

Modélisation micromécanique des argiles gonflantes

**Thibault LEMAIRE, Sébastien ROLLAND,
Christian MOYNE, Didier STEMMELEN**

Laboratoire d’Energétique
et de Mécanique Théorique et Appliquée
CNRS – INPL – UHP (UMR 7563)
2, avenue de la Forêt de Haye
54504 Vandœuvre lès Nancy Cedex

Márcio A. MURAD

Laboratório Nacional de Computação Científica
Avenida Getúlio Vargas, 333
25651–070 Petrópolis, RJ, Brésil

Plan de l'exposé

1. Introduction aux argiles

- 1.1. Structure des argiles gonflantes
- 1.2. Organisation générale : milieu à n échelles ?
- 1.3. Forces électrochimiques

2. Modélisation mathématique

- 2.1. Equations microscopiques
- 2.2. Homogénéisation périodique
- 2.3. Equations à résoudre

3. Conclusion

1. Introduction aux argiles

1.1. Structure des argiles gonflantes

- **Tétraèdres de silice et octaèdres d'alumine**

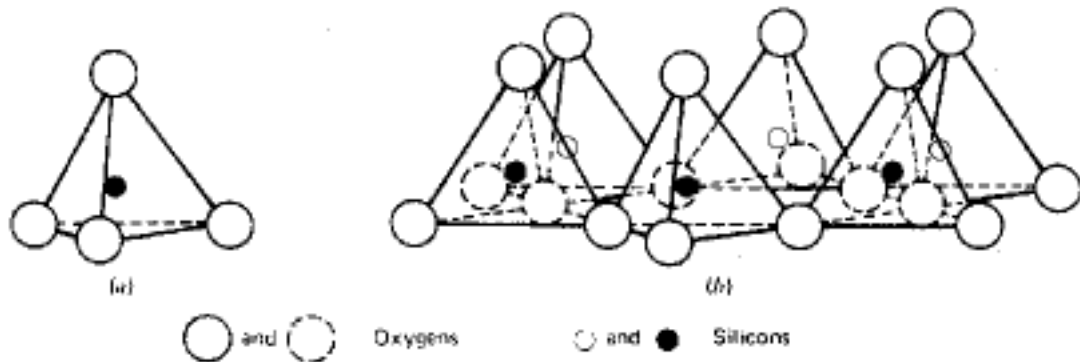


Figure 3.5 Silicon tetrahedron and silica tetrahedra arranged in a hexagonal network.

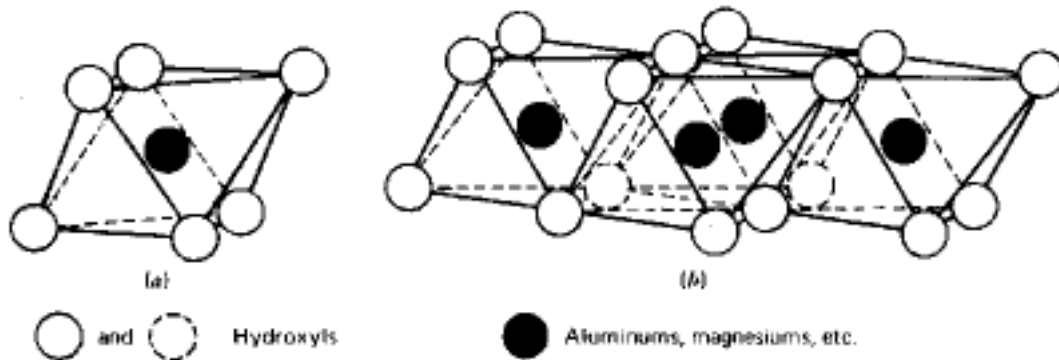


Figure 3.6 Octahedral unit and sheet structure of octahedral units.

