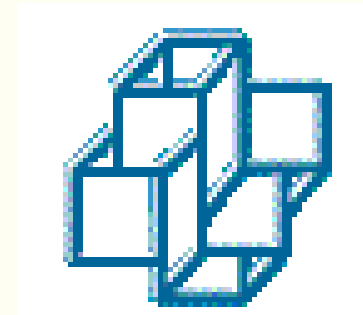


**LEMTA**



**LNCC**

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

**Christian MOYNE, Thibault LEMAIRE, 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, France**

**Márcio ARAB MURAD**

**Laboratório Nacional de Computação Científica**

**Avenida Getúlio Vargas, 333**

**25651–070 Petrópolis, RJ, Brésil**

## 1. Objectifs du travail

### Obtenir un modèle macroscopique pour décrire les phénomènes électro-hydro-chimio-mécaniques dans une argile gonflante

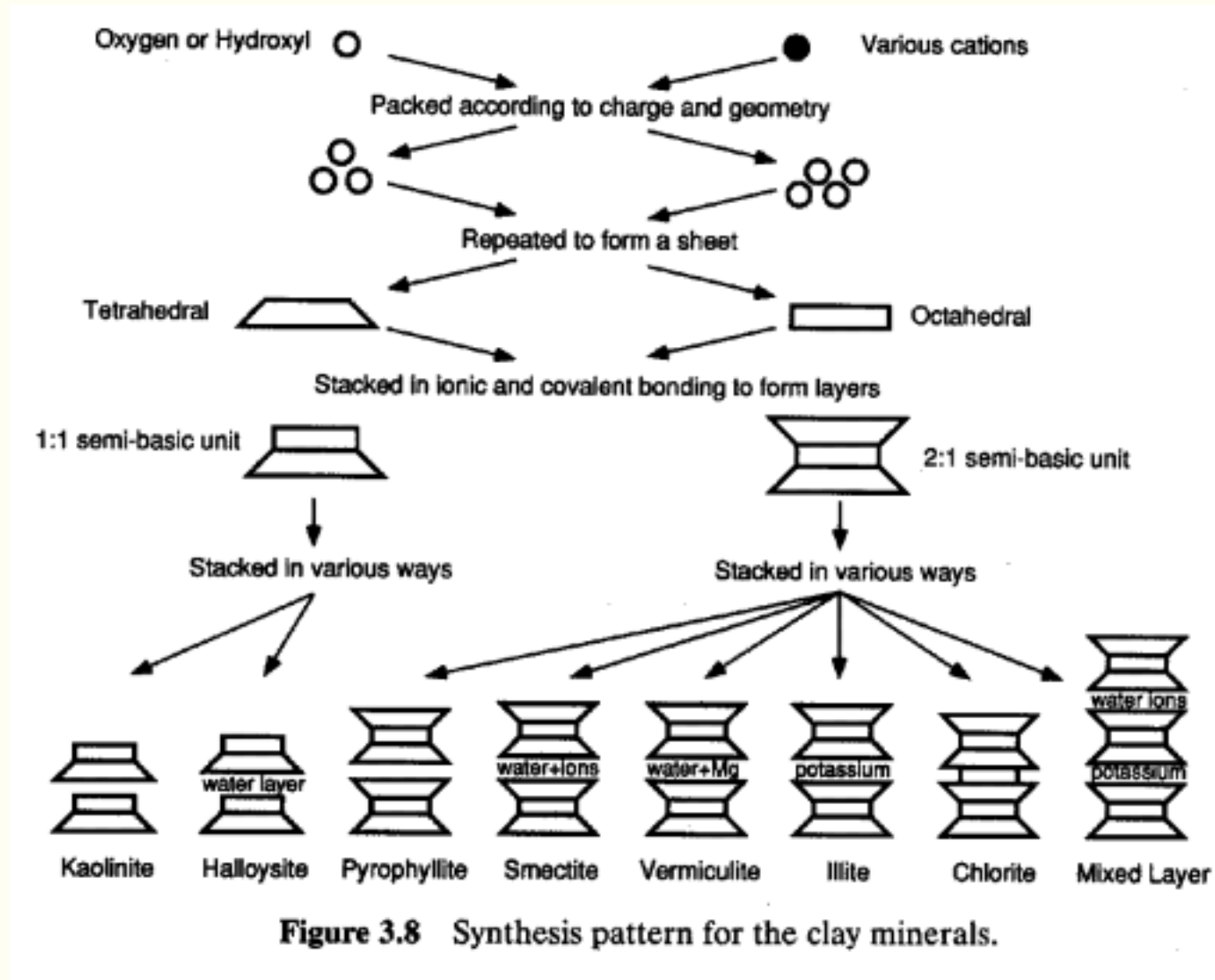
● **Méthode thermodynamique** : (Bennethum, Cushman, Murad – Coussy, Dormieux – Gu, Lai, Van Mow – Grodzinsky – Huyghe)

- \* **Ecriture des lois de conservation en utilisant la Théorie des Mélanges Hybrides (Gray, Hassanizadeh).**
- \* **Ecriture de la source d'entropie.**
- \* **En déduire les équations phénoménologiques satisfaisant à la restriction thermodynamique.**

● **Changement d'échelle** :

