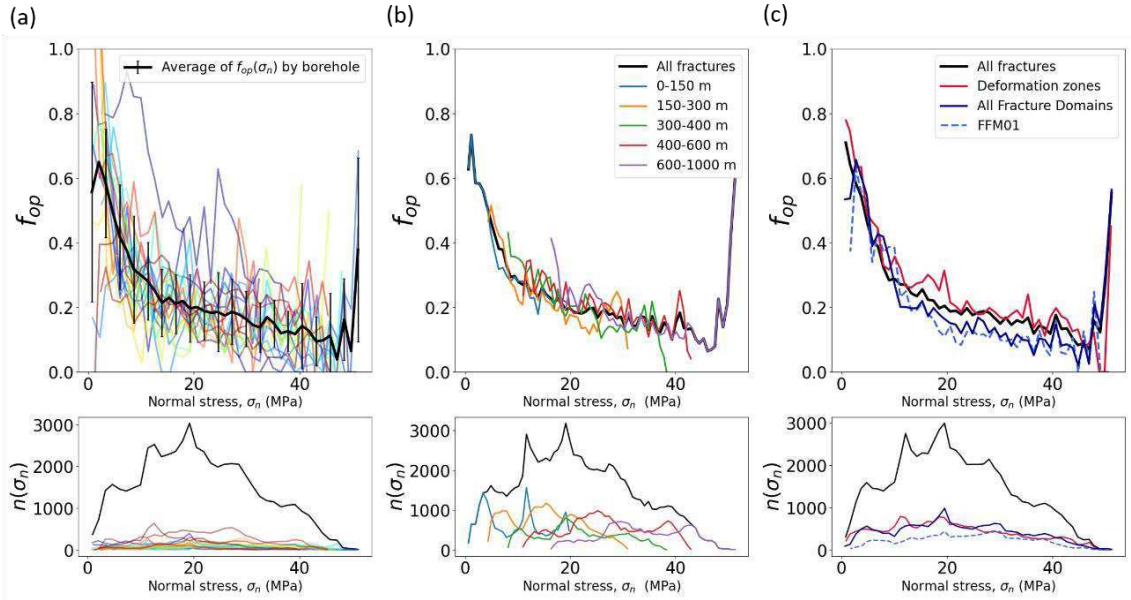


Figure 4-17 : (a) Average of the open fraction function of fracture normal stress, $f_{op}(\sigma_n)$, computed by boreholes (colored lines). The vertical error bars indicate the standard deviation of these measurements by borehole. (b) $f_{op}(\sigma_n)$ computed in groups of fractures selected by depth slices. (c) $f_{op}(\sigma_n)$ computed in Deformation zones, Fracture domains, and in the fracture domain FFM01, that host the repository. In (a), (b), and (c), lower subplots represent the distributions of σ_n by fracture.

The correlation of f_{op} with the current σ_n is also analyzed by selecting fractures based on the presence of a filling mineral (described in section 4.4). Different correlations are observed, indicating that the normal stress criterion is not universal but depends on the fracture minerals (Figure 4-18). For example, f_{op} measured in fractures with oxidized-walls (important marker of generation 1 and 2 – see Table 4-1) is mostly present for $\sigma_n < 10\,MPa$ but remain constant and very low for $\sigma_n > 10\,MPa$ (Figure 4-18a - red lines). On the contrary, f_{op} measured in fractures with more recent minerals, for example pyrite, clay-minerals, and chlorite, presents decreasing correlations with σ_n but f_{op} remains high even for high σ_n (Figure 4-18b,c).

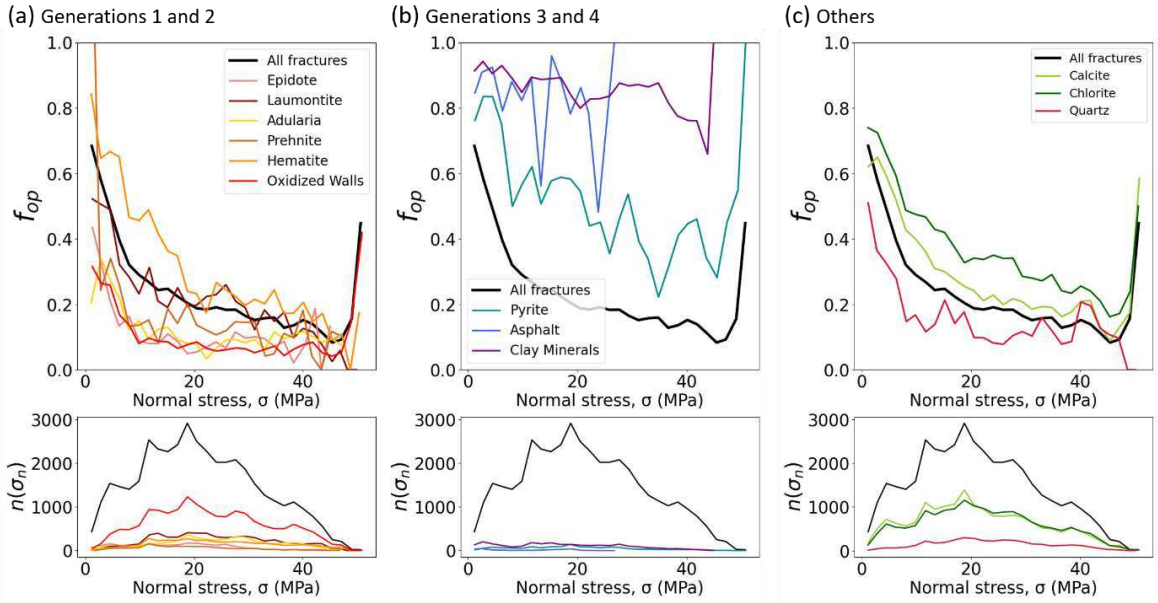


Figure 4-18: Open fraction function of fracture normal stress, $f_{op}(\sigma_n)$, computed in groups of fractures selected by filling minerals. (a) Generation 1 and 2 minerals (hydrothermal events). (b) Generation 3 and 4 minerals. (c) Minerals from both groups of generations. In (a), (b), and (c), lower subplots represent the distributions of σ_n by fracture. We recall that one same fracture can have several mineral types so that it can be selected several times.

5. Discussion about fracture reactivation

All in all, the analyses carried out in this paper indicate correlations with depth, orientation, and mineral filling but the most striking correlation is with the current remote fracture normal stress σ_n (Figure 4-16a). This correlation seems to be general to all depths (Figure 4-17b), to deformation zones and fracture domains (Figure 4-17c), and varies slightly from one borehole to another (+/- 0.1-0.15) but still with the important observed trend (Figure 4-17a). This is likely indicating that the openness of fractures is partly or totally controlled by some recent events, and rather with a mechanical than chemical origin given the low temperatures. Fracture reactivation is the most likely process to explain a recent opening of the fracture network. It may happen in different ways, either by shearing fractures when they are critically stressed, or by tensile opening, if the normal effective stress is low enough (Ferrill & Morris, 2003; Ramsey & Chester, 2004; Rozhko et al., 2007).

Regardless of whether the fracture reactivates by tensile opening or shearing, the mechanical criteria involve both the stress applied on the fracture plane, which may be estimated, and the fluid pressure P_f at the time when the fracture is reactivated, which is not known. In well-connected networks, we may expect P_f to be close to the hydrostatic pressure ($P_f = \gamma_w z$, with γ_w the water net weight, z the depth), but in weakly connected fracture networks or below impervious caprock, P_f can rise to the lithostatic pressure causing the

effective stress to vanish (Sibson, 2003) (Figure 4-19a). An increase of the fluid pressure is also expected when a continental-scale ice sheet is close, but not exactly above, the site. The diffusion at depth of water overpressurized by the ice sheet can potentially lead to a build-up of the fluid pressure, which may cause hydraulic fracturing (Chan & Stanchell, 2005; Hökmark & Lönnqvist, 2014; Lemieux et al., 2008; Lönnqvist & Hökmark, 2013; Rühaak et al., 2014; Talbot, 2014; Vidstrand et al., 2008).

Whatever the reason why the fluid pressure increases, it has the consequences of decreasing the effective normal stresses without changing shear stresses, and thus of shifting the Mohr circle to the left close to the rupture envelope (Figure 4-19b). The reactivation of the fracture plane occurs when the breaking condition is reached: $\tau = c + \mu(\sigma_n - P_f)$, where c and μ are the cohesion and friction coefficient, respectively, related to the preexisting fractures. Tests on sealed fractures, those that are potentially susceptible to reopening, give cohesion values between 2.2 and 7.5 MPa and friction coefficient values between 1.1 and 1.6 (Glamheden et al., 2007; Hakami, 2009). It should be noted that the tensile strength of the intact rock at Forsmark is from 8 to 21 MPa and the cohesion from 17 to 42 MPa (Glamheden et al. (2007); table 3-3 and 3-5). This explains why the reactivation of sealed fractures should occur, in general, before any creation of new fractures.

In order to quantify the potentiality of sealing fracture reactivation, we compute the theoretical fluid pressure P_f^C necessary for the fracture to reach the failure envelope (Figure 4-19b):

$$P_f^C = \sigma_n - \frac{\tau - c}{\mu} \tag{64}$$

where σ_n and τ are the fracture normal and shear stress, computed with the remote stress state model of Martin (2007). μ and c may depend on the mineral assemble that sealed the fracture. To take account of the variation of overpressure with depth, we normalize it by both the hydrostatic pressure P_f^H, which is the pressure normally expected when the fracture network is connected to the surface ($P_f^H = \gamma_w z$ with $\gamma_w = 9.81 \times 10^{-3}$ MPa/m), and the lithostatic pressure P_f^L, which is in theory the maximum pressure for a disconnected cluster ($P_f^L = \frac{\sigma_H + \sigma_h + \sigma_v}{3}$). We define a dimensionless measure of the overpressure r_c,

$$r_C = \frac{P_f^C - P_f^H}{P_f^L - P_f^H} \tag{65}$$

When $r_C = 0$, the hydrostatic pressure is sufficient to reach failure, and when $r_C = 1$, lithostatic pressure is required. P_f^C or r_C are indicators of the strength of a fracture since it represents the fluid pressure necessary to reach failure. Since no fluid pressure is supposed to

be larger than the lithostatic pressure, $r_C > 1$ represents a domain where fractures cannot be reactivated.

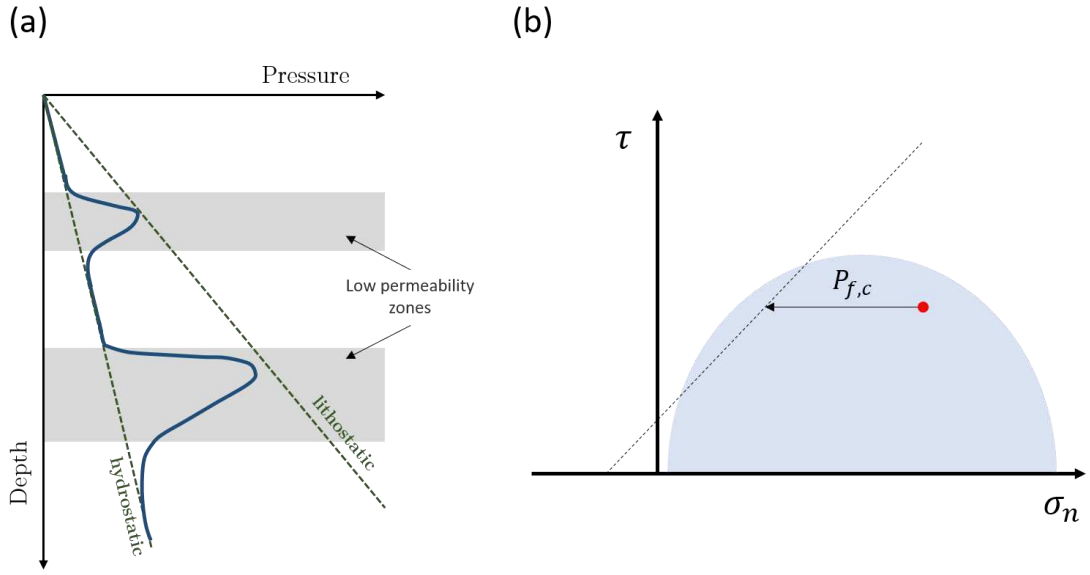


Figure 4-19 : (a) Illustration of the pressure build-up, from hydrostatic to lithostatic, in weakly connected network zones. Modified after Sibson (2003). (b) Illustration of the fluid pressure necessary to reach failure, in a Mohr-Coulomb diagram. The red dot indicates an hypothetical fracture with σ_n and τ estimated from the remote stress field. The arrow quantifies the amount of fluid pressure P_f^C that is necessary for this fracture to reach the failure envelop.

Fractures are sorted in equal bins of r_C, and $f_{op}(r_C)$ is computed for each bin using equation (63) (Figure 4-20). We use the parameters $c = 4$ and $\mu = 1.3$ for the failure envelop, which are the average values measured for sealed fractures at Forsmark (Glamheden et al., 2007). No fractures are under $r_C = 0$, which means that currently, with the chosen failure envelope, no fracture with the hydrostatic pressure is critically stressed. Between, $r_C = 0$ and $r_C = 1$, f_{op} decreases exponentially and reaches a plateau for $r_C > 1$ at $f_{op} = 0.17$.

To interpret this curve, we first note that overpressures with $r_C > 1$ are unlikely, which means that the plateau at 0.17 is likely the fraction of open fractures that have not been reactivated, i.e. that preexist before any recent overpressure event. For this reason, we call $f_{op}(r_C \geq 1)$ hereafter the unreactivated (or initial) open fraction f_{op}^o. When extrapolated to $r_C = 0$, the curve indicates that a fracture that would be critically stressed under hydrostatic conditions would be reactivated and thus 100% reopened. In between, the exponential decay shows the difficulty of maintaining sufficient excess pressure to reopen a large number of fractures. Indeed, as mentioned earlier, the pressure build-up is favored by 1) the presence of fluids in clusters of the fracture network and 2) the low connectivity of these clusters. This

configuration is possible when the proportion of sealed fractures make the network below the percolation threshold. When fractures open by reactivation, they increase the connectivity, which should lead to a decrease of the excess pressure and a stop of the reactivation process. It is no wonder that all fractures that need excess pressure cannot be reopened and that the fraction of fractures that are eventually reopened decreases as the excess pressure required to reactivate fractures increases. The exponential decay is likely reflecting this complex pressure evolution during the reactivation dynamics.

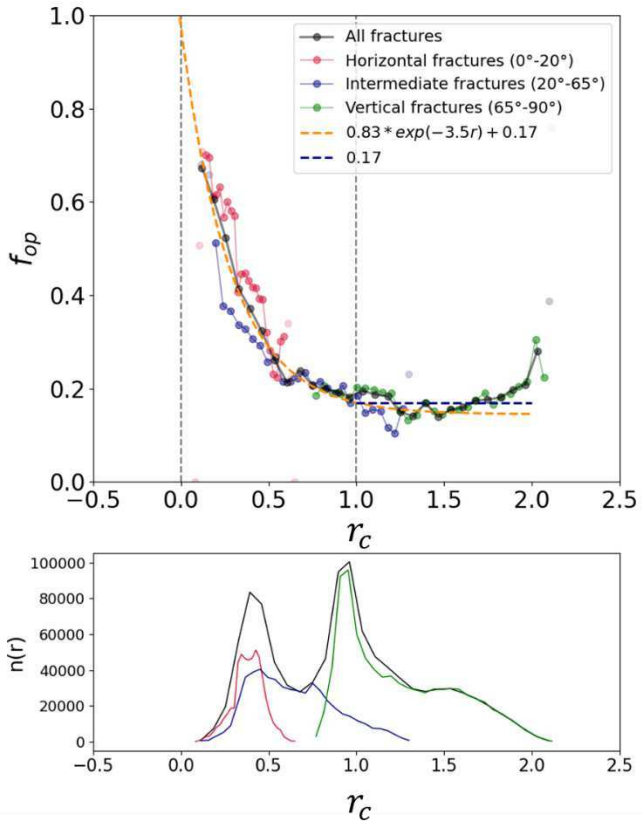


Figure 4-20: Open fraction f_{op} as a function of parameter r_C, which is a dimensionless measure of the over-pressure necessary to reach failure (équation (65)). The failure envelope coefficients are $c = 4$ and $\mu = 1.3$ taken from Glamheden et al. (2007). The lower subplot indicates the distribution of the r_C values.

The curve shown in Figure 4-20 is dependent on the parameters c and μ of the failure envelope that are neither well constrained nor universal in the sense that they depend on the nature of the fracture filling. We provide in Figure 4-21 a brief sensitivity analysis of how the $f_{op}(r_C)$ curve depends on these parameters. The three curves correspond to the average, minimum and maximum values of c and μ reported in Glamheden et al. (2007). The limit at $r_C > 1$ remains at 0.17 but the fraction of open fractures at $r_C = 0$ (i.e., under hydrostatic

conditions) is more or less important depending on the failure envelope. In between $r_C = 0$ and $r_C = 1$, the exponential decay remains the norm.

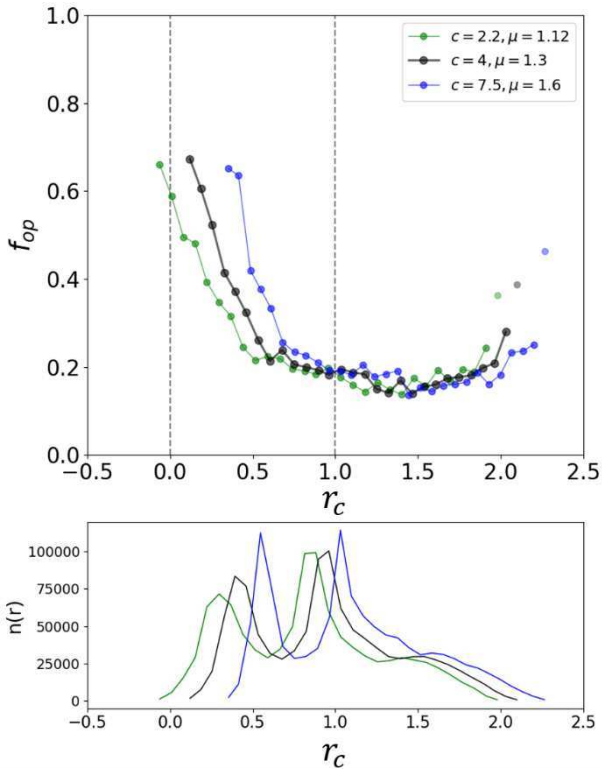


Figure 4-21: Open fraction f_{op} as a function of parameter r_C (équation (65)). Different failure envelope coefficients, c and μ, are used: minimum, average and maximum values found in Glamheden et al. (2007) for sealed fractures. The lower subplot indicates the distribution of the r_C values.

We also attempted to take into account fracture filling in the reactivation process by analyzing the fractures as a function of their filling minerals (Figure 4-22a). Note that a fracture generally contains several minerals and that these subgroups are therefore not independent of each other. The results first indicate that, for fractures that are not supposed to be reactivated, i.e. $r_C \geq 1$, the initial fraction of open fractures, f_{op}^o, varies from 0.1 to 0.3 depending on filling minerals. Note that the choice of failure envelope does not influence f_{op}^o (see Figure 4-21), so that it can not explain these different values. For all minerals where f_{op}^o is less than ~0.15 (oxidized walls, adularia, quartz), the fraction of open fractures remains about low and constant, whatever the r value. If f_{op}^o>0.2 (chlorite, calcite, hematite), the trend is the same as for all fractures together with a fraction of open fractures that increases exponentially when r decreases. Laumontite, whose initial open fraction is around 0.2, shows an intermediate behaviour with a slight increase of f_{op} when r_C decreases. These results may

vary depending on the hypothesis on the failure envelopes but the trends remain identical to those described.

Although it may be an overinterpretation, it is tempting to find a logic in these results. When the system experiences a fluid pressure excess, the capacity of reopening fractures depends on the presence of water. It seems that an initial value of f_{op}~0.15 (before reactivation) is a critical value to enable a build-up of the fluid pressure (Figure 4-22b). Besides, the fracture network should not be to well connected so that pressure does no drop directly to hydrostatic pressure because of water flows. This is possible if f_{op} is not to high initially.

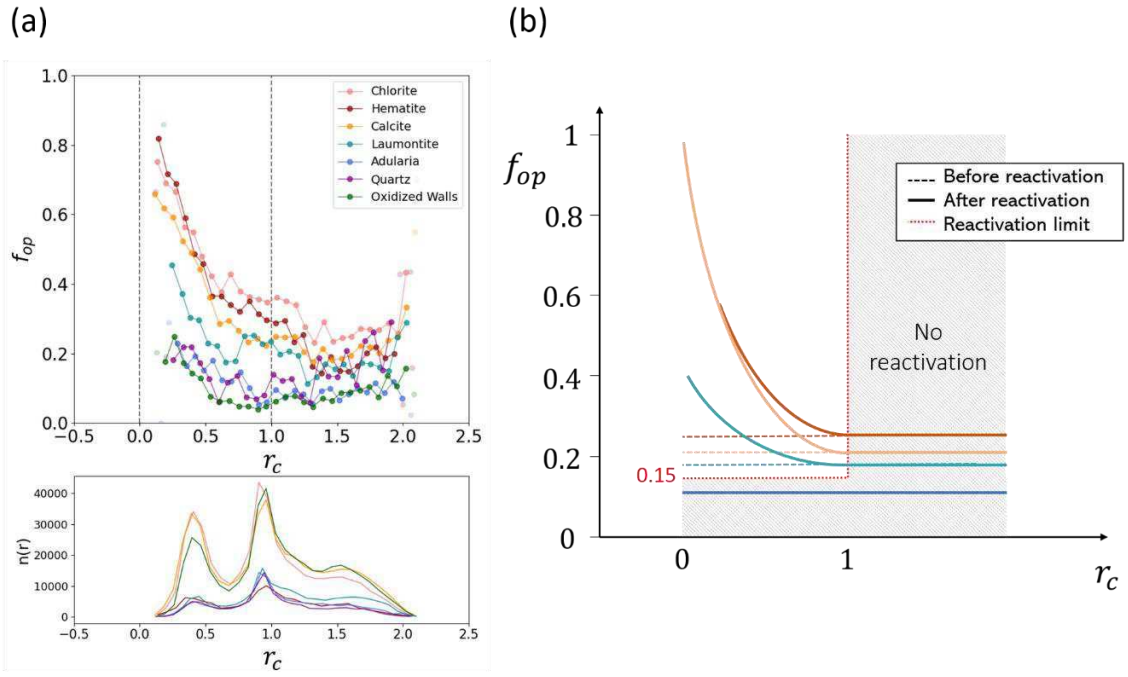


Figure 4-22 : (a) Open fraction f_{op} as a function of parameter r (équation (65)) in subsets of fractures selected by minerals. The lower subplot indicates the distribution of the r values. (b) Schématical representation interpreting the different curves $f_{op}(r)$ by minerals seen in (a). Fracture reactivation depends on the initial f_{op} (dashed lines).

This analysis opens perspectives on how P_f (from hydrostatic up to lithostatic) can play a role in fracture reactivation and the f_{op} distribution. If the recent – compared to geological times – glaciation/deglaciation episodes are sources of excess pressure, as suggested by numerous studies (see above), it is plausible that a recent reactivation and reopening of fractures will depend on the state of stress on the fracture (local criteria) and on the initial open fraction before the reactivation process. It would also mean that the reactivation cannot be estimated without taking into account the fluid pressure variations that are or were exerted on the fractures, as it has been done, for instance, in Mattila and Follin (2019).

Note however that these analyses based on core-logging data do not inform on correlations with fracture size, while the size dependency of f_{op} is critical in controlling the network connectivity (Le Goc et al., 2018). Considering the size distribution of fractures in Forsmark (Darcel et al., 2009), most of the core-logging data consists of small fractures (i.e., smaller than a couple of meters) and no conclusion can be drawn for the largest, yet critical for network connectivity, fractures (Le Goc et al., 2018; Maillot et al., 2016).

6. Conclusion

The purpose of the present work was to evaluate how the fracture openness, as the fraction of open surface, f_{op}, is distributed in the fracture network of the Forsmark site. We have used the Forsmark extensive core-log database to compute the open surface fraction f_{op}, and to quantify its correlations with most of the fracture parameters that have been recorded: depth, inclusion in deformation zones or not, fracture density, fracture orientation, fracture minerals fillings, and estimated current normal and shear stresses exerted on the fracture plane.

The main correlations observed are with depth, fracture orientation and filling mineralogy (on average, the older the mineralization is, the more the fractures are sealed). On the other hand, f_{op} depends very little on fracture density and there is little or no difference between deformation zones and fracture domains. The correlations with depth and fracture orientation can be explained by, or are consistent with, a strong control of σ_n, the stress normal to the fracture plane on f_{op} with two regimes: first, a steep linear decrease of f_{op} with σ_n from 0.75 at 0 MPa to 0.25 at 10 MPa and, second, a less steep linear decrease from 0.25 at 10 MPa to 0.08 at 50 MPa. The standard deviation of this correlation between the different boreholes across the site equals ± 0.1-0.15.

The observation that the current state of stress may control the open fraction of fractures leads us to question more deeply if and how fractures may have been reactivated recently. Based on previous studies that highlight a recent increase in fluid pressure due to glaciation and deglaciation episodes, we analyzed the open portion of fractures as a function of the fluid pressure required to cause fracture plane rupture P_f^c. A fracture for which the fluid pressure is larger than P_f^c is likely being reactivated and thus reopened if it was sealed. We calculated P_f^c from the current state of stress and a rupture envelope derived from laboratory tests, and then normalized with both the hydrostatic and lithostatic pressure to make fractures comparable regardless of depth. We observe that f_{op} is small and independent of P_f^c as long as P_f^c is larger than the lithostatic pressure P_f^H. Since no pressure excess is supposed to be larger than the lithostatic pressure, we interpret the f_{op} values for $P_f^c > P_f^H$ as the initial open fraction before any fracture reactivation. For P_f^c smaller than the lithostatic pressure, f_{op}

increases and tends to almost 100% when P_f^c is equal to the hydrostatic pressure (a condition that almost never happens in the studied population). By analyzing fractures with different mineralization fillings, we observe in addition to the previous behavior that, for some mineralizations types, the open fraction remains small and independent of P_f^c for the case where the initial open fraction is less than 15%. This last analysis is a first attempt to differentiate between the initial sealing and reactivation processes due to overpressure.

We plan further work to evaluate the consequences of the observed f_{op} distribution in DFN models for network connectivity and hydrogeological properties.

7. Appendices

7.1. Method of density P_{32} computation along boreholes

We consider a section of a borehole, starting at position x_0 and stopping at position x_{end}. The borehole is discretized by a vector $x = [x_0 : \Delta x : x_{end}]$, with Δx a small distance relative to the distance between fractures. The contribution of a fracture, f, to the density signal $P_{32}(x)$ can be counted as a Gaussian function, $w_{\sigma,f}(x)$, centered in the fracture position, x_f, and whose area under the curve equals 1 in the case where x_0 and x_{end} are sufficiently distant from x_f,

$$w_{\sigma,f}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_f)^2}{2\sigma^2}} \tag{66}$$

The standard deviation of the curve, σ, corresponds to a sampling scale. By summing all the fracture contributions, we compute $P_{32}(x)$ as

$$P_{32}(x) = \sum_f \left(\frac{w_{\sigma,f}(x)}{\int_{x_0}^{x_{end}} w_{\sigma,f}(x).dx} . C_f \right), \tag{67}$$

where f is any fracture present in the borehole section and C_f the fracture angular correction (Terzaghi, 1965). The dividing term in équation (67) is the area under $w_{\sigma,f}$. It is used to avoid underestimating a fracture contribution to the density P_{32}, when it is close to the section limits, x_0 or x_{end}. Indeed, if x_f is close to x_0 or x_{end}, the integral $\int_{x_0}^{x_{end}} w_{\sigma,f}(x).dx$ becomes significantly smaller than 1, and thus the fracture is only partly counted in the borehole density, P_{32}.

7.2. Conversion from borehole local coordinate, x, to depth, z

The method presented in appendix 7.1 computes the density P_{32} as a function of the position on the borehole, x. However, most of the boreholes are not vertical and slightly curved. To move from the local vector x to the depth vector z, we use the fracture positions provided also as a function of depth, z_f, in the dataset. If we note $P_{32,f}$ the contribution of one fracture f to the density P_{32} ($P_{32,f}$ is the term in parenthesis in equation (67)), we deduce the vector z with the following interpolation:

$$z = \frac{\sum_f \left(P_{32,f} \times z_f\right)}{P_{32}} \tag{68}$$

Fin de l'article

4.4. Travaux complémentaires. Méthode de « *Machine Learning* » appliquée aux données de puits de Forsmark : les arbres aléatoires.

Le *Machine Learning* (*ML*) regroupe tous les algorithmes donnant à une machine la capacité d'apprendre automatiquement à partir de données et de faire des prédictions sans instructions explicites. Il est particulièrement adapté à l'analyse d'un large jeu de données, c'est pourquoi nous nous sommes intéressés à son utilisation pour analyser les données de puits de Forsmark.

On distingue deux catégories majeures de méthodes de *ML*. Les méthodes supervisées apprennent à partir des données d'entrée et de sortie et tentent d'établir une relation entre elles. Les méthodes non-supervisées, à l'inverse, n'utilisent pas d'information sur le résultat, mais tentent d'identifier des structures dans le jeu de données afin de simplifier leur interprétation (p.ex. des motifs récurrents).

Cette section présente des travaux utilisant la méthode supervisée des forêts aléatoires (*random forest classifier*) pour évaluer les relations entre attributs de fractures et leur caractère « ouvert » ou « fermé ». Le but est aussi de savoir à quel point l'ensemble de ces attributs permettent d'identifier avec succès les fractures ouvertes parmi l'ensemble des fractures. La méthode repose sur la génération d'un grand ensemble d'arbres de décision aléatoires (un exemple d'arbre est donné Figure 4-24). Ces arbres de décision sont entrainés à partir de sous-ensembles variés du jeu de données, ce qu'on appelle le *bagging*. Une petite part des données est mise de côté et sert ensuite à tester la validité du modèle formé par l'ensemble de ces arbres.

Les avantages des *random forests* sont multiples. Ils s'adaptent facilement à des données quantitatives et qualitatives. Ils présentent des résultats peu biaisés et stables grâce au grand nombre d'arbres aléatoires entrainé sur les portions aléatoires du jeu de données. L'inconvénient est leur effet « boite noire » qui implique qu'on ne puisse pas toujours interpréter les résultats.

4.4.1.1. Construction du modèle de *random forests*

Le module d'analyse *ML* python *scikit-learn* est utilisé pour calcul de *random forest*. Notre problème est composé de deux classes cibles (*target*) : « ouverte » (*open*) ou « fermée » (*sealed*). Etant donné que la classe « ouverte » constitue la classe minoritaire que l'on cherche à prédire, nous lui attribuons la valeur **1**. La classe « fermée » se voit

attribuer la valeur **0**. Les attributs d'entrée (*features*) regroupent les caractéristiques de fractures suivantes : profondeur (*elevation*), orientation (*strike* et *dip*), appartenance à une zone de déformation (*DZ*), contraintes normale et cisaillante (σ_n et τ), et minéraux de remplissage (voir section 4.3. pour plus de détails sur ces paramètres). Pour les attributs qualitatifs (minéraux et *DZ*), des valeurs de **0** et de **1** sont données et signifient respectivement « non-présent » et « présent » (Figure 4-23). Pour les attributs quantitatifs, nous effectuons une normalisation des données comme suit : $z = \frac{x-\bar{x}}{\sigma_x}$ ($\bar{x}$ et σ_n sont respectivement moyenne et écart-type). Cependant, après comparaison des résultats avec et sans cette normalisation, il semble qu'elle ne soit pas nécessaire. Etant donné que le jeu de donnée est non-équilibré (plus de fractures fermées que d'ouvertes), un poids est attribué aux deux classes. Ce poids est inversement proportionnel à la fréquence de la classe (c.f. paramètre « *balanced* » dans *scikit-learn*). Dans la suite de cette section, on utilisera le terme « pondéré » pour qualifier cet ajustement. Le jeu de donnée est séparé en données d'entrainement et données de test avec une proportion 75/25% (55600/18500 fractures). Le nombre d'arbre créé s'élève à **100**.

