

**Electro-hydro-chimio-mécanique dans les argiles gonflantes :
modèle à double porosité**

Christian MOYNE, Didier STEMMELEN

Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée
CNRS – INPL – UHP (UMR 7563)

2, avenue de la Forêt de Haye, 54504 Vandœuvre les Nancy, France

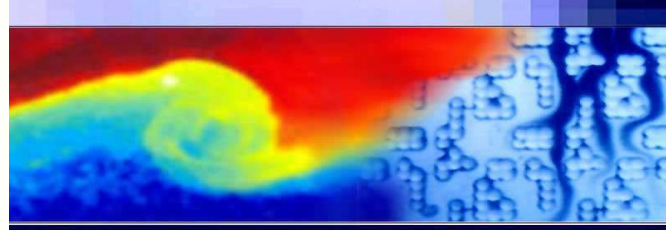
Márcio ARAB MURAD

Laboratório Nacional de Computação Científica

Avenida Getúlio Vargas, 333

25651-070 Petrópolis, RJ, Brésil

LEMMA



LNCC



Objectifs

● Argiles gonflantes :

- * milieux à trois échelles micro/méso/macro ;
- * saturées par eau + sel monovalent entièrement dissocié (NaCl) ;
- * forces électrostatiques dominantes.

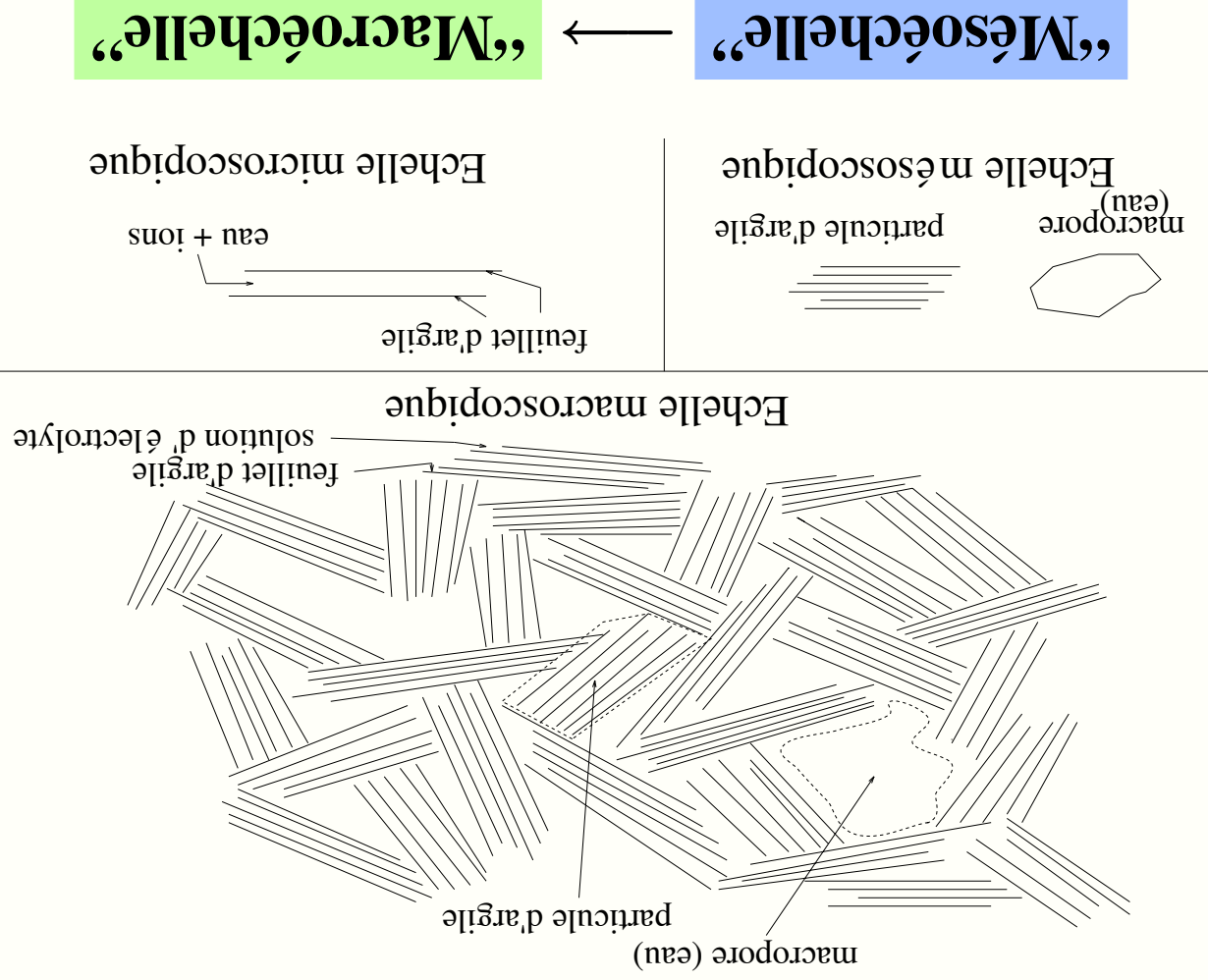
● Changement d'échelle :