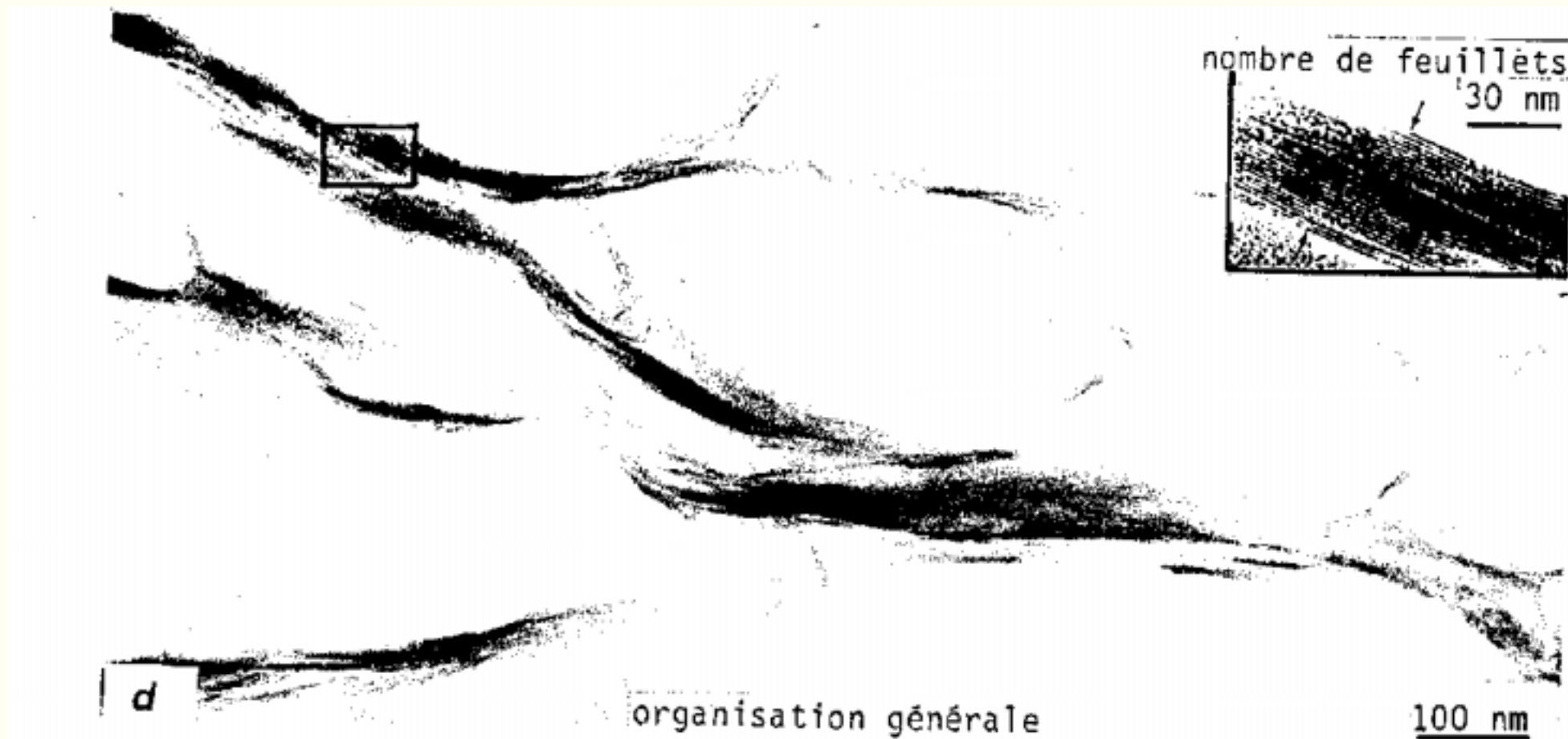
- \* **Ecriture des équations à l'échelle microscopique.**
- \* **Effectuer le(s) passage(s) micro-macro.**

## 2. Géométrie



- **Substitutions isomorphes :**       $\Rightarrow$  Charge de surface négative ( $\sigma < 0$ )

- **Vue mésoscopique d'une smectite**



**Micrographie de D. Teissier**

• Milieu à trois échelles

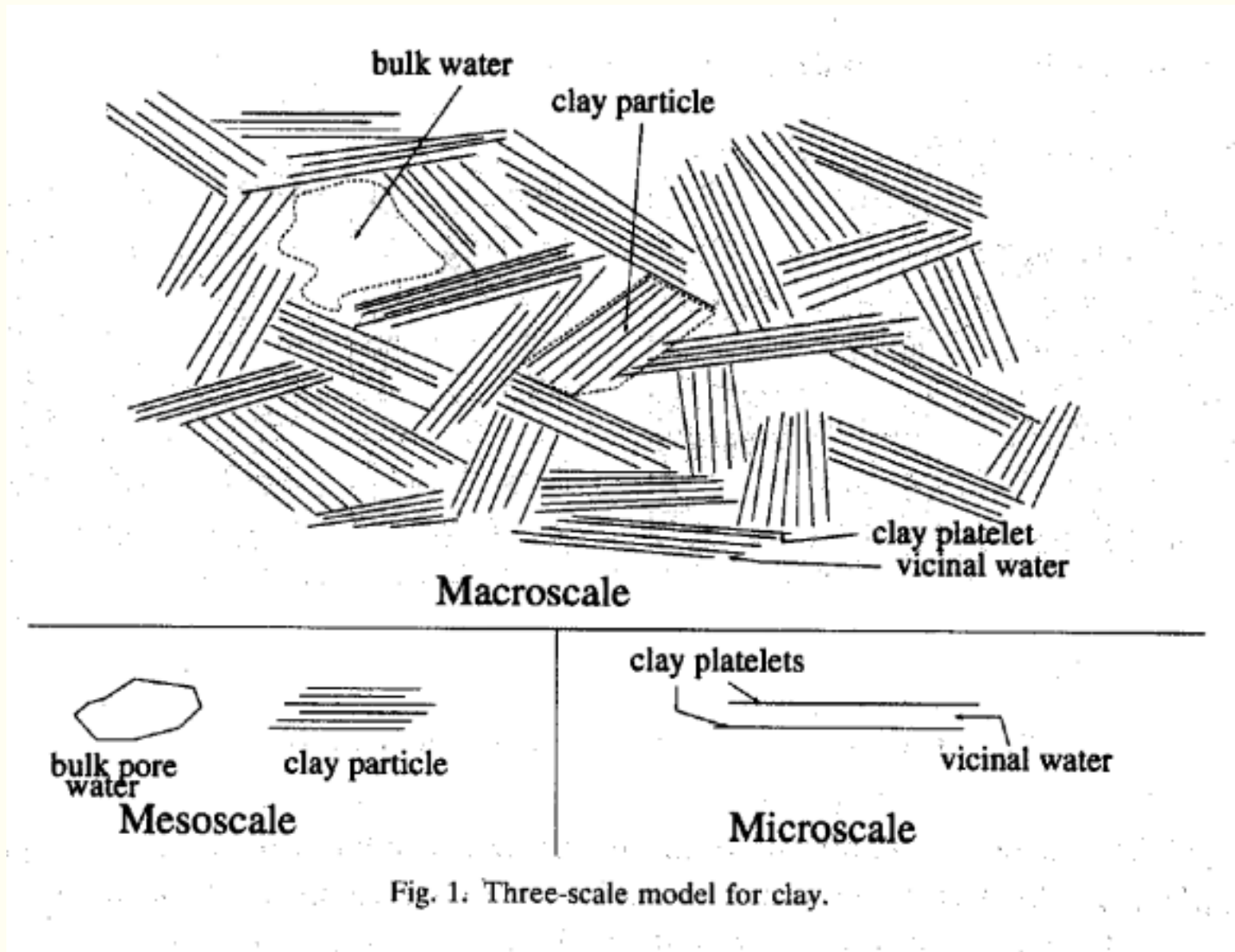


Fig. 1. Three-scale model for clay.

