

# Modelisation des mécanismes de dépôt-relargage dans la filtration

Hui Wang, Anthony Beaudoin, Abdellah Alem, Hua Qing Wang, Abdalgader

Elkawafi

# ▶ To cite this version:

Hui Wang, Anthony Beaudoin, Abdellah Alem, Hua Qing Wang, Abdalgader Elkawafi. Modelisation des mécanismes de dépôt-relargage dans la filtration. CFM 2011 - 20ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2011, Besançon, France. hal-03422602

# HAL Id: hal-03422602 https://hal.science/hal-03422602

Submitted on 9 Nov 2021

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modélisation des mécanismes de dépôt-relargage dans la filtration

H. WANG<sup>a</sup>, A. BEAUDOIN<sup>b</sup>, A. ALEM<sup>a</sup>, H.Q. WANG<sup>a</sup>, A. ELKAWAFI<sup>a</sup>

a. Laboratoire Ondes et Milieux Complexes, 53, Rue de Prony, 76058 Le Havre b. Institut Pprime, Boulevard Marie et Pierre Curie, 86962 Futuroscope Chasseneuil

# **Résumé :**

Un modèle mathématique, permettant de simuler le transfert de particules fines en suspension, est présenté. Ce modèle est basé sur l'équation de transport associée à une cinétique de dépôt-relargage qui tient compte du blocage mécanique, de la variabilité de la cinétique de dépôt au cours du processus de filtration et du relargage conditionné par un critère lié aux vitesses d'écoulement dans les pores. Le modèle permet de reproduire correctement les données expérimentales obtenues à partir des essais de filtration sur des colonnes de laboratoire.

# Abstract :

A mathematical model which can simulate the migration of fine particles in porous media is presented. In this model, the transport equation is associated with the deposition-release kinetics, in which straining and transient change of removal velocity are taken into account in deposition kinetic, and the critical shear stress is considered in release kinetic. This model is validated by a series of experimental data in our team.

#### Mots clefs : modélisation, cinétique dépôt-relargage, particules fines, milieux poreux

# 1. Introduction

Depuis plusieurs décennies, la modélisation du transfert de particules fines dans un milieu poreux a suscité l'intérêt de nombreux auteurs à cause de son importance dans de nombreux domaines comme la protection de l'environnement, l'exploration pétrolière et la sécurité des ouvrages de retenue en terre. La maîtrise des mécanismes qui contrôlent la migration de particules fines dans le milieu poreux est une étape cruciale dans la modélisation de ce phénomène. Dans la littérature il existe deux approches pour décrire le transfert de particules fines dans un milieu poreux, l'approche macroscopique et l'approche microscopique. Le modèle de filtration est une approche macroscopique souvent utilisée. Il est basé sur un bilan de matière permettant de décrire dans le temps l'état de filtration. Ce modèle suppose que les grains du milieu poreux sont complètement entourés par la phase liquide. Cette simplification ne tient pas compte de la structure des pores et des jonctions entre les grains et entraîne l'inexactitude des calculs par la théorie de la filtration [3]. Ces dernières années, plusieurs travaux ont montrés que le modèle de filtration avec une cinétique de dépôt-relargage du premier ordre ne permet pas de décrire correctement le transfert de particules fines dans un milieu poreux et de rendre compte des différents mécanismes mis en jeu. A partir de considérations théoriques et des constatations expérimentales, des améliorations sont apportées au terme décrivant la cinétique de dépôt-relargage [2,6,8]. Nous présentons, dans cette étude, un modèle de transfert de particules fines dans un milieu poreux basé sur le principe de l'équation de convection dispersion associée à un terme de dépôtrelargage qui prend en compte le blocage mécanique, la variabilité dans le temps de la cinétique de dépôt et le relargage, de particules préalablement déposées, conditionné par un critère identifié à un paramètre de l'écoulement. Les calculs par ce modèle sont confrontés aux données expérimentales d'essais de filtration de très longues durées (volume de la solution injectée à chaque essai égal à 83 fois le volume de pores dans la colonne) sur des colonnes de laboratoire pour valider les concepts et les hypothèses formulées.