Target

Features

FRACT_INTER	ELEVATIO	Dip	Strike	DZ	Sigma_n	Sigma_t	Calcite	Chlorite	Oxidized
0	-98.98	5.1	105.5	0	-2.72007034930558	1.14527463866947	0	0	0
1	-99.36	72.5	42.3	0	-17.8826064419996	5.09222445880337	1	0	0
0	-100.69	81	63	0	-19.2311756615336	2.85097275839501	1	0	0
0	-100.89	4.8	221.9	0	-2.79060353477015	1.40174809426468	0	0	0
1	-101.66	1.3	353.9	0	-2.69956536966411	0.257995222644567	0	1	0
1	-101.69	7.6	146.2	0	-2.85079311867205	1.16944711924016	0	1	0
1	-101.91	6.3	236.3	0	-2.90665242846419	1.86637537790919	0	0	0
1	-102.04	17.9	68.9	0	-4.27589628245888	4.90189477773538	0	1	0
1	-102.3	81.3	48.6	0	-19.327372030572	2.69671919095446	1	0	0
0	-102.45	89.4	210.9	0	-18.4498404798495	3.06254661603746	1	1	1
1	-103.49	8.7	176.8	0	-2.99776422736646	1.75845960141855	0	1	0
1	-103.54	3.3	158.1	0	-2.77462344029528	0.544483571033859	0	0	0

Figure 4-23 : Tableau des données utilisées dans la méthode des random forests. Une ligne correspond à une fracture. Pour la classe target, **0** *signifie « fermée » (sealed) et* **1** *signifie « ouverte » (open). Pour les données qualitatives (minéraux et DZ), des* **0** *et des* **1** *sont donnés et signifient respectivement « non-présent » et « présent ».*

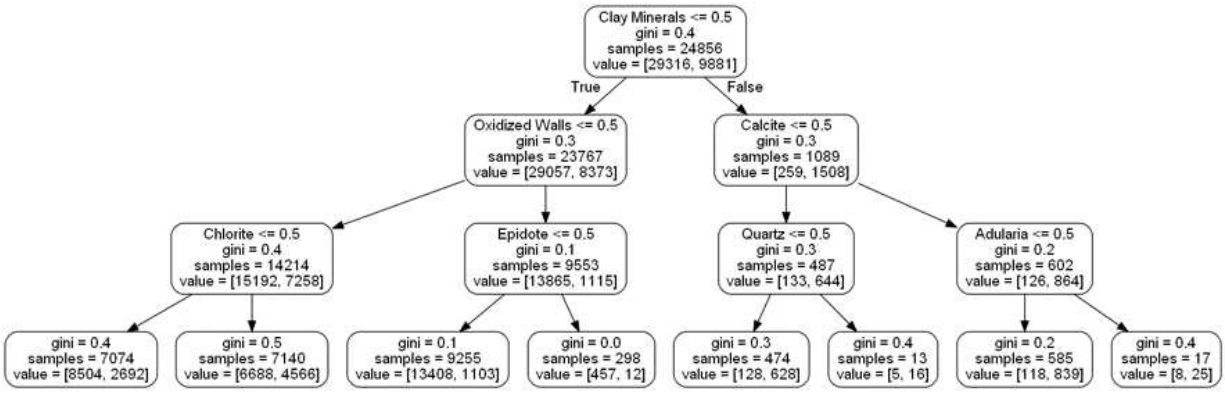


Figure 4-24 : Exemple d'arbre de décision généré. Pour une meilleure visualisation, la profondeur de l'arbre (nombre d'étapes) a été coupée à 4.

4.4.1.2. Résultats : importance des attributs et matrice de confusion

Lors de la création des arbres, l'algorithme quantifie l'importance de chaque attribut, en évaluant la capacité de l'attribut à séparer les données en différentes classes cibles. Dans le module utilisé, le critère de « Gini » est utilisé à chaque étape de décision d'un arbre pour quantifier cette information. Ce calcul révèle que les attributs les plus importants sont les suivants (dans l'ordre) : σ_n, *elevation, dip, strike,* τ, *oxydized walls, chlorite,* et *clay minerals* (Figure 4-25a). Afin de voir l'effet de la pondération des deux classes cibles (voir section précédente), nous effectuons aussi un calcul « non-pondéré » (Figure 4-25b). Dans ce cas, les importances des attributs *oxydized-walls* et *chlorite* diminuent et celle de *clay minerals* augmente. Attention, l'importance des attributs ne signifie pas que le modèle est bon, mais sert seulement à mesurer leur importance relativement aux autres.

Ensuite, le jeu de données test (25% gardés à part) est soumis au modèle. Chaque donnée est évaluée sur l'ensemble des arbres, qui font chacun une prédiction (fracture ouverte ou fermée). La prédiction majoritaire est celle qui est choisie. Les prédictions du modèle sont comparées aux résultats vrais du jeu test (matrice de confusion ; Figure 4-26b). Ces résultats montrent que le modèle est faible pour trouver les fractures ouvertes. En effet, le nombre de faux négatifs est grand. A l'inverse, il est capable de trouver les fractures fermées, car le nombre de faux positifs est faible. La validité du modèle peut être quantifiée au moyen de différents métriques que nous explorons ci-après.

Comme pour l'importance des attributs, nous présentons aussi les résultats pour le cas « non-pondéré » (Figure 4-26c). Dans ce modèle, les faux et vrais positifs sont légèrement augmentés. Ceci montre simplement que le nombre de fractures ouvertes prédites a augmenté.

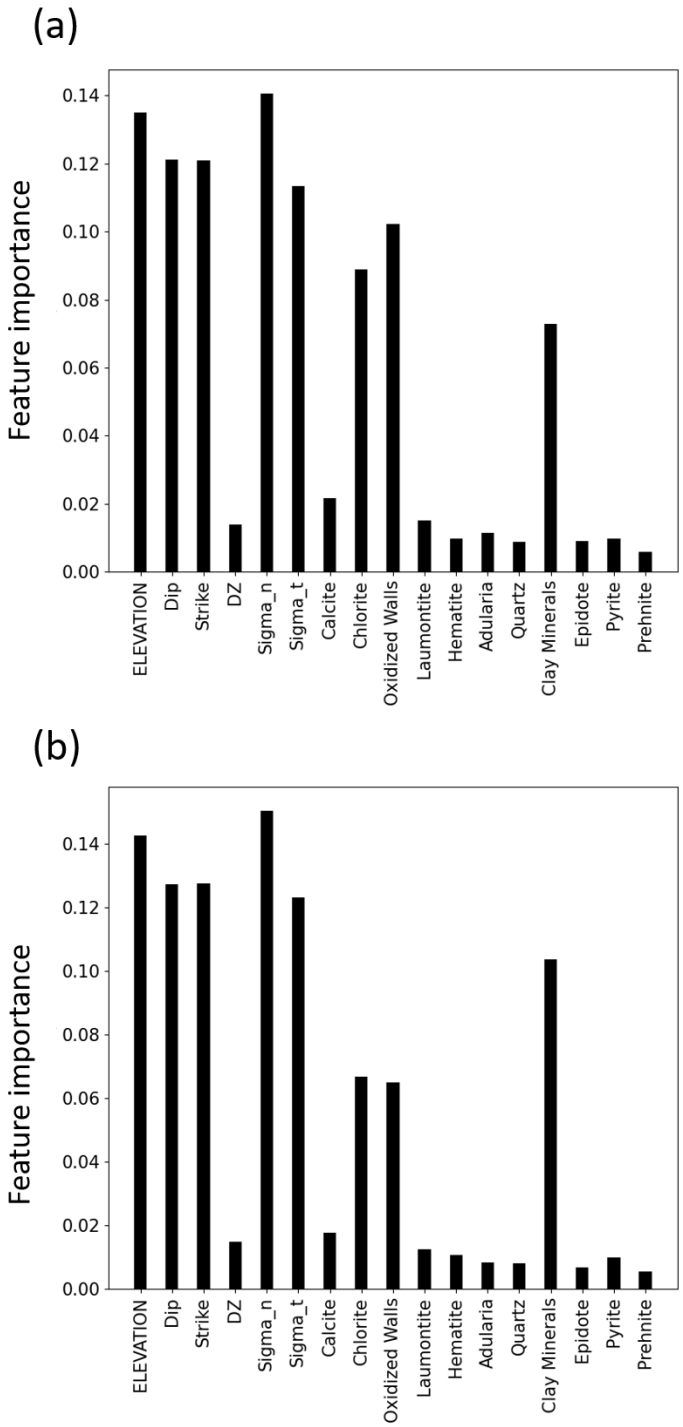


Figure 4-25 : Importance des attributs mesurés par le processus de classification par random forest. (a) Cas avec classes « pondérées », et (b) cas avec classes « non-pondérées ».

(a)

Actual \ Predicted	0	1
0	True Negative (TN)	False Positive (FP)
1	False Negative (FN)	True Positive (TP)

(b)

Actual \ Predicted	0 (sealed)	1 (open)
0 (sealed)	12762	988
1 (open)	2404	2395

(c)

Actual \ Predicted	0 (sealed)	1 (open)
0 (sealed)	12704	1046
1 (open)	2372	2427

Figure 4-26 : Matrice de confusion servant à comparer les résultats prédits par le modèle et les résultats vrais du jeu de donné test. (a) matrice schématique, (b) résultats pour un cas avec classes « pondérées » dans le modèle, et (c) résultats pour un cas « non-pondéré ».

4.4.1.3. Résultats : métriques de validité du modèle

Nous utilisons différentes métriques pour évaluer la capacité du modèle à prédire le paramètre cible : ouvert ou fermé (Tableau 4-2). Tous sont compris entre 0 et 1. Certaines métriques sont calculées relativement à une classe données (*recall, precision, F1*). Nous les calculons donc pour les deux classes : ouvert = 1 (colonne « Valeur 1 » dans Tableau 4-2) et fermé = 1 (colonne « Valeur 3 »). Finalement, nous calculons aussi ces métriques pour le cas « non-pondéré » (voir section 4.4.1.1. ; colonne « Valeur 2 »). Dans ce dernier cas,

les métriques sont calculées par rapport à la classe « ouverte » (comme pour « Valeur 1 »). L'effet de la pondération des classes ne semble pas beaucoup impacter la validité du modèle. En effet, les colonne « Valeur 1 » et « Valeur 2 » sont très similaires.

Comme cela a pu être observé dans la matrice de confusion, notre modèle est moyennement bon à trouver les fractures ouvertes. Cependant, dans l'ensemble de ces fractures ouvertes qu'il a trouvées, peu d'entre elles étaient en fait fermées. Ces deux observations sont quantifiées respectivement par les métriques *recall* et *precision.* Elles sont évaluées à 0.5 et 0.7 pour la classe ouverte. A présent, si on les évalue par rapport à la classe fermée (« Valeur 3 »), elles sont plus élevées et le *recall* (0.92) est supérieur à la *précision* (0.84). Le fait que ces deux métriques soient plus élevées est lié au fait que la classe « fermée » est bien plus fréquente. En effet, il est plus facile pour le modèle de prédire des fractures fermées. *Precision* et *recall* sont deux informations complémentaires. La métrique *F1* combine l'information des deux en faisant leur moyenne harmonique. A nouveau, il s'agit d'un paramètre spécifique à une classe. Il est moins élevé pour la classe « ouverte » (0.58), que pour la classe fermée (0.88).

D'autre métriques ne dépendent pas d'une classe choisie. La métrique *accuracy* quantifie simplement la proportion de réussite (nombre de prédiction correctes divisé par le nombre total de prédiction). Cependant pour un cas ou les deux classes sont non-équilibrées, cette métrique aura tendance à être facilement proche de 1, sans pour autant que le modèle soit bon. C'est pourquoi il est préférable d'utiliser dans le cas présent la *balanced-accuracy*, qui est la moyenne des métriques *recall* calculées pour les deux classes. Elle vaut ici 0.71. Une autre métrique est le *Cohen's Kappa* qui sert à quantifier l'accord entre plusieurs observations, ici les données prédites et les données vraies. Cette métrique serait plus robuste que la *balanced-accuracy* car elle prend aussi en compte l'accord obtenu par hasard (Vieira et al., 2010). La valeur obtenue de 0.47 indiquerait un accord modéré.

Tableau 4-2 : Description des différentes métriques utilisées pour quantifier la validité du modèle, et valeurs obtenues dans cette étude. La colonne « Valeur 1 » est pour le modèle pondéré, où la classe « ouverte » est prise positive (=1), la colonne « Valeur 2 » est pour le modèle non-pondéré, où la classe « ouverte » est prise positive, et la colonne « Valeur 3 » est pour le modèle pondéré, où la classe « fermée » est prise positive.

Métriques	**Formule**	**Description**	**Valeur 1**	**Valeur 2** (non-pondéré)	**Valeur 3** (fermé = 1)
Accuracy	$\frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$	-	0.82	0.81	0.82
Balanced accuracy	$\left(\frac{TP}{TN+FP}+\frac{TP}{TP+FN}\right).\frac{1}{2}$	Moyenne de la métrique *recall* obtenue pour chaque classe.	0.71	0.71	0.72
Cohen's Kappa	-	Mesure l'accord entre les prédictions et la réalité.	0.47	0.47	0.47
Recall	$\frac{TP}{TP+FN}$	Capacité du classificateur à trouver les échantillons positifs.	0.50	0.51	0.92
Precision	$\frac{TP}{TP+FP}$	Capacité du classificateur à ne pas rendre positif ce qui est négatif.	0.70	0.70	0.84
F1	$2.\left(\frac{precision.recall}{precision+recall}\right)$	Moyenne harmonique des métriques *recall* et *precision.*	0.58	0.59	0.88

Dans la suite, nous poussons plus loin l'évaluation de l'importance des attributs. Les différentes métriques présentées ci-dessus sont mesurées pour des modèles avec différentes configurations de ces attributs. Notons que les métriques *recall*, *precision* et *F1* sont calculées pour la classe « ouverte ». Dans le premier cas, le modèle est calculé en enlevant un attribut. L'effet de cette suppression est mesuré en quantifiant la baisse relative des différentes métriques : $\frac{X_i-X}{X_i}$, où X_i est la valeur initiale et X la valeur en ayant enlevé l'attribut (Figure 4-27). Les attributs qui ont le plus d'impact sont *clay minerals*, *chlorite* et *oxydized-walls*. L'attribut qui avait été qualifié comme le plus important précédemment, la contrainte normale σ_n, a peu d'effet sur la validité du modèle. Une explication est que

cet attribut est très corrélé aux attributs *elevation*, *strike* et *dip*, le fait de l'enlever aurait donc peu d'impact. Notons que la baisse relative des métriques atteint au maximum 0.15, ce qui montre qu'aucun attribut n'a à lui seul un impact fort et indispensable sur le modèle.

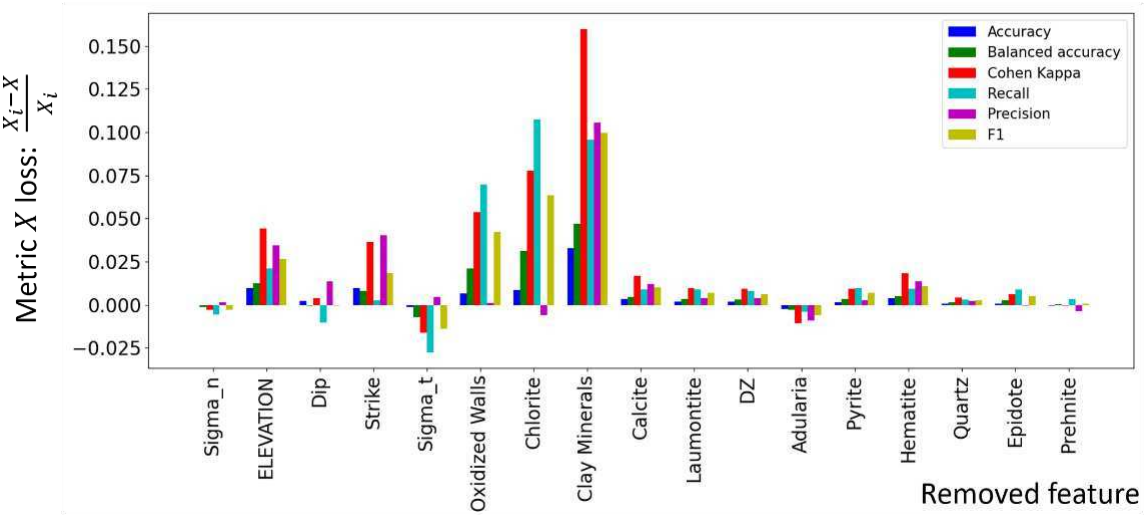


Figure 4-27 : Variations des différentes métriques (Tableau 4-2) lorsqu'un attribut est enlevé du modèle.

Dans les deuxième et troisième types de configuration, nous ajoutons un à un les attributs dans le modèle par ordre croissant d'importance (Figure 4-28a) et par ordre décroissant d'importance (Figure 4-28b). Avec ces configurations, on voit la limite de certaines métriques, car quand le nombre d'attribut est faible, beaucoup d'entre elles restent élevées. Dans la configuration d'ordre décroissant (Figure 4-28b), contre intuitivement, la métrique *recall* augmente à mesure que le nombre d'attribut diminue. Lorsque le seul attribut restant est la présente de *prehnite* (un attribut très peu important) toutes les métriques sont plutôt élevées et le *recall* vaut 1. Seule la métrique *Cohen's Kappa* est à 0. Ceci montre l'importance de prendre en compte quels seraient les résultats du modèle si celui-ci faisait des prédictions au hasard. Les courbes de la Figure 4-28a montrent qu'on peut réduire les données d'entrée aux 8 attributs les plus importants (jusqu'à *clay minerals*), car après les métriques n'augmentent plus.

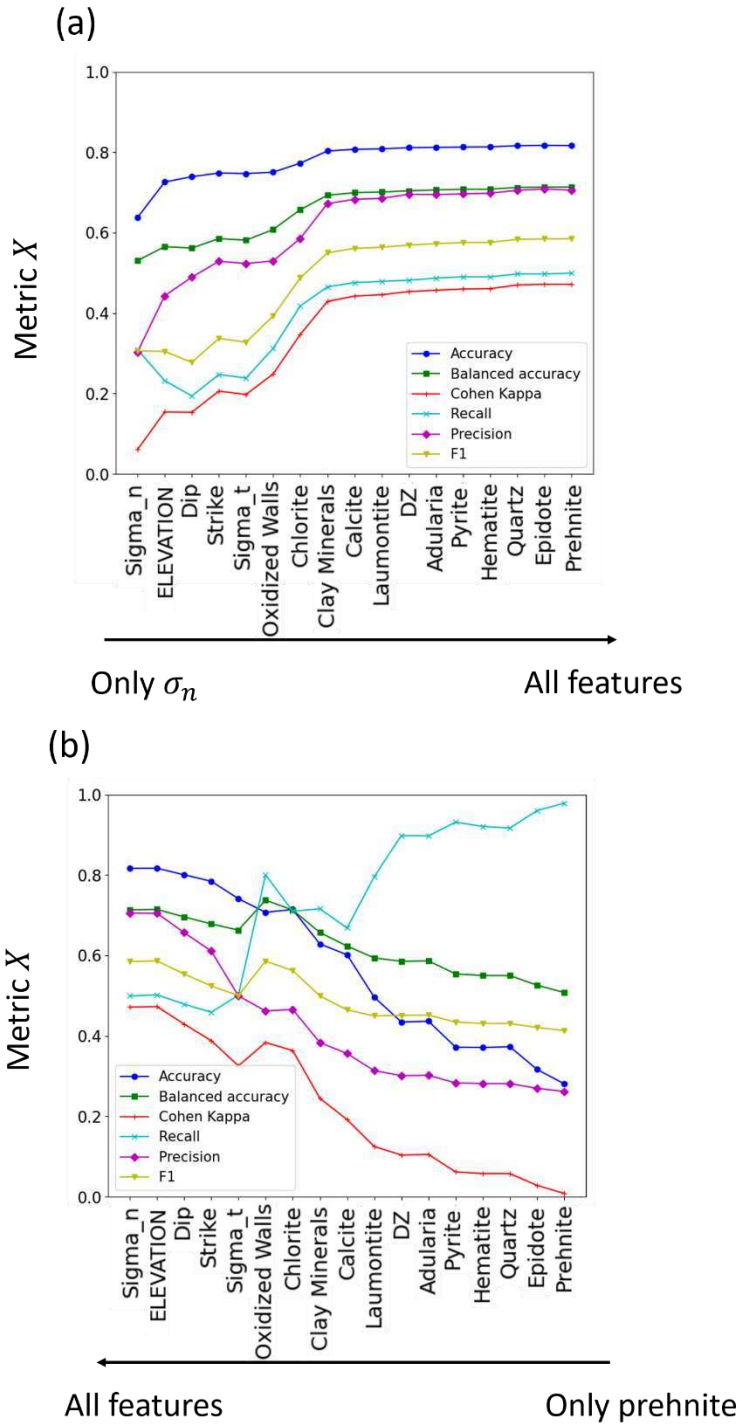


Figure 4-28 : Evolution des différentes métriques (Tableau 4-2) lorsque (a) les attributs sont ajoutés un par un au modèle par ordre croissant d'importance, et (b) par ordre décroissant d'importance.

En conclusion, cette analyse de *random forest* a supporté les informations déjà mises en avant dans le projet d'article de la section 4.3. Les attributs déjà interprétés comme importants dans la distribution des fractures « ouvertes/fermées » sont bien ressortis : σ_n, *elevation*, *dip*, *strike*. Concernant les minéraux, *oxydized wall* et *clay minerals* sont deux

attributs très caractéristiques des fractures respectivement fermées et ouvertes, il est logique qu'ils soient ressortis dans cette analyse. Il est difficile d'interpréter pourquoi l'attribut *chlorite* est ressorti et pas *calcite,* car ils ont tous deux des propriétés similaires : assez présents dans le jeu de donnée (40%) et tous deux moyennement corrélés aux fractures ouvertes. Avant de faire tourner le modèle, nous imaginions une importance plus forte de l'attribut σ_n comme le laissait suggérer les analyses faites dans le projet d'article. Le fait qu'il soit très corrélé aux attributs *elevation*, *dip* et *strike* a pu « faire de l'ombre » à son importance. Il n'est cependant pas plus ressorti dans les analyses approfondies présentées Figure 4-27 et Figure 4-28. Il est difficile d'interpréter pourquoi la pondération des classes (c.-à-d. leur accorder un poids inversement proportionnel à leur fréquence) change si peu les prédictions du modèle. Enfin, la validité du modèle moyenne obtenue (*Cohen's Kappa* = 0.47) indique qu'on peut modérément prédire la caractère ouvert ou fermé des fractures à partir de la liste d'attributs considérés.

Dans un prochain travail, il serait intéressant de transformer les attributs quantitatifs (p. ex. *elevation*) en attributs qualitatifs associés à différentes tranches (p. ex. *elevation 1* = [0,200], *elevation 2* = [200,400] etc) et donc l'attribut sera binaire (« appartient » (1) ou « n'appartient pas » (0)). Il peut être intéressant de voir quel effet ce remaniement des attributs a sur le modèle.

4.5. Figures annexes

Annexe 1 : Distribution des distances entre fractures dans les puits de Forsmark (Suède)

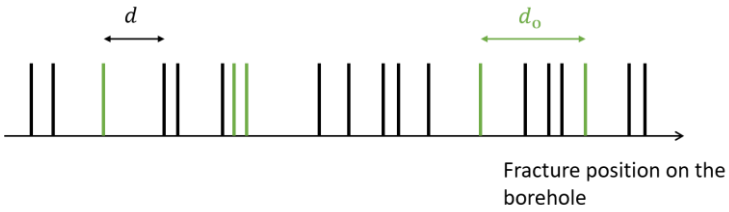


Figure 4-29 : Illustration schématique des distances entre fractures, $\mathbf{d}$*, et entre fractures ouvertes,* $\mathbf{d_o}$*, (traits verts), dont la position est mesurée le long d'un axe en une dimension.*

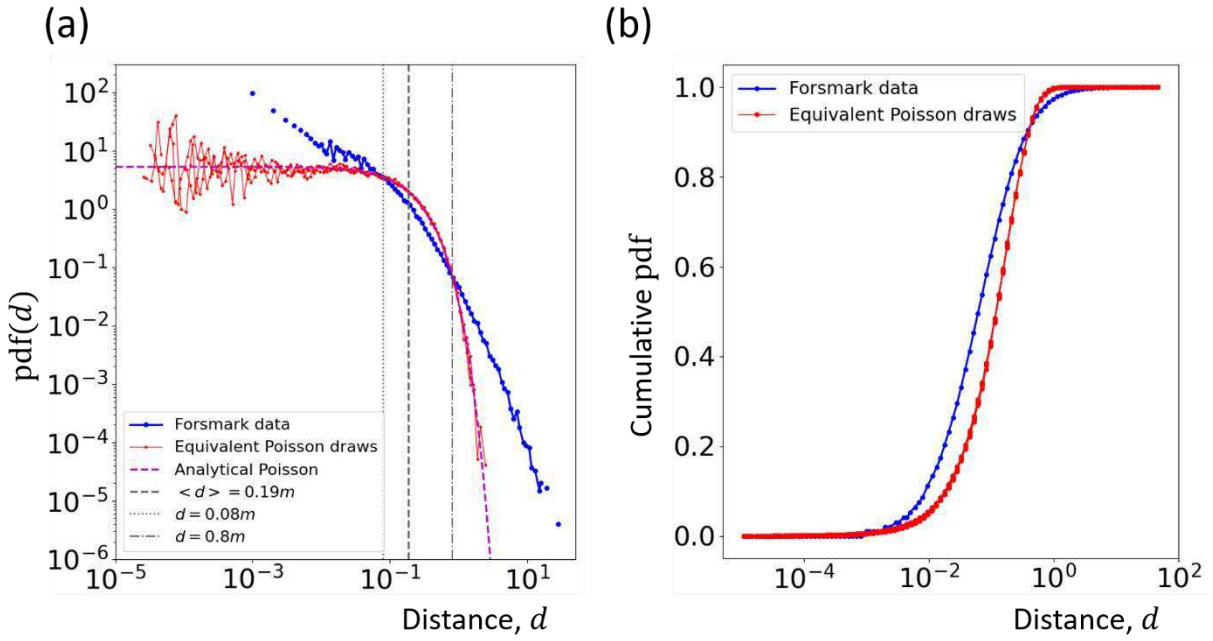


Figure 4-30 : Distribution des distances entre toutes les fractures (ouverte+fermées) de tous les puits du site de Forsmark. (a) Distribution en densité (pdf = probability density fonction). (b) Cumulée de la distribution en densité. Les données (en bleu) sont comparées à un tirage équivalent de Poisson (en rouge), c'est-à-dire de même densité mais dont les positions des fractures sont tirées aléatoirement. Dans (a), la solution analytique de la distribution des distances pour un tirage de Poisson est représentée (tirets violets) : $pdf(d) = \frac{1}{<d>}.exp\,(-\frac{1}{<d>}.d)$*. <d> est la distance moyenne.*

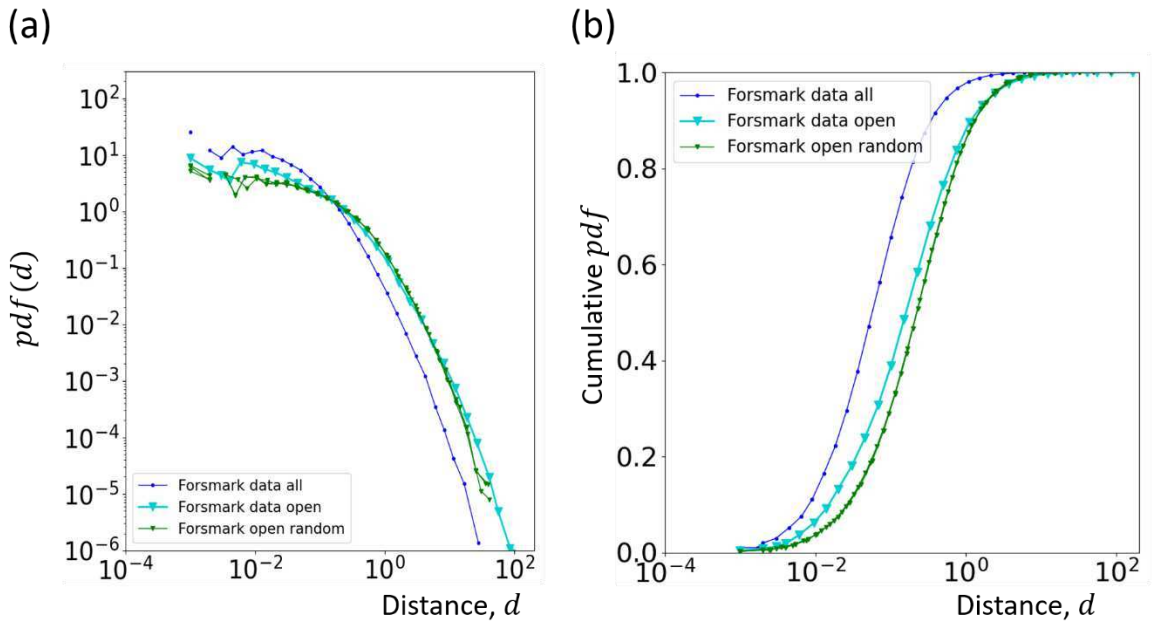


Figure 4-31 : Distribution des distances entre fractures ouvertes (cyan) de tous les puits du site de Forsmark. (a) Distribution en densité (pdf = probability density fonction). (b) Cumulée de la distribution en densité. Les données sont comparées à un tirage aléatoire (en vert), c'est-à-dire un tirage basé sur la même proportion de fractures ouvertes mais dont les fractures sont piochées aléatoirement dans l'ensemble du jeu de fractures.