- **Substitutions isomorphes**

- * $\text{Al}^{3+} \longrightarrow \text{Mg}^{2+}$ ou $\text{Si}^{4+} \longrightarrow \text{Al}^{3+}$

- * Densité surfacique négative de charge ($\sigma < 0$)

• Arrangement microscopique des argiles

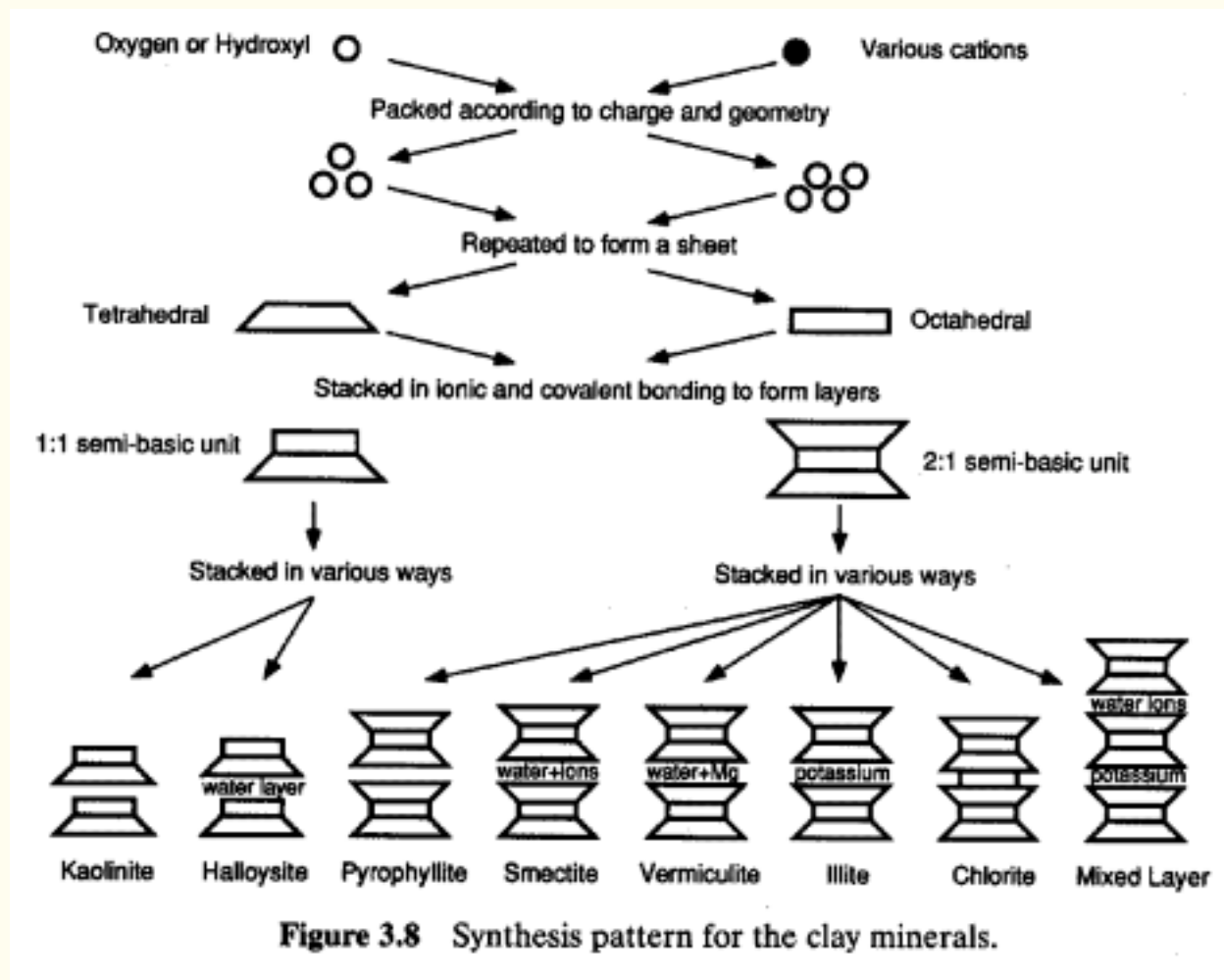


Figure 3.8 Synthesis pattern for the clay minerals.