- * homogénéisation périodique ;
- * passage micro → méso : déjà obtenu ;
- * passage méso → macro ?

● Propos de l'exposé :

- * obtention d'un modèle rigoureux de type double porosité ;
- * simplification : modèle quasi stationnaire (équilibre à l'échelle mésoscopique).

1. Structure des argiles gonflantes : milieux à trois échelles



“Mésoséchelle” ← “Macroéchelle”

Les phases “particules” (solide) et “macropores” (fissure) sont supposées continues.

1.1. Equations à la mésoséchelle dans les particules d'argile

• Inconnues

$u, p_b, c_b, \psi_b, \phi$ ("b" \equiv valeur du bulk équivalent)

• Modèle à deux échelles

Equilibre mécanique	$\Delta \cdot \sigma_t = 0$
Principe de Terzaghi	$\sigma_t = -p_b I + C \mathcal{E}(u) - \Pi$
Conservation masse totale	$\Delta \cdot v_D + \Delta \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = 0$
Conservation fluide	$\frac{\partial \phi}{\partial t} (1 - \phi) \Delta \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\phi G^c c_b) + \Delta \cdot \left(2 c_b v_D + \phi G^c c_b \frac{\partial u}{\partial t} + J^d \right) = 0$
Transport des ions	$\Delta \cdot I^e = 0$
Bilan charge électrique	$v_D = -L^{DP} \Delta p_b - RT L^{PC} \Delta \ln c_b - L^{PE} \Delta \psi_b$
Loi de Darcy	$J^d = -L^{CP} \Delta p_b - RT L^{CC} \Delta \ln c_b - L^{CE} \Delta \psi_b$
Loi de Fick	$I^e = -L^{EP} \Delta p_b - RT L^{EC} \Delta \ln c_b - L^{EE} \Delta \psi_b$
Loi d'Ohm	

1.2. Equations dans les macropores (fissure)

• Fluide (Stokes)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \sigma_f = 0 \\ \sigma_f = -P_f \mathbf{I} + 2\mu_f \mathcal{E}(V_f) \\ \nabla \cdot V_f = 0 \end{array} \right.$$

dans Ω_f

• Equations de transport

$$C_f^+ = C_f^- = C_f$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \frac{\partial C_f}{\partial t} + \nabla \cdot (2C_f V_f + J_f) = 0 \\ \nabla \cdot I_f = 0 \\ J_f = -2(D_f \Delta C_f + \nabla C_f \Delta \Psi_f) \\ I_f = -2F(\Delta_f \nabla C_f + D_f C_f \Delta \Psi_f) \\ D_f = \frac{D_{w+} + D_{w-}}{2} \quad \text{et} \quad \nabla C_f = \frac{D_{w+} - D_{w-}}{2} \end{array} \right.$$

