

**Modèle macroscopique de transferts couplés
hydro-chimio-mécaniques dans les argiles gonflantes
obtenu par homogénéisation périodique**

**Thibault Lemaire[†], Christian Moyne[†],
Márcio Murad[‡], Didier Stemmelen[†]**

[†]Laboratoire d’Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée
(UMR 7563 CNRS – INPL – UHP)

2, avenue de la Forêt de Haye, 54504 Vandœuvre lès Nancy

[‡]Laboratório Nacional de Computação Científica
Avenida Getúlio Vargas 333,25.651–070 Petrópolis, RJ – Brésil

La compréhension des phénomènes de transport au travers d’un milieu argileux gonflant typique d’une barrière ouvragée requiert une description simultanée des transferts de charge, d’eau et de soluté (sel) mettant en jeu diverses échelles de longueur. A l’échelle microscopique (pour le mécanicien), il est bien connu que, du fait des imperfections cristallographiques, les feuillets d’argile possèdent une densité de charge négative à leur surface. Quand ces feuillets sont immergés dans une solution saline (eau + sel), il intervient une dissociation des cations et des anions. Pour satisfaire la condition d’électroneutralité, la densité surfacique de charge est neutralisée par un excès de concentration des cations relativement à celle des anions. La présence d’une plus grande concentration de cations entre les feuillets constitutifs de l’argile provoque une diminution du potentiel chimique de l’eau et le milieu va alors absorber de l’eau occasionnant le phénomène d’expansion de la matrice poreuse. Pour contenir cette expansion, un excès de pression doit être exercé : pression dite de disjonction à l’échelle microscopique entre deux feuillets et de gonflement à l’échelle macroscopique. Cet équilibre de forces est typique des processus qui apparaissent dans les milieux poreux déformables.

Le milieu poreux déformable est modélisé comme un système hiérarchique composé de diverses échelles de longueur qui peuvent varier de l’angström au mètre. Deux échelles sont considérées : à l’échelle microscopique, le feuillet d’argile hydraté et à la seconde échelle mésoscopique, la particule argileuse (empilement de feuillets) [1, 2, 3, 4]. Au contraire de la démarche traditionnelle qui privilégie une approche *théorie des mélanges (hybrides)*, nous avons retenu, quitte à simplifier la description des forces à l’échelle microscopique, l’homogénéisation périodique comme outil de travail. Les phénomènes macroscopiques électrocinétiques comme le flux d’eau par électro-osmose sous l’action du gradient de potentiel de courant, le mouvement électrophorétique des ions et le gonflement induit par osmose sont obtenus en homogénéisant les équations de l’électro-hydrodynamique (mouvement de la solution électrolytique) couplées aux équations de Nernst–Planck (transport des ions) et de

Poisson–Boltzmann (distribution du potentiel électrique). L’avantage de cette méthode est de fournir une représentation micromécanique explicite des coefficients électrocinétiques et de la pression de gonflement du milieu [5]. La *pression* (en fait le tenseur) de gonflement est l’équivalent macroscopique (homogénéisé) de la pression de disjonction définie à l’échelle microscopique due à la combinaison des effets osmotiques (pression de Donnan) et des effets électriques (tenseur de Maxwell) au sein de la phase fluide.

Une première approche numérique du problème macroscopique a été développée à des fins d’illustration [2]. Une approximation par éléments finis du problème macroscopique a été obtenue. A chaque pas de temps, le système est linéarisé et sa résolution utilise un algorithme avec relaxation de Picard. L’application consiste à étudier un processus simultané de consolidation mécanique et chimique d’une barrière argileuse à l’interface entre un stockage de déchets et un aquifère. La microstructure du milieu a été idéalisée en orientant les feuillets d’argile parallèlement au plan vertical et en imposant une pression externe constante dans la direction perpendiculaire. Pour cette microstructure unidimensionnelle, les problèmes de fermeture microscopique deviennent analytiques. Ceci facilite la prise en compte du couplage entre les problèmes macroscopiques et microscopiques, la variation des grandeurs macroscopiques influençant de manière tout à fait significative les paramètres du problème macroscopique obtenus par la résolution des problèmes (microscopiques) de fermeture. La solution du problème macroscopique fournit alors les évolutions spatiales des diverses grandeurs macroscopiques : pression du liquide, concentration en sel, porosité, potentiel de courant...

Références

- [1] C. Moyne and M. A. Murad, Micromechanical computational modeling of hydration swelling of montmorillonite. *in Chemo-mechanical coupling in clays; from nano-structure to engineering applications*, pp. 121–147, Di Maio, Hueckel & Loret editors, Baklema Publishers, Lisse, 2002.
- [2] C. Moyne and M. A. Murad, Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from a micro/macro-homogenization procedure, *International J. Solids and Structures*, 39, pp. 6159–6190, 2002.
- [3] T. Lemaire, C. Moyne, D. Stemmelen, M. A. Murad, Electro-Chemo-Mechanical Couplings in Swelling Clays Derived by Homogenization: Electroviscous Effects and Onsager’s Relations, Poromechanics II, Proceedings of the 2nd Biot Conference on Poromechanics/Grenoble/France/26–28 août 2002, pp. 489–494, Auriault et al Editors, Balkema Publishers, 2002.
- [4] C. Moyne and M. A. Murad, Macroscopic behavior of swelling porous media derived from micromechanical analysis, Special issue of *Transport in Porous Media*, on Physico-Chemical and Electrochemical Effects in Porous Media, 50, pp. 127–151, 2003.
- [5] M. A. Murad and C. Moyne, Micromechanical computational modeling of expansive porous media, *C.R. Mecanique* 330, pp. 865–870, 2002.