#### 2. Contexte et objectif

L'approche en colonnes de laboratoire permet l'étude monodimensionnelle du transfert de particules dans des conditions physico-chimiques rigoureusement contrôlées. Des essais de filtration dans une colonne de laboratoire sont réalisés. La colonne est constituée d'un tube en plexiglas de 40 cm de longueur et de 4,5 cm de diamètre. Elle est remplie avec un sable de granulométrie entre 315 µm et 630 µm sélectionné à partir du sable de Seine. La porosité du milieu reconstitué est de 0,37. Le traceur utilisé est constitué de particules fines argileuses de diamètres compris entre 0,4µm et 35µm. En amont, la colonne est alimentée par un réservoir d'eau et munie d'une pompe péristaltique permettant de maintenir un débit constant qui est enregistré à l'aide d'un débitmètre numérique. A l'aval, le système de détection est constitué d'un turbidimètre qui permet, après étalonnage de suivre la restitution des particules en continu avec un pas de temps fixé. La colonne est équipée de piézomètres pour contrôler la variation de la pression dans le milieu en cours d'injection. L'ensemble est relié à une centrale d'acquisition connectée à un PC qui permet une mesure synchronisée. Le dispositif expérimental est représenté sur la figure1. Des injections continues sont réalisées avec des solutions à concentrations en particules fines constantes contrôlées et un débit constant de 145ml/min. Différentes concentrations de particules en suspension sont utilisées : 0,25g/l, 0,5g/l, 1g/l, 1,5g/l, 2g/l et 3g/l. Pour chaque essai, les relevés à des pas de temps réguliers de la concentration en particules de l'effluent et des pressions locales le long de la colonne permettent de suivre le processus de filtration et l'endommagement, du milieu, qui en résulte. Après chaque essai et afin de localiser la répartition des particules retenues dans le milieu poreux, l'échantillon contenu dans la colonne est découpé en tranches régulières pour quantifier la masse de particules déposées à des distances régulières le long de la colonne. Le matériau de chaque tranche (sable + particules fines déposées) est séché, pesé, puis lavé dans un tamis qui laisse passer seulement les fines. Le matériau lavé (sable propre) est ensuite séché et pesé. La masse des particules fines déposées dans la tranche est égale à la différence de masse avant et après lavage. Cette mesure permet de remonter à la variation de la porosité dans la tranche qui est égale au volume, calculé à partir de la masse, de fines déposées divisé par le volume de la tranche. L'endommagement du milieu est quantifié par la réduction progressive de sa perméabilité et de sa porosité. La figure 2 présente un exemple de courbe de restitution et du profil en fin d'essai de la porosité du milieu obtenus. L'objectif principal de ce travail est de simuler les résultats expérimentaux obtenus à partir des essais de filtration menés au laboratoire avec le modèle développé et de valider les concepts proposés pour la prise en compte des processus complexes de dépôt et relargage qui interviennent dans les problèmes de transfert de masse dans les milieux poreux. Cette modélisation est confrontée à une difficulté majeure liée à la durée très longue des essais expérimentaux rendant ainsi complexe la prise en compte des différents mécanismes mis en jeu et leur variation durant le processus de filtration.



Fig.1 Schéma de principe du dispositif expérimental de filtration à débit imposé



Fig.2 (a) Courbe de restitution, concentration relative vs. nombres de volume du pore (Vp) (b) Profil de porosité relative en fin d'essai vs. distance à partir de l'entrée de la colonne ( $\omega_o$ porosité initiale,  $\omega$  porosité en fin d'essai)

#### 3. Modèle mathématique et résolution numérique

Le modèle basé sur l'équation de convection-dispersion complétée par les termes de dépôt et relargage [4] s'écrit:

$$\frac{\partial [(\omega_{o} - \omega_{p})C]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{L} \frac{\partial (\omega_{o} - \omega_{p})C}{\partial x} \right] - \frac{\partial [u(\omega_{o} - \omega_{p})C]}{\partial x} - \frac{\partial (\rho_{p}\omega_{p})}{\partial t}$$
(1)

$$\frac{\partial(\rho_p \omega_p)}{\partial t} = q_{dep} + q_{rel} \tag{2}$$

$$q_{dep} = K_{dep} \cdot (\omega_o - \omega_p) \cdot C \cdot \phi(\omega_p) \cdot \theta(x)$$
(3)

$$q_{rel} = \begin{cases} -K_{rel} \cdot \omega_p \cdot \rho_p \cdot \left(1 - \frac{\tau_{cr}}{\tau}\right)^n & \tau \ge \tau_{cr} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
(4)