### 3. Equations à l'échelle microscopique

- **Milieux poreux** : saturé par un fluide newtonien, sel monovalent :  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ .
- **Gonflement osmotique** : forces électrostatiques dominantes.
- **Inconnues** :

Pot. électrique : $\Phi$	Cations : $c^+$	Anions : $c^-$
Concentr. bulk : $c_b$	Pot. double couche : $\varphi$	Pot. d'écoulement : $\psi_b$
Vitesse fluide : $\mathbf{v}$	Pression bulk : $p_b$	
Déplac. solide : $\mathbf{u}$		

$$\Phi = \varphi + \psi_b \quad c^\pm = \exp\left(\mp \frac{F\varphi}{RT}\right) \quad \text{"bulk"} \Leftrightarrow \varphi = 0.$$

- **Séparation des échelles** : microscopique  $\ell(\mathbf{y})$  ; macroscopique  $L(\mathbf{x})$  ;  $\epsilon = \frac{\ell}{L} \ll 1$ .
- **Indice "b"** : variables lentes et continues avec le bulk.
- **Nombre de Péclet**:  $\text{Pe} = \frac{v_{ref}L}{D_\pm} = \mathcal{O}(\epsilon^m)$  ;  $m = 1$  (diffusion) ;  $= 0$  (+ convection).

## • Equations à résoudre

- Equation de Poisson dans  $Y_f$

$$\epsilon^2 \nabla^2 (\varphi + \psi_b) = -\frac{q}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}, \quad q = F(c^+ - c^-), \quad c^\pm = c_b \exp(\mp \bar{\varphi}) \quad \text{et} \quad \bar{\varphi} = \frac{F \varphi}{RT}$$

$$\mathbf{E} = -\epsilon \nabla (\varphi + \psi_b)$$

- Equations de Stokes dans  $Y_f$

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v}$$

$$0 = -\nabla p_b - 2RT (\cosh \bar{\varphi} - 1) \nabla c_b + 2RT c_b \sinh \bar{\varphi} \nabla \bar{\psi}_b + \epsilon^2 \mu_f \nabla^2 \mathbf{v}$$

- Transport des ions dans  $Y_f$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\exp(\mp \bar{\varphi}) c_b] + \epsilon^m \nabla \cdot (\exp(\mp \bar{\varphi}) c_b \mathbf{v}) = \nabla \cdot [\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}) (\nabla c_b \pm c_b \nabla \bar{\psi}_b)]$$

- Déformation du solide dans  $Y_s$

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

#### 4. Homogénéisation de la mécanique pour la phase solide

• **Ordre**  $\mathcal{O}(\epsilon^0)$ :  $\mathbf{u}^0(\mathbf{x}, t)$

• **Ordre**  $\mathcal{O}(\epsilon)$ :

$$\mu_s \nabla_y^2 \mathbf{u}^1 + (\lambda_s + \mu_s) \nabla_y (\nabla_y \cdot \mathbf{u}^1) = 0 \quad \text{dans } Y_s$$

$$- [p_b^0(\mathbf{x}, t) \mathbf{I} + \mathbf{\Pi}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)] \cdot \mathbf{n} = [\lambda_s (\nabla_x \cdot \mathbf{u}^0 + \nabla_y \cdot \mathbf{u}^1) \mathbf{I} + 2 \mu_s (\boldsymbol{\mathcal{E}}_x(\mathbf{u}^0) + \boldsymbol{\mathcal{E}}_y(\mathbf{u}^1))] \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

• **Sur**  $\partial Y_{se}$ : Conditions de périodicité

• **Pression de disjonction**  $\mathbf{\Pi}^0$

$$\mathbf{\Pi}^0 = \underbrace{- \int_0^{\varphi^0} F (c^{+0} - c^{-0}) d\varphi \mathbf{I}}_{\pi^0 = RT(c^{+0} + c^{-0} - 2c_b^0)} - \underbrace{\frac{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}{2} (2 \mathbf{E}^0 \mathbf{E}^0 - (E^0)^2 \mathbf{I})}_{\boldsymbol{\tau}_M^0}$$

Pression de Donnan

Tenseur de Maxwell

- **Fermeture pour  $\mathbf{u}^1$**

$$\mathbf{u}^1 = \zeta(\mathbf{y}) p_b^0(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{y}) : \boldsymbol{\mathcal{E}}_x(\mathbf{u}^0) + \mathbf{u}_\pi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) + \hat{\mathbf{u}}^1(\mathbf{x}, t)$$

- **$\zeta$  et  $\boldsymbol{\xi}$**  : Homogénéisation des équations de Biot de la poroélasticité (Auriault et Sanchez-Palencia, 1977).