avec $\underline{\Psi}_f = \frac{F \Psi_f}{RT}$

Conservation de la charge

Transport du sel

1.3. Conditions à l'interface : sur Γ_{fs}

* Continuité

$$\left(V_{fs} = V_f - \frac{\partial u}{\partial t} \right)$$

Particules Macropores

pression : $p_b = P_f$

concentration : $c_b = C_f$

potentiel électrique : $\psi_b = \Psi_f$

flux liquide : $v^D \cdot N = V_{fs} \cdot N$

flux diffusif sel : $J^d \cdot N = J_f \cdot N$

charge : $I^e \cdot N = I_f \cdot N$

contrainte : $\sigma^t \cdot N = \sigma_f \cdot N$

*** Glissement**

- Interface électriquement chargée

- Double couche électrique très fine à l'interface

- Glissement de la vitesse tangentielle

Particules

$$(v_D - v_{fs}) \cdot \tau =$$

$$V_{match}$$

$$K_{fE}^{\infty}$$

=

$$\frac{\mu_f}{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty} \zeta}$$

=

$$-K_{fE}^{\infty} \Delta \Psi_f - K_{fC}^{\infty} \Delta C_f$$

$$V_{match} \cdot \tau$$

Macropores

$$K_{fC}^{\infty}$$

=

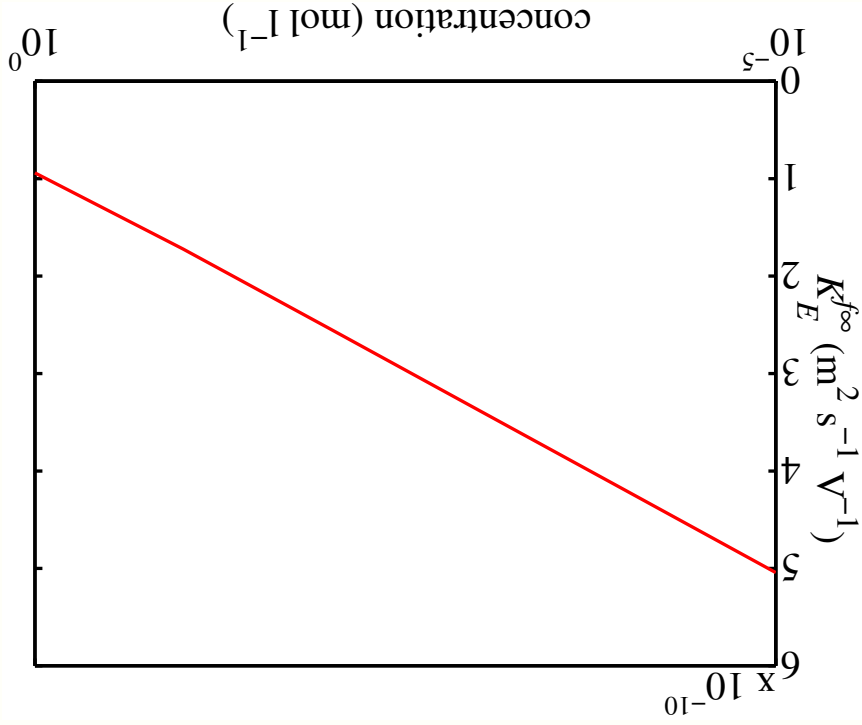
$$\frac{8RTL_D^2}{\mu_f} \ln \cosh \left(\frac{\zeta}{4} \right)$$

(Derjaguin)

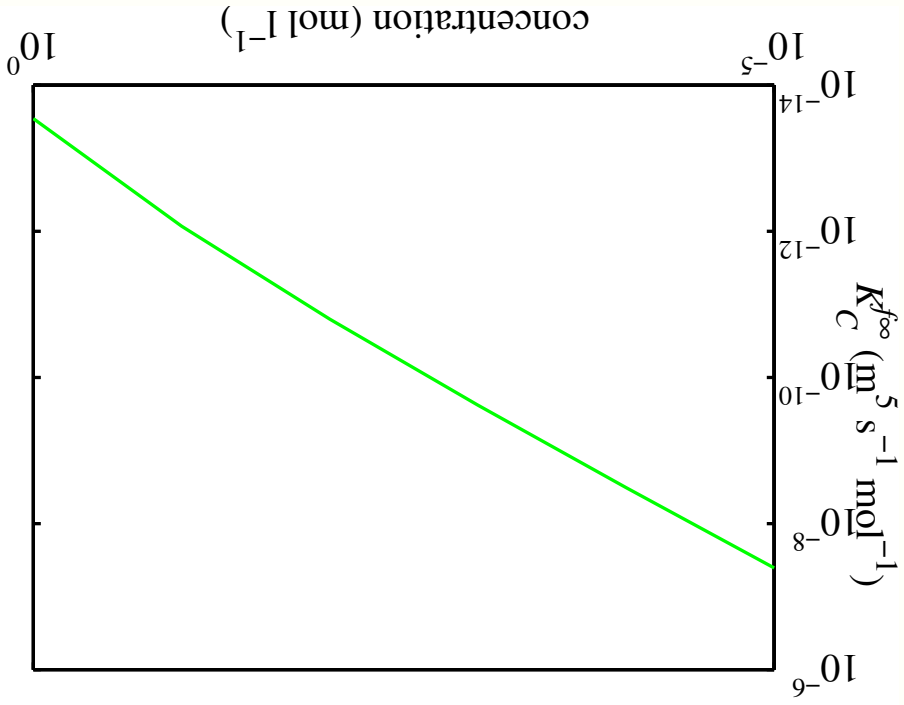
(Smoluchowski)