Annexe 2 : Assortiments et répartition des minéraux de remplissage des fractures

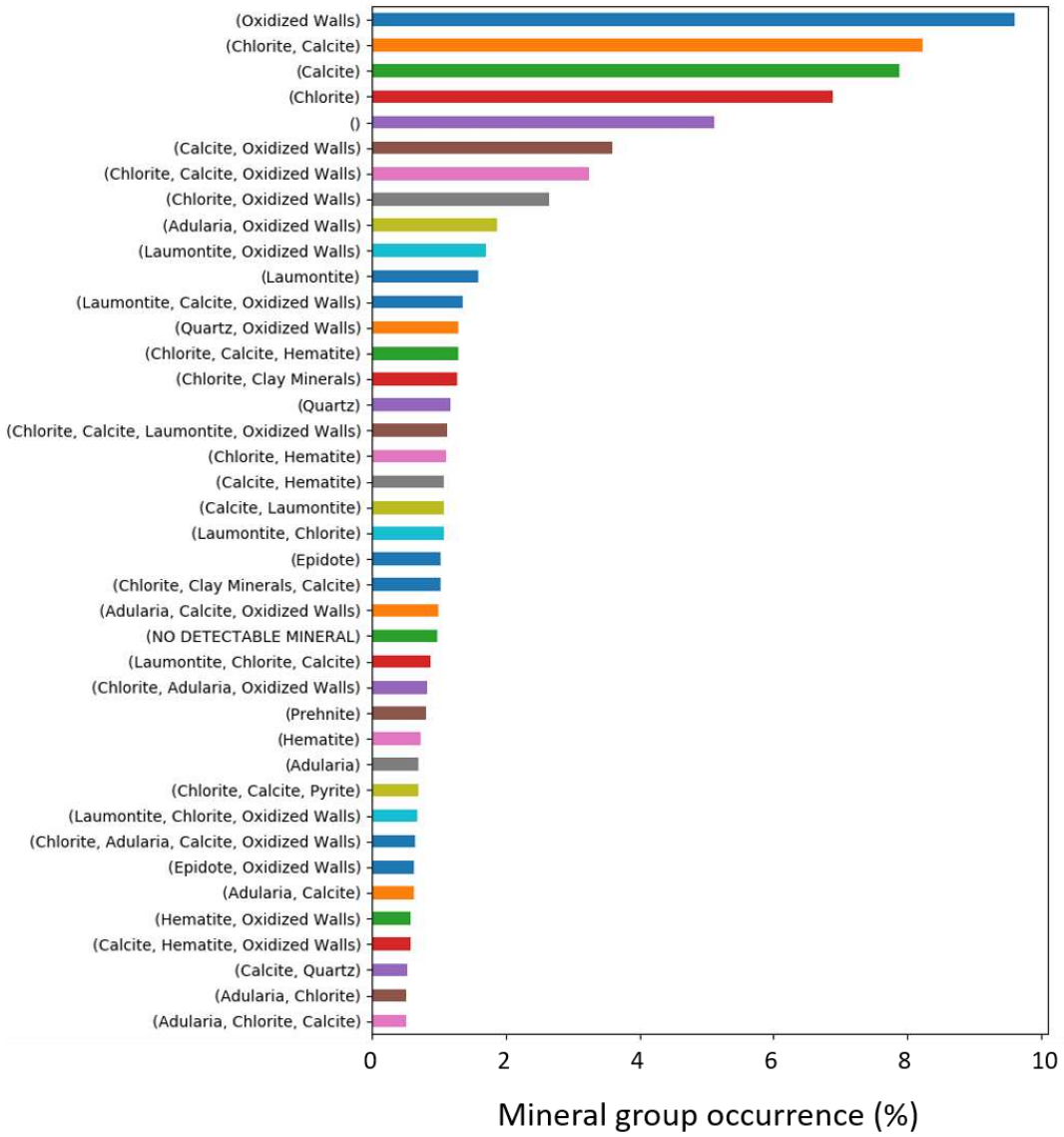
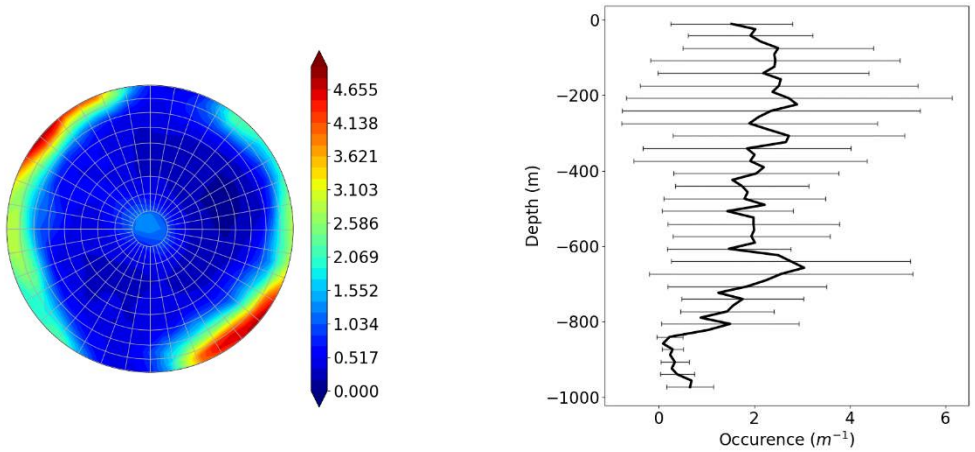


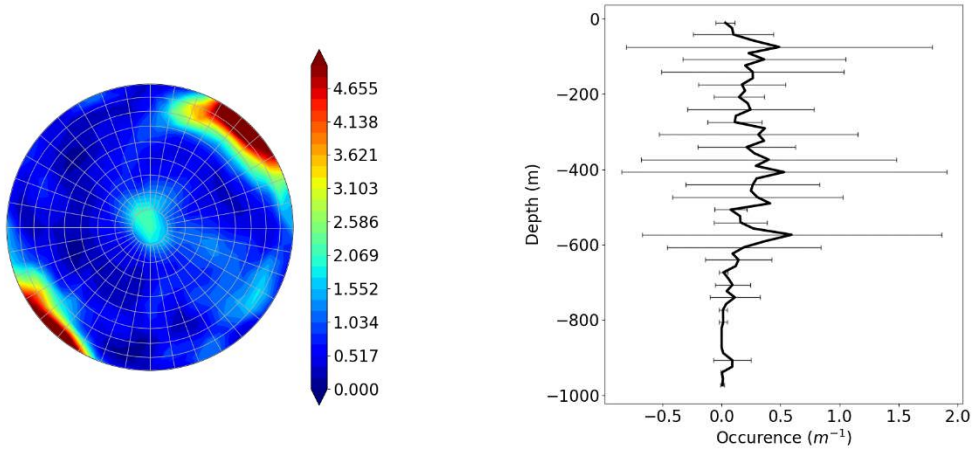
Figure 4-32 : Assortiments des minéraux par fracture dans les carottes de puits de Forsmark, et leurs pourcentage d'apparition.

Figure 4-33 (ci-dessous) : Répartition des minéraux des générations 1 et 2 (origine hydrothermale) (voir projet d'article, Table 4-1). (Gauche) Stéréonet des fractures contenant le minéral. La couleur représente la densité des pôles de fractures (voir chapitre 1). (Droite) Apparition du minéral avec la profondeur.

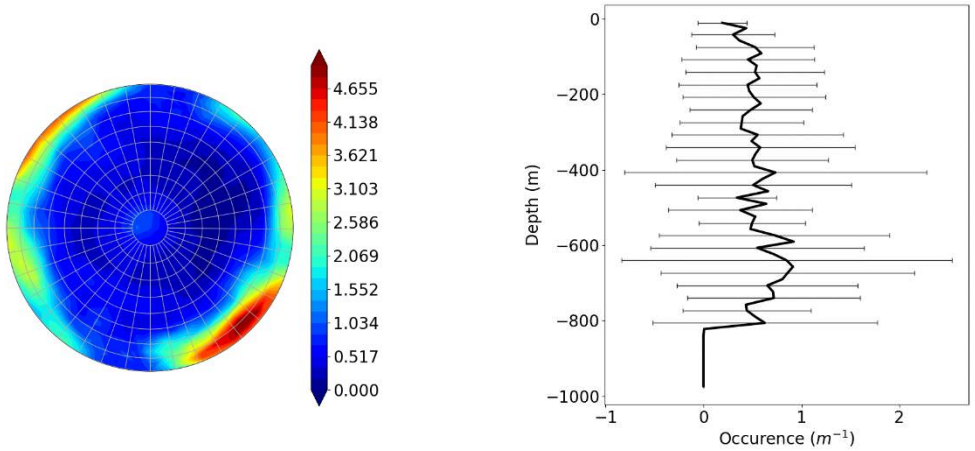
Oxidized Walls :



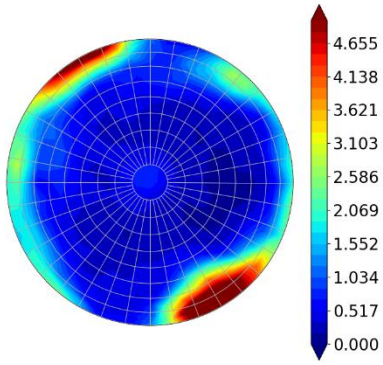
Epidote :

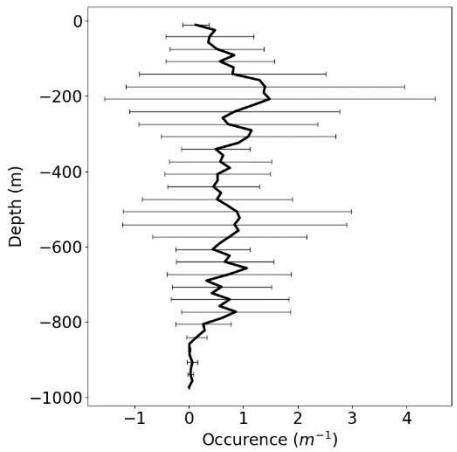


Adularia :

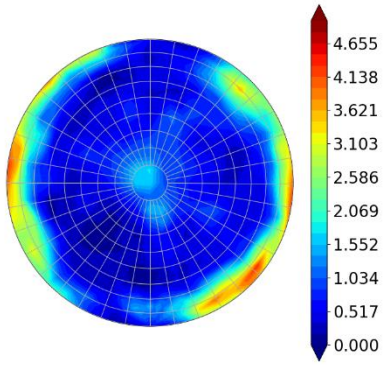


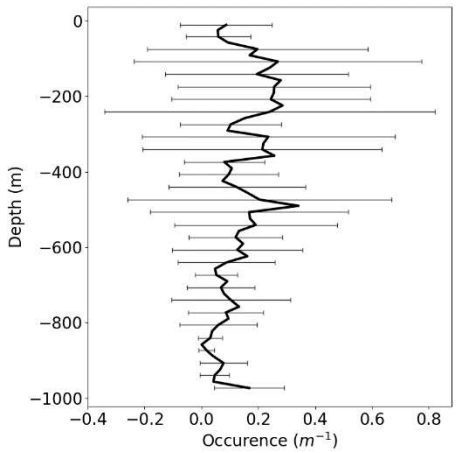
Laumontite :



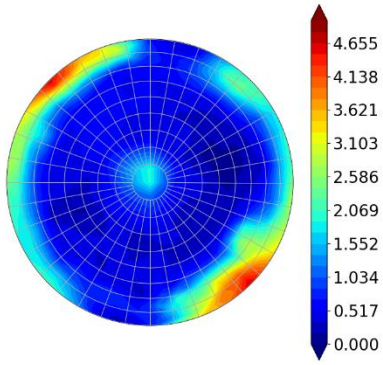


Prehnite :





Hematite :



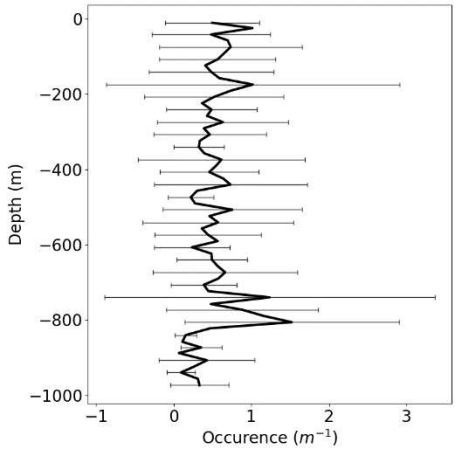
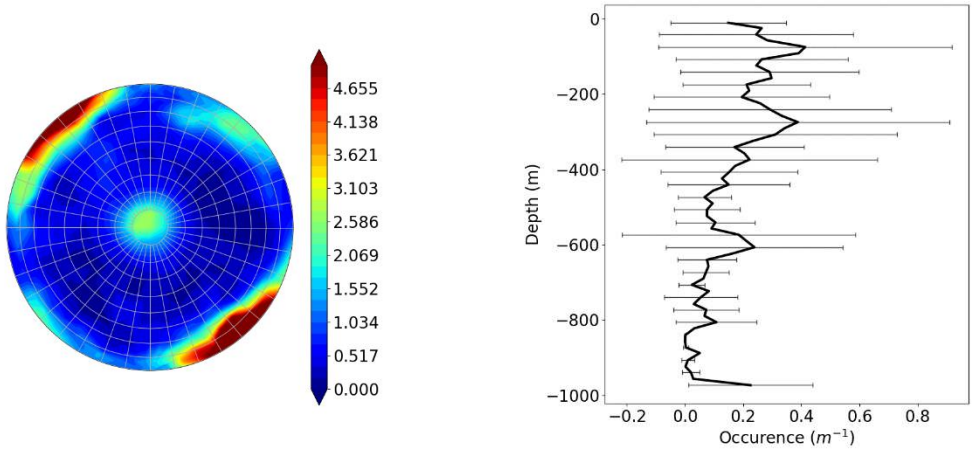
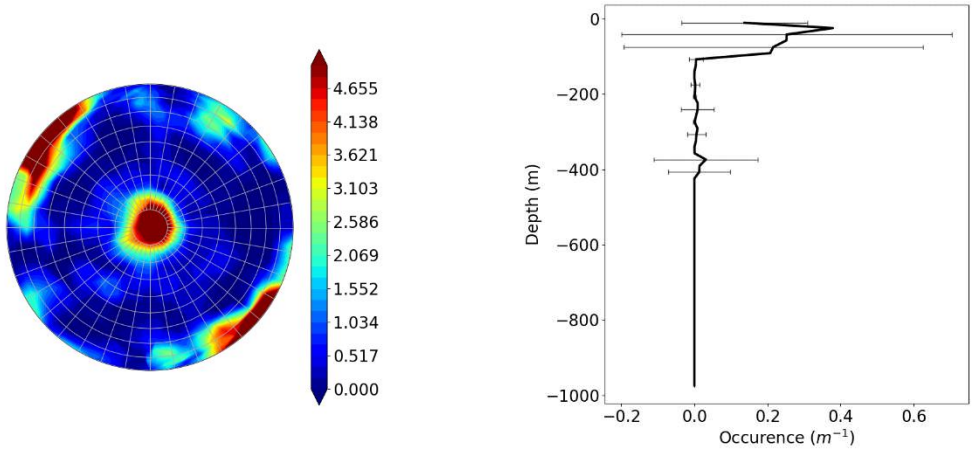


Figure 4-34 (ci-dessous): Répartition des minéraux des générations 3 et 4 (voir projet d'article, Table 4-1). (Gauche) Stéréonet des fractures contenant le minéral. La couleur représente la densité de pôles de fractures (voir chapitre 1). (Droite) Apparition du minéral avec la profondeur.

Pyrite :



Asphalt :



Clay Minerals :

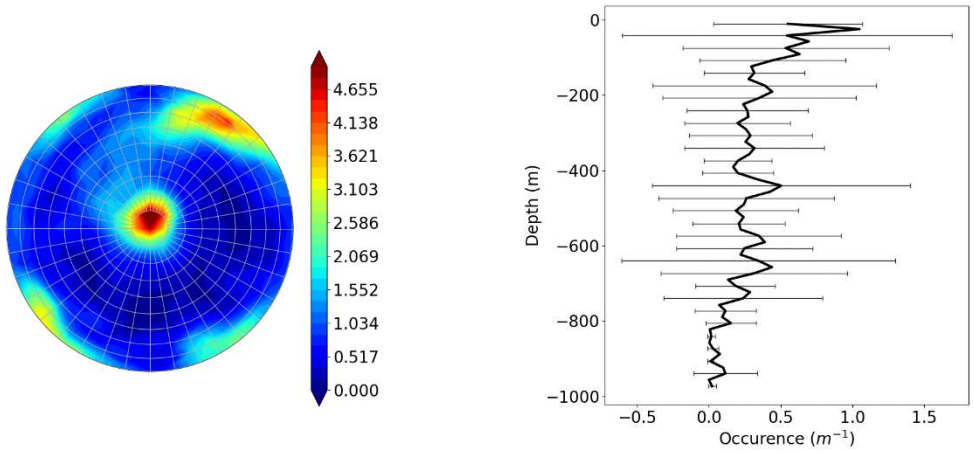
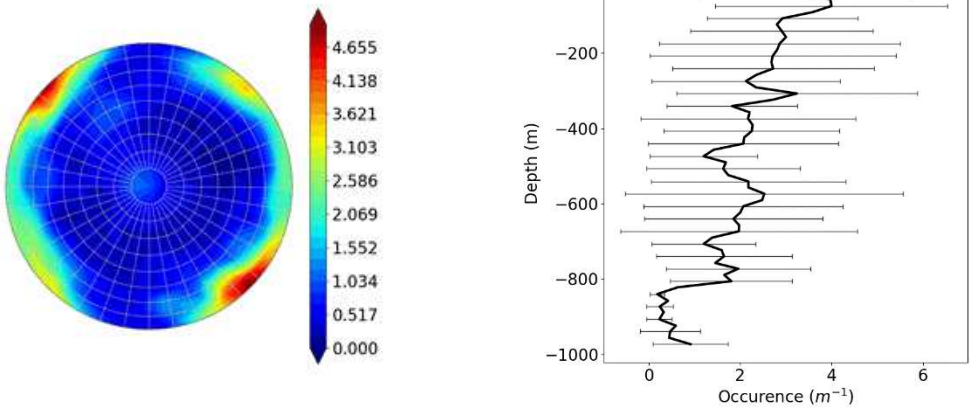
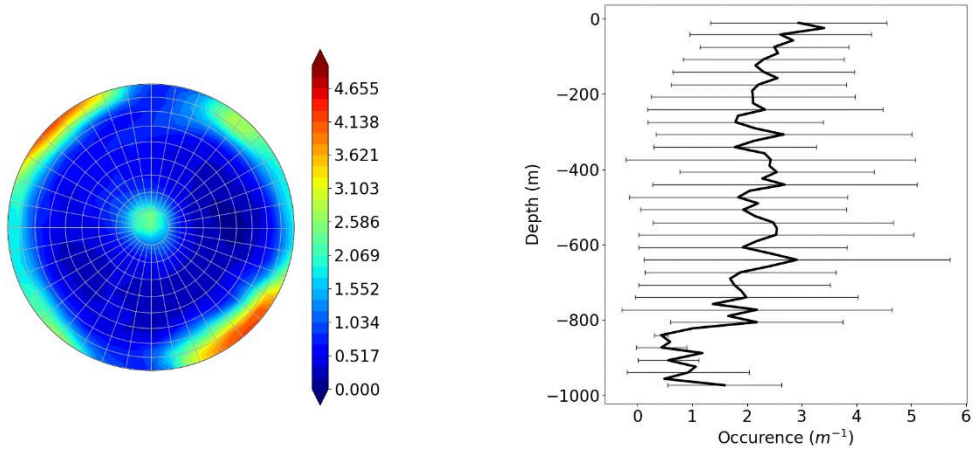


Figure 4-35 (ci-dessous) : Répartition des minéraux présents à la fois dans les générations 1 et 2 (origine hydrothermales) et dans les générations 3 et 4 (voir projet d'article, Table 4-1). (Gauche) Stéréonet des fractures contenant le minéral. La couleur représente la densité de pôles de fractures (voir chapitre 1). (Droite) Apparition du minéral avec la profondeur.

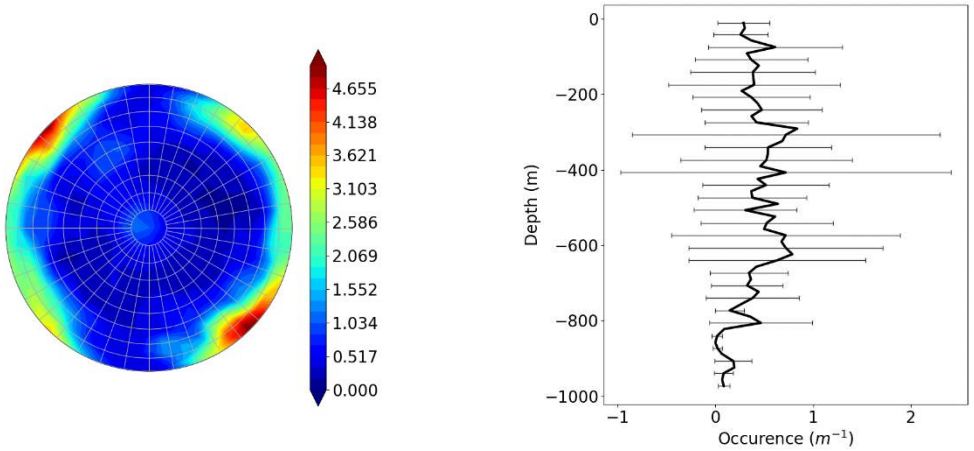
Calcite (generation 2, 3, and 4) :



Chlorite (generation 1, 2, and 4) :



Quartz (generation 1 and 3) :



Chapitre 5

Conséquences hydrologiques d'un contrôle par la contrainte de la fraction ouverte. Application au site de Forsmark.

Table des matières :

5.1. Introduction 190

5.2. Méthodologie 191

5.2.1. Les modèles de DFN 191

5.2.1.1. Modèles géométriques (GeoDFN) et de transmissivités (HydroDFN) 191

5.2.1.2. Modèles de distribution de la fraction open (OpenDFN) 192

5.2.2. Description des données réelles de flux mesurées dans les puits 199

5.2.3. Configuration de la simulation de flux 200

5.2.4. Indicateurs de connectivité et de flux 202

5.3. Résultats 205

5.3.1. Analyses de connectivité 205

5.3.2. Analyses d'échelles 209

5.4. Discussion et conclusions 214

5.1. Introduction

Dans ce dernier chapitre, nous abordons la question des conséquences de différentes distributions des surfaces de fractures ouvertes (non-colmatées) sur la connectivité et les flux d'un réseau de fractures. L'étude s'inscrit dans un projet déjà entamé par le groupe de recherche du doctorant, le laboratoire *La Fractory*. L'objectif principal du projet est d'utiliser les données de puits pour contraindre les modèles de DFN à l'échelle du site, c'est-à-dire leur géométrie (GeoDFN), la distribution des surfaces de fractures ouvertes (OpenDFN), et les propriétés de transmissivités des fractures (HydroDFN). Le projet s'inscrit dans le cadre d'une longue collaboration entre *la Fractory* et SKB (Swedish Nuclear Fuel and Waste Management and Co) et porte principalement sur l'établissement d'un modèle de site à Forsmark (Suède). Un volet du projet porte sur l'interprétation hydrologique des données de flux mesurées dans les puits. Celles-ci sont très chenalisées, c'est-à-dire très éparpillées le long du puits et d'intensités variables, ce qui est typique des milieux fracturés (Le Goc et al., 2010b; Zou & Cvetkovic, 2020). Une méthode, qui sera détaillée dans ce chapitre, consiste à caractériser les effets d'échelles, c'est-à-dire la manière dont la chenalisation des flux et la perméabilité évoluent avec l'échelle de mesure (Davy et al., 2006a; Doolaeghe et al., 2019; Le Goc et al., 2018).

Dans le chapitre 4, l'analyse des données de carottes de puits de Forsmark a révélé une corrélation forte entre la proportion de fractures ouvertes, f_{op}, et la contrainte normale appliquée à chaque fracture, σ_n. Dans le présent chapitre, nous utilisons cette relation, $f_{op}(\sigma_n)$, pour sélectionner statistiquement la portion de fractures ouvertes dans des modèles de réseaux de fractures. D'autres modèles de distribution sont également utilisés : un modèle où la distribution des surfaces ouvertes est aléatoire, et un autre où les surfaces ouvertes sont majoritairement dans les grandes fractures. Ces deux modèles ont déjà été étudiés par la *Fractory* et révèlent qu'une corrélation avec la taille est nécessaire pour conserver la connectivité et l'organisation (chenalisation) des flux observée dans les puits (Le Goc et al., 2018). L'objectif des travaux présentés ici est d'évaluer les conséquences hydrologiques du nouveau modèle corrélé à σ_n. Les interrogations sont les suivantes :

- Le un modèle de distribution corrélé a σ_n permet-il d'expliquer la connectivité et les effets d'échelle observés dans les puits ?
- Qu'apporte cette corrélation par rapport aux modèles déjà étudiés (aléatoire et corrélé à la taille) ?

5.2. Méthodologie

5.2.1. Les modèles de DFN

5.2.1.1. Modèles géométriques (GeoDFN) et de transmissivités (HydroDFN)

Lors de précédentes phases de recherche de la *Fractory*, un modèle géométrique (GeoDFN) a été calibré aux données de carottes de puits correspondant au domaine de fractures appelé *FFM01*, localisé approximativement entre 150-200 mètres et 1000 mètres de profondeur, et qui accueillera le futur site de stockage (Follin et al. (2007) ; voir chapitre 4). Le modèle est généré à partir de la méthode UFM (*Universal Fracture Model*), dans lequel les fractures suivent un processus de nucléation, de croissance et d'arrêt (Davy et al., 2013). Il est caractérisé par une distribution des tailles de fractures en double loi de puissance (Figure 5-1b), avec une taille caractéristique l_c, délimitant les fractures en régime de croissance (régime dilué ; $l < l_c$) et les fractures en régime d'arrêt (régime dense ; $l > l_c$). Nous rappelons qu'une distribution des tailles en loi de puissance est définie comme : $n(l) = \alpha . l^a$, où $n(l).dl$ est le nombre de fractures par unité de volume dont la taille est comprise entre l et $l + dl$. α est appelé le terme de densité, et a l'exposant.

Les paramètres du modèle sont calibrés pour correspondre à la densité ($p_{32} = 4.766\, m^{-1}$) et aux orientations mesurées dans les carottes de puits correspondant à *FFM01.* Nous référons à Darcel et al. (in prep.) pour la méthode de calibration. Les valeurs de ces paramètres sont présentées dans le tableau de la Figure 5-1a. Un exemple de réalisation est montré à la Figure 5-5a.

Les modèles sont générés dans un système cubique de taille 200 mètres, avec une taille minimum de fracture égale à 2 mètres. Les analyses montrées dans cette étude reposent sur dix-neuf réalisations de ce modèle géométrique. Ensuite, le système est tronqué à une taille de 150 mètres, afin de ne pas prendre en compte l'arrêt des fractures sur les bords.

Notons que la densité mesurée dans le puits ($p_{32} = 4.766\, m^{-1}$) correspond à un réseau de fractures dont la distribution des tailles est définie à partir du diamètre du puits (d = 0.076 m). Or, le modèle UFM généré sur cette gamme de longueurs atteint environ 10^9 fractures, ce qui est difficile à gérer numériquement, à la fois en termes de génération et de simulations de flux. C'est pourquoi les modèles sont générés avec une taille minimum de fracture l_{min} supérieure (2 m), ce qui correspond à un nombre de fractures bien moins élevé ($\sim 1.3 \times 10^6$) et donc une densité p_{32} plus faible. Ce choix est fait en considérant l'hypothèse que les fractures de taille comprises entre 0.076 et 2 participent peu à la connectivité et les flux du réseau (Bour & Davy, 1997).

Deux modèles de transmissivité (HydroDFN) sont utilisés dans cette étude. Un modèle où toutes les fractures ont la même transmissivité : $T = 1$, et un modèle où la transmissivité est corrélée à la taille de fracture, $T = l$. Notons que ces modèles ne représentent pas de vraies valeurs de transmissivité, qui sont plutôt de l'ordre de 10^{-4}-$10^{-9}\ m^2.s^{-1}$, d'après les mesures dans les puits de Forsmark. Le but est de mesurer la manière dont sont organisés les flux avec ces deux modèles, mais pas leurs intensités.

(a)

Transition size, l_c	3.3
Growth regime density term, α_G	1.2
Growth regime exponent, a_G	3
Arrest regime density term, α_U	4
Arrest regime exponent, a_U	4
p_{32} ($l > 0.076$)	4.766

(b)

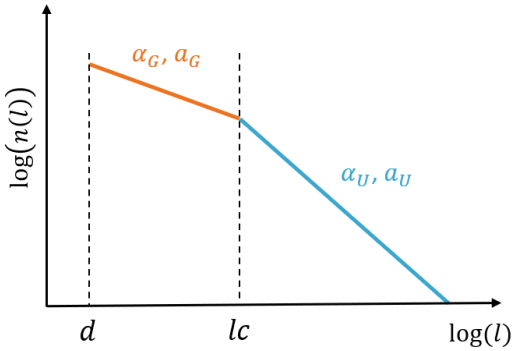


Figure 5-1 : (a) Paramètres de la distribution des tailles du modèle UFM (GeoDFN). (b) Illustration schématique d'une distribution des tailles en double loi de puissance.

5.2.1.2. Modèles de distribution de la fraction open (OpenDFN)

Dans tous les modèles présentés ci-dessous, les fractures sont considérées comme étant soit complètement ouvertes, soit complètement fermées. Nous ne considérons pas de modèle de colmatage partiels des fractures. Les fractures choisies comme étant fermées par le modèle de distribution sont enlevées du GeoDFN.

Modèle de distribution aléatoire, α-open, et modèle corrélé à la taille, l_c-open

Dans le modèle α-open, les fractures ouvertes sont sélectionnées sans aucune corrélation avec des paramètres de fractures (tailles, orientations, etc). Pour chaque fracture, un nombre entre 0 et 1 est pioché aléatoirement. Si ce nombre est supérieur à la fraction ouverte voulue, f_{op}, alors la fracture est enlevée du DFN, sinon elle est conservée.

Dans le modèle l_c-open, les grandes fractures sont en priorité gardées ouvertes. Le modèle est basé sur la définition d'une nouvelle longueur de transition $l_{c,o}$, supérieure à l_c, et

qui caractérise la nouvelle double loi de puissance (voir Figure 5-2 – traits rouges). Les paramètres a_G, a_U, et α_U de la double loi de puissance initiale (traits gris) sont conservés, seule la longueur de transition entre les deux lois augmente, ce qui engendre une baisse du terme de densité du régime de croissance, α_G. Une relation théorique existe entre la densité p_{32} et la longueur de transition l_c d'un réseau en double loi de puissance (voir Darcel et al. (in prep.)). Cette relation prédit une décroissance de p_{32} à mesure que l_c augmente. La nouvelle longueur de transition $l_{c,o}$ est ajustée pour obtenir la valeur de densité voulue dans le modèle des fractures ouvertes, à savoir celle des fractures ouvertes mesurée dans le puits : $p_{32,o} = p_{32} \times f_{op}$. Finalement, le nouveau terme de densité, noté $\alpha_{G,o}$, est calculé à partir de $l_{c,o}$, avec la relation suivante : $\alpha_{G,o} = \alpha_U . l_{c,o}^{-a_U + a_G}$.

La relation qui lie f_{op} a la taille de fracture l est la suivante (Figure 5-2b) :

- si $d < l < l_c$, alors $f_{op} = \frac{\alpha_{G,o}}{\alpha_G}$,
- si $l_c < l < l_{c,o}$, alors $f_{op} = \frac{\alpha_{G,o} . l^{a_G}}{\alpha_U . l^{a_U}}$,
- si $l > l_{c,o}$, alors $f_{op} = 1$.

Pour chaque fracture un nombre entre 0 et 1 est pioché aléatoirement. Si ce nombre est supérieur à $f_{op}(l)$, l étant la taille de la fracture, alors la fracture est enlevée du DFN, sinon elle est conservée.

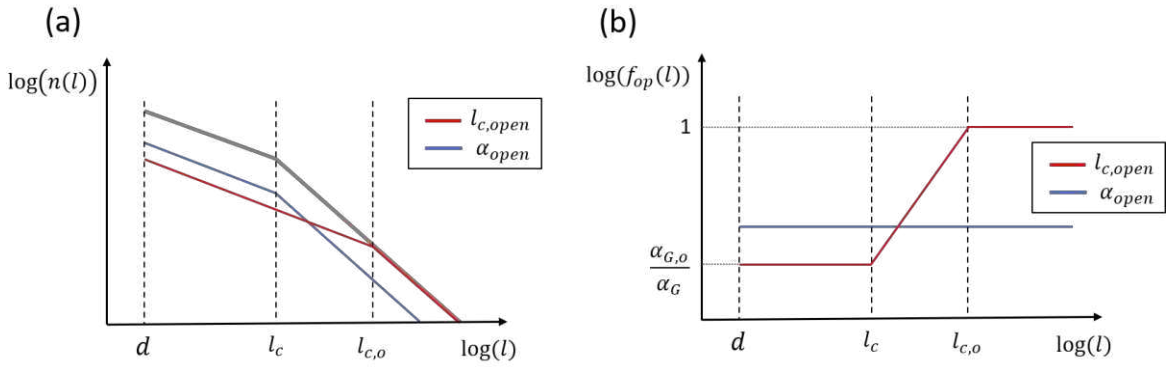


Figure 5-2 : (a) Schéma de la distribution des tailles de fractures, l, dans les modèles α-open (bleu) et l_c-open (rouge). (b) Schéma de la fraction ouverte f_{op} en fonction de la taille.

Notons que, dans le modèle l_c-open, la relation $f_{op}(l)$ est calibrée en considérant une taille minimale de fracture égale à la taille du puits $d = 0.076$ m. Comme vu dans la section 5.2.1.1. , pour des raisons de capacité numérique, les modèles de DFN générés ont une taille de fracture minimale supérieure, $l_{min} = 1.5$ m, ce qui résulte en un f_{op} total mesuré dans les modèles supérieur à celui mesuré dans le puits.

Les deux modèles de distribution α-open et l_c-open sont des modèles hypothétiques dont la distribution ne dépend pas de données mesurées. A l'inverse, le modèle σ-open proposé dans la prochaine section est un modèle directement mesuré dans les données de puits.

Modèles de distribution corrélé à la contrainte normale : σ-open et l_c-σ-open

Le modèle σ-open introduit une corrélation entre la contrainte normale à la fracture σ_n et la fraction ouverte f_{op}. Cette corrélation est la plus forte qui ait été mesurée dans les puits de Forsmark. σ_n a été estimé pour chaque fracture à partir du modèle de champs de contrainte éloigné (voir chapitre 4). Notons qu'elle introduit une dépendance de f_{op} avec l'orientation de la fracture.

La relation $f_{op}(\sigma_n)$ a été quantifiée pour l'ensemble des données et pour les données du domaine *FFM01.* Elle a été caractérisée par une double loi linéaire dont les paramètres sont présentés à la Figure 5-3. Dans cette étude, nous utilisons la loi pour le modèle *FFM01* (bleu).