- **$\mathbf{u}_\pi^1$**  vérifie dans  $Y_s$  :

$$\mu_s \nabla_y^2 \mathbf{u}_\pi^1 + (\lambda_s + \mu_s) \nabla_y (\nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1) = 0$$

et sur  $\partial Y_{fs}$  :

$$-\boldsymbol{\Pi}^0 \cdot \mathbf{n} = [\lambda_s \nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1 \mathbf{I} + 2 \mu_s \boldsymbol{\mathcal{E}}_y(\mathbf{u}_\pi^1)] \cdot \mathbf{n}$$

avec des conditions de périodicité sur  $\partial Y_{se}$

## • Equations de Biot modifiées

### \* Tenseur des contraintes totales

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dans } Y_f, \quad \sigma_t = \sigma_f \\ \text{Dans } Y_s, \quad \sigma_s \end{array} \right. \quad \nabla_x \cdot \langle \sigma_t^0 \rangle = 0$$

### \* Principe de Terzaghi modifié

$$\langle \sigma_t^0 \rangle = \underbrace{-p_b^0 (n_f \mathbf{I} - \langle \mathbf{c}_s \cdot \mathcal{E}_y(\zeta) \rangle)}_{\text{pression du pore}} + \underbrace{\langle \mathbf{c}_s \cdot (\mathbf{I} + \mathcal{E}_y(\xi)) \rangle \cdot \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0)}_{\text{contraintes de contact}} - \underbrace{\langle \Pi^0 \rangle_{SP}}_{\text{tenseur de gonflement}}$$

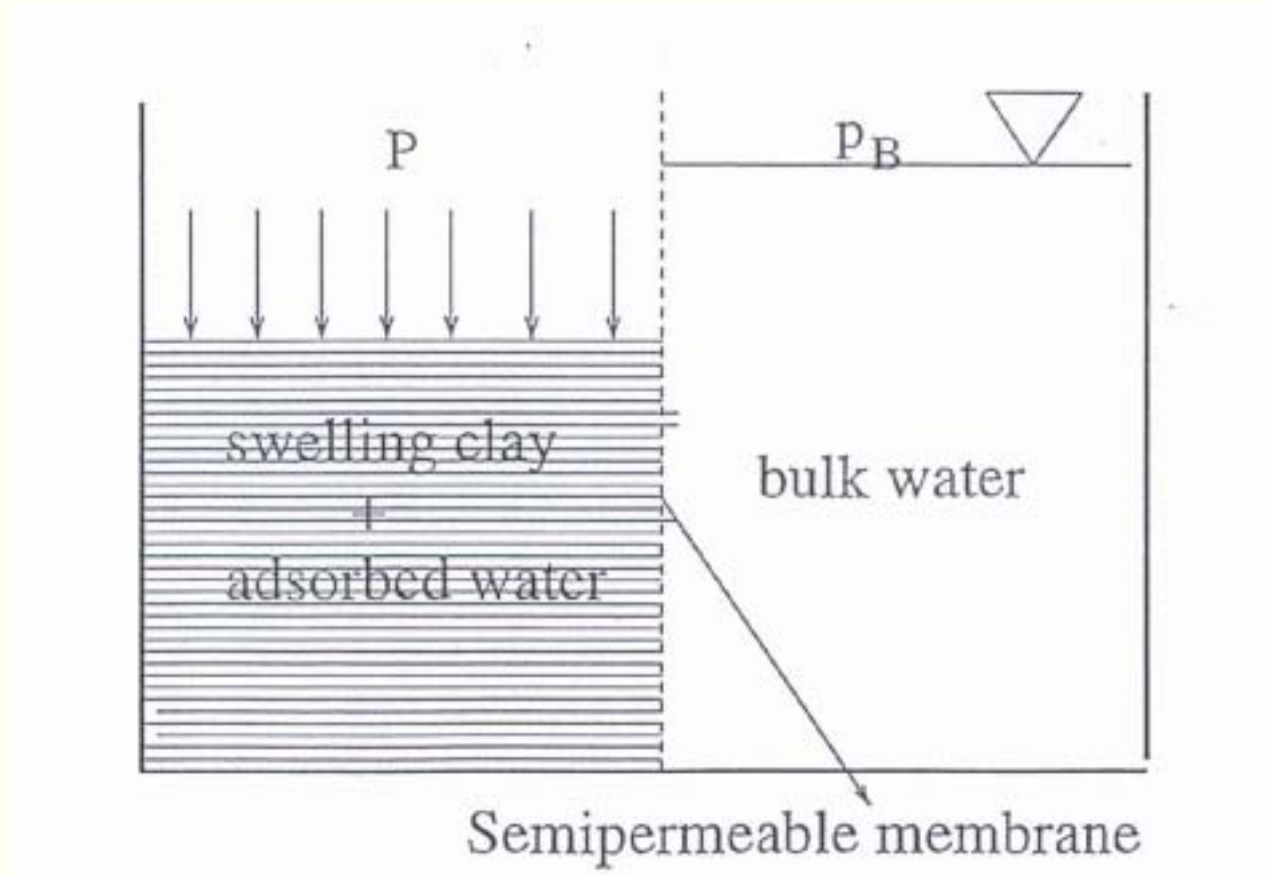
### \* “Pression de gonflement” (tenseur de gonflement)

$$\langle \Pi^0 \rangle_{SP} = \underbrace{-n_s \langle \mathbf{c}_s \cdot \mathcal{E}_y(\mathbf{u}_\pi^1) \rangle^s}_{\text{solide}} + \underbrace{n_f \langle \Pi^0 \rangle^f}_{\text{fluide}}$$