$$\sigma = -0.2 \text{ C m}^{-2}$$

Electro-osmose



Osmose inverse



2. Modèle à double porosité

* Homogénéisation périodique

x	macroéchelle	(L)	variable lente
y	microéchelle	(ℓ)	variable rapide

$$\Delta = \frac{\ell}{L} \epsilon \gg 1$$

$$\Delta = \frac{\ell}{L} \Delta_y + \Delta_x$$

Cellule-unité périodique: $Y = Y^f \cup Y^s$

* Dans les particules d'argile :

$$\begin{pmatrix} I_1^e \\ J_1^c \\ \mathbf{v}_1^D \end{pmatrix} = -\epsilon^2 \begin{pmatrix} L_{EP} & L_{EC} & L_{EE} \\ L_{CP} & L_{CC} & L_{CE} \\ L_{PP} & L_{PC} & L_{PE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \psi_0^y \\ RT \Delta \ln c_0^y \\ \Delta p_0^y \end{pmatrix}$$

2.1. Transport des ions

• Transport du sel

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n_f C_0^f \rangle + \Delta \cdot x \cdot \left[2 C_0^f V_0^{D_f} - D_{eff}^f \Delta x C_0^f + \Delta_{eff}^f C_0^f \Delta \Phi_0^f \right] = - \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi_0 G^c c_0^b \rangle$$

où $D_{eff}^f \equiv \mathcal{D}_f \Lambda$ $\Delta_{eff}^f \equiv \Delta_f \Lambda$

avec $\Lambda = \langle I + \Delta_y f \rangle$: tenseur de tortuosité

où f est solution de :

$$\left. \begin{aligned} \Delta_2 f &= 0 && \text{dans } Y_f \\ -N \cdot (I + \Delta_y f) &= 0 && \text{sur } \partial Y_{fs} \\ C_1^f &= f \cdot \Delta x C_0^f && \text{à une fonction près de } x \text{ et } t. \end{aligned} \right\}$$

(diffusion linéaire dans les macropores avec des particules imperméables)

• Conservation de la charge électrique

$$0 = \Delta \cdot x \cdot \left(\Delta_{eff}^f C_0^f \Delta x C_0^f + C_0^f \Delta x C_0^f \Delta \Phi_0^f \right)$$

2.2. Loi de Darcy

- Glissement à la paroi :

$$V_0^{fs} \cdot \tau = \left[K_{f\infty}^E (I + \Delta_y f) + K_{f0}^C \Delta_x C_0^f \right] \cdot \tau \quad \text{sur } \partial Y_{fs} \cdot$$

- Linéarité de Stokes :

$$V_0 = V_0^d + V_0^e + V_0^c$$

Darcy classique

- Problème en V_0^p :

- Problème en V_0^e (ou V_0^c) :

$$\left. \begin{aligned} \mu_f \Delta_y V_0^e - \Delta_y P_1^e &= 0 & \text{dans } Y_f \\ V_0^e \cdot N &= 0 & \text{sur } \partial Y_{fs} \end{aligned} \right\}$$

$$V_0^e = -K_{f\infty}^E (I + \Delta_y f) \Delta_x \Psi_0^f$$

- Solution :

- Loi de Darcy :

$$V_0^D = -K_{f0}^D \Delta_x C_0^f - K_{f0}^P \Delta_x P_0^f - K_{f\infty}^E \Delta_x \Psi_0^f$$

$$K_{f0}^C = K_{f\infty}^E \quad V_{\infty} K_{f0}^C = K_{f\infty}^E \quad V_{\infty} K_{f0}^E = K_{f\infty}^E \quad \text{(Smoluchowski)}$$

$$0 = \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} \cdot \mathbf{x} \Delta + \mathbf{V}_0^D \cdot \mathbf{x} \Delta$$