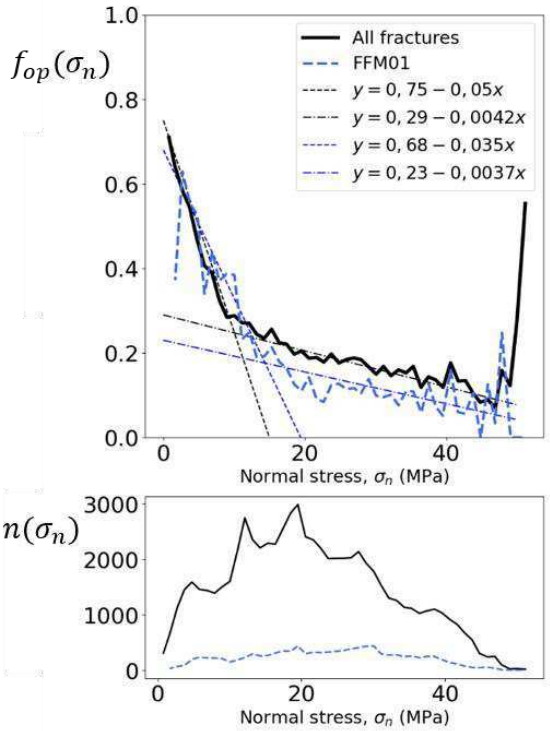


Figure 5-3 : Relation entre la fraction ouverte et la contrainte normale, $f_{op}(\sigma_n)$, mesurées pour l'ensemble des données des puits de Forsmark (noir), et pour les données du domaine FFM01 (bleu). Le graphique inférieur indique la distribution des valeurs de σ_n calculées pour chaque fracture des puits.

Deux modèles sont proposés à partir de la corrélation avec σ_n. Le premier modèle est sans corrélation avec la taille de fracture, appelé σ-open. Celui-ci est à comparer avec le modèle α-open. Le second modèle est corrélé à la taille, appelé l_c-σ-open. Il est à comparer avec le modèle l_c-open.

Dans le modèle σ-open, la contrainte normale σ_n est estimée pour chaque fracture du GeoDFN. Un nombre aléatoire est pioché entre 0 et 1. Si ce nombre est supérieur à $f_{op}(\sigma_n)$ alors la fracture est enlevée du DFN, sinon elle est conservée.

Le modèle l_c-σ-open introduit une double corrélation, avec la taille et avec σ_n. Dans ce modèle, la relation entre la fraction ouverte et la taille, $f_{op}(l)$, varie selon la valeur de σ_n (Figure 5-4). $f_{op}(\sigma_n)$ est d'abord évalué pour chaque fracture du GeoDFN. Ensuite, comme dans le modèle l_c-open, la longueur de transition $l_{c,o}$ et le terme de densité $\alpha_{G,o}$ sont ajustés pour obtenir la densité de fracture ouverte désirée : $p_{32,o} = p_{32} \times f_{op}(\sigma_n)$. Notons que cette fois, $p_{32,o}$ varie d'une fracture à l'autre, selon σ_n, ou autrement dit selon son orientation. Finalement, un nombre aléatoire est pioché entre 0 et 1. Si ce nombre est supérieur à $f_{op}(l)$ alors la fracture est enlevée du DFN, sinon elle est conservée.

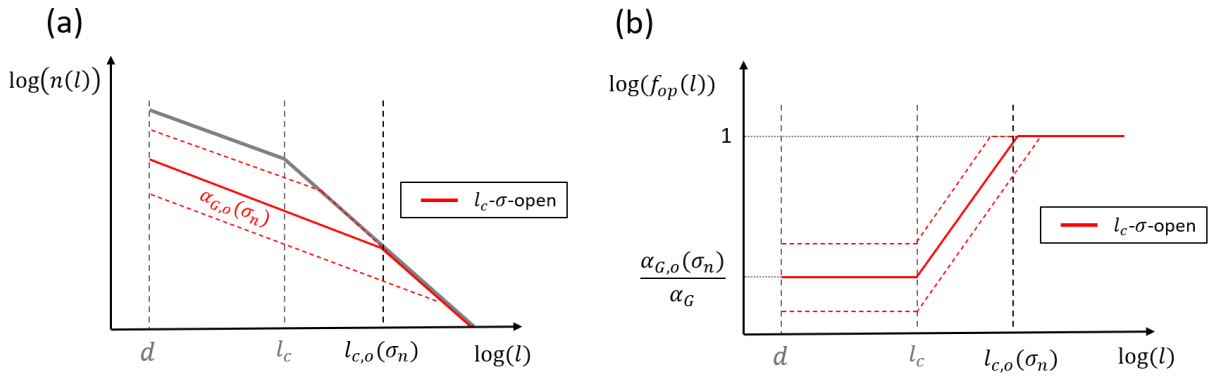


Figure 5-4 : (a) Schéma de la distribution des tailles de fractures, l, dans le modèle l_c-σ-open. (b) Schéma de la fraction ouverte f_{op} en fonction de la taille. Les lignes en pointillés rouges indiquent comment le modèle peut varier selon la contrainte normale σ_n.

A Forsmark, le champ de contraintes éloigné, permettant de calculer σ_n, dépend de la profondeur considérée (chapitre 4 ; Figure 14). Nous choisissons de ne pas considérer de dépendance avec la profondeur dans nos modèles, mais prenons le champs de contrainte mesuré à une unique profondeur pour l'ensemble du réseau. Le modèle de GeoDFN présenté à la section 5.2.1.1. a été calibré sur des données allant de 200 à 400 mètres. Nous considérons donc trois scénarios : un champ de contrainte pris à 200 mètres, 300 mètres, et 400 mètres.

La valeur de f_{op} mesurée à l'échelle du réseau varie avec la profondeur considérée. Les valeurs de f_{op} obtenues dans le modèle σ-open, moyennées sur les dix-neuf réalisations sont indiquées dans le Tableau 5-1. Celles-ci servent de valeurs d'entrées aux modèles l_c-open et α-open, dans le but de pouvoir comparer les différents modèles.

Tableau 5-1 : Valeurs de f_{op} calculées à l'échelle du réseau avec le modèle σ-open. Le modèle est calculé pour le champs de contrainte de Forsmark pris à différentes profondeurs. Les valeurs sont moyennées sur les dix-neuf réalisations.

Profondeur du champ de contrainte (m)	200	300	400
f_{op} moyen	0.176	0.145	0.118

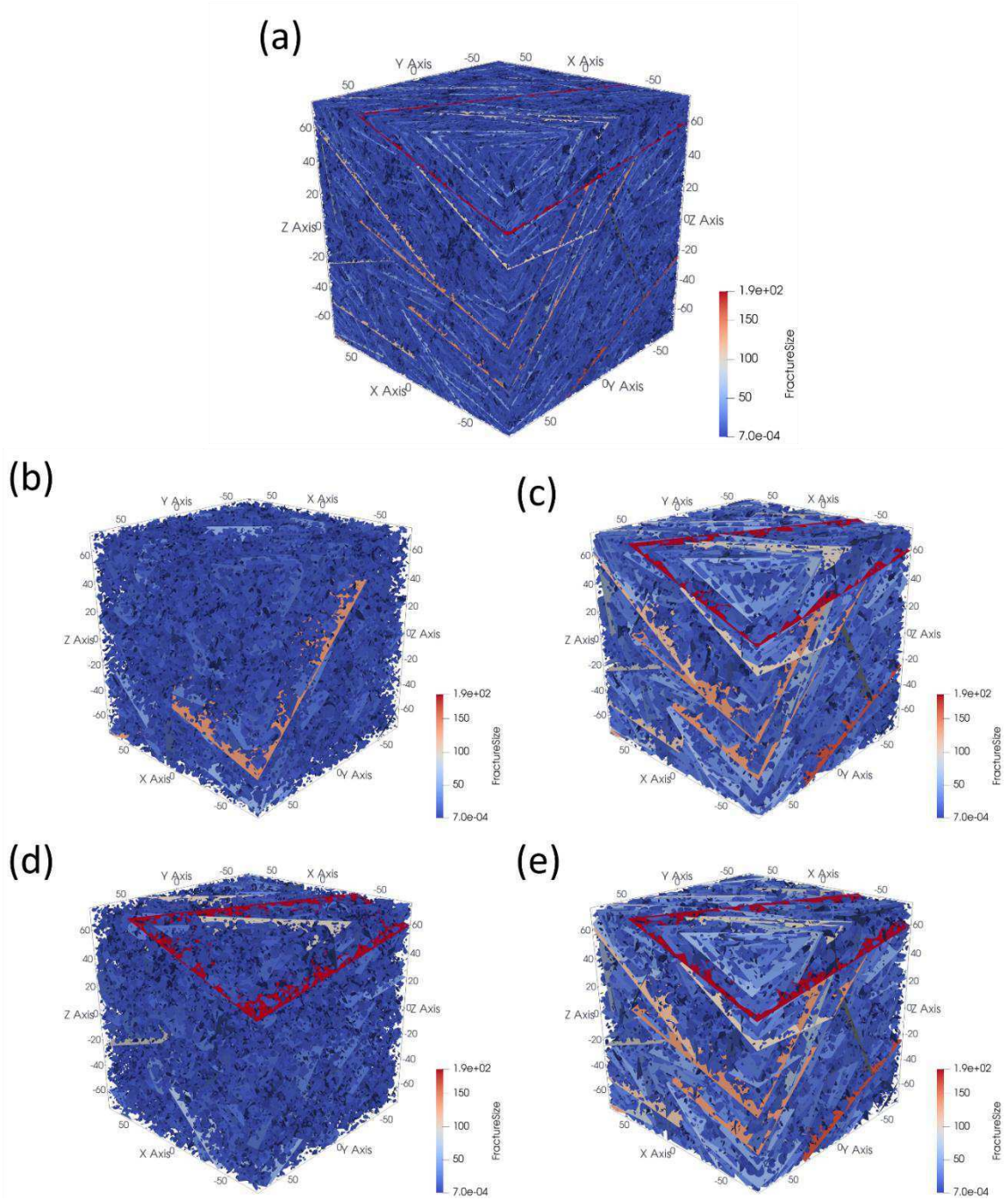


Figure 5-5 : (a) Exemple d'une réalisation d'un modèle UFM (GeoDFN). Fractures ouvertes (OpenDFN) sélectionnées selon (b) le modèle α-open, (c) le modèle l_c-open, (d) le modèle σ-open, et (e) le modèle l_c-σ-open.

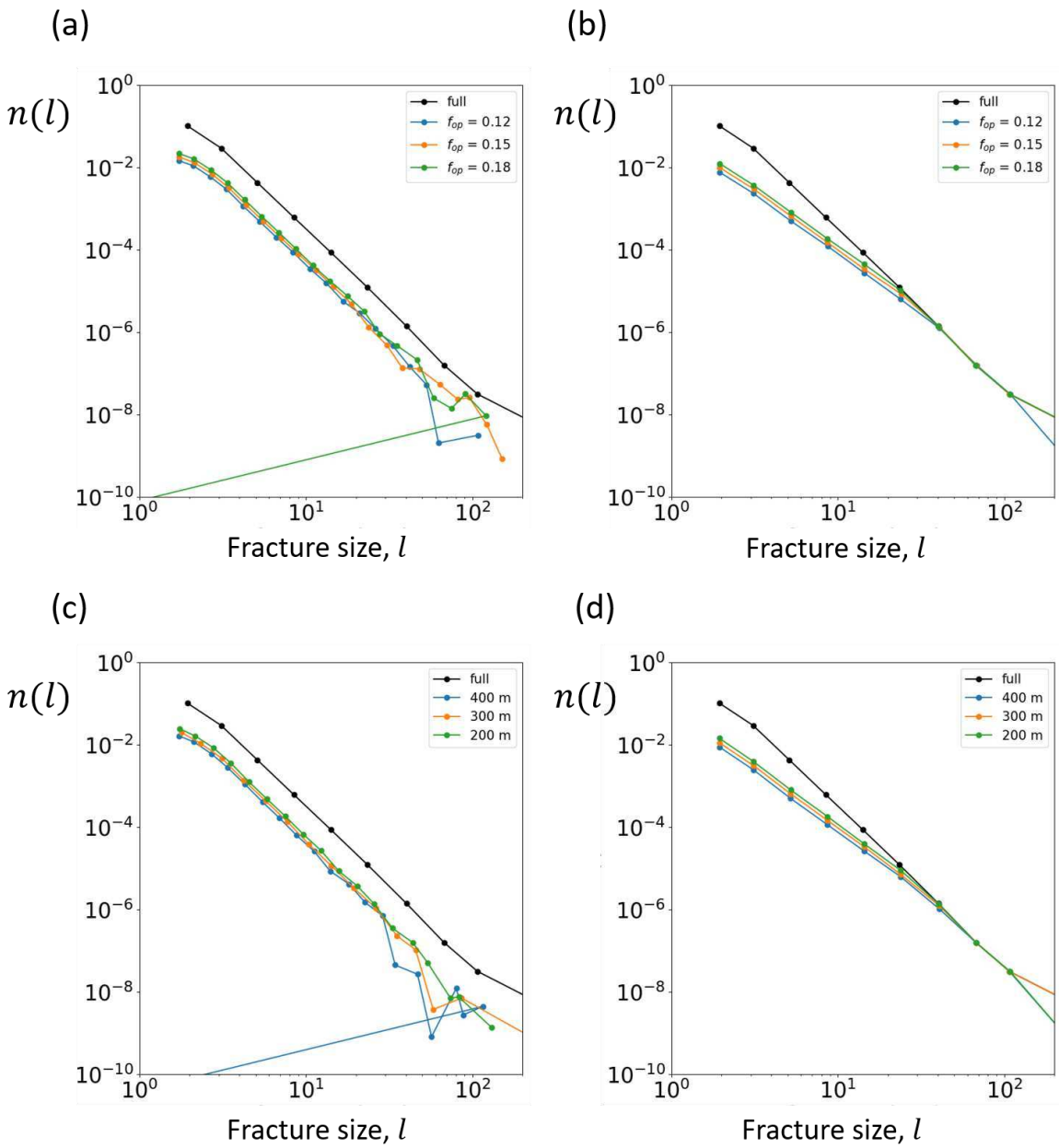


Figure 5-6 : Distribution des tailles de fractures dans les différents modèles OpenDFN. (a) Modèle α-open. (b) Modèle l_c-open. (c) Modèle σ-open. (d) Modèle l_c-σ-open. Dans (a), (b), (c), et (d) la distribution du DFN initial (GeoDFN) est en noir.

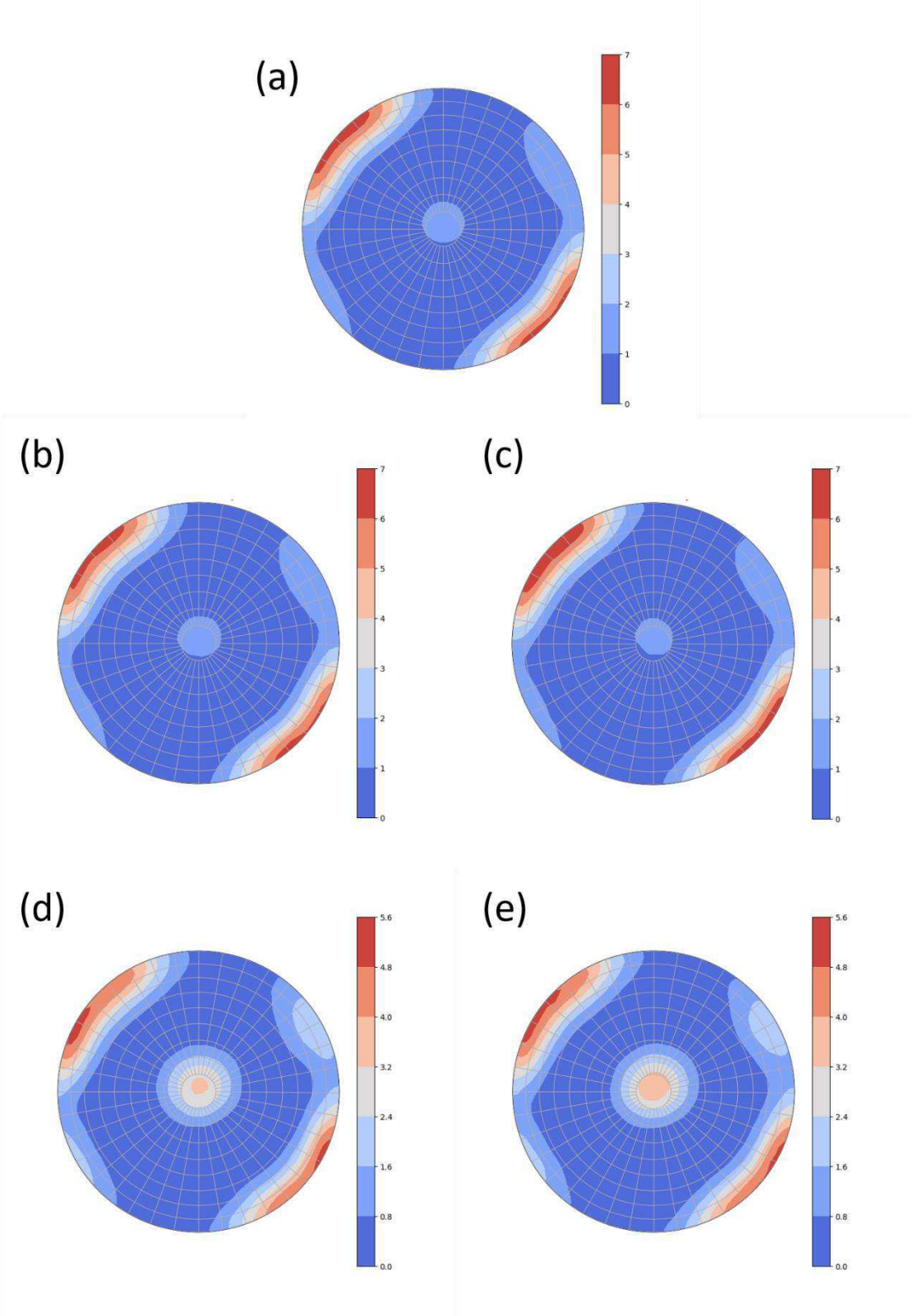


Figure 5-7 : Distribution des orientations représentées dans un stéréonet. (a) Modèle de DFN initial (GeoDFN). (b) Modèle α-open. (c) Modèle l_c-open. (d) Modèle σ-open. (e) Modèle l_c-σ-open.

5.2.2. Description des données réelles de flux mesurées dans les puits

Plusieurs campagnes de mesures ont été réalisées pour identifier les sections/fractures conduisant les flux dans les puits de Forsmark. Parmi elles, les mesures par la méthode des PFL (*Posiva-Flow-Logs*) sont les plus utilisées, car elles reposent sur une instrumentation permettant de détecter des flux assez petits. Cette instrumentation utilise des mesures de différence de débit entre une section isolée et le débit du reste du puits (*Difference flowmeter* ; Rouhiainen and Pöllänen (2003)) (voir Figure 5-8 pour un schéma de l'instrumentation). A l'inverse, les méthodes classiques mesurent le débit accumulé le long du puits, cependant les incréments de débit peuvent être difficile à détecter dans ce type d'environnement.

Dans la méthode des PFL, un pompage est réalisé dans le puits sur environ 4 à 7 jours afin d'obtenir des conditions d'écoulement stationnaires. L'instrument de mesure est glissé le long du puits avec des intervalles de 5 mètres. Lorsqu'une différence de débit est détectée, alors une méthode de chevauchement utilisant un intervalle de 10 cm est utilisée, ce qui permet d'isoler précisément la zone/fracture qui conduit le flux (Rouhiainen & Pöllänen, 2003).

Notons que l'instrument permet au débit du puits de s'écouler au travers de la section isolée par un tuyau (Figure 5-8), ce qui permet de garder un pompage stationnaire dans l'ensemble du puits. La méthode est différente d'un système de pompage ou injection dans une section complètement isolée du reste du puits par deux *packers.* Cette dernière méthode, appelée *PSS* (*Pipe String System*), a été employée à Forsmark avant les *PFL.* Les différences entre les deux méthodes de mesure sont évaluées dans Follin et al. (2011).

Les débits Q mesurés par la méthode PFL sont transformés en transmissivité T_{PFL} ($m^2.s^{-1}$) en utilisant l'interprétation de Dupuits/Thiem (Renard, 2005) :

$$T_{PFL} = \frac{Q}{2\pi\Delta h} ln\left(\frac{r_e}{r_b}\right) \tag{5-1}$$

où r_b est le rayon du puits, r_e le rayon d'influence du puits, défini ici comme $r_e = 500.r_b$, et Δh la baisse de hauteur d'eau engendrée par le pompage, ici 10 mètres (Rouhiainen & Pöllänen, 2003). La mesure T_{PFL} est une normalisation des flux, qui permet de refléter la transmissivité de la structure de fractures connectées, proche du point de mesure.

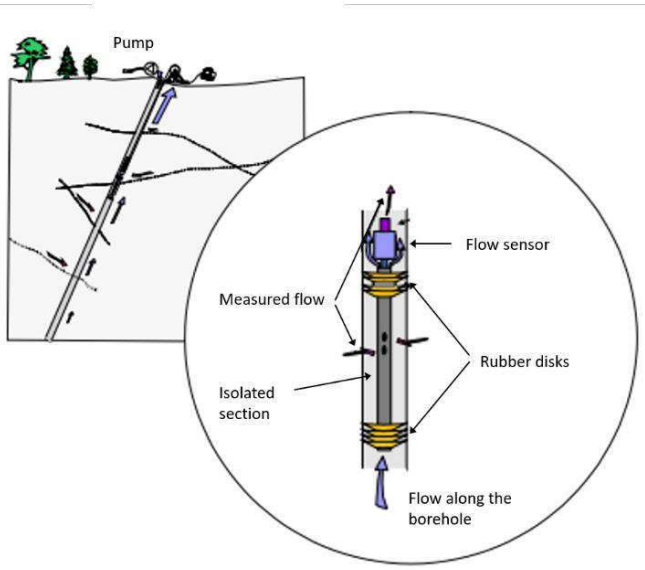


Figure 5-8 : Illustration de l'instrumentation des mesures types PFL (Posiva Flow Log) dans un forage. Modifié d'après Rouhiainen and Pöllänen (2003).

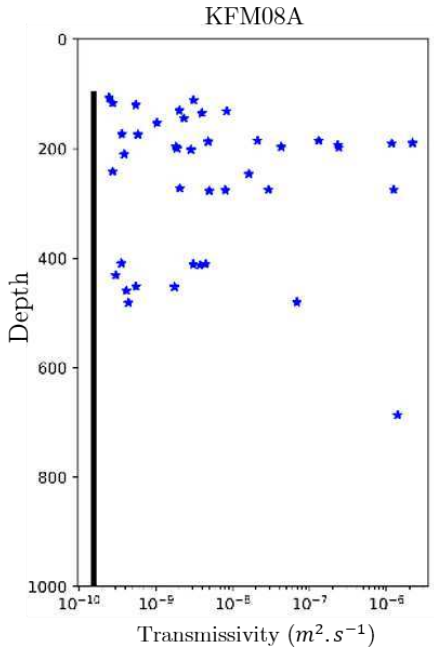


Figure 5-9 : Distribution des transmissivité T_{PFL} dans le puits KFM08A. Dans Le Goc et al. (2018).

5.2.3. Configuration de la simulation de flux

Les simulations de flux ont pour but de reproduire la mesure des *Posiva Flow Logs* décrite dans la section précédente. La simulation utilise le logiciel *DFN.lab* (Le Goc et al., 2019). Un puits est placé le long de l'axe z (vertical) au centre du système (Figure 5-10). Une

charge constante, $h = -10$ m, est appliquée le long du puit, et une charge constante, $h = 0$, est appliquée sur les bords du système parallèles au puits (bords verticaux). Les deux bords perpendiculaires aux puits (horizontaux) ont une condition limite de flux nul.

En réalité, les puits à Forsmark ne sont pas verticaux mais présentent un certain pendage et azimut. Afin de garder le puits vertical dans la simulation, le modèle géométrique (GeoDFN) est généré dans un système cubique aligné dans la direction du puits. Ceci permet d'éviter des effets de bords, par exemple, des cas où le puits ne se rapproche trop d'un bord a charge nulle. Les modèles GeoDFN utilisés dans cette étude ont été générés dans un système aligné avec le puits KFM08A. Ce puits a un pendage de 61°.

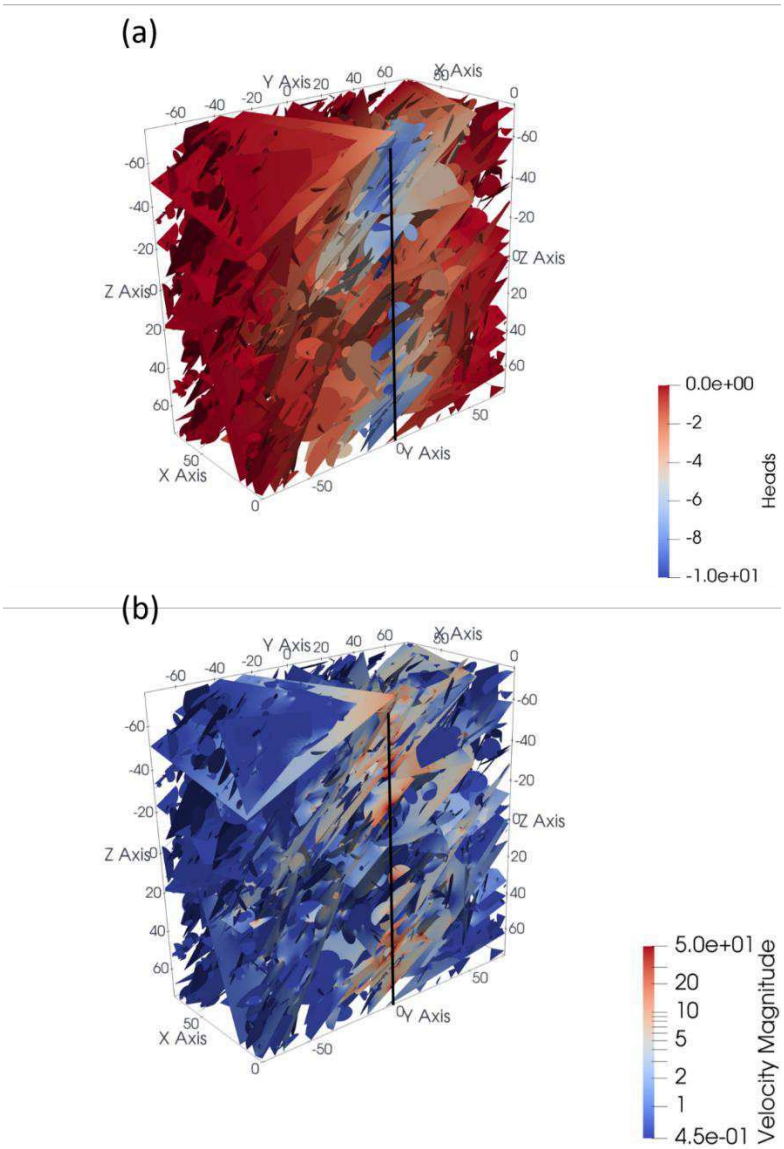


Figure 5-10 : Résultats d'une simulation de flux reproduisant un pompage dans un puits. (a) Charges (m) et (b) magnitude des vitesses ($m.s^{-1}$) mesurées dans le DFN (ici, une réalisation de modèle l_c-open).

5.2.4. **Indicateurs de connectivité et de flux**

Connectivité

La connectivité du réseau est analysée entre les objets ayant une condition limite de charge imposée, c'est-à-dire entre le puits et les quatre bords verticaux (Figure 5-10). Le *backbone* est la structure du réseau portant des flux. Celui-ci est calculé en enlevant du réseau les *clusters* de fractures qui ne sont pas connectés à au moins deux conditions limites de charges différentes, et les bras-morts. Les bras mort sont détectés en enlevant itérativement les fractures ayant une seule intersection avec d'autres fractures (Doolaeghe et al., 2020). Les indicateurs de connectivité que nous analysons sont les suivants : le paramètre de percolation p (voir chapitre 1), le pourcentage de réalisations connectées, et, dans le cas où le réseau est connecté, la densité de fractures du *backbone*.

Indicateur de flux et analyses d'échelles

En plus des analyses de connectivité, des analyses sur les mesures de flux dans le puits sont réalisées avec l'échelle de mesure. La perméabilité équivalente K ($m.s^{-1}$) du réseau de fractures est évaluée sur un segment s du puits de taille L_s (Figure 5-11a) comme :

$$K(s) = \frac{1}{L_s}\sum_{f \epsilon s} T_{PFL,f} \tag{5-2}$$

Dans ce même segment s, on peut aussi calculer un paramètre de chenalisation des flux (m^{-1}),

$$p_{10_q}(s) = \frac{1}{L_S}\left(\frac{\left(\sum_{f \epsilon s} T_{PFL,f}\right)^2}{\sum_{f \epsilon s} T_{PFL,f}^2}\right). \tag{5-3}$$

Ce paramètre indique si les flux sont plutôt concentrés dans un petit nombre de fractures, ou, à l'inverse, plutôt uniformément répartis. Il peut être considéré comme l'inverse de la distance statistique entre deux flux majeurs. Plus la chenalisation est élevée, plus ce paramètre décroit.

Ces indicateurs (équation (5-2) et (5-3)) sont mesurés dans le puits pour différentes tailles L_s du segment s. Une méthode de boite coulissante est utilisée pour couvrir toute la hauteur de puits (Figure 5-11b). Ceci fournit une distribution de valeurs des indicateurs mesurées dans chaque segment s_i de taille L_s. Les moyennes et écart-types de ces distributions seront analysées en fonction de la taille L_s dans la section 5.3.

Pour la perméabilité K, deux types de moyennes sont utilisés, la moyenne arithmétique K_a et la moyenne géométrique K_g, définies comme :

$$K_a(L_s) = \frac{1}{N_{>0}} \sum_{\{s_i\}_{>0}} K(s_i) \tag{5-4}$$

$$K_g(L_s) = \exp\left(\frac{1}{N_{>0}} \sum_{\{s_i\}_{>0}} \log K(s_i) \right) \tag{5-5}$$

où $N_{>0}$ est le nombre de segments contenant des flux. Concernant l'indicateur p_{10_q}, seule la moyenne arithmétique est utilisée.

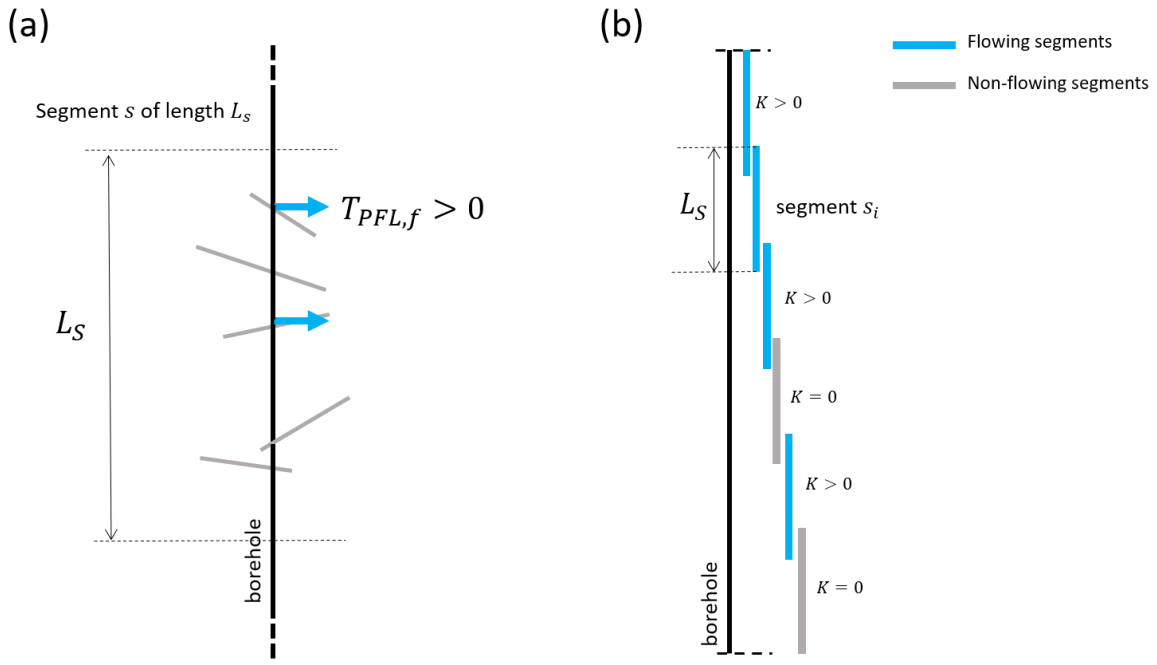


Figure 5-11 : Schémas illustrant les analyses d'échelles réalisées dans les puits. (a) Illustration d'un segment s de taille L_s. En gris sont représentées les fractures interceptées par le puits. La flèche bleue indique les fractures qui conduisent des flux. (b) Découpage du puits en différents segments s_i de taille L_s.