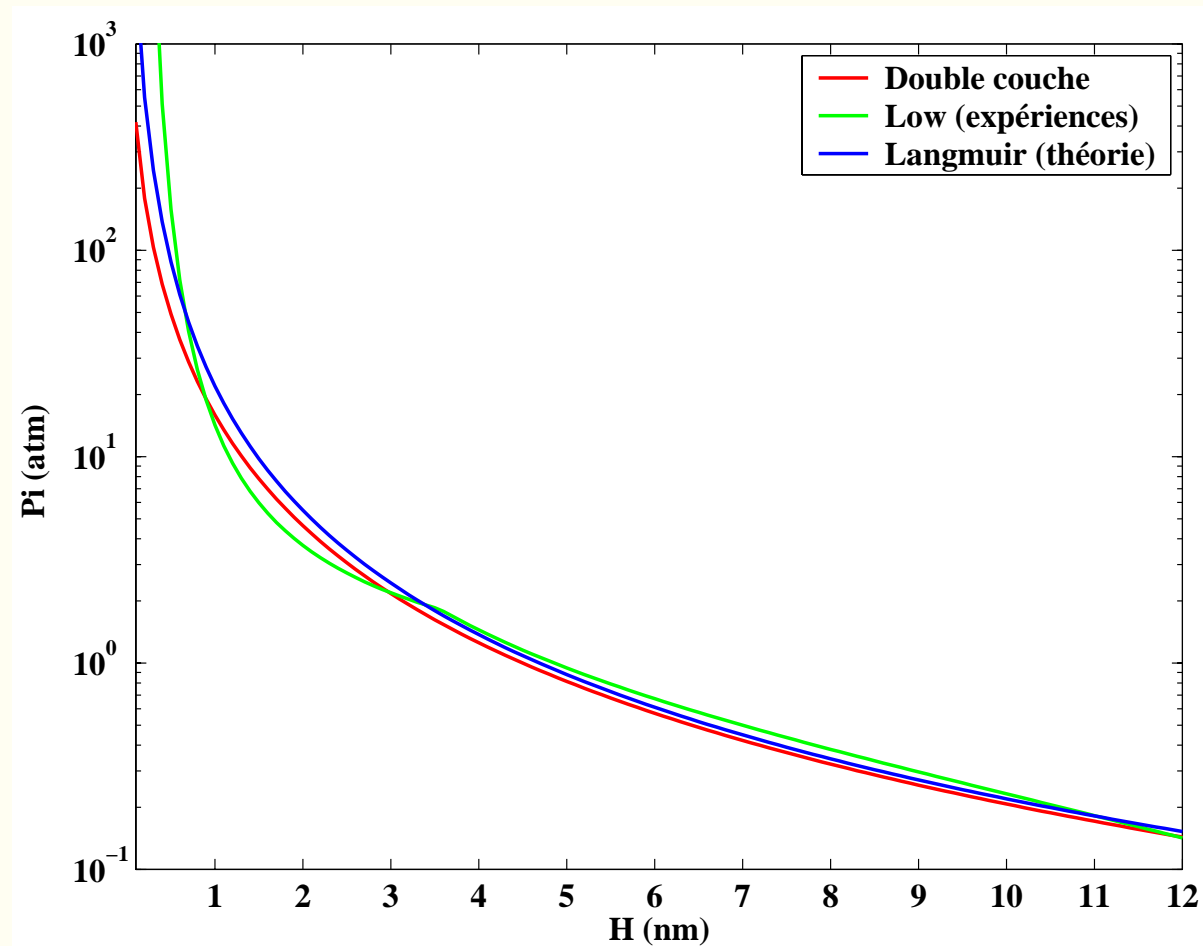
- **Expérience de Philip Low**

- \* **Particules argileuses alignées sans contact**

- \* **Pas de contrainte de contact dans la loi macroscopique**



$$\langle \Pi \rangle_{SP} = (P - p_b) \mathbf{I}$$

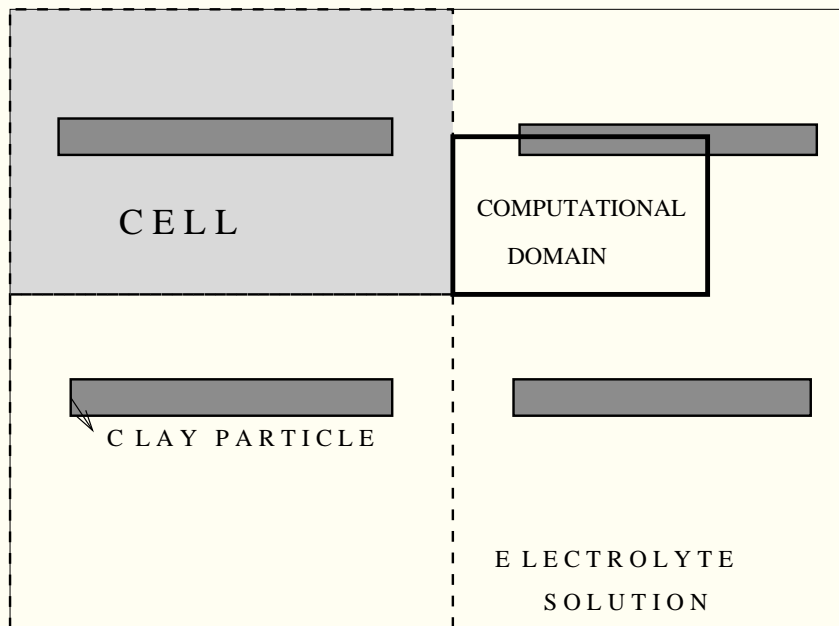


$$C = 10^{-4} \text{ mole/l}$$

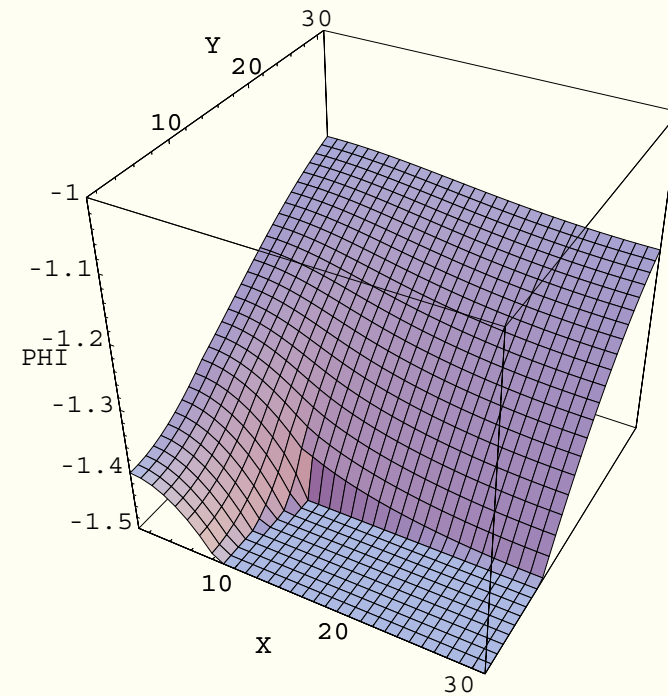
Formule de Langmuir

$$\langle \Pi \rangle_{SP} = \langle \Pi \rangle \simeq \frac{\pi^2}{2} \epsilon \epsilon_0 \left( \frac{RT}{FH} \right)^2$$