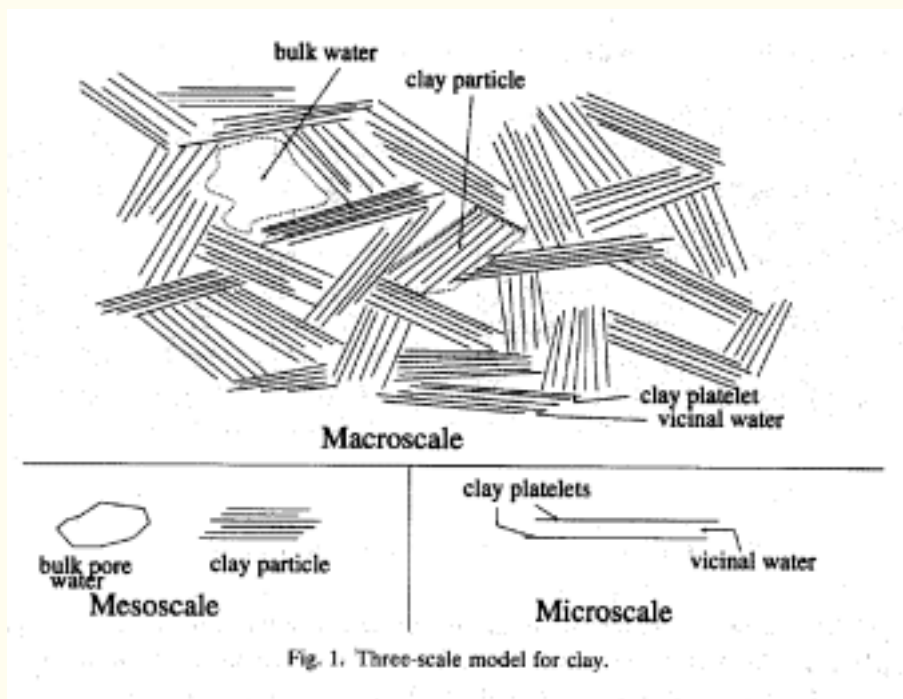
1.2. Organisation générale : milieu à n échelles ?