Nous présentons succinctement quelques analyses précédentes utilisant cette méthode réalisées par le groupe de *la Fractory* sur l'ensemble des puits de Forsmark. Ces analyses sont résumées dans Doolaeghe et al. (2019). Elles montrent une décroissance de la moyenne arithmétique K_a avec L_s, quelle que soit la taille L_s (Figure 5-12a), alors que dans certains puits K_g suit la même décroissance mais réaugmente après une certaine échelle (Figure 5-12b).

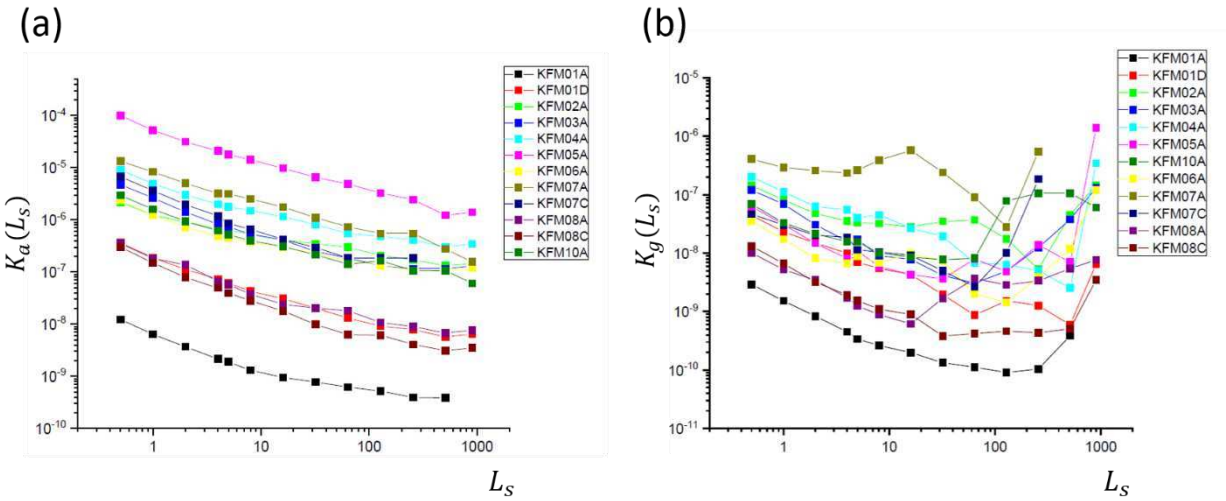


Figure 5-12 : Evolution de la moyenne de la perméabilité équivalente mesurée dans différents segments, $K(s_i)$, en fonction de l'échelle de mesure L_s. (a) Moyenne arithmétique K_a (équation (5-4)). (b) Moyenne géométrique K_g (équation (5-5)). Modifié d'après Doolaeghe et al. (2019).

La décroissance de l'indicateur K_a s'explique par le fait que celui-ci est inversement proportionnel à la proportion de segment s_i ayant des flux. En effet, en combinant les équations (5-2) et (5-4), on peut réécrire K_a comme :

$$K_a(L_s) = \frac{1}{N_{>0}} . \frac{1}{L_s} . \sum T_{PFL} \tag{5-6}$$

où $\sum T_{PFL}$ est la somme de l'ensemble des transmissivités du puits. En définissant $N_T = h/L_s$ comme le nombre total de segment de taille L_s, h étant la longueur du puits, alors,

$$K_a(L_s) = \frac{N_T}{N_{>0}} . \frac{1}{h} . \sum T_{PFL} . \tag{5-7}$$

$\frac{N_{>0}}{N_T}$ mesure la proportion de segment s_i ayant des flux, et augmente avec l'échelle L_s. Le terme $\frac{1}{h} . \sum T_{PFL}$ est la perméabilité équivalente du puits sur toute sa longueur. Ainsi, K_a ne dépend que de la distribution spatiale des T_{PFL}, mais ne reflète pas leurs intensités, c'est pourquoi l'indicateur K_g est utilisé.

L'indicateur K_g dépend à la fois de la distribution spatiale des T_{PFL} et de leurs intensités. En effet, la décroissance initiale de $K_g(L_s)$ dépend de la distribution spatiale des T_{PFL}, tant que la taille du segment est inférieure à la distance statistique entre les T_{PFL}. Ensuite, l'augmentation est due à la présence de quelques T_{PFL} de large intensité parmi

l'ensemble des mesures, qui sont accentués par la moyenne géométrique, mais pas par la moyenne arithmétique.

5.3. Résultats

5.3.1. Analyses de connectivité

En moyenne, les dix-neuf réseaux GeoDFN ont initialement une densité p_{32} égale à 1.38 $m^2.s^{-1}$ et un paramètre de percolation p égal à 24. Les densités $p_{32,o}$ et fraction ouverte f_{op} ($\frac{p_{32,o}}{p_{32}}$) des différents modèles de OpenDFN sont présentées Figure 5-13. Comme cela a été mentionné précédemment dans la section 5.2.1.2. , les modèles ayant une corrélation avec la taille de fracture (l_c-open et l_c-σ-open) ont un f_{op} plus élevé que le f_{op} donné en entrée du modèle. Ceci est dû au fait que la corrélation de f_{op} avec la taille est volontairement établie sur une gamme de taille de fracture allant du diamètre du puits d à la taille du système, alors que les modèles générés ont une taille minimale l_{min}, supérieure à d. Il est possible que cette différence influence un peu les résultats de connectivité, cependant dans ces modèles la connectivité est normalement principalement influencée par les grandes fractures.

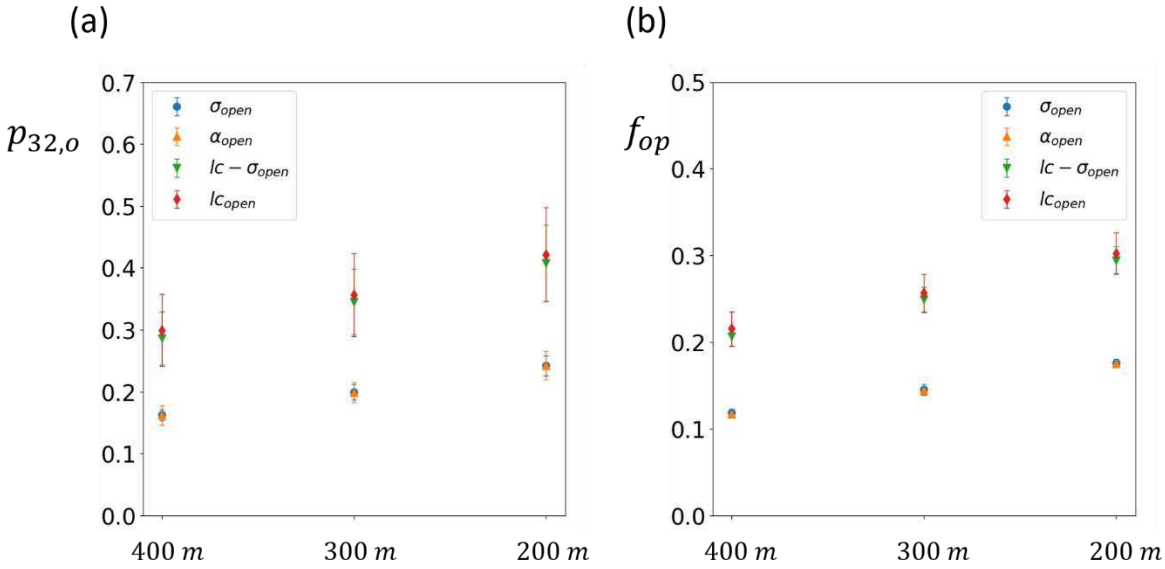


Figure 5-13 : (a) Densité $p_{32,o}$ et (b) fraction ouverte f_{op} des modèles OpenDFN. En axe des abscisses sont indiquées les différentes profondeurs à laquelle le champ de contraintes a été considéré pour calculer les modèles σ-open et l_c-σ-open.

Les analyses de connectivité indiquent que les modèles α-open et σ-open (non corrélés à la taille) sont en moyenne peu connectés, alors que les modèles l_c-open et l_c-σ-open le sont

toujours (Figure 5-14). Notons le paramètre de percolation p des modèles α-open et σ-open qui est très proche du seuil de percolation p_c (De Dreuzy et al., 2000) (Figure 5-14a). Lorsque les modèles α-open et σ-open sont connectés, la densité du *backbone* est très faible (Figure 5-14c), ce qui indique que la connexion est faite par très peu de fractures, voire une unique grande fracture qui parfois connecte le puits aux bords. Des illustrations du *backbone* dans les différents modèles sont présentées aux Figure 5-15 et Figure 5-16.

Les résultats montrent que le modèle σ-open semble être statistiquement plus souvent connecté que le α-open (Figure 5-14b). Ceci est possiblement un effet de la corrélation de f_{op} avec les orientations dans le modèle σ-open, qui laisse plus de fractures horizontales ouvertes, et donc plus de chance de connecter le puits aux bord verticaux. Cependant, le pourcentage de réalisations connectées montré à la Figure 5-14b repose sur seulement dix-neuf réalisations. Il faudrait plus de réalisations pour s'assurer d'une réelle différence entre les deux modèles. Les résultats ne montrent pas de différences notables entre le modèle l_c-open et le modèle l_c-σ-open.

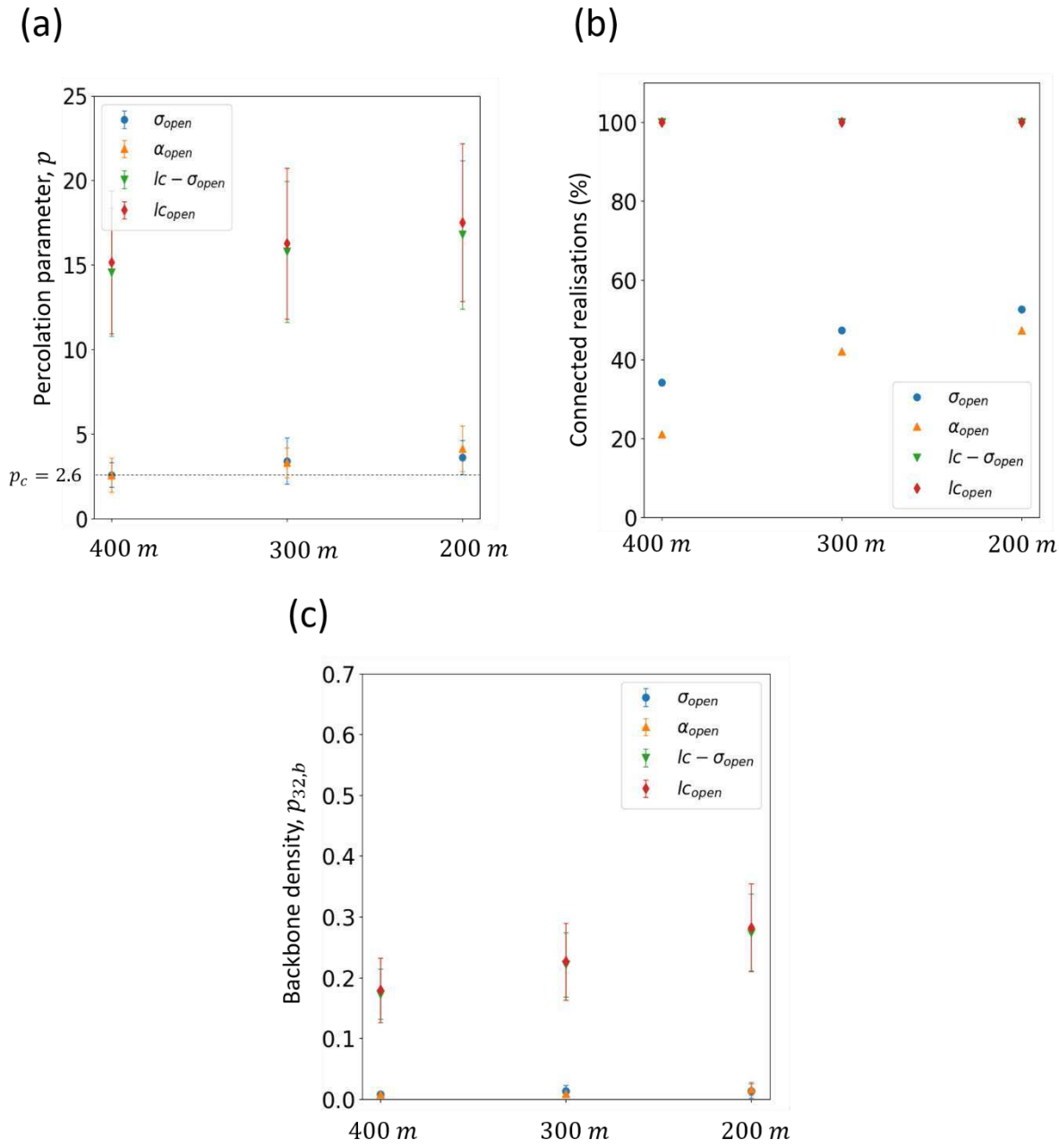


Figure 5-14 : Paramètres de connectivité des différents modèles OpenDFN. (a) Paramètre de percolation de l'OpenDFN, (b) pourcentage de réalisations connectées (sur les 19 réalisations), et (c) densité p_{32} du backbone. En axe des abscisses sont indiqués les différentes profondeurs auxquelles le champ de contraintes a été considéré pour calculer les modèles σ-open et l_c-σ-open.

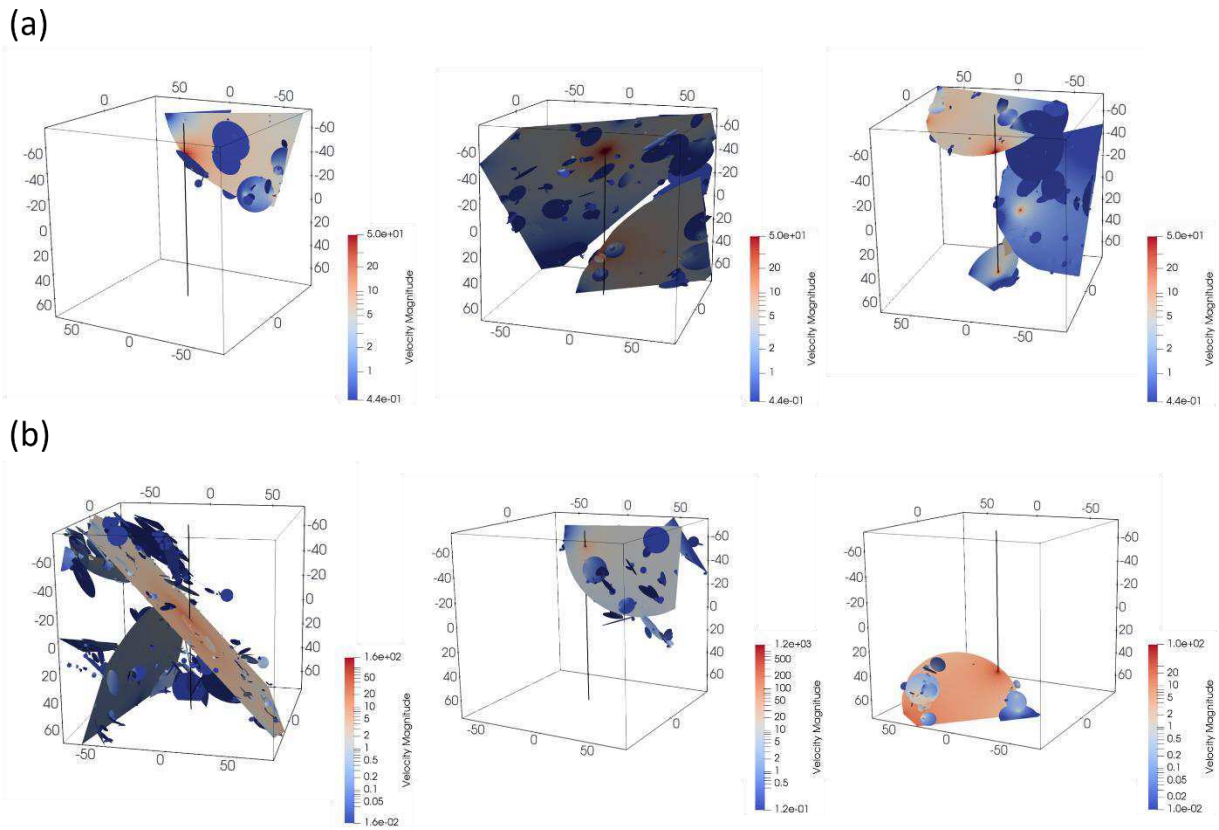


Figure 5-15 : Exemples de backbones, (a) pour le modèle α-open, et (b) pour le modèles σ-open.

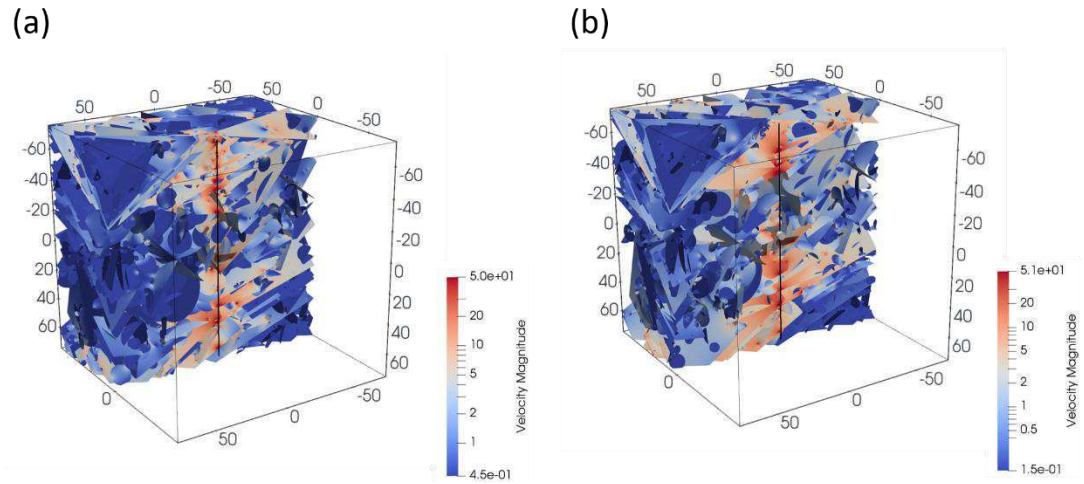


Figure 5-16 : Exemple de backbone, (a) pour le modèle l_c-open, et (b) pour le modèle l_c-σ-open.

5.3.2. Analyses d'échelles

Les évolutions des indicateurs K_a, K_g, et p_{10_q} mesurés dans le puits en fonction de l'échelle L_s (voir section 5.2.4.) sont représentées respectivement aux Figure 5-17, Figure 5-18, et Figure 5-19. Sur ces figures, chaque série d'indicateur est normalisée par la valeur prise à $L_s = 1$ m. Ce choix est fait pour pouvoir comparer les évolutions des différents modèles avec l'échelle, entre eux, et avec les données du puits KFM08A (trait noir), tout en s'affranchissant de l'intensité du flux.

Les résultats sur la moyenne arithmétique de la perméabilité K_a ne montrent pas de différences entre les modèles avec transmissivité constante ($T = 1$, colonne de gauche) et ceux avec transmissivités corrélées à la taille de fracture ($T = l$, colonne de droite). Pour rappel, cet indicateur n'est en effet pas sensible à l'intensité des flux, seulement à la manière dont ils sont distribués dans l'espace. Un palier est atteint dans les modèles OpenDFN corrélés à la taille, c.-à-d. l_c-open et l_c-σ-open (traits rouges et verts), pour une taille de segment L_s égale environ à 10 mètres. Ceci indique que pour cette taille, tous les segments d'échantillonnage portent des flux ($\frac{N_{>0}}{N_T} = 1$). Cette taille représente statistiquement la distance moyenne entre deux flux, ou deux *clusters* de flux, et est appelée l'échelle de connectivité (voir chapitre 1). Les modèles non-corrélés à la taille (α-open et σ-open) n'indiquent pas de palier car la distance entre les différentes mesures de flux est statistiquement de l'ordre de la taille du puits (voir Figure 5-15).

En ce qui concerne la moyenne géométrique de la perméabilité K_g, les résultats pour le cas avec transmissivités constantes (Figure 5-18, colonne gauche) sont très similaires à ceux de la mesure K_a. La différence est marquée lorsque la mesure de K_g est appliquée à des cas avec transmissivités corrélées aux tailles de fractures. On y observe une remontée de K_g après que l'échelle de connectivité a été atteinte dans les modèles l_c-open et l_c-σ-open (Figure 5-18, colonne droite, traits rouges et verts). Pour les modèles α-open et σ-open, les résultats ne changent pas car l'échelle de connectivité n'est pas atteinte.

Enfin la mesure de $p_{10,q}$ décroit jusqu'à un palier dans les modèle l_c-open et l_c-σ-open, et décroit sans palier dans les modèles α-open et σ-open. Pour rappel, cette mesure est statistiquement l'inverse de la distance entre deux flux majeurs. Le palier est atteint lorsque deux flux majeurs se retrouvent dans le même segment de taille L_s. Le fait que p_{10_q} décroit sans s'arrêter ($\sim 1/L_s$) peut être dû soit à un réseau peu connecté (comme les modèles α-open et σ-open), dont la distance entre deux mesure de flux est très large, soit à un réseau connecté mais ayant des valeurs de flux extrêmes. On peut en effet observer que le palier est atteint plus tardivement dans le cas où la transmissivité est corrélée à la taille, probablement à cause

de l'existence de quelques valeurs de flux plus élevées que les autres (Figure 5-19, colonne droite, traits rouges et verts).

L'ensemble de ces résultats ne présentent pas de différences notables entre les modèles α-open et σ-open et entre les modèles l_c-open et l_c-σ-open, ce qui indique que la corrélation avec σ_n ne semble pas changer les mesures d'échelles dans le puits. Quelques différences ont pu être observées entre les modèles α-open et σ-open (traits oranges et bleus), mais ces résultats sont très sensibles au très petit nombre de fractures qui connecte de temps en temps le réseau (voir Figure 5-15). Plus de réalisations devraient être faites pour obtenir de meilleures statistiques sur ces modèles très proches du seuil de percolation.

Les analyses d'échelles ont aussi été effectuées sur les données de flux du puits KFM08A prises entre 200 et 400 mètres (traits noirs). Ces données de flux sont montrées plus haut, à la Figure 5-9. L'analyse de l'indicateur $K_g(L_s)$ dans ce puits indique une descente puis une remontée, ce qui correspond aux modèles l_c-open et l_c-σ-open avec transmissivités corrélées à la taille de fracture (Figure 5-18, colonne droite). L'échelle L_s à partir de laquelle K_g remonte (ou échelle de connectivité) indique une meilleure correspondance avec les modèles calculés pour un champ de contrainte pris à 400 mètres (voir section 5.2.1.2.). En effet, cette échelle de connectivité doit augmenter à mesure que la fraction ouverte f_{op} diminue. Ici, elle semble correspondre à la fraction ouverte la plus basse qui a été considérée, $f_{op} = 0.118$ (Tableau 5-1) (Figure 5-18, bas, droite). La remontée dans les données de KFM08A est plus forte que dans les modèles, ce qui indique l'existence de valeurs de flux plus extrêmes que dans les modèles. Ceci est confirmé par l'indicateur $p_{10,q}(L_s)$ qui ne présente pas de palier marqué pour les données de KFM08A, à l'inverse des modèles l_c-open et l_c-σ-open (Figure 5-19). Ces résultats indiquent qu'un modèle de transmissivités engendrant des valeurs de flux plus extrêmes correspondrait probablement mieux aux données, par exemple une corrélation plus forte avec la taille de fracture, $T = l^2$.

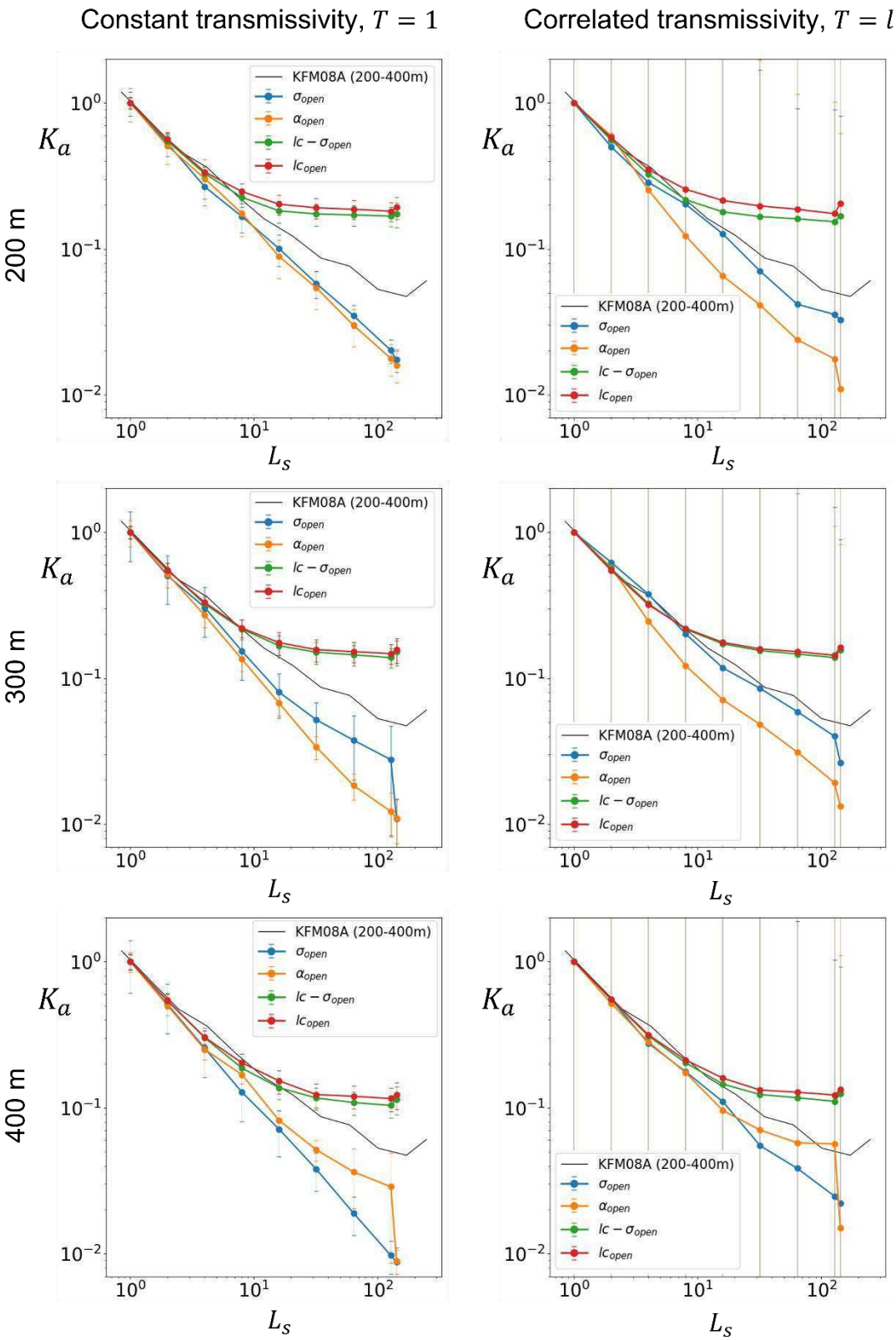


Figure 5-17 : Evolution de la moyenne arithmétique de la perméabilité K_a mesurée dans les puits en fonction de l'échelle de mesure L_s. Modèle HydroDFN avec transmissivités constantes ($T = 1$) (colonne de gauche), et avec transmissivités corrélées à la taille ($T = l$) (colonne de droite). Modèles OpenDFN équivalents à un champs de contrainte pris à 200 mètres (ligne du haut), 300 mètres (ligne du milieu), et 400 mètres (ligne du bas).

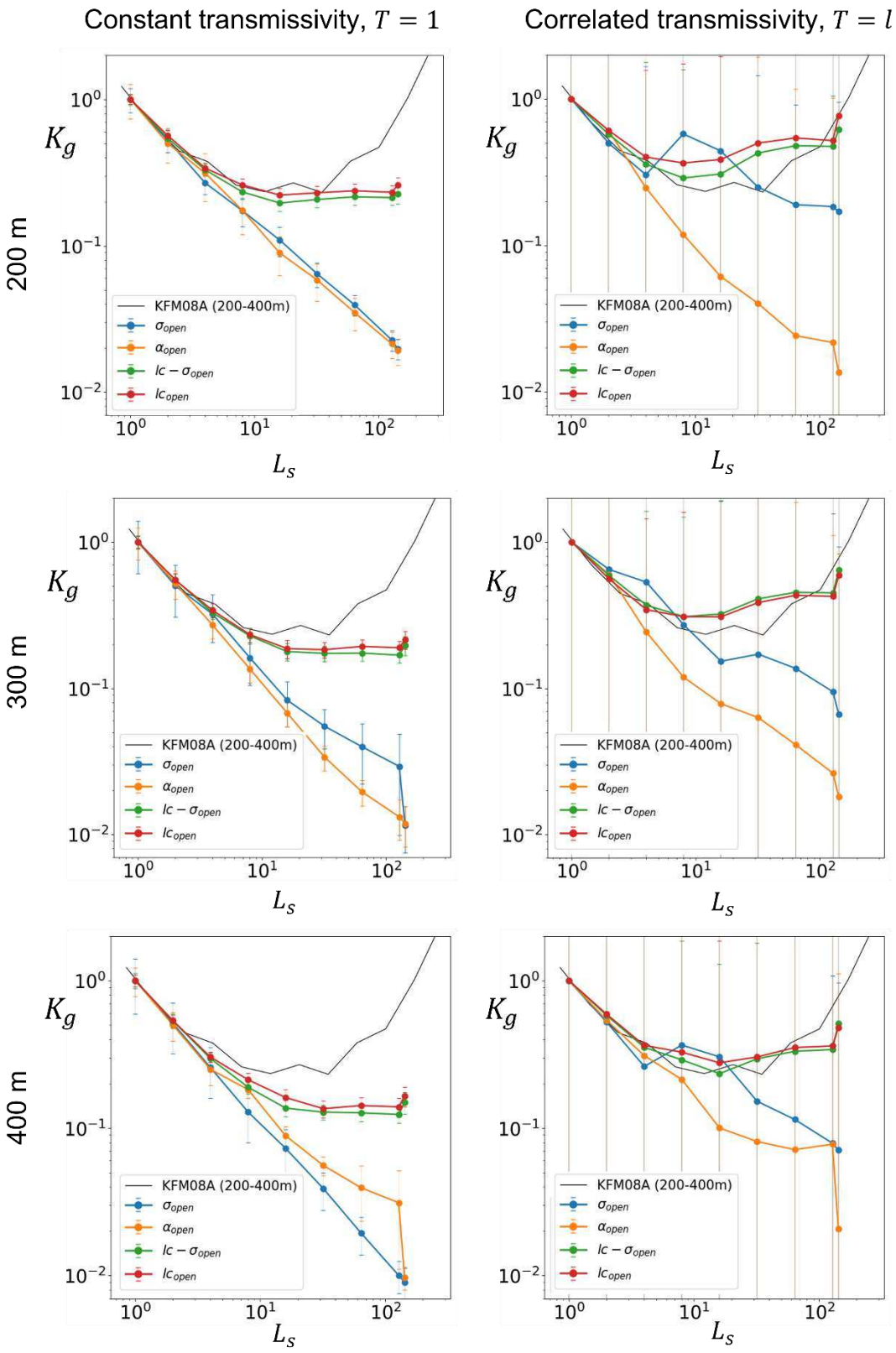


Figure 5-18 : Evolution de la moyenne géométrique de la perméabilité K_g mesurée dans les puits en fonction de l'échelle de mesure L_s. Modèle HydroDFN avec transmissivités constantes ($T = 1$) (colonne de gauche), et avec transmissivités corrélées à la taille ($T = l$) (colonne de droite). Modèles OpenDFN équivalents à un champs de contrainte pris à 200 mètres (ligne du haut), 300 mètres (ligne du milieu), et 400 mètres (ligne du bas).