• Autre exemple

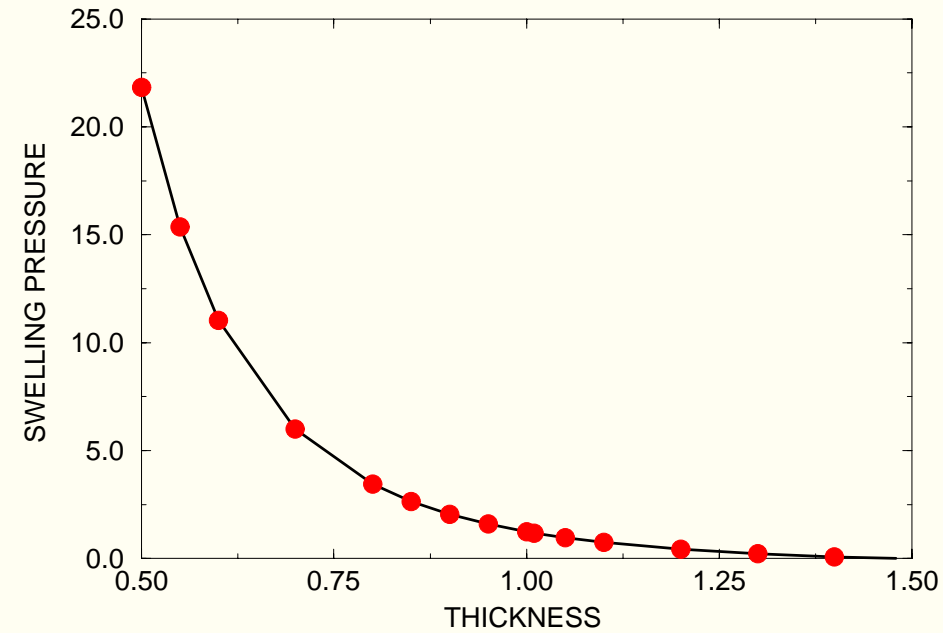


Cellule unité périodique  
et domaine de calcul (carré de côté  $H$ )



$$\varphi^* \equiv \varphi^0 \tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 / \sigma L_D$$

en fonction  $\mathbf{x}^* = \mathbf{x} / L_D$ .



Pression de gonflement adimensionnelle  $\Pi_S^* \equiv (2 \Pi_S^0 \tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 / \sigma^2)$   
en fonction de l'espacement entre les couches  $H/L_D$ .