où C est la concentration de particules en suspension (g/ cm<sup>3</sup>),  $ω_p$  est la volume de particules fines déposées par l'unité de volume de milieu poreux,  $ω_o$  est la porosité cinématique initiale du milieu poreux,  $ω_c=(ω_o-ω_p)$  est la porosité cinématique à une position x (cm) dans la colonne et à un instant donné t (s), D<sub>L</sub> est le coefficient de dispersion longitudinale (cm<sup>2</sup>/s) dont une expression possible est D<sub>L</sub>= $α_L$ u, avec  $α_L$  la dispersivité longitudinale (cm), u est la vitesse moyenne dans les pores du milieu poreux (cm/s),  $ρ_p$  est la masse volumique des particules (g/cm<sup>3</sup>), τ est la contrainte de cisaillement moyenne sur la surface des pores du milieu (Pa),  $τ_{cr}$  est la contrainte de cisaillement critique au dessus de laquelle les particules fines commencent à relarguer dans la phase aqueuse, n est un coefficient de calage, K<sub>dep</sub> est le coefficient cinétique de dépôt (/s) à l'entrée de la colonne au début d'essai et K<sub>rel</sub> est le coefficient de la cinétique de relargage (/s). q<sub>dep</sub> et q<sub>rel</sub> sont des termes de puits et de source respectivement.  $φ(ω_p)$  est une fonction de filtration qui rend compte de l'évolution de la cinétique de dépôt des particules fines en cours de l'essai du fait que les particules déjà déposées ont tendances à entraver le dépôt de particules en suspension [1,8,10], φ est donnée par la relation suivante :

$$\varphi(\omega_{\rm p}) = 1 + a(\omega_{\rm p}/\omega_{\rm pmax}) + b(\omega_{\rm p}/\omega_{\rm pmax})^2 + c(\omega_{\rm p}/\omega_{\rm pmax})^3$$
(5)

 $\omega_{pmax}$  est la capacité maximale de dépôt des particules fines sur la matrice poreuse et a, b et c sont des constantes. La fonction  $\theta(x)$  est introduite pour prendre en compte le blocage mécanique qui est un mécanisme important dans le dépôt de particules dans les milieux poreux comme il a été montré par plusieurs chercheurs, Bradford [2]. En substitution à l'expression couramment utilisée, Bradford [2]  $\theta(x) = ((d_{50} + x)/d_{50})^{-\beta}$ , nous proposons l'expression similaire  $\theta(x)$  suivante :

$$\theta(\mathbf{x}) = \left( \left( \mathbf{L}_{\mathbf{p}} + \mathbf{x} \right) / \mathbf{L}_{\mathbf{p}} \right)^{-\beta} \tag{6}$$

où d<sub>50</sub> est le diamètre moyen des grains du milieu poreux,  $\beta$  est un paramètre de calage qui contrôle la forme de la distribution spatiale du dépôt des particules fines dans le milieu, L<sub>p</sub> est la profondeur de pénétration moyenne des particules dans le milieu (L<sub>p</sub>=1/ $\lambda_0$  et  $\lambda_0$ =K<sub>dep-moy</sub>/u) K<sub>dep-moyen</sub> est le coefficient de dépôt moyen dans la colonne au début de l'essai (/s) et x est la distance à partir de l'entrée de la colonne (cm). L'existence d'un palier, sur la courbe de restitution expérimentale, au début de certains essais montre que le relargage n'est pas systématique mais est soumis à certaines conditions. Très souvent un critère de contrainte de cisaillement est introduit pour tenir compte d'un relargage non systématique mais conditionné. Dans notre modèle, la contrainte de cisaillement est calculée par la relation suivante [11]

$$\tau = 1,414 \cdot (\Delta P / \Delta L) \cdot (k / \omega_c)^{0,5}$$
(7)

où ( $\Delta P/\Delta L$ ) est le gradient de pression dans la colonne et k et  $\omega_c$  sont la perméabilité intrinsèque et la porosité cinématique du milieu poreux respectivement.