• En introduisant la vitesse de Darcy macroscopique : $\mathbf{V}_0^D = \langle \mathbf{V}_0^f \rangle - \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t}$

N : normale extérieure aux particules ; u_f : fraction volumique de macropores.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{V}_0^f \cdot \mathbf{x} \Delta \rangle - \left\langle \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} \cdot \mathbf{x} \Delta \right\rangle &= \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \mathbf{x} \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} - \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \hat{n} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + \mathbf{V}_1^D \right) \\ &= \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \mathbf{x} \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} - \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \hat{n} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + \mathbf{V}_1^D \right) = \langle \mathbf{V}_0^f \cdot \mathbf{x} \Delta \rangle - \langle \mathbf{V}_1^f \cdot \hat{n} \Delta \rangle \\ &= \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \mathbf{x} \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial t} - \text{DP} \int \frac{|\mathcal{Y}|}{1} \Delta \cdot \hat{n} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + \mathbf{V}_1^D \right) = \langle \mathbf{V}_0^f \cdot \mathbf{x} \Delta \rangle - \langle \mathbf{V}_1^f \cdot \hat{n} \Delta \rangle \end{aligned}$$

• Intégration de la conservation de la masse dans les macropores :

2.3. Conservation de la masse totale

2.4. Equilibre mécanique

• Intégration des équations d'équilibre sur la cellule-unité

$$\begin{aligned} \Delta^x \cdot \langle \sigma_0^t \rangle &= \Delta^x \cdot \langle \sigma_0^e \rangle - \langle d_0^q \rangle \cdot \Delta^x - \langle \Pi_0 \rangle \cdot \Delta^x = \int_{Y^s} \frac{|Y|}{1} \Delta^y \cdot \sigma_1^t \, dY = \\ &= \int_{Y^f} \frac{|Y|}{1} \Delta^y \cdot \sigma_1^f \, dY = \int_{Y^f} \frac{|Y|}{1} \Delta^y \cdot \sigma_1^f \, dY = \int_{Y^f} \frac{|Y|}{1} \Delta^x \, dY = \langle \Delta^x \rangle \cdot P_0^f \end{aligned}$$

• Equation d'équilibre mécanique

$$0 = \left[\Delta^x \cdot \left(1 - n_0^f \right) \langle \sigma_0^e \rangle - d_0^q - \Pi_0 \right] \cdot \Delta^x = 0$$

$$\sigma_0^e = C \left(\mathcal{E}^x \cdot n_0 + \mathcal{E}^y \cdot n_1 \right)$$

• Condition à la limite mécanique sur ∂Y^f_s

$$N_0 \Pi = N \left[(\mathcal{E}^y \cdot n_1) \mathcal{Z} + (\mathcal{E}^x \cdot n_0) \mathcal{Z} \right] \cdot C$$

2.5. Bilan de masse pour la phase fluide

• A l'ordre $\mathcal{O}(1)$:

$$\frac{\partial n_f}{\partial t} - (1 - n_f) \Delta \cdot \mathbf{u} = - \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle$$

qui combinée avec la conservation de la masse totale donne :

$$\frac{\partial n_f}{\partial t} + (1 - n_f) \Delta \cdot \mathbf{V}_0^D = - \left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle$$

n_f : fraction volumique de macropores
 ϕ : porosité interne des particules

Récapitulation du modèle à double porosité

Equation du mouvement totale

$$\Delta^x \cdot \sigma_0^T = 0$$

$$\sigma_0^T = (1 - n_0^f) \left(C \mathcal{E}(u_0) + C \langle \mathcal{E}(u_1) \rangle_s - \langle p_0^p \rangle_s I - \langle \Pi_0 \rangle_s \right) - n_0^f P_0^f I$$

Conservation masse totale

$$\Delta^x \cdot \frac{\partial u_0}{\partial t} + \Delta^x \cdot V_0^{Df} = 0$$

$$V_0^{Df} = -K_f^D \Delta^x P_0^f - K_f^C \Delta^x C_0^f - K_f^E \Delta^x \Psi_0^f$$