- Arrangement mésoscopique d'une smectite



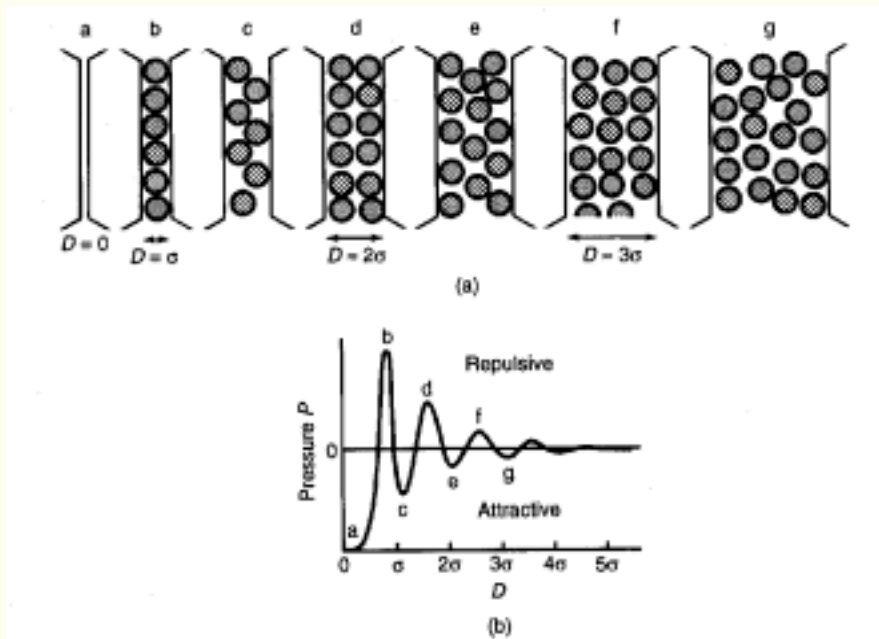
Micrographie de D. Teissier

- Milieu à trois échelles

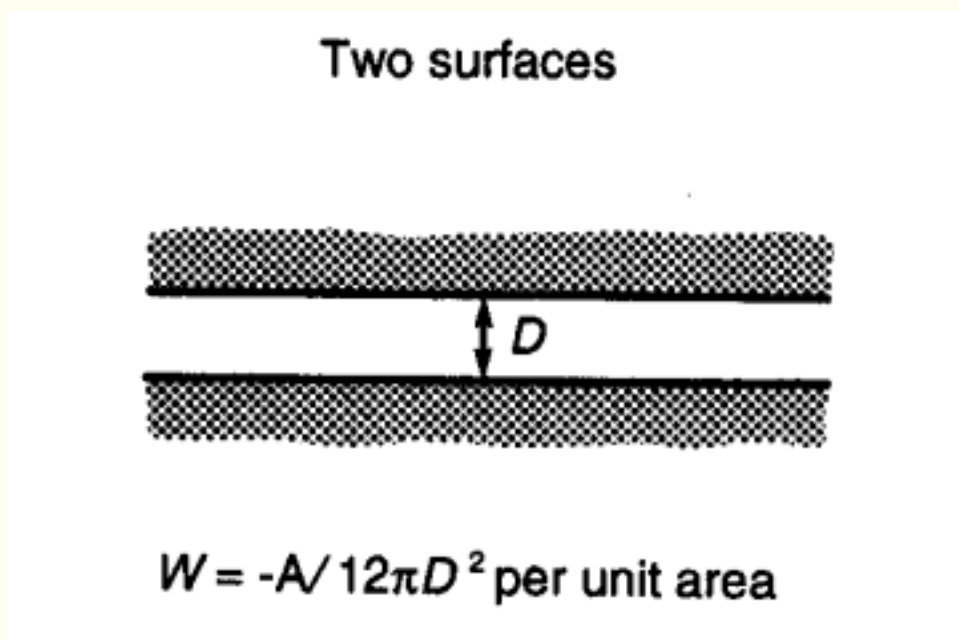


1.3. Forces électrochimiques

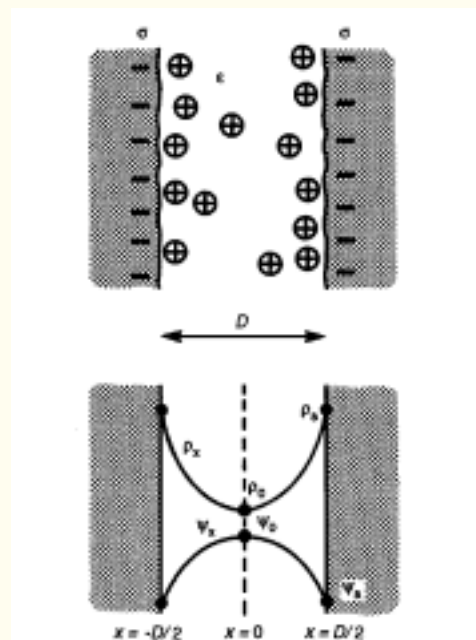
- $D < 3 \cdot 10^{-9}$ m : Forces d'hydratation (attractives-répulsives)



- Forces de Van der Waals (attractives)



- $D > 3.10^{-9}$ m : Forces électrostatiques (répulsives)



2. Modélisation mathématique

2.1. Equations microscopiques

- Equation de Poisson dans V_f

$$\begin{aligned}\nabla^2 \Phi &= -\frac{q}{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0} \\ q &= e(n^+ - n^-)\end{aligned}$$

- Equations de Stokes dans V_f

$$\begin{aligned}0 &= \nabla \cdot \mathbf{v} \\ 0 &= -\nabla p - q \nabla \Phi + \mu_f \nabla^2 \mathbf{v}\end{aligned}$$

- Transport des ions dans V_f (Na^+ et Cl^-)

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\pm \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left\{ \mathcal{D}_{w^\pm} \left[\nabla n^\pm \pm n^\pm \nabla \left(\frac{e \Phi}{k T} \right) \right] \right\}$$

- Mécanique du solide dans V_s

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s = 0 \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{c}_s \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{u})$$

- Sur l'interface fluide-solide A_{fs}

- * Charge électrique imposée

$$\nabla \Psi \cdot \mathbf{n} = \frac{\sigma}{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0}$$