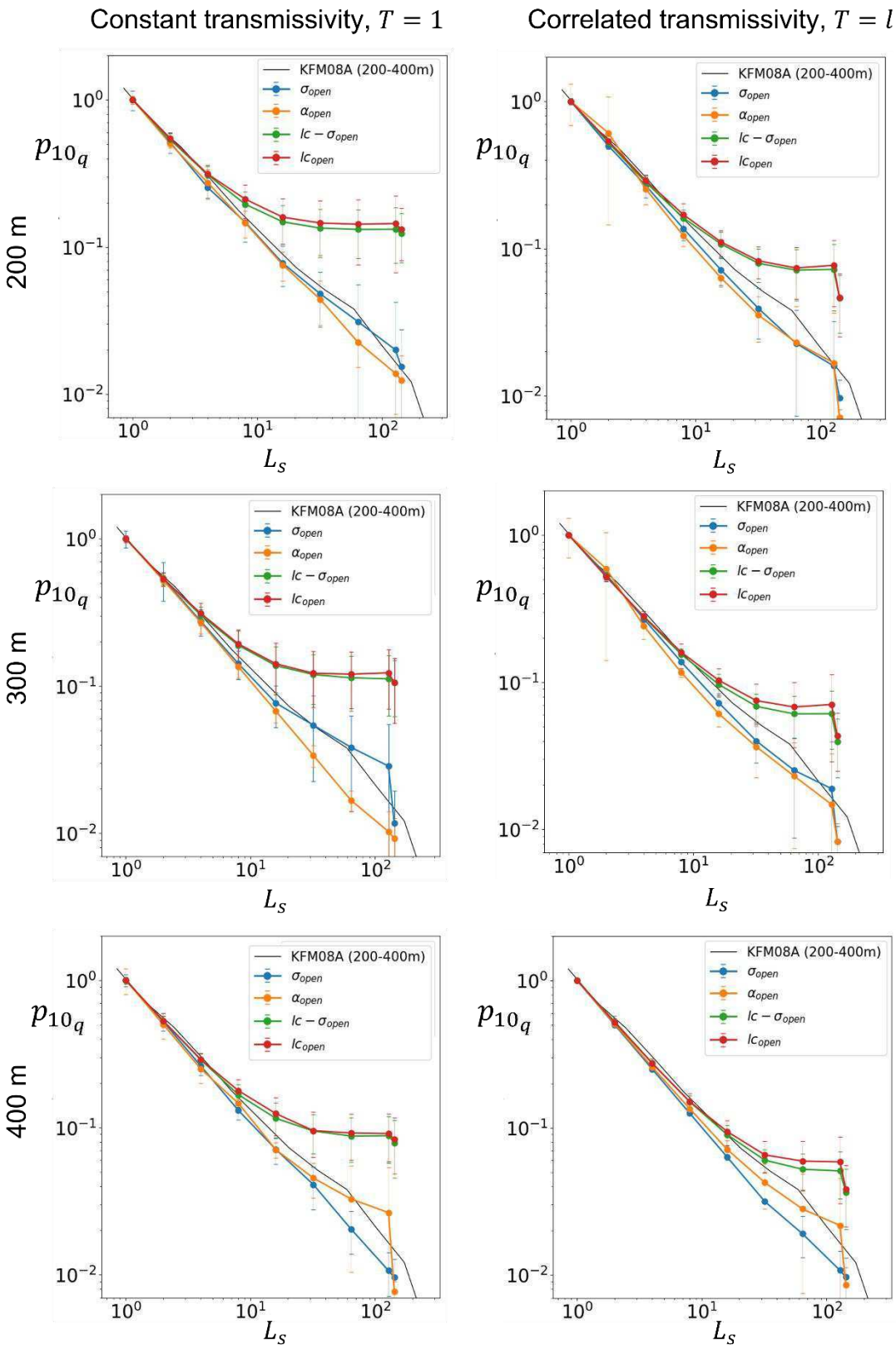


Figure 5-19 : Evolution de la moyenne arithmétique du paramètre de chenalisation p_{10_q} *mesurée dans les puits en fonction de l'échelle de mesure* L_s*. Modèle HydroDFN avec transmissivités constantes* ($T = 1$) *(colonne de gauche), et avec transmissivités corrélées à la taille* ($T = l$) *(colonne de droite). Modèles OpenDFN équivalents à un champs de contrainte pris à 200 mètres (ligne du haut), 300 mètres (ligne du milieu), et 400 mètres (ligne du bas).*

5.4. Conclusions

Ces analyses n'ont pas révélé de différences majeures entre les modèles sans corrélation avec σ_n et avec corrélation avec σ_n. Le modèle σ-open semble seulement être un peu plus souvent connecté que le modèle α-open, ce qui peut être dû au fait que σ-open favorise les fractures horizontales et donc connecte mieux le puits aux bords quasi-verticaux. Cependant, le groupe des fractures horizontales est également le moins dense des groupes, ce qui peut expliquer que l'effet soit si peu marqué. Plus de réalisations seraient nécessaires pour évaluer s'il s'agit d'un effet réel ou simplement un résultat du faible nombre de réalisations. Aucune différence n'est observée entre les modèles l_c-open et l_c-σ-open ni en termes de connectivité ni en termes d'analyses d'échelles, ce qui montre que ces mesures sont principalement dominées par la corrélation avec la taille de fracture.

La configuration de flux utilisée (reproduisant un pompage) avait pour but de pouvoir comparer les analyses d'échelles faites dans des modèles aux analyses d'échelles faites sur des données de flux réelles. Elle s'est donc focalisée sur des analyses de connectivité et de perméabilité dans une direction quasi-horizontale. Etant donné que le modèle σ-open change le poids des différents pôles d'orientation, il serait adapté, dans un futur travail, de compléter ces analyses en mesurant l'impact sur les flux dans d'autres directions, par exemple en mesurant l'anisotropie de la perméabilité.

Les analyses d'échelles comparées aux données du puits KFM08A révèlent que la corrélation avec σ_n ne peut à elle seule être utilisée pour distribuer la fraction ouverte, mais qu'elle doit nécessairement être couplée avec une corrélation à la taille. Le modèle de corrélation avec la taille $f_{op}(l)$ utilisé dans cette étude laisse les fractures complètement ouvertes au-delà d'une certaine taille $l_{c,o}$, mais d'autres modèles pourraient aussi être envisagés, afin de voir leurs effets sur l'échelle de connectivité.

Chapitre 6

Synthèse et perspectives

6.1. Synthèse

L'objectif de ce travail de thèse était d'obtenir une meilleure compréhension des processus de colmatage dans les fractures, afin d'évaluer leur distribution et leurs conséquences sur les propriétés hydrologiques des réseaux de fractures. Le contexte qui a motivé cette recherche est l'étude du futur site d'enfouissement profond de déchets nucléaires de Forsmark (Suède), qui sera construit dans une roche granitique fracturée, et dont les analyses de données indiquent qu'environ 80% des surfaces de fractures sont colmatées par des précipitations minérales. Même si finalement, ces travaux indiquent plutôt un contrôle d'ordre mécanique (c.-à-d. de la réactivation) sur la manière dont les surfaces colmatées préexistantes (ou à l'opposé, ouvertes) sont réparties sur ce site, le travail de thèse s'est aussi penché sur les mécanismes physico-chimiques à l'origine du colmatage dans un contexte plus large. En effet, une question critique pour évaluer l'évolution de la perméabilité des réseaux de fractures est de comprendre comment ces processus peuvent se distribuer et donc affecter sa connectivité.

6.1.1. Synthèse de la partie I

La partie I a présenté des travaux sur l'évaluation de la distribution du colmatage à partir de modèles numériques reproduisant des mécanismes de précipitation/dépôt aux parois des fractures. Le but ici était de proposer une modélisation adaptée à des échelles plus larges que celles considérées habituellement dans le plan d'une unique fracture, c'est-à-dire à l'échelle d'un véritable réseau de fractures. Un objectif était de mettre en avant des corrélations avec la taille de fracture, qui ont un fort contrôle sur la connectivité du réseau. Une problématique est que, sur des échelles larges, la modélisation de processus physiques dans les réseaux de fractures peut demander beaucoup de ressources numériques, à cause du caractère multi-échelle de ces réseaux qui entraine un nombre très élevé de fractures.

Ces travaux ont d'abord porté sur la simplification du calcul des flux à l'échelle topologique du réseau (c'est-à-dire négligeant le détail des flux sur les plans de fractures) (chapitre 2) via un calcul direct des flux à partir d'une structure de graphe. Le graphe est une structure faite de nœuds et de liens, qui peut être utilisée pour réduire un modèle de DFN en trois dimensions à sa structure topologique. Deux types de graphes ont été étudiés : un graphe des fractures et un graphe des intersections. Une définition précise des propriétés hydrauliques des liens de chaque type de graphe (c.-à-d. une conductance) a été proposée, pour rendre le graphe équivalent au DFN en termes de flux. La méthode a été testée sur des DFNs ayant un large nombre de fractures ($\sim 10^4 - 10^5$) et des propriétés géométriques variées. En comparant les résultats des graphes à des simulations complètes de DFNs entièrement maillés, nous avons montré que le graphe des fractures permet une estimation correcte de la perméabilité équivalente du DFN, mais estime mal certains flux locaux. Le graphe des intersections, quant à lui, peut non seulement estimer correctement la perméabilité et est plus fiable pour reproduire la structure complète des flux calculés par fracture. Malgré une perte de précision lorsque le DFN est très dense et connecté (perméabilité équivalente multipliée par un facteur 1.5-2), les performances des deux types de graphes en termes de temps de calcul dépassent largement celles du calcul complet (accélération ×100-200 pour le graphe des fractures et ×10-50 pour le graphe des intersections).

Ces travaux ont ensuite porté sur l'étude d'un modèle de précipitation, couplé aux flux, aux parois des fractures, et sur la possibilité d'utiliser le graphe pour appliquer ce modèle à de larges DFNs (chapitre 3). Un modèle simple de précipitation a été défini, dans lequel le taux de précipitation est contrôlé par la cinétique (vitesse) de la réaction de précipitation, mais aussi par la vitesse de transport du soluté, et par la vitesse de diffusion qui amène le soluté aux parois de la fracture. Dans une première analyse de ce modèle, nous avons défini un taux de précipitation moyen par fracture, et évalué sa dépendance à des paramètres de fractures, particulièrement la taille. Plusieurs scénarios ont été étudiés, d'abord en faisant varier le mécanisme limitant la réaction (cinétique de réaction, transport, ou diffusion), et ensuite en faisant varier spatialement la source des éléments chimiques (en entrée du système ou distribuée sur le plan de fracture). De ce modèle, aucune corrélation avec la taille de fracture n'a été observée dans des réseaux DFNs, où les ouvertures de fractures sont constantes. A l'inverse, des corrélations ont pu être mises en évidence dans des réseaux DFNs, où les ouvertures sont corrélées à la taille de fracture.

Ensuite, le modèle de précipitation a été intégré numériquement à la structure de graphe présentée ci-avant. Le modèle permet d'inclure un processus rétroactif entre les changements géométriques dus à la précipitation et les flux. Il intègre également le transport du soluté d'une fracture à l'autre. Seuls quelques résultats préliminaires ont pu être présentés dans ce

travail de thèse. De prochaines analyses devraient évaluer comment les corrélations avec la taille de fracture, mises en avant précédemment, évoluent dans ce modèle plus complexe.

6.1.2. Synthèse de la partie II

La partie II a présenté des travaux sur l'analyse de la distribution spatiale du colmatage à partir de données du site de Forsmark. La base de données analysée contient 41 puits carottés pour une longueur totale de puits d'environ 18 km. La position et le statut ouvert ou colmaté des fractures sont systématiquement enregistrés en même temps qu'un ensemble d'informations (minéralogie, orientation, etc.).

Dans un premier temps (chapitre 4), les analyses ont porté sur la caractérisation de la fraction de surface ouverte (complémentaire à la fraction colmatée) relativement à la surface totale de fracture. Un premier objectif était de proposer une distribution de cette fraction ouverte en fonction de paramètres de fractures mesurables dans le puits : orientation, profondeur, densité. La catégorisation du site en zones de déformations principales et domaines de fracturation a aussi été utilisée pour analyser spatialement cette distribution. Un second objectif était de comprendre les mécanismes à l'origine de cette distribution. La fraction ouverte a donc été aussi évaluée en fonction du champ de contrainte éloigné actuel, et en fonction des minéraux de remplissage des fractures. L'ensemble de ces analyses a montré un contrôle sur la fraction ouverte d'ordre mécanique plutôt que géochimique à Forsmark. Une très forte corrélation avec la contrainte normale au plan de fracture, σ_n, a été identifiée. Cette corrélation explique notamment les corrélations mesurées avec les orientations (pôle horizontal plus ouvert), et la décroissance de la fraction ouverte avec la profondeur. Etant donné ce contrôle d'ordre mécanique, qui laisse supposer un effet de la réactivation des fractures, nous avons également analysé un possible effet de la pression des fluides présents dans les fractures sur cette réactivation. La pression de fluide diminue la contrainte normale effective appliquée au plan de fracture et pourrait donc expliquer la réactivation des fractures, même celles qui se trouvent en dessous du seuil de rupture (c'est-à-dire la majorité des fractures). Nous avons montré que l'hypothèse d'une pression fluide qui varie de la pression hydrostatique (dans les zones bien connectées du réseau) à la pression lithostatique (possible dans les zones mal connectées) peut expliquer la distribution de la fraction ouverte.

Dans un second temps (chapitre 5), une étude de l'impact de différentes distributions du colmatage sur les propriétés hydrologiques du réseau de fractures a été proposée. Dans cette étude, la fraction ouverte a été distribuée dans des réseaux DFNs selon la corrélation avec σ_n identifiée dans les carottes de puits de Forsmark. D'autres modèles de distribution ont aussi été simulés, un modèle sans corrélation et un modèle corrélé à la taille (laissant les grandes fractures ouvertes). Dans tous ces modèles, chaque fracture était soit complètement

ouverte, soit complétement colmatée (et donc retirée du DFN). La simulation de flux a consisté en une configuration de pompage dans un puits, dans le but d'avoir des analyses comparables à des données réelles de flux enregistrées le long des forages. Les analyses ont repris une méthodologie déjà développée par le groupe de travail du doctorant qui consiste à analyser l'évolution de la perméabilité et de la chenalisation des flux avec l'échelle de mesure dans le puits. Nous avons observé que le modèle corrélé à σ_n n'assure pas une connectivité du réseau assez élevée pour correspondre aux données réelles de flux (de manière similaire au modèle sans aucune corrélation). Un autre modèle de distribution dépendant à la fois de σ_n et de la taille de fracture a été proposé. Celui-ci permet une meilleure connectivité et explique mieux l'évolution de la perméabilité avec l'échelle mesurée dans les forages. Cependant, la corrélation avec σ_n, introduisant essentiellement une corrélation avec les orientations, n'a pas montré de différence significative avec le modèle uniquement corrélé à la taille pour ce type d'analyse. De prochaines analyses devraient plutôt porter sur l'impact de ce modèle sur l'anisotropie de la perméabilité. Ces résultats montrent donc qu'une corrélation avec la taille de fracture est plus importante qu'une corrélation avec σ_n pour expliquer l'organisation des flux mesurée dans les puits de Forsmark.

6.2. Perspectives

6.2.1. Perspectives de la partie I

L'utilisation du graphe pour simplifier les simulations DFNs a montré des résultats prometteurs. Cependant, nous avons vu qu'à cause de son architecture, le graphe pouvait engendrer certains biais, qui peuvent être critiques selon le type de simulation que l'on souhaite faire. Une architecture de type graphe des fractures (reliant les centres de fractures) ne permet pas d'estimer des flux dans certaines parties du réseau qui sont reliés à une unique grande fracture, ce qui est critique si l'on souhaite modéliser des phénomènes physiques dépendant des flux, comme la plupart des processus réactifs (p. ex. le colmatage). Une architecture de type graphe des intersections, quant à elle, reproduit bien la structure complète des flux en reliant toutes les intersections d'une fracture deux à deux, mais présente une forte redondance de liens sur les plans de fractures ayant beaucoup d'intersections, le rendant finalement un peu lourd en termes de ressources numériques. A la fin du chapitre 2, nous avons introduit un algorithme permettant de simplifier le graphe des intersections, en évitant que deux liens ne se croisent. De futures recherches pourraient se concentrer sur l'amélioration de ce type d'algorithme, ou sur la définition d'une architecture hybride entre le graphe des fractures et le graphe des intersections.

Ensuite, le graphe a principalement été testé pour des calculs de flux stationnaires, mais de prochaines applications pourraient porter sur des simulations de transport, comme dans l'étude de Karra et al. (2018), ou des simulation de flux non-stationnaires comme dans l'étude de Srinivasan et al. (2020).

Enfin, notre étude du colmatage par un modèle de transport réactif a constitué une étude très générique, qui a montré que certaines fractures peuvent se colmater plus vite que d'autres selon leur tailles et selon les paramètres de la réaction (localisation des sources, mécanisme limitant ; voir chapitre 3). Il serait intéressant dans de futurs travaux d'étudier des scénarios plus ciblés afin de prédire le devenir des réseaux de fractures autour du futur site d'enfouissement de Forsmark. En effet, même si aujourd'hui les potentiels de réactivité chimique sont très faibles à Forsmark, des études ont montré qu'ils pourraient être perturbés par la mise en place du futur site de stockage et donc entrainer du colmatage (Serrano et al., 2008).

6.2.2. Perspectives de la partie II

La partie II a soulevé l'hypothèse que la distribution des surfaces préexistantes ouvertes à Forsmark était contrôlée par un processus de réactivation des fractures. Dans cette hypothèse, les données suggèrent que cette réactivation a opéré même à de fortes profondeurs (Moon et al., 2020), et donc à forte contrainte de confinement. Le rôle de la pression fluide dans le processus de réactivation a donc aussi été envisagé (chapitre 4). Une piste de recherche serait de continuer ce travail, en approfondissant l'analyse des données et en étudiant des pistes de modélisation de ce phénomène. Ce développement pourrait s'inscrire dans un contexte plus large – scénarios de périodes glaciaires - puisque la pression fluide est susceptible d'augmenter en front de calotte glaciaire (Lemieux et al., 2008; Lönnqvist & Hökmark, 2013), ce qui pourrait réactiver certaines fractures et donc être critique pour le stockage à Forsmark sur le long terme.

Les analyses présentées au chapitre 4 semblent indiquer un contrôle des différents minéraux de remplissage sur la réactivation des fractures. Une étude sur les paramètres mécaniques de ces minéraux (cohésion, friction) manque à ces analyses. Elle permettrait notamment de comprendre si les différentes corrélations entre les minéraux et la fraction ouverte sont principalement d'ordre mécanique ou bien liées à d'autres processus (chronologie, distribution spatiale des minéralisations …).

Enfin, les analyses, étant basées sur les données de puits, ne permettent pas une mise en évidence directe de corrélations avec la taille de fracture. Une piste présentée dans la partie I a été d'utiliser des modèles numériques de transport réactif pour mettre en avant de telles

corrélations. Cependant, à Forsmark les processus de contrôle de la fraction ouverte sont plutôt d'ordre mécanique. Une piste consisterait à explorer si des corrélations avec la taille peuvent apparaitre dans le processus de réactivation d'un réseau de fractures. Par exemple, une hypothèse serait de dire que les interactions mécaniques entre fractures peuvent inhiber la réactivation de petites fractures qui se trouvent dans la zone d'ombre des plus grandes (zone de réduction de contraintes) (Ackermann & Schlische, 1997; Darcel et al., 2003a).

Références

Aben, F., Doan, M. L., Gratier, J. P., & Renard, F. (2017). Experimental postseismic recovery of fractured rocks assisted by calcite sealing. *Geophysical Research Letters, 44*(14), 7228-7238. doi:https://doi.org/10.1002/2017GL073965

Ackermann, R. V., & Schlische, R. W. (1997). Anticlustering of small normal faults around larger faults. *Geology, 25*(12), 1127-1130. doi:https://doi.org/10.1130/0091-7613(1997)025<1127:AOSNFA>2.3.CO;2

Ahokas, H., Rouhiainen, P., Komulainen, J., & Pöllänen, J. (2014). *Analysis of hydrogeological flow responses in Olkiluoto*. Retrieved from Helsinki

Albert, R., & Barabási, A.-L. (2002). Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics, 74*(1), 47. doi:https://doi.org/10.1103/RevModPhys.74.47

Alghalandis, Y. F., Xu, C., & Dowd, P. A. (2011). *A general framework for fracture intersection analysis: algorithms and practical applications.* Paper presented at the Australian Geothermal Energy Conference, Melbourne.

Ameli, P., Elkhoury, J. E., Morris, J. P., & Detwiler, R. L. (2014). Fracture permeability alteration due to chemical and mechanical processes: a coupled high-resolution model. *Rock mechanics and rock engineering, 47*(5), 1563-1573. doi:https://doi.org/10.1007/s00603-014-0575-z

Andresen, C. A., Hansen, A., Le Goc, R., Davy, P., & Hope, S. M. (2013). Topology of fracture networks. *Frontiers in Physics, 1*, 7. doi:https://doi.org/10.3389/fphy.2013.00007

Anna, P. d., Jimenez-Martinez, J., Tabuteau, H., Turuban, R., Le Borgne, T., Derrien, M., & Méheust, Y. (2014). Mixing and reaction kinetics in porous media: An experimental pore scale quantification. *Environmental Science & Technology, 48*(1), 508-516. doi:https://doi.org/10.1021/es403105b

Atkinson, B. K. (2015). *Fracture mechanics of rock*: Elsevier.

Ayawei, N., Ebelegi, A. N., & Wankasi, D. (2017). Modelling and interpretation of adsorption isotherms. *Journal of chemistry, 2017*. doi:https://doi.org/10.1155/2017/3039817

Bächler, D., & Kohl, T. (2005). Coupled thermal–hydraulic–chemical modelling of enhanced geothermal systems. *Geophysical Journal International, 161*(2), 533-548. doi:https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02497.x

Balberg, I. (1985). Universal percolation-threshold limits in the continuum. *Physical review B, 31*(6), 4053. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.4053

Balberg, I., Anderson, C., Alexander, S., & Wagner, N. (1984). Excluded volume and its relation to the onset of percolation. *Physical review B, 30*(7), 3933. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.3933

Bandis, S., Lumsden, A., & Barton, N. (1983). *Fundamentals of rock joint deformation.* Paper presented at the International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts.

Bandis, S., Makurat, A., & Vik, G. (1986). Predicted and measured hydraulic conductivity of rock joints. *Publikasjon-Norges Geotekniske Institutt*(164), 1-11.

Barabási, A.-L., Albert, R., & Jeong, H. (2000). Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world-wide web. *Physica A: statistical mechanics and its applications, 281*(1-4), 69-77. doi:https://doi.org/10.1016/S0378-4371(00)00018-2

Barker, J. A. (2018). Intersection statistics and percolation criteria for fractures of mixed shapes and sizes. *Computers & Geosciences, 112*, 47-53. doi:https://doi.org/10.1016/j.cageo.2017.12.001

Barton, C. A., Zoback, M. D., & Moos, D. (1995). Fluid flow along potentially active faults in crystalline rock. *Geology, 23*(8), 683-686. doi:https://doi.org/10.1130/0091-7613(1995)023<0683:FFAPAF>2.3.CO;2

Barton, N., Bandis, S., & Bakhtar, K. (1985). *Strength, deformation and conductivity coupling of rock joints.* Paper presented at the International journal of rock mechanics and mining sciences & geomechanics abstracts.

Baveye, P., Vandevivere, P., Hoyle, B. L., DeLeo, P. C., & de Lozada, D. S. (1998). Environmental impact and mechanisms of the biological clogging of saturated soils and aquifer materials. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 28*(2), 123-191. doi:https://doi.org/10.1080/10643389891254197

Bear, J., Tsang, C.-F., & De Marsily, G. (2012). *Flow and contaminant transport in fractured rock*: Academic Press.

Bekri, S., Thovert, J.-F., & Adler, P. (1997). Dissolution and deposition in fractures. *Engineering Geology, 48*(3-4), 283-308. doi:https://doi.org/10.1016/S0013-7952(97)00044-6

Belayneh, M. W., Matthai, S. K., Blunt, M. J., & Rogers, S. F. (2009). Comparison of deterministic with stochastic fracture models in water-flooding numerical simulations. *AAPG bulletin, 93*(11), 1633-1648. doi:https://doi.org/10.1306/07220909031

Belfield, W., & Sovich, J. (1995). Fracture statistics from horizontal wellbores. *Journal of Canadian Petroleum Technology, 34*(06). doi:https://doi.org/10.2118/95-06-04

Ben-Zion, Y., & Sammis, C. G. (2003). Characterization of fault zones. *Pure and applied geophysics, 160*(3), 677-715. doi:https://doi.org/10.1007/PL00012554

Berkowitz, B. (1995). Analysis of fracture network connectivity using percolation theory. *Mathematical Geology, 27*(4), 467-483. doi:https://doi.org/10.1007/BF02084422

Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Advances in water resources, 25*(8-12), 861-884. doi:https://doi.org/10.1016/S0309-1708(02)00042-8

Berrone, S., Hyman, J., & Pieraccini, S. (2020). Multilevel Monte Carlo predictions of First passage times in three-dimensional discrete fracture networks: A graph-based approach. *Water Resources Research, 56*(6), e2019WR026493. doi:https://doi.org/10.1029/2019WR026493

Blundell, D., Karnkowski, P., Alderton, D., Oszczepalski, S., & Kucha, H. (2003). Copper mineralization of the Polish Kupferschiefer: a proposed basement fault-fracture system of fluid flow. *Economic Geology, 98*(7), 1487-1495. doi:https://doi.org/10.2113/gsecongeo.98.7.1487

Bonneau, F., Caumon, G., & Renard, P. (2016). Impact of a stochastic sequential initiation of fractures on the spatial correlations and connectivity of discrete fracture networks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 121*(8), 5641-5658. doi:https://doi.org/10.1002/2015JB012451

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*(3), 347-383. doi:https://doi.org/10.1029/1999RG000074

Borghi, A., Renard, P., & Cornaton, F. (2016). Can one identify karst conduit networks geometry and properties from hydraulic and tracer test data? *Advances in Water Resources, 90*, 99-115. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2016.02.009

Bouchot, V., Ledru, P., Lerouge, C., Lescuyer, J.-L., & Milesi, J.-P. (2005). 5: Late Variscan mineralizing systems related to orogenic processes: The French Massif Central. *Ore Geology Reviews, 27*(1-4), 169-197. doi:https://doi.org/10.1016/j.oregeorev.2005.07.017

Bour, O., & Davy, P. (1997). Connectivity of random fault networks following a power law fault length distribution. *Water Resources Research, 33*(7), 1567-1583. doi: https://doi.org/10.1029/96WR00433

Bour, O., & Davy, P. (1998). On the connectivity of three-dimensional fault networks. *Water Resources Research, 34*(10), 2611-2622. doi:https://doi.org/10.1029/98WR01861

Bour, O., & Davy, P. (1999). Clustering and size distributions of fault patterns: Theory and measurements. *Geophysical Research Letters, 26*(13), 2001-2004. doi:https://doi.org/10.1029/1999GL900419

Bour, O., Davy, P., Darcel, C., & Odling, N. (2002). A statistical scaling model for fracture network geometry, with validation on a multiscale mapping of a joint network (Hornelen Basin, Norway). *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 107*(B6), ETG 4-1-ETG 4-12. doi:https://doi.org/10.1029/2001JB000176

Bourg, A., Oustriere, P., & Sureau, J. (1985). Experimental investigation of clogging of fissures and pores in granite. *Mineralogical Magazine, 49*(351), 223-231. doi:https://doi.org/10.1180/minmag.1985.049.351.09

Brantley, S. L., Evans, B., Hickman, S. H., & Crerar, D. A. (1990). Healing of microcracks in quartz: Implications for fluid flow. *Geology, 18*(2), 136-139. doi:https://doi.org/10.1130/0091-7613(1990)018<0136:HOMIQI>2.3.CO;2

Brantley, S. L., Kubicki, J. D., & White, A. F. (2008). *Kinetics of water-rock interaction* (Vol. 168): Springer.

Brown, S. R. (1987). Fluid flow through rock joints: the effect of surface roughness. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 92*(B2), 1337-1347. doi:https://doi.org/10.1029/JB092iB02p01337

Bruyelle, J., & Lange, A. (2009). *An extended evolution strategy for the characterization of fracture conductivities from well tests.* Paper presented at the Proceedings of the 11th Annual conference on Genetic and evolutionary computation.

Burté, L. (2018). *Etude des risques de colmatage et optimisation des procédés de traitement des doublets géothermiques superficiels.* Rennes 1,

Butler Jr, J. J., & Healey, J. M. (1998). Relationship between pumping-test and slug-test parameters: Scale effect or artifact? *Groundwater, 36*(2), 305-312. doi: https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1998.tb01096.x

Byerlee, J. (1978). Friction of rocks. In *Rock friction and earthquake prediction* (pp. 615-626): Springer.

Cacas, M. C., Ledoux, E., Marsily, G. d., Barbeau, A., Calmels, P., Gaillard, B., & Magritta, R. (1990a). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation. 2. The transport model. *Water Resources Research, 26*(3), 491-500. doi:https://doi.org/10.1029/WR026i003p00491

Cacas, M. C., Ledoux, E., Marsily, G. d., Tillie, B., Barbeau, A., Durand, E., Feuga, B., & Peaudecerf, P. (1990b). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation. 1. The flow model. *Water Resources Research, 26*(3), 479-489. doi:https://doi.org/10.1029/WR026i003p00479

Caine, J. S., & Forster, C. B. (1999). Fault zone architecture and fluid flow: Insights from field data and numerical modeling. *Geophysical Monograph-American Geophysical Union, 113*, 101-128.