## 5. Modèle macroscopique

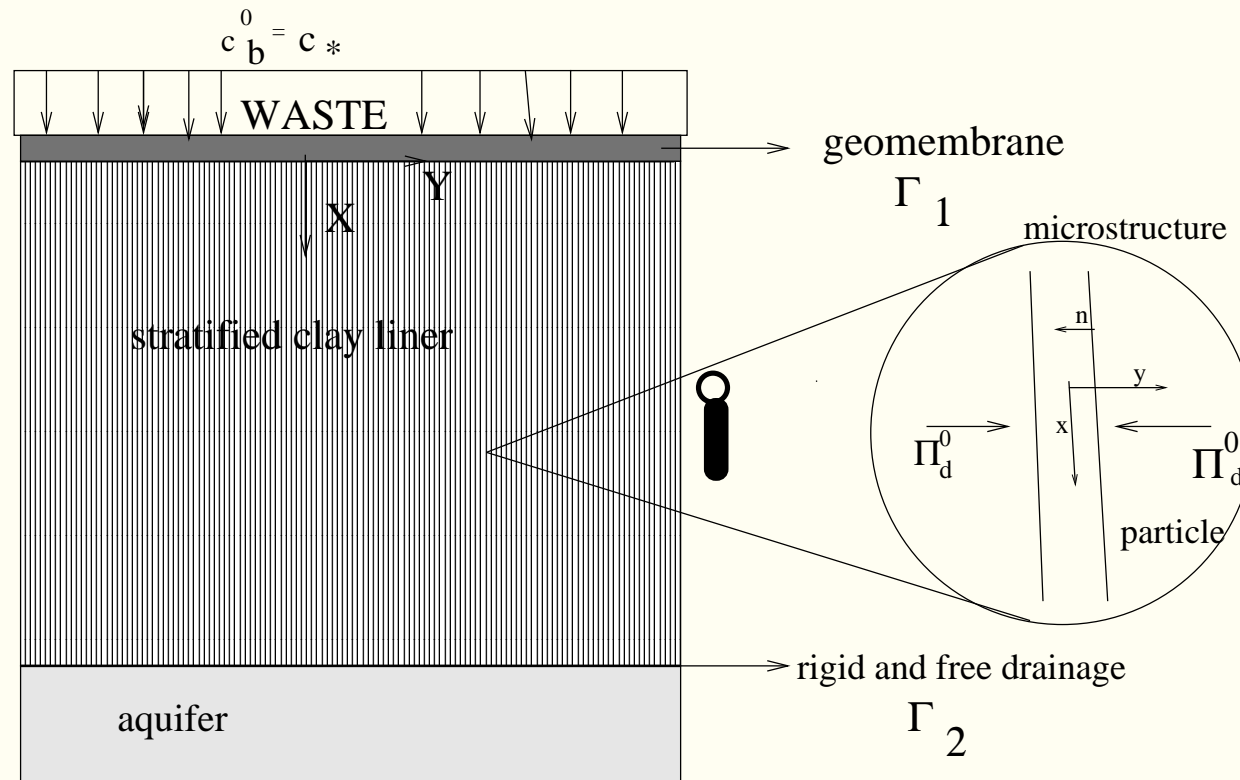
### • Inconnues

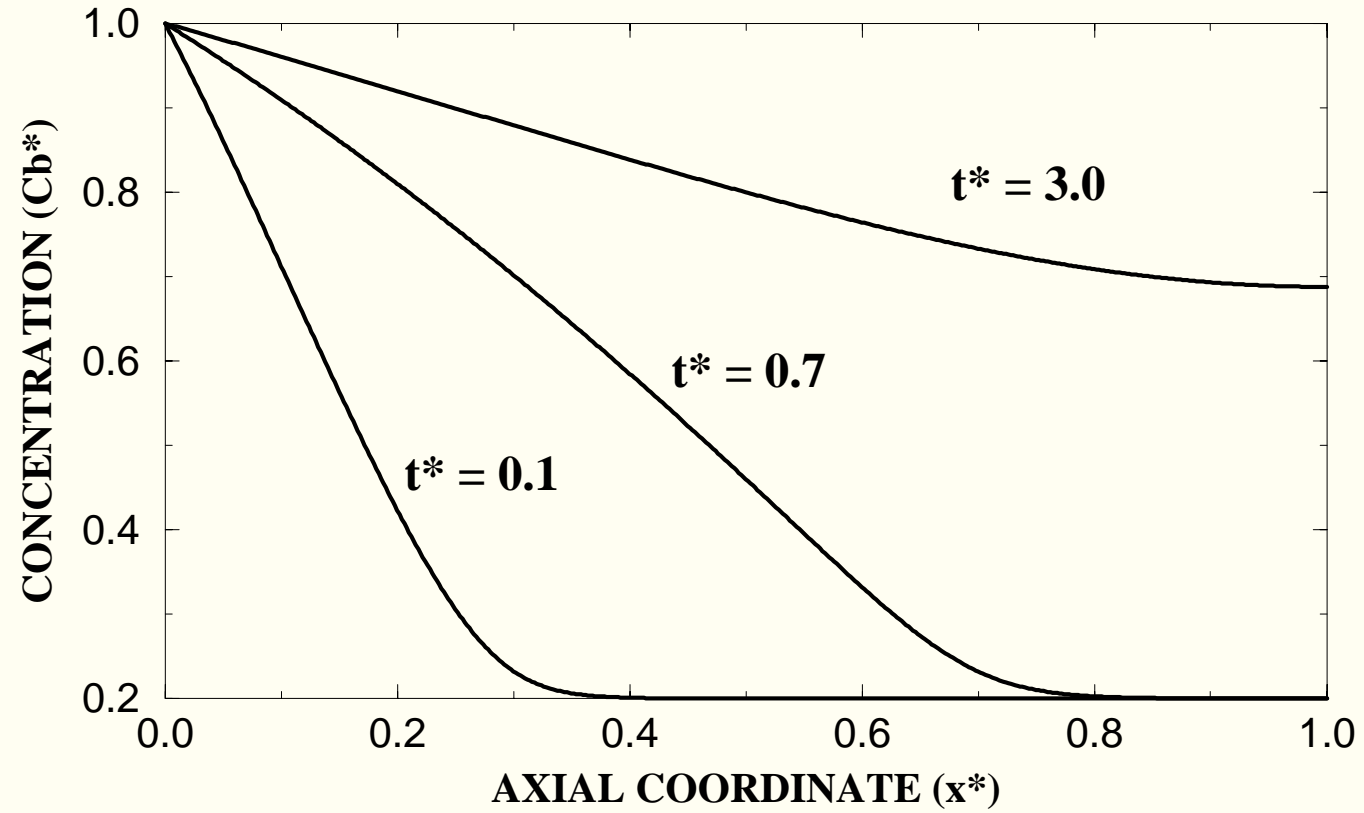
$$\boldsymbol{\sigma}_T^0, p_b^0, \mathbf{u}^0, \mathbf{v}_D^0, c_b^0, \psi_b^0, n_f$$

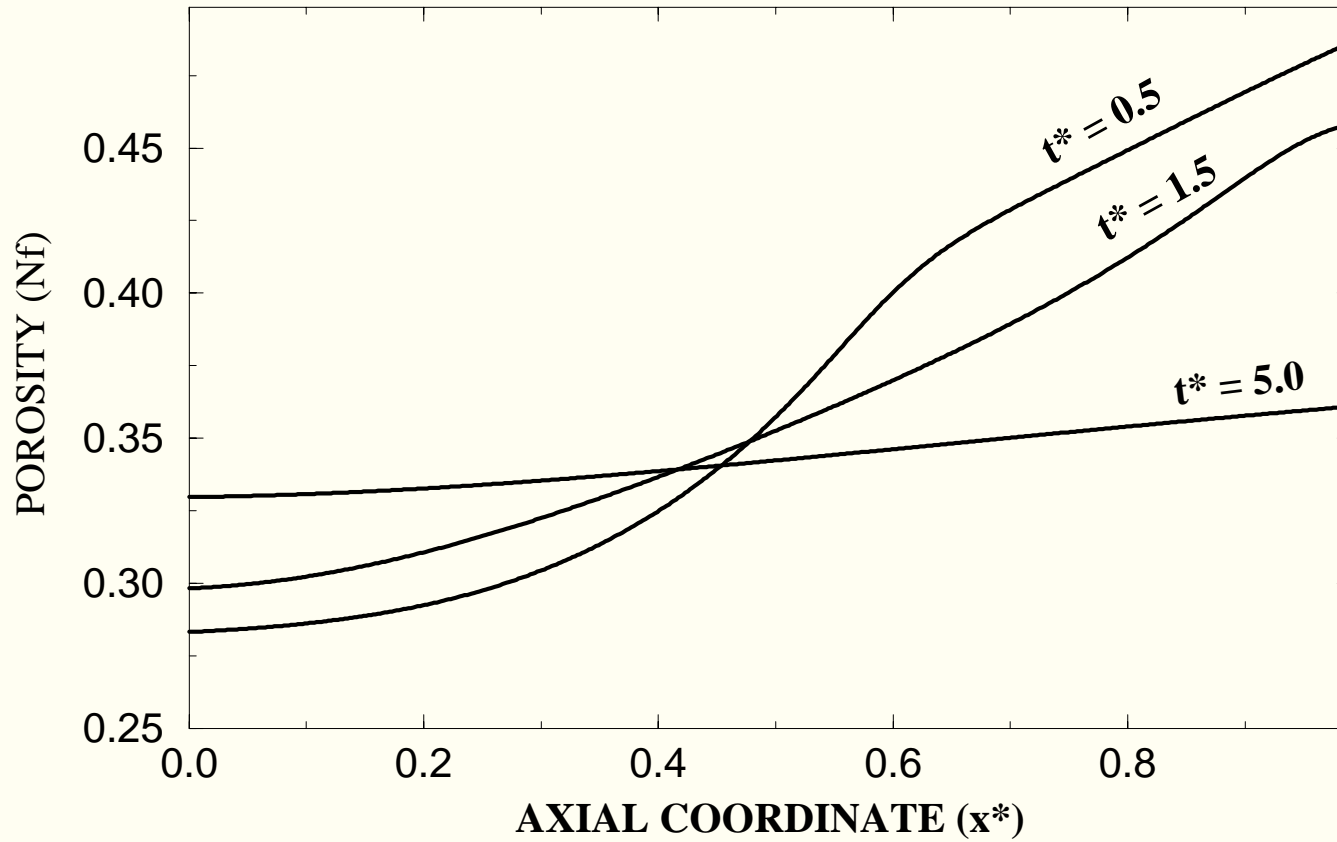
### • Récapitulatif du modèle à deux échelles