Conservation masse fluide

$$\frac{\partial n_0^f}{\partial t} + (1 - n_0^f) \Delta^x \cdot V_0^{Df} = - \left\langle \frac{1}{\partial \phi_0} \frac{1 - \phi_0}{\partial t} \right\rangle$$

Conservation masse espèces

$$2 \frac{\partial}{\partial t} (n_0^f C_0^f) + \Delta^x \cdot J_0^F = - \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi_0 G^c c_0^p \rangle$$

$$J_0^F = 2 C_0^f V_0^{Df} - 2 \left(D_{eff}^f \Delta^x C_0^f + \nabla_{eff}^f C_0^f \Delta^x \Psi_0^f \right)$$

Conservation de la charge

$$\Delta^x \cdot I_0^F = 0$$

$$I_0^F = -2 F \left(\nabla_{eff}^f \Delta^x C_0^f + D_{eff}^f C_0^f \Delta^x \Psi_0^f \right)$$

$$\left. \begin{aligned} {}^f_0\mathbb{H} &= {}^q_0\phi & {}^f_0\mathcal{C} &= {}^q_0\mathcal{C} & {}^f_0D &= {}^q_0d \\ N_0\mathbb{H} &= N \left(({}_1\mathbf{n})^{\hat{h}} \mathcal{Z} + ({}_0\mathbf{n})^x \mathcal{Z} \right) \mathcal{C} \end{aligned} \right\}$$

avec les conditions limites suivantes

$$\left. \begin{aligned} I_1^e &= -L_{EP} \Delta {}^q_0d^{\hat{h}} - L_{EC} \Delta {}^q_0c^{\hat{h}} - L_{EE} \Delta {}^q_0\phi^{\hat{h}} \\ J_1^p &= -L_{CP} \Delta {}^q_0d^{\hat{h}} - L_{CC} \Delta {}^q_0c^{\hat{h}} - L_{CE} \Delta {}^q_0\phi^{\hat{h}} \\ D_1^v &= -L_{PP} \Delta {}^q_0d^{\hat{h}} - L_{PC} \Delta {}^q_0c^{\hat{h}} - L_{PE} \Delta {}^q_0\phi^{\hat{h}} \\ 0 &= \Delta {}^{\hat{h}} \cdot I_1^e \\ 0 &= \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \Delta {}^{\hat{h}} + \left(G_0^c \mathcal{C} \phi_0 \right) \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{f}_1^p + 2 \left(D_1^v \mathcal{C} \right) \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{D}_1^v \\ \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{n}_0^x \left(\phi_0 - 1 \right) &= \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{n}_1 \left(\phi_0 - 1 \right) - \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{v}_1^D + \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{n}_0^x \\ 0 &= \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \left(\mathcal{C} \mathcal{Z} ({}_1\mathbf{n})^{\hat{h}} \right) \Delta {}^{\hat{h}} - {}^q_0d^{\hat{h}} \Delta {}^{\hat{h}} - \mathbb{H}_0 \Delta {}^{\hat{h}} \cdot \mathbf{n}_0^x \end{aligned} \right\}$$

et dans les particules d'argile

3. Modèle à trois échelles quasi permanent

- Equilibre instantané entre les "particules" and les "macropores"

$$p_0^b(x, y, t) \equiv P_0^f(x, t); c_0^b(x, y, t) \equiv C_0^f(x, t); \phi_0^b(x, y, t) \equiv \Psi_0^f(x, t); \boxed{\phi_0(x, y, t) = ???}$$

- Fermeture pour l'équilibre mécanique

$$\left. \begin{array}{l} \text{dans } Y_s \\ \text{sur } \partial Y_s^f \end{array} \right\} \begin{array}{l} N_0 \Pi = N [({}_1 \mathbf{n})^{\hat{h}} \mathcal{E} + ({}_0 \mathbf{n})^x \mathcal{E}] \mathcal{C} \\ 0 = \Delta^{\hat{h}} \cdot \Pi_0 - (({}_1 \mathbf{n})^{\hat{h}} \mathcal{E}) \cdot \Delta^{\hat{h}} \end{array}$$

$$({}_1 \mathbf{n}, \hat{h}, x) = \xi(\hat{h}) : \mathcal{E} : ({}_0 \mathbf{n}, x, t) + ({}_1 \mathbf{n}, \hat{h}, x) + (\hat{\mathbf{u}}, x, t)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{dans } Y_s \\ \text{sur } \partial Y_s^f \end{array} \right\} \begin{array}{l} \Delta^{\hat{h}} \cdot (C \mathcal{E} \hat{\xi}) = 0 \\ N_0 \Pi = N (C \mathcal{E} \hat{\xi}) \end{array}$$