Chan, T., & Stanchell, F. W. (2005). Subsurface hydro-mechanical (HM) impacts of glaciation: Sensitivity to transient analysis, HM coupling, fracture zone connectivity and model dimensionality. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 42*(5), 828-849. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2005.04.001

Charles, R. (1958). Dynamic fatigue of glass. *Journal of Applied Physics, 29*(12), 1657-1662. doi:https://doi.org/10.1063/1.1723019

Chaudhuri, A., Rajaram, H., & Viswanathan, H. (2008). Alteration of fractures by precipitation and dissolution in gradient reaction environments: Computational results and stochastic analysis. *Water Resources Research, 44*(10). doi:https://doi.org/10.1029/2008WR006982

Chaudhuri, A., Rajaram, H., & Viswanathan, H. (2012). Fracture alteration by precipitation resulting from thermal gradients: Upscaled mean aperture-effective transmissivity relationship. *Water Resources Research, 48*(1). doi:https://doi.org/10.1029/2011WR010983

Chi, G., & Xue, C. (2011). An overview of hydrodynamic studies of mineralization. *Geoscience frontiers, 2*(3), 423-438. doi:https://doi.org/10.1016/j.gsf.2011.05.001

Chrysikopoulos, C. V., & Abdel-Salam, A. (1997). Modeling colloid transport and deposition in saturated fractures. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 121*(2-3), 189-202. doi:https://doi.org/10.1016/S0927-7757(96)03979-9

Claesson, L., Munier, R., Sandstroem, B., Drake, H., & Tullborg, E.-L. (2011). *Assessment of fractures classified as non-mineralised in the Sicada database*. Retrieved from Stockholm

Claesson, L., Skelton, A., Graham, C., Dietl, C., Mörth, M., Torssander, P., & Kockum, I. (2004). Hydrogeochemical changes before and after a major earthquake. *Geology, 32*(8), 641-644. doi:https://doi.org/10.1130/G20542.1

Claesson, L., Skelton, A., Graham, C., & Mörth, C. M. (2007). The timescale and mechanisms of fault sealing and water-rock interaction after an earthquake. *Geofluids, 7*(4), 427-440. doi:https://doi.org/10.1111/j.1468-8123.2007.00197.x

Clauser, C. (1992). Permeability of crystalline rocks. *Eos, Transactions American Geophysical Union, 73*(21), 233-238. doi:https://doi.org/10.1029/91EO00190

Cowie, P. A., Sornette, D., & Vanneste, C. (1995). Multifractal scaling properties of a growing fault population. *Geophysical Journal International, 122*(2), 457-469. doi:https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.1995.tb07007.x

Cui, G., Su, X., Liu, Y., & Zheng, S. (2021). Effect of riverbed sediment flushing and clogging on river-water infiltration rate: a case study in the Second Songhua River, Northeast China. *Hydrogeology Journal, 29*(2), 551-565. doi:https://doi.org/10.1007/s10040-020-02218-7

Curewitz, D., & Karson, J. A. (1997). Structural settings of hydrothermal outflow: Fracture permeability maintained by fault propagation and interaction. *Journal of Volcanology and Geothermal Research, 79*(3-4), 149-168. doi:https://doi.org/10.1016/S0377-0273(97)00027-9

Dana, S., Srinivasan, S., Karra, S., Makedonska, N., Hyman, J. D., O'Malley, D., Viswanathan, H., & Srinivasan, G. (2020). Towards real-time forecasting of natural gas production by harnessing graph theory for stochastic discrete fracture networks. *Journal of Petroleum Science and Engineering, 195*, 107791. doi:https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.107791

Darcel, C., Bour, O., & Davy, P. (2003a). Cross-correlation between length and position in real fracture networks. *Geophysical Research Letters, 30*(12). doi:https://doi.org/10.1029/2003GL017174

Darcel, C., Bour, O., & Davy, P. (2003b). Stereological analysis of fractal fracture networks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 108*(B9). doi:https://doi.org/10.1029/2002JB002091

Darcel, C., Bour, O., Davy, P., & De Dreuzy, J. (2003c). Connectivity properties of two-dimensional fracture networks with stochastic fractal correlation. *Water Resources Research, 39*(10). doi:https://doi.org/10.1029/2002WR001628

Darcel, C., Davy, P., & Le Goc, R. (in prep.). *Alternative Hydro DFN modeling at the Forsmark site - phase I* (016R-017). Retrieved from Stockholm

Darcel, C., Davy, P., Le Goc, R., de Dreuzy, J., & Bour, O. (2009). *Statistical methodology for discrete fracture model-including fracture size, orientation uncertainty together with intensity uncertainty and variability.* Retrieved from Stockholm

Darcel, C., Le Goc, R., & Davy, P. (2015). *ONKALO POSE Experiment: Effective Elastic Properties of Fractured Rocks*. Helsinki: Posiva Oy.

Darcel, C., Le Goc, R., Davy, P., & Olofsson, I. (2014). *Including variability into a quantitative DFN modeling approach–application to SKB sites.* Paper presented at the International Conference on Discrete Fracture Network Engineering.

Davy, P. (1993). On the frequency-length distribution of the San Andreas fault system. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 98*(B7), 12141-12151. doi:https://doi.org/10.1029/93JB00372

Davy, P., Bour, O., De Dreuzy, J.-R., & Darcel, C. (2006a). Flow in multiscale fractal fracture networks. *Geological Society, London, Special Publications, 261*(1), 31-45. doi:https://doi.org/10.1144/GSL.SP.2006.261.01.03

Davy, P., Darcel, C., Bour, O., Munier, R., & de Dreuzy, J.-R. (2006b). A note on the angular correction applied to fracture intensity profiles along drill core. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 111*(B11). doi:https://doi.org/10.1029/2005JB004121

Davy, P., Darcel, C., Le Goc, R., & Mas Ivars, D. (2018a). Elastic properties of fractured rock masses with frictional properties and power law fracture size distributions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 123*(8), 6521-6539. doi:https://doi.org/10.1029/2017JB015329

Davy, P., Darcel, C., Le Goc, R., Munier, R., Selroos, J.-O., & Mas Ivars, D. (2018b). *DFN, why, how and what for, concepts, theories and issues.* Paper presented at the 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference.

Davy, P., Hansen, A., Bonnet, E., & Zhang, S. Z. (1995). Localization and fault growth in layered brittle-ductile systems: Implications for deformations of the continental lithosphere. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 100*(B4), 6281-6294. doi:https://doi.org/10.1029/94JB02983

Davy, P., Le Goc, R., & Darcel, C. (2013). A model of fracture nucleation, growth and arrest, and consequences for fracture density and scaling. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 118*(4), 1393-1407. doi:https://doi.org/10.1002/jgrb.50120

Davy, P., Le Goc, R., Darcel, C., Bour, O., De Dreuzy, J.-R., & Munier, R. (2010). A likely universal model of fracture scaling and its consequence for crustal hydromechanics. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 115*(B10). doi:https://doi.org/10.1029/2009JB007043

Davy, P., Sornette, A., & Sornette, D. (1990). Some consequences of a proposed fractal nature of continental faulting. *Nature, 348*(6296), 56-58. doi:https://doi.org/10.1038/348056a0

Davy, P., Sornette, A., & Sornette, D. (1992). Experimental discovery of scaling laws relating fractal dimensions and the length distribution exponent of fault systems. *Geophysical Research Letters, 19*(4), 361-363. doi:https://doi.org/10.1029/91GL02711

De Anna, P., Dentz, M., Tartakovsky, A., & Le Borgne, T. (2014). The filamentary structure of mixing fronts and its control on reaction kinetics in porous media flows. *Geophysical Research Letters, 41*(13), 4586-4593. doi:https://doi.org/10.1002/2014GL060068

De Dreuzy, J.-R., Davy, P., & Bour, O. (2000). Percolation parameter and percolation-threshold estimates for three-dimensional random ellipses with widely scattered distributions of eccentricity and size. *Physical review E, 62*(5), 5948. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.5948

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*(8), 2065-2078. doi:https://doi.org/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*(8), 2079-2095. doi:https://doi.org/10.1029/2001WR900010

De Dreuzy, J. R., Davy, P., & Bour, O. (2002). Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following power law distributions of length and aperture. *Water Resources Research, 38*(12), 12-11-12-19. doi:https://doi.org/10.1029/2001WR001009

De Dreuzy, J. R., Méheust, Y., & Pichot, G. (2012). Influence of fracture scale heterogeneity on the flow properties of three-dimensional discrete fracture networks (DFN). *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 117*(B11). doi:https://doi.org/10.1029/2012JB009461

De Marsily, G. (1986). *Quantitative hydrogeology*. Retrieved from Paris

De Marsily, G., Delhomme, J., Coudrain-Ribstein, A., & Lavenue, A. (2000). Four decades of inverse problems in hydrogeology. *SPECIAL PAPERS-GEOLOGICAL SOCIETY OF AMERICA*, 1-18.

De Simone, S., & Krevor, S. (2021). A tool for first order estimates and optimisation of dynamic storage resource capacity in saline aquifers. *International Journal of Greenhouse Gas Control, 106*, 103258. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2021.103258

Deng, H., Molins, S., Trebotich, D., Steefel, C., & DePaolo, D. (2018a). Pore-scale numerical investigation of the impacts of surface roughness: Upscaling of reaction rates in rough fractures. *Geochimica et Cosmochimica Acta, 239*, 374-389. doi:https://doi.org/10.1016/j.gca.2018.08.005

Deng, H., Steefel, C., Molins, S., & DePaolo, D. (2018b). Fracture evolution in multimineral systems: The role of mineral composition, flow rate, and fracture aperture heterogeneity. *ACS Earth and Space Chemistry, 2*(2), 112-124. doi:https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.7b00130

Dentz, M., Le Borgne, T., Englert, A., & Bijeljic, B. (2011). Mixing, spreading and reaction in heterogeneous media: A brief review. *Journal of contaminant hydrology, 120*, 1-17. doi:https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2010.05.002

Dershowitz, W., & Einstein, H. (1988). Characterizing rock joint geometry with joint system models. *Rock mechanics and rock engineering, 21*(1), 21-51. doi:https://doi.org/10.1007/BF01019674

Dershowitz, W., & Fidelibus, C. (1999). Derivation of equivalent pipe network analogues for three-dimensional discrete fracture networks by the boundary element method. *Water Resources Research, 35*(9), 2685-2691. doi:https://doi.org/10.1029/1999WR900118

Dershowitz, W., Hermanson, J., Follin, S., & Mauldon, M. (2000). *Fracture intensity measures in 1-D, 2-D, and 3-D at Äspö, Sweden.* Paper presented at the 4th North American Rock Mechanics Symposium.

Dershowitz, W. S., & Herda, H. H. (1992). *Interpretation of fracture spacing and intensity.* Paper presented at the The 33th us symposium on rock mechanics (USRMS).

Deschamps, T., Benzaazoua, M., Bussière, B., Belem, T., & Mbonimpa, M. (2006). Mécanismes de rétention des métaux lourds en phase solide: cas de la stabilisation des sols contaminés et des déchets industriels. *VertigO-la revue électronique en sciences de l'environnement, 7*(2). doi:https://doi.org/10.4000/vertigo.2171

Detwiler, R. L. (2008). Experimental observations of deformation caused by mineral dissolution in variable-aperture fractures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 113*(B8). doi:https://doi.org/10.1029/2008JB005697

Detwiler, R. L., Glass, R. J., & Bourcier, W. L. (2003). Experimental observations of fracture dissolution: The role of Peclet number on evolving aperture variability. *Geophysical Research Letters, 30*(12). doi:https://doi.org/10.1029/2003GL017396

Detwiler, R. L., & Rajaram, H. (2007). Predicting dissolution patterns in variable aperture fractures: Evaluation of an enhanced depth-averaged computational model. *Water Resources Research, 43*(4). doi:https://doi.org/10.1029/2006WR005147

Dezayes, C., Genter, A., & Valley, B. (2010). Structure of the low permeable naturally fractured geothermal reservoir at Soultz. *Comptes Rendus Geoscience, 342*(7-8), 517-530. doi:https://doi.org/10.1016/j.crte.2009.10.002

Dijk, P., & Berkowitz, B. (1998). Precipitation and dissolution of reactive solutes in fractures. *Water Resources Research, 34*(3), 457-470. doi:https://doi.org/10.1029/97WR03238

Dijkstra, E. W. (1959). A note on two problems in connexion with graphs. *Numerische mathematik, 1*(1), 269-271.

Dobson, P. F., Kneafsey, T. J., Sonnenthal, E. L., Spycher, N., & Apps, J. A. (2003). Experimental and numerical simulation of dissolution and precipitation: implications for fracture sealing at Yucca Mountain, Nevada. *Journal of Contaminant Hydrology, 62*, 459-476. doi:https://doi.org/10.1016/S0169-7722(02)00155-9

Doe, T., McLaren, R., & Dershowitz, W. (2014). *Discrete fracture network simulations of enhanced geothermal systems.* Paper presented at the Proceedings of 39th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford.

Doolaeghe, D., Davy, P., Hyman, J. D., & Darcel, C. (2020). Graph-based flow modeling approach adapted to multiscale discrete-fracture-network models. *Physical review E, 102*(5), 053312. doi:10.1103/PhysRevE.102.053312

Doolaeghe, D., Davy, P., Le Goc, R., Darcel, C., & Selroos, J. (2019). *Validation of hydraulic models in fractured rocks. Application to the Forsmark site (Sweden).* Paper presented at the AGU Fall Meeting Abstracts.

Drake, H., Tullborg, E.-L., & Page, L. (2009). Distinguished multiple events of fracture mineralisation related to far-field orogenic effects in Paleoproterozoic crystalline rocks, Simpevarp area, SE Sweden. *Lithos, 110*(1-4), 37-49. doi:https://doi.org/10.1016/j.lithos.2008.12.003

Durham, W. B., Bourcier, W. L., & Burton, E. A. (2001). Direct observation of reactive flow in a single fracture. *Water Resources Research, 37*(1), 1-12. doi:https://doi.org/10.1029/2000WR900228

Dverstorp, B., & Andersson, J. (1989). Application of the discrete fracture network concept with field data: Possibilities of model calibration and validation. *Water Resources Research, 25*(3), 540-550. doi:https://doi.org/10.1029/WR025i003p00540

Elkhoury, J. E., Ameli, P., & Detwiler, R. L. (2013). Dissolution and deformation in fractured carbonates caused by flow of CO2-rich brine under reservoir conditions. *International Journal of Greenhouse Gas Control, 16*, S203-S215. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2013.02.023

Elkhoury, J. E., Detwiler, R. L., & Ameli, P. (2015). Can a fractured caprock self-heal? *Earth and Planetary Science Letters, 417*, 99-106. doi:https://doi.org/10.1016/j.epsl.2015.02.010

Ellis, B. R., Fitts, J. P., Bromhal, G. S., McIntyre, D. L., Tappero, R., & Peters, C. A. (2013). Dissolution-driven permeability reduction of a fractured carbonate caprock. *Environmental engineering science, 30*(4), 187-193. doi:https://doi.org/10.1089/ees.2012.0337

Ellis, B. R., & Peters, C. A. (2016). 3D Mapping of calcite and a demonstration of its relevance to permeability evolution in reactive fractures. *Advances in water resources, 95*, 246-253. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2015.07.023

Ferrill, D. A., & Morris, A. P. (2003). Dilational normal faults. *Journal of Structural Geology, 25*(2), 183-196. doi:https://doi.org/10.1016/S0191-8141(02)00029-9

Figueroa, R., Viguier, B., Taucare, M., Yáñez, G., Arancibia, G., Sanhueza, J., & Daniele, L. (2021). Deciphering groundwater flow-paths in fault-controlled semiarid mountain front zones (Central Chile). *Science of the Total Environment*, 145456. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.145456

Fisher, R. A. (1953). Dispersion on a sphere. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 217*(1130), 295-305. doi:https://doi.org/10.1098/rspa.1953.0064

Follin, S., Hartley, L., Rhén, I., Jackson, P., Joyce, S., Roberts, D., & Swift, B. (2014). A methodology to constrain the parameters of a hydrogeological discrete fracture network model for sparsely fractured crystalline rock, exemplified by data from the proposed high-level nuclear waste repository site at Forsmark, Sweden. *Hydrogeology Journal, 22*(2), 313-331. doi:https://doi.org/10.1007/s10040-013-1080-2

Follin, S., Leven, J., Hartley, L., Jackson, P., Joyce, S., Roberts, D., & Swift, B. (2007). *Hydrogeological characterisation and modelling of deformation zones and fracture domains, Forsmark modelling stage 2.2* (R-07-48). Retrieved from Stockholm, Sweden

Follin, S., Ludvigson, J.-E., & Levén, J. (2011). *A comparison between standard well test evaluation methods used in SKB's site investigations and the generalised radial flow concept*. Retrieved from Stockholm, Sweden

Fourno, A., Ngo, T.-D., Noetinger, B., & La Borderie, C. (2019). FraC: A new conforming mesh method for discrete fracture networks. *Journal of Computational Physics, 376*, 713-732. doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.005

Freeze, R. A. (1975). A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media. *Water Resources Research, 11*(5), 725-741. doi:https://doi.org/10.1029/WR011i005p00725

Ghassemi, A., & Kumar, G. S. (2007). Changes in fracture aperture and fluid pressure due to thermal stress and silica dissolution/precipitation induced by heat extraction from subsurface rocks. *Geothermics, 36*(2), 115-140. doi:https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2006.10.001

Gillespie, P., Howard, C., Walsh, J., & Watterson, J. (1993). Measurement and characterisation of spatial distributions of fractures. *Tectonophysics, 226*(1-4), 113-141. doi:https://doi.org/10.1016/0040-1951(93)90114-Y

Glamheden, R., Fredriksson, A., Roeshoff, K., Karlsson, J., Hakami, H., & Christiansson, R. (2007). *Rock mechanics Forsmark. Site descriptive modelling Forsmark stage 2.2*. Retrieved from Stockholm

Goldberg, S., Criscenti, L. J., Turner, D. R., Davis, J. A., & Cantrell, K. J. (2007). Adsorption–desorption processes in subsurface reactive transport modeling. *Vadose Zone Journal, 6*(3), 407-435. doi:https://doi.org/10.2136/vzj2006.0085

Golfier, F., Zarcone, C., Bazin, B., Lenormand, R., Lasseux, D., & QUINTARD, M. (2002). On the ability of a Darcy-scale model to capture wormhole formation during the dissolution of a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics, 457*, 213-254. doi:https://doi.org/10.1017/S0022112002007735

Gratier, J.-P. (2011). Fault permeability and strength evolution related to fracturing and healing episodic processes (years to millennia): the role of pressure solution. *Oil & Gas Science and Technology–Revue d'IFP Energies nouvelles, 66*(3), 491-506. doi:https://doi.org/10.2516/ogst/2010014

Gratier, J. P., Favreau, P., & Renard, F. (2003). Modeling fluid transfer along California faults when integrating pressure solution crack sealing and compaction processes. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 108*(B2). doi:https://doi.org/10.1029/2001JB000380

Gratier, J. P., Renard, F., & Vial, B. (2014). Postseismic pressure solution creep: Evidence and time-dependent change from dynamic indenting experiments. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 119*(4), 2764-2779. doi:https://doi.org/10.1002/2013JB010768

Griffiths, L., Heap, M., Wang, F., Daval, D., Gilg, H., Baud, P., Schmittbuhl, J., & Genter, A. (2016). Geothermal implications for fracture-filling hydrothermal precipitation. *Geothermics, 64*, 235-245. doi:https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2016.06.006

Gudmundsson, A. (2011). *Rock fractures in geological processes*: Cambridge University Press.

Guimerà, J., Vives, L., & Carrera, J. (1995). A discussion of scale effects on hydraulic conductivity at a granitic site (El Berrocal, Spain). *Geophysical Research Letters, 22*(11), 1449-1452. doi:https://doi.org/10.1029/95GL01493

Gupta, A., & Scholz, C. H. (2000). A model of normal fault interaction based on observations and theory. *Journal of Structural Geology, 22*(7), 865-879. doi:https://doi.org/10.1016/S0191-8141(00)00011-0

Hakami, E. (2009). *Rock mechanics Laxemar: site descriptive modelling SDM-Site Laxemar*: SKB.

Hickman, S. H., & Evans, B. (1987). Influence of geometry upon crack healing rate in calcite. *Physics and Chemistry of Minerals, 15*(1), 91-102. doi:https://doi.org/10.1007/BF00307614

Hökmark, H., & Lönnqvist, M. (2014). Reply to comment by Christopher Talbot on "Approach to estimating the maximum depth for glacially induced hydraulic jacking in fractured crystalline rock at Forsmark, Sweden". *Journal of Geophysical Research: Earth Surface, 119*(4), 955-959.

Hope, S. M., Davy, P., Maillot, J., Le Goc, R., & Hansen, A. (2015). Topological impact of constrained fracture growth. *Frontiers in Physics, 3*, 75. doi:https://doi.org/10.3389/fphy.2015.00075

Hossain, M., Rahman, M., & Rahman, S. (2002). A shear dilation stimulation model for production enhancement from naturally fractured reservoirs. *Spe Journal, 7*(02), 183-195. doi:https://doi.org/10.2118/78355-PA

Hyman, Dentz, M., Hagberg, A., & Kang, P. K. (2019). Linking Structural and Transport Properties in Three-Dimensional Fracture Networks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 124*(2), 1185-1204. doi:https://doi.org/10.1029/2018JB016553

Hyman, J., & Jimenez-Martinez, J. (2018). Dispersion and Mixing in Three-Dimensional Discrete Fracture Networks: Nonlinear Interplay Between Structural and Hydraulic Heterogeneity. *Water Resources Research*. doi:https://doi.org/10.1029/2018WR022585

Hyman, J. D., Dentz, M., Hagberg, A., & Kang, P. K. (2019). Emergence of stable laws for first passage times in three-dimensional random fracture networks. *Physical Review Letters, 123*(24), 248501. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.248501

Hyman, J. D., Hagberg, A., Osthus, D., Srinivasan, S., Viswanathan, H., & Srinivasan, G. (2018). Identifying backbones in three-dimensional discrete fracture networks: A bipartite graph-based approach. *Multiscale Modeling & Simulation, 16*(4), 1948-1968. doi:https://doi.org/10.1137/18M1180207

Hyman, J. D., Hagberg, A., Srinivasan, G., Mohd-Yusof, J., & Viswanathan, H. (2017). Predictions of first passage times in sparse discrete fracture networks using graph-based reductions. *Physical review E, 96*(1-1), 013304. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.013304

Hyman, J. D., Jiménez-Martínez, J., Viswanathan, H. S., Carey, J. W., Porter, M. L., Rougier, E., Karra, S., Kang, Q., Frash, L., & Chen, L. (2016). Understanding hydraulic fracturing: a multi-scale problem. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 374*(2078), 20150426. doi:https://doi.org/10.1098/rsta.2015.0426

Hyman, J. D., Karra, S., Makedonska, N., Gable, C. W., Painter, S. L., & Viswanathan, H. S. (2015). dfnWorks: A discrete fracture network framework for modeling subsurface flow and transport. *Computers & Geosciences, 84*, 10-19. doi:https://doi.org/10.1016/j.cageo.2015.08.001

Irwin, G. R. (1957). Analysis of stresses and strains near the end of a crack transversing a plate. *Trans. ASME, Ser. E, J. Appl. Mech., 24*, 361-364. doi:https://doi.org/10.1115/1.4011547

Jeong, H., Mason, S. P., Barabási, A.-L., & Oltvai, Z. N. (2001). Lethality and centrality in protein networks. *Nature, 411*(6833), 41-42. doi:https://doi.org/10.1038/35075138

Jiménez, S., Brauchler, R., & Bayer, P. (2013). A new sequential procedure for hydraulic tomographic inversion. *Advances in water resources, 62*, 59-70. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.10.002

Jones, T. A., & Detwiler, R. L. (2016). Fracture sealing by mineral precipitation: The role of small-scale mineral heterogeneity. *Geophysical Research Letters, 43*(14), 7564-7571. doi:https://doi.org/10.1002/2016GL069598

Kalia, N., & Balakotaiah, V. (2007). Modeling and analysis of wormhole formation in reactive dissolution of carbonate rocks. *Chemical Engineering Science, 62*(4), 919-928. doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.10.021

Kang, P. K., Dentz, M., Le Borgne, T., & Juanes, R. (2015a). Anomalous transport on regular fracture networks: Impact of conductivity heterogeneity and mixing at fracture intersections. *Physical review E, 92*(2), 022148. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.022148

Kang, P. K., Le Borgne, T., Dentz, M., Bour, O., & Juanes, R. (2015b). Impact of velocity correlation and distribution on transport in fractured media: Field evidence and theoretical model. *Water Resources Research, 51*(2), 940-959. doi:https://doi.org/10.1002/2014WR015799

Karra, S., Makedonska, N., Viswanathan, H. S., Painter, S. L., & Hyman, J. D. (2015). Effect of advective flow in fractures and matrix diffusion on natural gas production. *Water Resources Research, 51*(10), 8646-8657. doi:https://doi.org/10.1002/2014WR016829

Karra, S., O'Malley, D., Hyman, J. D., Viswanathan, H. S., & Srinivasan, G. (2018). Modeling flow and transport in fracture networks using graphs. *Physical review E, 97*(3), 033304. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.033304

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:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2019.103500

Klepikova, M., Le Borgne, T., Bour, O., & de Dreuzy, J. R. (2013). Inverse modeling of flow tomography experiments in fractured media. *Water Resources Research, 49*(11), 7255-7265. doi:https://doi.org/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:https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2014.03.018

Klimczak, C., Schultz, R. A., Parashar, R., & Reeves, D. M. (2010). Cubic law with aperture-length correlation: implications for network scale fluid flow. *Hydrogeology Journal, 18*(4), 851-862. doi:https://doi.org/10.1007/s10040-009-0572-6

Lang, P., Paluszny, A., & Zimmerman, R. (2015). Hydraulic sealing due to pressure solution contact zone growth in siliciclastic rock fractures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 120*(6), 4080-4101. doi:https://doi.org/10.1002/2015JB011968

Lang, P. S., Paluszny, A., Nejati, M., & Zimmerman, R. W. (2018). Relationship between the orientation of maximum permeability and intermediate principal stress in fractured rocks. *Water Resources Research*. doi:https://doi.org/10.1029/2018WR023189

Larocque, M., Banton, O., Ackerer, P., & Razack, M. (1999). Determining karst transmissivities with inverse modeling and an equivalent porous media. *Groundwater, 37*(6), 897-903. doi: https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1999.tb01189.x

Larsson, M., Niemi, A., & Tsang, C. F. (2012). A study of flow-wetted surface area in a single fracture as a function of its hydraulic conductivity distribution. *Water Resources Research, 48*(1). doi:https://doi.org/10.1029/2011WR010686

Latora, V., & Marchiori, M. (2001). Efficient behavior of small-world networks. *Physical Review Letters, 87*(19), 198701. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.198701

Laug, P., Pichot, G., Le Goc, R., Darcel, C., & Davy, P. (2018). *Automatic meshing of Discrete Fracture Networks*.

Lavoine, E. (2020). *Modélisation cinématique et mécanique des réseaux de fractures à l'échelle du massif rocheux.* Université de Rennes 1, Rennes.

Lavoine, E., Davy, P., Darcel, C., & Goc, R. L. (2019). On the Density Variability of Poissonian Discrete Fracture Networks, with application to power-law fracture size distributions. *Advances in Geosciences, 49*, 77-83. doi:https://doi.org/10.5194/adgeo-49-77-2019

Lavoine, E., Davy, P., Darcel, C., & Munier, R. (2020). A Discrete Fracture Network Model With Stress-Driven Nucleation: Impact on Clustering, Connectivity, and Topology. *Frontiers in Physics, 8*, 9. doi:https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00009

Le Borgne, T., Bour, O., Riley, M., Gouze, P., Pezard, P., Belghoul, A., Lods, G., Le Provost, R., Greswell, R., & Ellis, P. (2007). Comparison of alternative methodologies for identifying and characterizing preferential flow paths in heterogeneous aquifers. *Journal of hydrology, 345*(3-4), 134-148. doi:https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2007.07.007

Le Borgne, T., Dentz, M., Bolster, D., Carrera, J., De Dreuzy, J.-R., & Davy, P. (2010). Non-Fickian mixing: Temporal evolution of the scalar dissipation rate in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources, 33*(12), 1468-1475. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.08.006

Le Borgne, T., Ginn, T. R., & Dentz, M. (2014). Impact of fluid deformation on mixing-induced chemical reactions in heterogeneous flows. *Geophysical Research Letters, 41*(22), 7898-7906. doi:https://doi.org/10.1002/2014GL062038

Le Goc, R. (2009). *Caractérisation et modélisation des écoulements dans les milieux fracturés.* Université Rennes 1,

Le Goc, R., Davy, P., Darcel, C., & Selroos, J.-O. (2018). *Discrimination of Discrete Fracture Network models using structural and flow data.* Paper presented at the 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference.

Le Goc, R., De Dreuzy, J.-R., & Davy, P. (2010a). An inverse problem methodology to identify flow channels in fractured media using synthetic steady-state head and geometrical data. *Advances in water resources, 33*(7), 782-800. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.04.011

Le Goc, R., de Dreuzy, J.-R., & Davy, P. (2010b). Statistical characteristics of flow as indicators of channeling in heterogeneous porous and fractured media. *Advances in water resources, 33*(3), 257-269. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2009.12.002

Le Goc, R., Pinier, B., Darcel, C., Lavoine, E., Doolaeghe, D., de Simone, S., De Dreuzy, J.-R., & Davy, P. (2019). *DFN. lab: software platform for Discrete Fracture Network models.* Paper presented at the AGU Fall Meeting 2019.

Lei, Q., Latham, J.-P., & Tsang, C.-F. (2017). The use of discrete fracture networks for modelling coupled geomechanical and hydrological behaviour of fractured rocks. *Computers and Geotechnics, 85*, 151-176. doi:https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.12.024

Lei, Q., & Wang, X. (2016). Tectonic interpretation of the connectivity of a multiscale fracture system in limestone. *Geophysical Research Letters, 43*(4), 1551-1558. doi:https://doi.org/10.1002/2015GL067277

Lemieux, J. M., Sudicky, E., Peltier, W., & Tarasov, L. (2008). Simulating the impact of glaciations on continental groundwater flow systems: 2. Model application to the Wisconsinian glaciation over the Canadian landscape. *Journal of Geophysical Research: Earth Surface, 113*(F3). doi:https://doi.org/10.1029/2007JF000929

Lima, M. G., Vogler, D., Querci, L., Madonna, C., Hattendorf, B., Saar, M. O., & Kong, X.-Z. (2019). Thermally driven fracture aperture variation in naturally fractured granites. *Geothermal Energy, 7*(1), 23. doi:https://doi.org/10.1186/s40517-019-0140-9

Liu, E., & Martinez, A. (2014). *Seismic fracture characterization* (Vol. 575): Elsevier.

Löfgren, M., & Sidborn, M. (2010). *Statistical analysis of results from the quantitative mapping of fracture minerals in Forsmark. Site descriptive modelling-complementary studies*. Retrieved from

Long, J., & Witherspoon, P. A. (1985). The relationship of the degree of interconnection to permeability in fracture networks. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 90*(B4), 3087-3098. doi:https://doi.org/10.1029/JB090iB04p03087

Long, J. C., Gilmour, P., & Witherspoon, P. A. (1985). A model for steady fluid flow in random three-dimensional networks of disc-shaped fractures. *Water Resources Research, 21*(8), 1105-1115. doi:https://doi.org/10.1029/WR021i008p01105

Long, J. C., Remer, J., Wilson, C., & Witherspoon, P. (1982). Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research, 18*(3), 645-658. doi:https://doi.org/10.1029/WR018i003p00645

Lönnqvist, M., & Hökmark, H. (2013). Approach to estimating the maximum depth for glacially induced hydraulic jacking in fractured crystalline rock at Forsmark, Sweden. *Journal of Geophysical Research: Earth Surface, 118*(3), 1777-1791. doi:https://doi.org/10.1002/jgrf.20106

Lowell, R. P., Van Cappellen, P., & Germanovich, L. N. (1993). Silica precipitation in fractures and the evolution of permeability in hydrothermal upflow zones. *Science, 260*(5105), 192-194. doi:http://10.1126/science.260.5105.192

Lu, R., Nagel, T., Shao, H., Kolditz, O., & Shao, H. (2018). Modeling of Dissolution-Induced Permeability Evolution of a Granite Fracture Under Crustal Conditions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 123*(7), 5609-5627. doi:http://10.1029/2018JB015702

MacQuarrie, K. T., & Mayer, K. U. (2005). Reactive transport modeling in fractured rock: A state-of-the-science review. *Earth-Science Reviews, 72*(3-4), 189-227. doi:https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2005.07.003

Mahmoudzadeh, B., Liu, L., Moreno, L., & Neretnieks, I. (2016). Evolution of Fracture Aperture under Combined Effect of Stress and Flow. *International Journal of Chemical Engineering and Applications, 7*(5), 303.

Maillot, J., Davy, P., Le Goc, R., Darcel, C., & De Dreuzy, J.-R. (2016). Connectivity, permeability, and channeling in randomly distributed and kinematically defined discrete fracture network models. *Water Resources Research, 52*(11), 8526-8545. doi:https://doi.org/10.1002/2016WR018973

Mandelbrot, B. B. (1982). *The fractal geometry of nature* (Vol. 1): WH freeman New York.