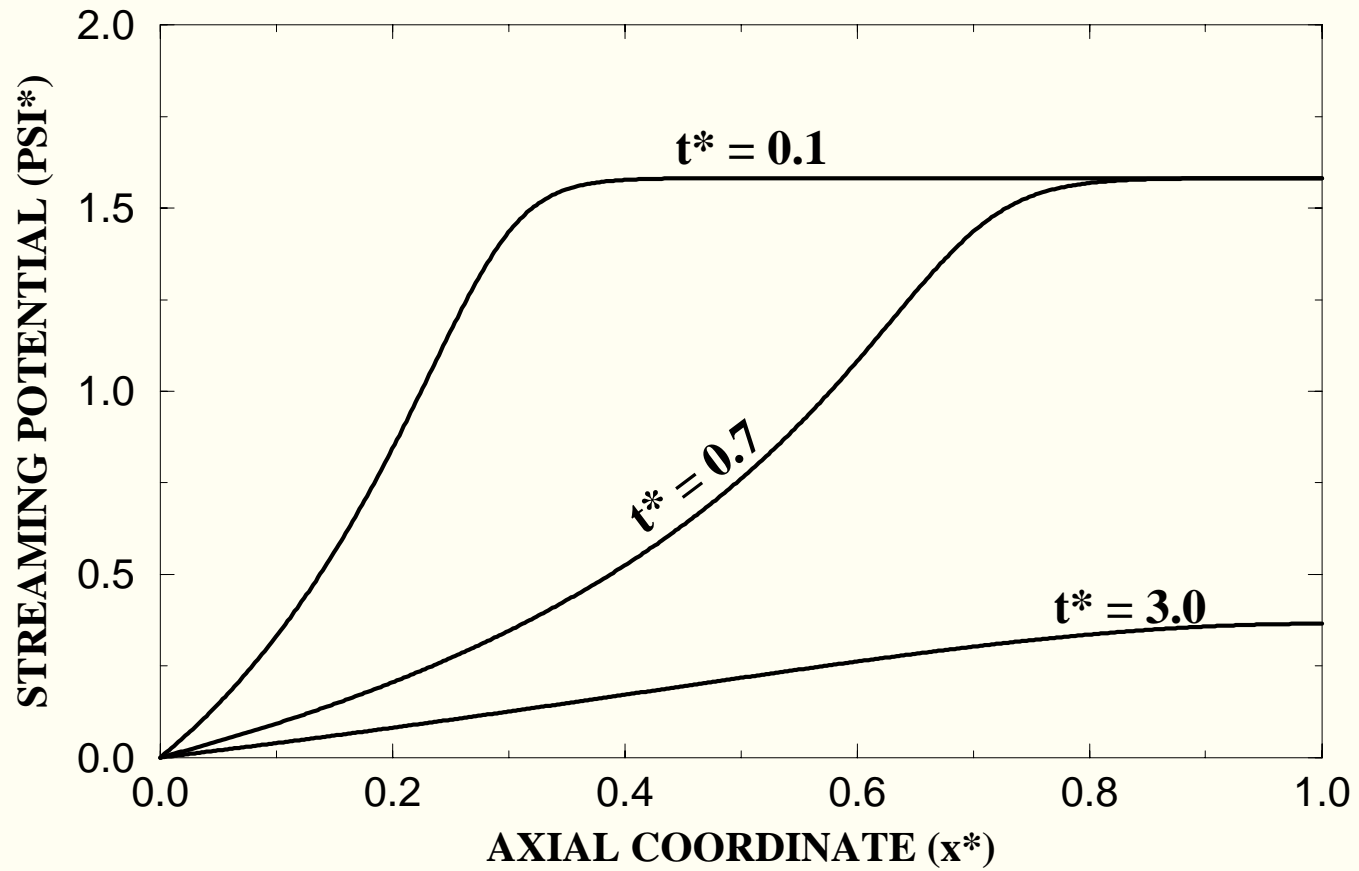
$\nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}_T^0 = 0$	Equilibre mécanique
$\boldsymbol{\sigma}_T^0 = -\alpha p_b^0 + \mathbf{C}_s \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) - \langle \boldsymbol{\Pi}^0 \rangle_{SP}$	Principe de Terzaghi
$\mathbf{v}_D^0 = -\mathbf{K}_P \nabla_x p_b^0 - \mathbf{K}_C \nabla_x c_b^0 - \mathbf{K}_E \nabla_x \psi_b^0$	Loi de Darcy
$\nabla_x \cdot \mathbf{v}_D^0 + \alpha : \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) = \beta \frac{\partial p_b^0}{\partial t} + \frac{\partial \gamma_\pi}{\partial t}$	Conserv. du volume total
$\frac{\partial}{\partial t} (n_f G_\pm^* c_b^0) + \nabla_x \cdot \mathbf{J}_\pm^0 = 0$	Conservation ions
$\mathbf{J}_\pm^0 = G_\pm^* c_b^0 \mathbf{v}_*^{\pm 0}$	Flux total des ions
$-n_f \left( \mathbf{D}_\pm^c \nabla_x c_b^0 \pm \mathbf{D}_\pm^e c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 + \mathbf{D}_\pm^p \nabla_x p_b^0 \right)$	
$\frac{\partial n_f}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{v}_D^0 + n_f \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} = 0$	Conserv. volume fluide

• Exemple de résolution









## 6. Conclusion et problèmes ouverts

- **Problème à trois échelles** : en voie d'achèvement.
- **Milieus non saturés** : à examiner.
- **Validation expérimentale** : en cours.
- **Influence du pH – couplage avec la chimie** : en cours.
- **Couplage avec la dynamique moléculaire** :
  - \* Réunion GDR MoMaS – PARIS (Lyon, 18–19 septembre 2003)
  - \* Gonflement osmotique → Gonflement cristallin
  - \* Echanges d'ions : argiles sodiques (gonflantes) → argiles calciques (???)