- * Condition d'adhérence

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$$

- * Imperméabilité du solide aux ions

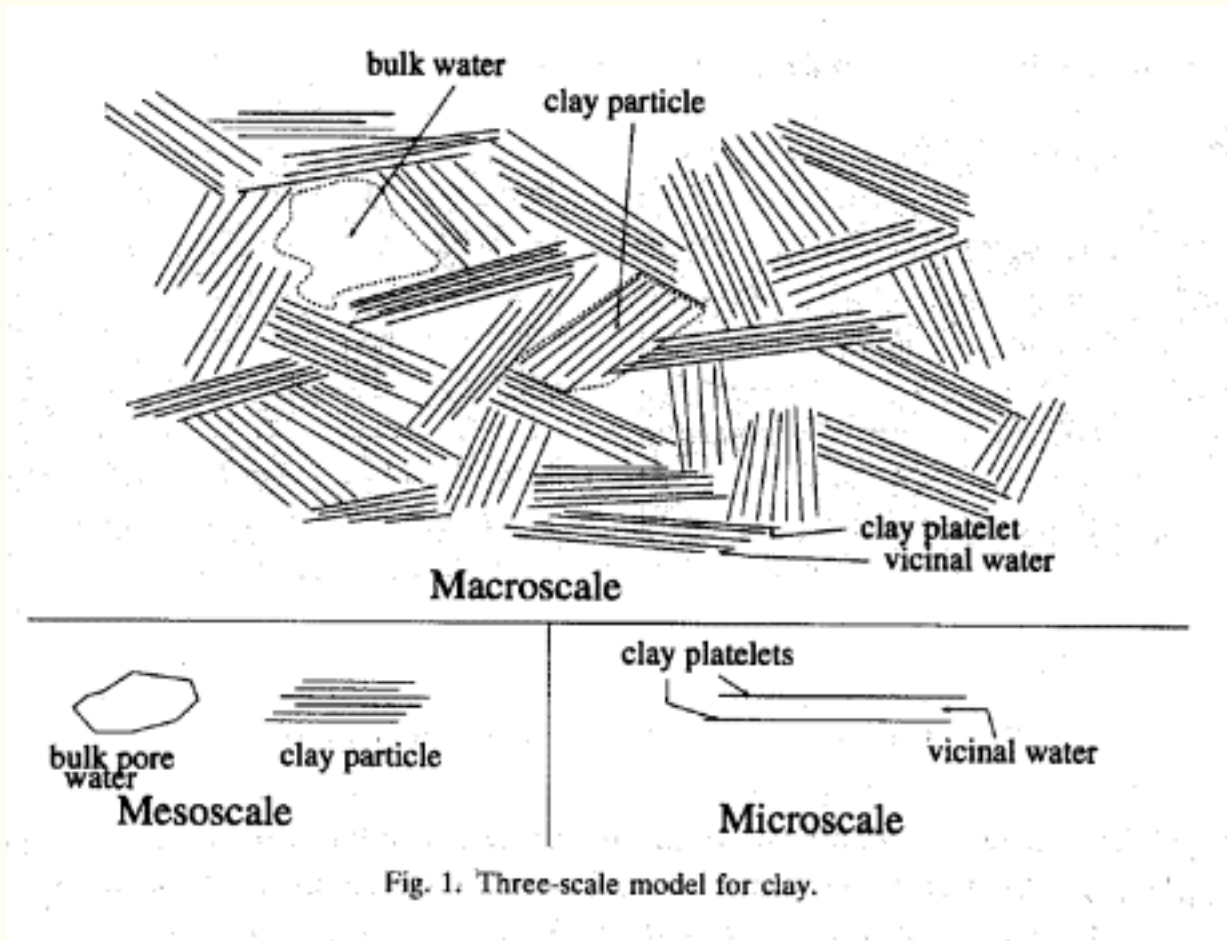
$$-\mathcal{D}_{\pm} \left[\nabla n^{\pm} \pm n^{\pm} \nabla \left(\frac{e \Phi}{k T} \right) \right] \cdot \mathbf{n} = 0$$

- * Continuité de la contrainte

$$\left[-p \mathbf{I} + \frac{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0}{2} (2 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} - E^2 \mathbf{I}) + 2 \mu_f \mathcal{E}(\mathbf{v}) \right] \mathbf{n} = c_s \mathcal{E}(\mathbf{u}) \mathbf{n}$$