- Décomposition de Terzaghi pour l'approximation quasi stationnaire

$$\sigma_0^J = -P_0^f I + C^{eff} \mathcal{E}({}_0 \mathbf{n})^x - \Pi^{eff}$$

- Propriétés homogénéisées

$$C^{eff} \equiv \langle [(\hat{\xi})^{\hat{h}} \mathcal{E} + I \otimes I] \mathcal{C} \rangle \quad \text{et} \quad \Pi^{eff} \equiv \langle ({}_1 \mathbf{n})^{\hat{h}} \mathcal{E} - \Pi_0 \rangle$$

• Tenseur macroscopique de gonflement Π_{eff}

* Problème de fermeture pour u_1^*

$$\mathbb{I}_0 \mathbb{I} = \mathbb{I}_0 \mathbb{I} \left(C_0^f(x, t), \phi_0(x, y, t) \right)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{sur } Y_s \quad N \mathbb{I}_0 \mathbb{I} &= N C \mathcal{E} \left(u_1^* \right) \\ \text{dans } Y_s \quad \frac{\partial \mathbb{I}_0 \mathbb{I}}{\partial \phi_0} \Delta \phi_0 &= \left(C \mathcal{E} \left(u_1^* \right) \right) \cdot \Delta \end{aligned} \right\}$$

* Equation pour la porosité interne des particules ϕ_0

$$\frac{\partial \phi_0}{\partial t} = \frac{1}{\partial \phi_0} \frac{\partial \phi_0}{\partial t} + \left(\Delta \cdot u_0 \right) \frac{\partial \phi_0}{\partial t} + \left(\Delta \cdot \xi \right) \frac{\partial \phi_0}{\partial t} + \left(\Delta \cdot u_1^* \right) \frac{\partial \phi_0}{\partial t}$$

* Tenseur de gonflement Π_{eff}

$$\Pi_{eff} \equiv \left(1 - u_0^f \right) \langle \mathbb{I}_0 \mathbb{I} - C \mathcal{E} \left(u_1^* \right) \rangle$$

4. Conclusion: modèle à double porosité quasi stationnaire

$$\left. \begin{aligned}
 & \Delta \cdot \sigma_0^T = 0 \\
 & \sigma_0^T = -P_0^f I + C_{eff} \mathcal{E}^x(u_0) - \Pi_{eff} \\
 & \Delta \cdot u_0^x + \Delta \cdot V_0^{Df} = 0 \\
 & V_0^{Df} = -K_f^D \Delta \cdot P_0^f - K_f^C \Delta \cdot C_0^f - K_f^E \Delta \cdot \Phi_0^f \\
 & \frac{\partial n_0^f}{\partial t} + (1 - n_0^f) \Delta \cdot V_0^{Df} + \alpha : \frac{\partial \mathcal{E}^x(u_0)}{\partial t} = - \left\langle \Delta \cdot u_1^{\frac{\partial}{\partial t}} \right\rangle \quad \text{Conserv. fluide} \\
 & \left[\frac{\partial}{\partial t} (2n_0^f + \langle \phi \rangle G^c) + C_0^f \right] \Delta \cdot u_0^x + (2C_0^f V_0^{Df} + J_0^E) = 0 \quad \text{Transport sel} \\
 & J_0^E = - \left(D_{eff}^f \Delta \cdot C_0^f + \nabla_{eff}^f \Phi_0^f \right) \quad \text{Loi de Fick} \\
 & \Delta \cdot I_0^E = 0 \\
 & I_0^E = -2F \left(\nabla_{eff}^f \Delta \cdot C_0^f + D_{eff}^f \Delta \cdot \Phi_0^f \right) \quad \text{Loi d'Ohm}
 \end{aligned} \right\}$$

+ le problème précédent pour $u_1^{\frac{\pi}{1}}$ et ϕ_0 dans les "particules".