Manga, M., Beresnev, I., Brodsky, E. E., Elkhoury, J. E., Elsworth, D., Ingebritsen, S. E., Mays, D. C., & Wang, C. Y. (2012). Changes in permeability caused by transient stresses: Field observations, experiments, and mechanisms. *Reviews of Geophysics, 50*(2). doi:https://doi.org/10.1029/2011RG000382

Manzocchi, T. (2002). The connectivity of two-dimensional networks of spatially correlated fractures. *Water Resources Research, 38*(9), 1-1-1-20. doi:https://doi.org/10.1029/2000WR000180

Marçais, J. (2018). *Variabilités des temps de résidence de l'eau et du débit dans les rivières et les nappes phréatiques: implications sur la qualité de l'eau: inférence, modélisation et prédiction des temps de transit de l'eau dans les bassins versants.* Université Rennes 1,

Martin, C. D. (2007). *Quantifying in situ stress magnitudes and orientations for Forsmark. Forsmark stage 2.2* (R-07-26). Retrieved from Stockholm, Sweden

Martin, J. T., & Lowell, R. P. (2000). Precipitation of quartz during high-temperature, fracture-controlled hydrothermal upflow at ocean ridges: Equilibrium versus linear kinetics. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 105*(B1), 869-882. doi:https://doi.org/10.1029/1999JB900342

Martinez-Landa, L., & Carrera, J. (2005). An analysis of hydraulic conductivity scale effects in granite (Full-scale Engineered Barrier Experiment (FEBEX), Grimsel, Switzerland). *Water Resources Research, 41*(3). doi:https://doi.org/10.1029/2004WR003458

Mattila, J., & Follin, S. (2019). Does In Situ State of Stress Affect Fracture Flow in Crystalline Settings? *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 124*(5), 5241-5253. doi:https://doi.org/10.1029/2018JB016791

Mauldon, M., & Mauldon, J. (1997). Fracture sampling on a cylinder: from scanlines to boreholes and tunnels. *Rock Mechanics and Rock Engineering, 30*(3), 129-144. doi:https://doi.org/10.1007/BF01047389

McCarthy, J. F., & McKay, L. D. (2004). Colloid transport in the subsurface: Past, present, and future challenges. *Vadose Zone Journal, 3*(2), 326-337. doi:https://doi.org/10.2113/3.2.326

McGuire, T. P., Elsworth, D., & Karcz, Z. (2013). Experimental measurements of stress and chemical controls on the evolution of fracture permeability. *Transport in porous media, 98*(1), 15-34. doi:https://doi.org/10.1007/s11242-013-0123-4

McKibben, M. A., & Barnes, H. L. (1986). Oxidation of pyrite in low temperature acidic solutions: Rate laws and surface textures. *Geochimica et Cosmochimica Acta, 50*(7), 1509-1520. doi:https://doi.org/10.1016/0016-7037(86)90325-X

Milton, G., & Brown, R. (1987). Adsorption of uranium from groundwater by common fracture secondary minerals. *Canadian Journal of Earth Sciences, 24*(7), 1321-1328.

Min, K.-B., Rutqvist, J., & Elsworth, D. (2009). Chemically and mechanically mediated influences on the transport and mechanical characteristics of rock fractures. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 46*(1), 80-89. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2008.04.002

Min, K.-B., Rutqvist, J., Tsang, C.-F., & Jing, L. (2004). Stress-dependent permeability of fractured rock masses: a numerical study. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 41*(7), 1191-1210. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2004.05.005

Moein, M. J. A., Valley, B., & Evans, K. F. (2019). Scaling of fracture patterns in three deep boreholes and implications for constraining fractal discrete fracture network models. *Rock Mechanics and Rock Engineering, 52*(6), 1723-1743. doi:https://doi.org/10.1007/s00603-019-1739-7

Molron, J. (2021). *Conditionnement des modèles de réseaux de fractures à des données géologiques et géophysiques pour la réduction des incertitudes dans les modèles d'écoulement et de transport.* Université de Rennes 1, Rennes.

Molron, J., Linde, N., Baron, L., Selroos, J.-O., Darcel, C., & Davy, P. (2020). Which fractures are imaged with Ground Penetrating Radar? Results from an experiment in the Äspö Hardrock Laboratory, Sweden. *Engineering Geology, 273*, 105674. doi:https://doi.org/10.1016/j.enggeo.2020.105674

Molron, J., Linde, N., Davy, P., Darcel, C., Selroos, J.-O., Doolaeghe, D., Baron, L., Le Borgne, T., & (submitted). GPR-inferred fracture aperture widening in response to a high-pressure tracer injection test at the Äspö Hard Rock Laboratory, Sweden *Engineering Geology*.

Montgomery, D. R., & Manga, M. (2003). Streamflow and water well responses to earthquakes. *Science, 300*(5628), 2047-2049. doi:http://10.1126/science.1082980

Moon, S., Perron, J. T., Martel, S. J., Goodfellow, B. W., Mas Ivars, D., Hall, A., Heyman, J., Munier, R., Näslund, J. O., & Simeonov, A. (2020). Present-Day Stress Field Influences Bedrock Fracture Openness Deep Into the Subsurface. *Geophysical Research Letters, 47*(23), e2020GL090581. doi:https://doi.org/10.1029/2020GL090581

Moore, D. E., Lockner, D. A., & Byerlee, J. D. (1994). Reduction of permeability in granite at elevated temperatures. *Science, 265*(5178), 1558-1561. doi:http://10.1126/science.265.5178.1558

Mourzenko, V., Békri, S., Thovert, J.-F., & Adler, P. (1996). Deposition in fractures. *Chemical Engineering Communications, 148*(1), 431-464. doi:https://doi.org/10.1080/00986449608936530

Neretnieks, I. (2014). Stress-mediated closing of fractures: Impact of matrix diffusion. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 119*(5), 4149-4163. doi:https://doi.org/10.1002/2013JB010645

Neuman, S. P. (2005). Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks. *Hydrogeology Journal, 13*(1), 124-147. doi:https://doi.org/10.1007/s10040-004-0397-2

Newman, M. E. (2002). Assortative mixing in networks. *Physical Review Letters, 89*(20), 208701. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.208701

Newman, M. E. J. (2001). Scientific collaboration networks. I. Network construction and fundamental results. *Physical review E, 64*(1), 016131. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.016131

Nicolaides, C., Jha, B., Cueto-Felgueroso, L., & Juanes, R. (2015). Impact of viscous fingering and permeability heterogeneity on fluid mixing in porous media. *Water Resources Research, 51*(4), 2634-2647. doi:https://doi.org/10.1002/2014WR015811

Noiriel, C., Gouze, P., & Made, B. (2013). 3D analysis of geometry and flow changes in a limestone fracture during dissolution. *Journal of hydrology, 486*, 211-223. doi:https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.01.035

Nordqvist, A. W., Tsang, Y., Tsang, C., Dverstorp, B., & Andersson, J. (1992). A variable aperture fracture network model for flow and transport in fractured rocks. *Water Resources Research, 28*(6), 1703-1713. doi:https://doi.org/10.1029/92WR00216

O'Malley, D., Karra, S., Hyman, J., Viswanathan, H. S., & Srinivasan, G. (2018). Efficient Monte Carlo with graph-based subsurface flow and transport models. *Water Resources Research, 54*(5), 3758-3766. doi:https://doi.org/10.1029/2017WR022073

Odling, N., Gillespie, P., Bourgine, B., Castaing, C., Chiles, J., Christensen, N., Fillion, E., Genter, A., Olsen, C., & Thrane, L. (1999). Variations in fracture system geometry and their implications for fluid flow in fractures hydrocarbon reservoirs. *Petroleum Geoscience, 5*(4), 373-384. doi:https://doi.org/10.1144/petgeo.5.4.373

Odling, N. E. (1997). Scaling and connectivity of joint systems in sandstones from western Norway. *Journal of Structural Geology, 19*(10), 1257-1271. doi:https://doi.org/10.1016/S0191-8141(97)00041-2

Odling, N. E., & Webman, I. (1991). A "conductance" mesh approach to the permeability of natural and simulated fracture patterns. *Water Resources Research, 27*(10), 2633-2643. doi:https://doi.org/10.1029/91WR01382

Oehberg, A., & Rouhiainen, P. (2000). Posiva groundwater flow measuring techniques.

Okamoto, A., Yamada, R., Saishu, H., & Tsuchiya, N. (2017). Porosity and permeability evolution induced by precipitation of silica under hydrothermal conditions. *Procedia Earth Planet Sci, 17*, 249-252. doi:https://doi.org/10.1016/j.proeps.2016.12.046

Olofsson, B. (2001). *Groundwater in hard rock: a literature review*: Statens råd för kärnavfallsfrågor (KASAM).

Olofsson, I., Simeonov, A., Stephens, M., Follin, S., Nilsson, A., Röshoff, K., Lindberg, U., Lanaro, F., Fredriksson, A., & Persson, L. (2007). *Site descriptive modelling Forsmark, stage 2.2* (R-07-15). Retrieved from Stockholm, Sweden

Olson, J. E., Laubach, S. E., & Lander, R. H. (2009). Natural fracture characterization in tight gas sandstones: Integrating mechanics and diagenesis. *AAPG bulletin, 93*(11), 1535-1549. doi:https://doi.org/10.1306/08110909100

Ortoleva, P., Chadam, J., Merino, E., & Sen, A. (1987). Geochemical self-organization II; the reactive-infiltration instability. *American Journal of Science, 287*(10), 1008-1040. doi:https://doi.org/10.2475/ajs.287.10.1008

Osselin, F., Kondratiuk, P., Budek, A., Cybulski, O., Garstecki, P., & Szymczak, P. (2016). Microfluidic observation of the onset of reactive-infitration instability in an analog fracture. *Geophysical Research Letters, 43*(13), 6907-6915. doi:https://doi.org/10.1002/2016GL069261

Palandri, J. L., & Kharaka, Y. K. (2004). *A compilation of rate parameters of water-mineral interaction kinetics for application to geochemical modeling*. Retrieved from Menlo Park, California

Peacock, D., Nixon, C., Rotevatn, A., Sanderson, D., & Zuluaga, L. (2016). Glossary of fault and other fracture networks. *Journal of Structural Geology, 92*, 12-29. doi:https://doi.org/10.1016/j.jsg.2016.09.008

Piggott, A. R. (1997). Fractal relations for the diameter and trace length of disc-shaped fractures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 102*(B8), 18121-18125. doi:https://doi.org/10.1029/97JB01202

Pinier, B., Le Goc, R., & Davy, P. (in prep.). Computation of flow and transport properties on large heterogeneous 3D fractured media.

Poisson, S. D. (1837). *Recherches sur la probabilité des jugements en matière criminelle et en matière civile*: Bachelier.

Polak, A., Elsworth, D., Liu, J., & Grader, A. S. (2004). Spontaneous switching of permeability changes in a limestone fracture with net dissolution. *Water Resources Research, 40*(3). doi:https://doi.org/10.1029/2003WR002717

Polak, A., Elsworth, D., Yasuhara, H., Grader, A., & Halleck, P. (2003). Permeability reduction of a natural fracture under net dissolution by hydrothermal fluids. *Geophysical Research Letters, 30*(20). doi:https://doi.org/10.1029/2003GL017575

Priest, S., & Hudson, J. (1981). *Estimation of discontinuity spacing and trace length using scanline surveys.* Paper presented at the International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts.

Pyrak-Nolte, L., & Morris, J. (2000). Single fractures under normal stress: The relation between fracture specific stiffness and fluid flow. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 37*(1-2), 245-262. doi:https://doi.org/10.1016/S1365-1609(99)00104-5

Pyrak-Nolte, L. J., & Nolte, D. D. (2016). Approaching a universal scaling relationship between fracture stiffness and fluid flow. *Nat Commun, 7*, 10663. doi:https://doi.org/10.1038/ncomms10663

Pyrak-Nolte, L. J., Cook, N. G., & Nolte, D. D. (1988). Fluid percolation through single fractures. *Geophysical Research Letters, 15*(11), 1247-1250. doi: https://doi.org/10.1029/GL015i011p01247

Ramsey, J. M., & Chester, F. M. (2004). Hybrid fracture and the transition from extension fracture to shear fracture. *Nature, 428*(6978), 63-66. doi:https://doi.org/10.1038/nature02333

Renard, F., Gratier, J.-P., & Jamtveit, B. (2000). Kinetics of crack-sealing, intergranular pressure solution, and compaction around active faults. *Journal of Structural Geology, 22*(10), 1395-1407. doi:https://doi.org/10.1016/S0191-8141(00)00064-X

Renard, P. (2005). Hydraulics of wells and well testing. *Encyclopedia of hydrological sciences. Wiley, Chichester, UK.* doi:https://doi.org/10.1002/0470848944.hsa154a

Renshaw, C. E. (1995). On the relationship between mechanical and hydraulic apertures in rough-walled fractures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 100*(B12), 24629-24636. doi:https://doi.org/10.1029/95JB02159

Rinck-Pfeiffer, S., Ragusa, S., Sztajnbok, P., & Vandevelde, T. (2000). Interrelationships between biological, chemical, and physical processes as an analog to clogging in aquifer storage and recovery (ASR) wells. *Water Research, 34*(7), 2110-2118. doi:https://doi.org/10.1016/S0043-1354(99)00356-5

Robinson, P. (1984). Numerical calculations of critical densities for lines and planes. *Journal of Physics A: Mathematical and General, 17*(14), 2823.

Rouhiainen, P., & Pöllänen, J. (2003). *Forsmark site investigation. Difference flow logging of borehole KFM01A* (P-03-28). Retrieved from Stockholm

Rovey II, C. W., & Niemann, W. (2001). Wellskins and slug tests: where's the bias? *Journal of Hydrology, 243*(1-2), 120-132. doi:https://doi.org/10.1016/S0022-1694(00)00408-X

Roy, A., Perfect, E., Dunne, W. M., & McKay, L. D. (2014). A technique for revealing scale-dependent patterns in fracture spacing data. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 119*(7), 5979-5986. doi:https://doi.org/10.1002/2013JB010647

Rozhko, A., Podladchikov, Y., & Renard, F. (2007). Failure patterns caused by localized rise in pore-fluid overpressure and effective strength of rocks. *Geophysical Research Letters, 34*(22). doi:https://doi.org/10.1029/2007GL031696

Rühaak, W., Bense, V. F., & Sass, I. (2014). 3D hydro-mechanically coupled groundwater flow modelling of Pleistocene glaciation effects. *Computers & Geosciences, 67*, 89-99. doi:https://doi.org/10.1016/j.cageo.2014.03.001

Rutqvist, J. (2015). Fractured rock stress-permeability relationships from in situ data and effects of temperature and chemical-mechanical couplings. *Geofluids, 15*(1-2), 48-66. doi:https://doi.org/10.1111/gfl.12089

Rutter, E. (1976). A discussion on natural strain and geological structure-the kinetics of rock deformation by pressure solution. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 283*(1312), 203-219. doi:https://doi.org/10.1098/rsta.1976.0079

Sandström, B. (2009). *Fluid Migration and Brittle Tectonothermal Evolution in the Central Fennoscandian Shield-Recorded by Fracture Minerals and Wall Rock Alteration.* University of Gothenburg, Department of Earth Sciences; Institutionen för geovetenskaper, Gothenburg.

Sandström, B., & Tullborg, E.-L. (2008). *Fracture mineralogy of the Forsmark site* (R-08-102). Retrieved from Stockholm, Sweden

Sandström, B., & Tullborg, E.-L. (2009). Episodic fluid migration in the Fennoscandian Shield recorded by stable isotopes, rare earth elements and fluid inclusions in fracture minerals at Forsmark, Sweden. *Chemical Geology, 266*(3-4), 126-142. doi:https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2009.04.019

Schälchli, U. (1992). The clogging of coarse gravel river beds by fine sediment. *Hydrobiologia, 235*(1), 189-197. doi:https://doi.org/10.1007/BF00026211

Selroos, J.-O., & Follin, S. (2014). Overview of hydrogeological site-descriptive modeling conducted for the proposed high-level nuclear waste repository site at Forsmark, Sweden. *Hydrogeology Journal, 22*(2), 295-298. doi:https://doi.org/10.1007/s10040-013-1077-x

Selroos, J.-O., Walker, D. D., Ström, A., Gylling, B., & Follin, S. (2002). Comparison of alternative modelling approaches for groundwater flow in fractured rock. *Journal of Hydrology, 257*(1-4), 174-188. doi:https://doi.org/10.1016/S0022-1694(01)00551-0

Serrano, M. J. G., Salazar, P. A., Sanz, L. F. A., & Jimenez, Y. (2008). Fracture sealing by mineral precipitation in a Deep Geological Nuclear Waste Repository. *Revista de la Sociedad Espanola de Mineralogia, 9*, 119-120.

Sherman, T., Hyman, J., Dentz, M., & Bolster, D. (2020). Characterizing the influence of fracture density on network scale transport. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 125*(1), e2019JB018547. doi:https://doi.org/10.1029/2019JB018547

Sibson, R. (1992). Implications of fault-valve behaviour for rupture nucleation and recurrence. *Tectonophysics, 211*(1-4), 283-293. doi:https://doi.org/10.1016/0040-1951(92)90065-E

Sibson, R. H. (1996). Structural permeability of fluid-driven fault-fracture meshes. *Journal of Structural Geology, 18*(8), 1031-1042. doi:https://doi.org/10.1016/0191-8141(96)00032-6

Sibson, R. H. (2003). Brittle-failure controls on maximum sustainable overpressure in different tectonic regimes. *AAPG bulletin, 87*(6), 901-908. doi:https://doi.org/10.1306/01290300181

Singurindy, O., & Berkowitz, B. (2005). The role of fractures on coupled dissolution and precipitation patterns in carbonate rocks. *Advances in water resources, 28*(5), 507-521. doi:https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2005.01.002

SKB. (2011). *Long-term safety for the final repository for spent nuclear fuel at Forsmark. Main report of the SR-Site project.* Retrieved from Stockholm, Sweden

SKB. (2013). *Site description of the SFR area at Forsmark at completion of the site investigation phase. SDM-PSU Forsmark* (TR-11-04). Retrieved from Stockholm, Sweden

SKB. (2019). *Post-closure safety for a proposed repository concept for SFL* (TR-19-01). Retrieved from Stockholm, Sweden

Smith, D. L., & Evans, B. (1984). Diffusional crack healing in quartz. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 89*(B6), 4125-4135. doi:https://doi.org/10.1029/JB089iB06p04125

Sornette, D., & Davy, P. (1991). Fault growth model and the universal fault length distribution. *Geophysical Research Letters, 18*(6), 1079-1081. doi:https://doi.org/10.1029/91GL01054

Sposito, G. (1986). Distinguishing adsorption from surface precipitation. doi:http://10.1021/bk-1987-0323.ch011

Srinivasan, S., Hyman, J., Karra, S., Srinivasan, G., & Viswanathan, H. (2018). *Reduced-Order Models of Discrete Fracture Networks Through Flow-Physics on Graph Representations.* Paper presented at the 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference, Seattle.

Srinivasan, S., Karra, S., Hyman, J., Viswanathan, H., & Srinivasan, G. (2019). Model reduction for fractured porous media: a machine learning approach for identifying main flow pathways. *Computational Geosciences, 23*, 617-629. doi:https://doi.org/10.1007/s10596-019-9811-7

Srinivasan, S., O'Malley, D., Hyman, J. D., Karra, S., Viswanathan, H. S., & Srinivasan, G. (2020). Transient flow modeling in fractured media using graphs. *Physical review E, 102*(5), 052310. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.052310

Stauffer, D., & Aharony, A. (2018). *Introduction to percolation theory*: CRC press.

Steefel, C. I. (2008). Geochemical kinetics and transport. In *Kinetics of water-rock interaction* (pp. 545-589): Springer.

Steefel, C. I., DePaolo, D. J., & Lichtner, P. C. (2005). Reactive transport modeling: An essential tool and a new research approach for the Earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters, 240*(3-4), 539-558. doi:https://doi.org/10.1016/j.epsl.2005.09.017

Steefel, C. I., & Lasaga, A. C. (1990). Evolution of dissolution patterns: Permeability change due to coupled flow and reaction. doi:http://10.1021/bk-1990-0416.ch016

Steefel, C. I., & Maher, K. (2009). Fluid-rock interaction: A reactive transport approach. *Reviews in mineralogy and geochemistry, 70*(1), 485-532. doi:https://doi.org/10.2138/rmg.2009.70.11

Stephens, M. B., Fox, A., La Pointe, P., Simeonov, A., Isaksson, H., Hermanson, J., & Oehman, J. (2007). *Geology forsmark. site descriptive modelling forsmark-stage 2.2* (R-07-45). Retrieved from Stockholm, Sweden

Stone, A. (2013). *The theory of intermolecular forces*: oUP oxford.

Szymczak, P., & Ladd, A. (2006). A network model of channel competition in fracture dissolution. *Geophysical Research Letters, 33*(5). doi:https://doi.org/10.1029/2005GL025334

Szymczak, P., & Ladd, A. (2009). Wormhole formation in dissolving fractures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 114*(B6). doi:https://doi.org/10.1029/2008JB006122

Szymczak, P., & Ladd, A. J. (2012). Reactive-infiltration instabilities in rocks. Fracture dissolution. *arXiv preprint arXiv:1204.0917*. doi:https://doi.org/10.1017/jfm.2012.174

Talbot, C. J. (2014). Comment on "Approach to estimating the maximum depth for glacially induced hydraulic jacking in fractured crystalline rock at Forsmark, Sweden" by M. Lönnqvist and H. Hökmark. *Journal of Geophysical Research: Earth Surface, 119*(4), 951-954.

Tarantola, A. (2005). *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*: SIAM.

Terzaghi, R. D. (1965). Sources of error in joint surveys. *Geotechnique, 15*(3), 287-304. doi:https://doi.org/10.1680/geot.1965.15.3.287

Touchard, F. (1998). *Caractérisation hydrogéologique d'un aquifère en socle fracturé: Site de Ploemeur (Morbihan)*. Université Rennes 1, Rennes.

Tsai, F. T. C., Sun, N. Z., & Yeh, W. W. G. (2003). Global-local optimization for parameter structure identification in three-dimensional groundwater modeling. *Water Resources Research, 39*(2). doi:https://doi.org/10.1029/2001WR001135

Tsang, C.-F., Birkholzer, J., & Rutqvist, J. (2008). A comparative review of hydrologic issues involved in geologic storage of CO 2 and injection disposal of liquid waste. *Environmental Geology, 54*(8), 1723-1737. doi:http://10.1007/s00254-007-0949-6

Tsang, C.-F., & Neretnieks, I. (1998). Flow channeling in heterogeneous fractured rocks. *Reviews of Geophysics, 36*(2), 275-298. doi:https://doi.org/10.1029/97RG03319

Tsang, Y. (1984). The effect of tortuosity on fluid flow through a single fracture. *Water Resources Research, 20*(9), 1209-1215. doi:https://doi.org/10.1029/WR020i009p01209

Turcotte, D. (1986). A fractal model for crustal deformation. *Tectonophysics, 132*(1-3), 261-269. doi:https://doi.org/10.1016/0040-1951(86)90036-3

Valentini, L., Perugini, D., & Poli, G. (2007a). The 'small-world'nature of fracture/conduit networks: possible implications for disequilibrium transport of magmas beneath mid-ocean ridges. *Journal of volcanology and geothermal research, 159*(4), 355-365. doi:https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2006.08.002

Valentini, L., Perugini, D., & Poli, G. (2007b). The "small-world" topology of rock fracture networks. *Physica A: statistical mechanics and its applications, 377*(1), 323-328. doi:https://doi.org/10.1016/j.physa.2006.11.025

Valera, M., Guo, Z., Kelly, P., Matz, S., Cantu, V. A., Percus, A. G., Hyman, J. D., Srinivasan, G., & Viswanathan, H. S. (2018). Machine learning for graph-based representations of three-dimensional discrete fracture networks. *Computational Geosciences, 22*(3), 695-710. doi:https://doi.org/10.1007/s10596-018-9720-1

Vaughn, P. (1987). Analysis of permeability reduction during flow of heated, aqueous fluid through Westerly Granite. In *Coupled processes associated with nuclear waste repositories*.

Vevatne, J. N., Rimstad, E., Hope, S. M., Korsnes, R., & Hansen, A. (2014). Fracture networks in sea ice. *Frontiers in Physics, 2*. doi:https://doi.org/10.3389/fphy.2014.00021

Vidstrand, P., Wallroth, T., & Ericsson, L. O. (2008). Coupled HM effects in a crystalline rock mass due to glaciation: indicative results from groundwater flow regimes and stresses from an FEM study. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment, 67*(2), 187-197. doi:https://doi.org/10.1007/s10064-008-0123-8

Vieira, S. M., Kaymak, U., & Sousa, J. M. (2010). *Cohen's kappa coefficient as a performance measure for feature selection.* Paper presented at the International Conference on Fuzzy Systems.

Viswanathan, H. S., Hyman, J., Karra, S., O'Malley, D., Srinivasan, S., Hagberg, A., & Srinivasan, G. (2018). Advancing graph-based algorithms for predicting flow and transport in fractured rock. *Water Resources Research, 54*, 6085-6099. doi:https://doi.org/10.1029/2017WR022368

Watanabe, N., Hirano, N., & Tsuchiya, N. (2009). Diversity of channeling flow in heterogeneous aperture distribution inferred from integrated experimental-numerical analysis on flow through shear fracture in granite. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 114*(B4). doi:https://doi.org/10.1029/2008JB005959

Watts, D. J., & Strogatz, S. H. (1998). Collective dynamics of 'small-world'networks. *Nature, 393*(6684), 440. doi:https://doi.org/10.1038/30918

Witherspoon, P. A., Wang, J. S., Iwai, K., & Gale, J. E. (1980). Validity of cubic law for fluid flow in a deformable rock fracture. *Water Resources Research, 16*(6), 1016-1024. doi:https://doi.org/10.1029/WR016i006p01016

Wong, D. L. Y., Doster, F., Geiger, S., & Kamp, A. (2020). Partitioning Thresholds in Hybrid Implicit-Explicit Representations of Naturally Fractured Reservoirs. *Water Resources Research, 56*(2), e2019WR025774. doi:https://doi.org/10.1029/2019WR025774

Wu, J., Wu, Y., & Lu, J. (2008). Laboratory study of the clogging process and factors affecting clogging in a tailings dam. *Environmental geology, 54*(5), 1067-1074. doi:https://doi.org/10.1007/s00254-007-0873-9

Xu, F., Jimenez, M., Dietrich, N., & Hébrard, G. (2017). Fast determination of gas-liquid diffusion coefficient by an innovative double approach. *Chemical Engineering Science, 170*, 68-76. doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.02.043

Xue, L., Li, H.-B., Brodsky, E. E., Xu, Z.-Q., Kano, Y., Wang, H., Mori, J. J., Si, J.-L., Pei, J.-L., & Zhang, W. (2013). Continuous permeability measurements record healing inside the Wenchuan earthquake fault zone. *Science, 340*(6140), 1555-1559. doi:http://10.1126/science.1237237

Yasuhara, H. (2005). Fault zone restrengthening and frictional healing: The role of pressure solution. *Journal of Geophysical Research, 110*(B6). doi:https://doi.org/10.1029/2004JB003327

Yasuhara, H., & Elsworth, D. (2008). Compaction of a rock fracture moderated by competing roles of stress corrosion and pressure solution. *Pure and Applied Geophysics, 165*(7), 1289-1306. doi:https://doi.org/10.1007/s00024-008-0356-2

Yasuhara, H., Elsworth, D., & Polak, A. (2004). Evolution of permeability in a natural fracture: Significant role of pressure solution. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 109*(B3). doi:https://doi.org/10.1029/2003JB002663

Yasuhara, H., Kinoshita, N., Ogata, S., Cheon, D.-S., & Kishida, K. (2016). Coupled thermo-hydro-mechanical-chemical modeling by incorporating pressure solution for estimating the evolution of rock permeability. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 86*, 104-114. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2016.03.015

Yasuhara, H., Kinoshita, N., Ohfuji, H., Lee, D. S., Nakashima, S., & Kishida, K. (2011). Temporal alteration of fracture permeability in granite under hydrothermal conditions and its interpretation by coupled chemo-mechanical model. *Applied Geochemistry, 26*(12), 2074-2088. doi:https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2011.07.005

Yehya, A., & Rice, J. R. (2020). Influence of fluid-assisted healing on fault permeability structure. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, e2020JB020553. doi:https://doi.org/10.1029/2020JB020553

Yen, J. Y. (1971). Finding the k shortest loopless paths in a network. *management Science, 17*(11), 712-716. doi:https://doi.org/10.1287/mnsc.17.11.712

Zha, Y., Yeh, T.-C. J., Illman, W. A., Tanaka, T., Bruines, P., Onoe, H., & Saegusa, H. (2015). What does hydraulic tomography tell us about fractured geological media? A field study and synthetic experiments. *Journal of Hydrology, 531*, 17-30. doi:https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2015.06.013

Zhan, J., Xu, P., Chen, J., Zhang, W., Niu, C., & Han, X. (2016). A stepwise approach for 3D fracture intersection analysis and application to a hydropower station in Southwest China. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 89*, 116-128. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2016.08.006

Zhang, L., & Einstein, H. H. (2010). The planar shape of rock joints. *Rock Mechanics and rock engineering, 43*(1), 55-68. doi:https://doi.org/10.1007/s00603-009-0054-0

Zhang, W., Tang, X., Weisbrod, N., & Guan, Z. (2012). A review of colloid transport in fractured rocks. *Journal of Mountain Science, 9*(6), 770-787. doi:https://doi.org/10.1007/s11629-012-2443-1

Zhang, Y., Schaubs, P. M., Zhao, C., Ord, A., Hobbs, B. E., & Barnicoat, A. C. (2008). Fault-related dilation, permeability enhancement, fluid flow and mineral precipitation patterns: numerical models. *Geological Society, London, Special Publications, 299*(1), 239-255. doi:https://doi.org/10.1144/SP299.15

Zhu, W., David, C., & Wong, T. f. (1995). Network modeling of permeability evolution during cementation and hot isostatic pressing. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 100*(B8), 15451-15464. doi:https://doi.org/10.1029/95JB00958

Zou, L., & Cvetkovic, V. (2020). Inference of Transmissivity in Crystalline Rock Using Flow Logs Under Steady-State Pumping: Impact of Multiscale Heterogeneity. *Water Resources Research, 56*(8), e2020WR027254. doi:https://doi.org/10.1029/2020WR027254

UNIVERSITÉ DE RENNES 1

Titre : Colmatage des réseaux de fractures, modèles et conséquences hydrologiques

Mots clés : Réseaux de fractures, DFN, hydrogéologie, colmatage, réactivation des fractures

Résumé : L'état naturel des fractures dans les milieux rocheux cristallins a un impact hydrologique important car elles y constituent les seuls conduits qui existent. Les données indiquent souvent qu'une large proportion de fractures est cependant colmatée, et est donc imperméable aux écoulements. C'est le cas par exemple du futur site d'enfouissement de déchets nucléaires en Suède (Forsmark), pour lequel les carottes de puits révèlent qu'environ 75-80% des fractures sont colmatées. La distribution du colmatage dans un réseau de fractures est une interrogation critique puisqu'elle peut drastiquement changer la connectivité de ces ensembles et l'organisation des écoulements.
La première partie de ces travaux porte sur l'étude de la distribution du colmatage à partir de modèles numériques. Une problématique est de disposer de modèles simplifiés qui puissent être appliqués à l'étude de larges réseaux de fractures. Nous montrons qu'une structure de graphe peut être utilisée pour simplifier les modèles de réseaux de fractures (DFN) et calculer directement les flux. Ensuite, nous étudions son utilisation pour modéliser un processus de transport réactif engendrant de la précipitation au niveau des parois des fractures.
Dans une seconde partie, nous évaluons la distribution du colmatage à partir des données de terrain du site de Forsmark. Les analyses statistiques montrent d'abord une forte corrélation entre le caractère ouvert ou colmaté des fractures et la contrainte normale appliquée au plan de fracture. Ce contrôle d'ordre mécanique est approfondi par une analyse des pressions de fluides, qui semblent avoir amené les fractures à la réactivation. Enfin, en utilisant la modélisation DFN, nous analysons les conséquences hydrologiques de la corrélation avec la contrainte normale identifiée précédemment. Nous montrons que cette corrélation ne permet pas à elle seule d'expliquer l'organisation des flux mesurée dans les puits de Forsmark et qu'une corrélation avec la taille de fracture doit nécessairement être prise en compte.

Title : Sealing in fracture networks, models and hydrological consequences

Keywords : Fracture networks, DFN, hydrogeology, fracture sealing, fracture reactivation

Abstract : Fracture networks have a major impact on crystalline rocks' hydraulic properties because they constitute the only flowing paths. Field data often point out that a large proportion of the network is however sealed by physico-chemical processes and thus is impermeable. For example, at the Forsmark site (Sweden), future deep nuclear waste repository, the core-log data indicate that 75-80 % of fractures are sealed. The way sealed surfaces are distributed in fracture networks is critical because it can drastically change the connectivity and the flow organization. In the first part, we study how the sealing distribution can be constrained by numerical models. The aim is to have models that are simple enough to be applied to large fracture networks. We show that a graph structure (made of nodes and edges) can be used to simplify fracture network models (DFN) and to compute the flow directly. Then, we use it to model a sealing process coupled to the flow. In the second part, we evaluate the sealing distribution from Forsmark core-log data. The statistical analyses show a strong correlation between the proportion of open fractures and the normal stress, indicating a mechanical control. This mechanical control is further deepened by an analysis of fluid pressures, which seem to have caused fracture reactivation. Finally, we evaluate the hydrological consequences of the measured correlation with the normal stress, by using DFN models. We show that this correlation can not itself explain the flow organization measured in Forsmark boreholes and that a correlation with fracture sizes must be considered.