2.2. Homogénéisation périodique

- Problème à trois échelles



- Problème à deux échelles

“Echelle microscopique”



“Echelle mésoscopique”

2.3. Equations à résoudre

2.3.1. Equation de Poisson–Boltzmann (microscopique)

$$\nabla_y^2 \bar{\varphi}^0 = \frac{1}{L_D^2} \sinh \bar{\varphi}^0 \quad \text{dans } Y_f$$

$$\nabla_y \bar{\varphi}^0 \cdot \mathbf{n} = \frac{e \sigma}{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 k T} \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

Conditions de périodicité sur ∂Y_{fe}

2.3.2. Contraintes mécaniques

* Tenseur des contraintes totales

$$\nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}_T^0 = 0$$

* Principe de Terzaghi modifié

$$\boldsymbol{\sigma}_T^0 = - \underbrace{p_b^0 \boldsymbol{\alpha}}_{\text{pression du pore}} + \underbrace{\mathbf{C}_s \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0)}_{\text{contraintes de contact}} - \underbrace{\boldsymbol{\Pi}^0}_{\text{gonflement}}$$

* “Pression” de gonflement : $\boldsymbol{\Pi}^0$

2.3.3. Ecoulement du fluide

- Loi de Darcy modifiée

$$\mathbf{v}_D^0 = \langle \mathbf{v}^0 \rangle - \varepsilon_f \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} = \begin{aligned} & -\mathbf{K}_P \cdot \nabla_x p_b^0 && \text{Darcy} \\ & -\mathbf{K}_C \cdot \nabla_x n_b^0 && \text{Osmose chimique} \\ & -\mathbf{K}_E \cdot \nabla_x \bar{\psi}^0 && \text{Electro-osmose} \end{aligned}$$

- Conservation de la masse

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v}_D^0 + \alpha : \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) = \beta \frac{\partial p_b^0}{\partial t}$$

2.3.4. Transport des ions (macroscopique)

- Changement de variables : $n^{+0}, n^{-0} \longrightarrow n_b^0, \psi^0$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_f G^\pm n_b^0) = \nabla_x \cdot \left[\varepsilon_f \mathbf{D}_\pm^* \cdot \left(\nabla_x n_b^0 \pm n_b^0 \nabla_x \bar{\psi}^0 \right) \right]$$

où $G^\pm = \langle \exp \mp \bar{\varphi}^0 \rangle^f$ et \mathbf{D}_\pm^* calculés par une fermeture.

- Forme alternative

* Conservation de la charge

$$\nabla_x \cdot \left[\varepsilon_f \mathbf{D}_+^* \left(\nabla_x n_b^0 + n_b^0 \nabla_x \bar{\psi}^0 \right) - \varepsilon_f \mathbf{D}_-^* \left(\nabla_x n_b^0 - n_b^0 \nabla_x \bar{\psi}^0 \right) \right] = 0$$

* Transport du sel

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\varepsilon_f \langle \cosh \bar{\varphi}^0 \rangle^f n_b^0 \right] = \nabla_x \cdot \left(\frac{\mathbf{D}_+^* + \mathbf{D}_-^*}{2} \nabla_x n_b^0 + \frac{\mathbf{D}_+^* - \mathbf{D}_-^*}{2} n_b^0 \nabla_x \bar{\psi}^0 \right)$$

2.3.5. Conservation de la masse pour le fluide

$$\frac{\partial \varepsilon_f}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{v}_D + \varepsilon_f \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} = 0$$

3. Conclusions

- * Théorie complète pour le problème à deux échelles.
- * Besoin de solutions numériques (aussi bien micro que macro) pour comprendre le fonctionnement du modèle.
- * La physique du modèle peut/doit être enrichie à l'échelle microscopique : forces d'hydratation, Van der Waals, couche de Stern, couplage avec dynamique moléculaire (?) ...
- * Passer de deux échelles à trois échelles : co-existence de feuilletts et d'un réseau de fissures :
 - fissures saturées : en cours,
 - fissures non saturées : couplage pression de gonflement / pression capillaire.
- * Valider expérimentalement : banc γ double source.
- * Appliquer.