Les méthodes numériques de résolution du modèle mathématique proposé sont généralement classées en deux approches : Eulérienne et Lagrangienne. Chacune de ses deux approches a ses avantages et ses inconvénients. Le choix d'une approche dépend du problème considéré. La résolution de l'équation de transport couplée à l'équation de la cinétique de dépôt-relargage par la méthode eulérienne est difficile [5]. Par ailleurs, il est connu que la méthode eulérienne génère une dispersion numérique lorsque la dispersivité du milieu poreux est faible. Pour éviter ces problèmes, la méthode lagrangienne est de plus en plus utilisée [12]. Dans cette méthode, à chaque pas de temps de la résolution numérique, on obtient la position et le poids des particules numériques qui ont été définies lors de la discrétisation lagrangienne. On détermine ensuite dans le milieu poreux la concentration de particules en suspension. Une fois cette concentration estimée, on réévalue les paramètres du milieu poreux,  $\omega_c$  et k. On estime ensuite la vitesse de pore en résolvant les équations d'écoulement. Cette vitesse de pore est utilisée pour passer au prochain pas de temps.

#### 4. Résultats et analyses

#### 4.1 Paramètres utilisés dans le calcul

Le tableau 1 regroupe les paramètres de calcul utilisés dans le modèle numérique. Le coefficient cinétique de dépôt donné dans la colonne 2 est déterminé expérimentalement par les expériences de traçage [9]. Ce coefficient évolue avec la concentration initiale Co. On constate une légère diminution de ce paramètre lorsque Co augmente jusqu'à la valeur Co=1g/l. Au-delà de cette concentration, le coefficient cinétique de dépôt augmente. La profondeur moyenne de pénétration  $L_p$  est calculée à partir des valeurs du coefficient de dépôt et de la vitesse du pore  $L_p=u/K_{dep-moy}$ . La dispersivité  $\alpha_L$  est déterminée expérimentalement par les expériences de traçage, et est égale à 0,1 dans le calcul. La valeur de la contrainte de cisaillement critique  $\tau_{cr}$  qui permet de prévoir l'existence du palier dans certains essais est conforme aux valeurs obtenues expérimentalement sur des essais d'érosion de matériaux peu compacts. Les coefficients  $K_{rel}$ , n et  $\beta$  sont obtenus par l'optimisation du calage avec le modèle des courbes expérimentales de restitution. Globalement, le coefficient de relargage  $K_{rel}$  augmente avec la concentration d'injection. On note une grande dispersion des valeurs de  $\beta$  reflétant la très grande variabilité dans la distribution du dépôt, dans le milieu, pour les divers essais. La valeur de la capacité maximale de dépôt  $\omega_{pmax}$  est prise égale à 10,5% de la porosité initiale du milieu  $\omega_o$ , et correspond aux valeurs obtenus par Vigneswaran [13].

On note qu'une fonction polynomiale de degré 2 est suffisante pour tenir compte de l'évolution de la cinétique de dépôt dans les essais de filtration avec les concentrations faibles à moyennes (Co $\leq$ 1,5g/l). Pour les plus fortes concentrations, un polynôme de degré 3 est nécessaire.

Co (g/l)	K <sub>dep-moy-</sub> <sub>num</sub> (/s)	K <sub>dep-moy-</sub> analytique (/s)	L <sub>p</sub> (cm)	β	K <sub>rel</sub> (/s)	$\tau_{cr}$ (Pa)	φ(ω <sub>p</sub> )
0,25	0,0175	0,0176	20,51	1	0,0005	0,376	$1-2,5y+9y^2$
0,5	0,0172	0,016	22,856	1,2	0,00018	0,367	$1-2,5y+9y^2$
1	0,0147	0,0132	26,665	2	0,00026	0,367	$1-2,5y+5,5y^2$
1,5	0,0193	0,04	19	0,8	0,00034	0,367	$1-2,5y+7,5y^2$
2	0,0264	0,0212	14,28	0,43	0,00057	0,367	$1-2,5y+5y^2+y^3$
3	0,0257	0,0212	16	0,21	0,00056	0,367	$1-2,3y+6,9y^2 \\+0,2y^3$

Tab. 1- Valeurs des paramètres du modèle pour différentes valeurs de concentration de particules en suspension ( $y = \omega_p / \omega_{pmax}$ )

#### 4.2 Calage de données expérimentales

Les figures 3 et 4 présentent les résultats de simulation des courbes de restitution et du profil de porosité dans le milieu en fin de chaque essai. Ces résultats montrent que le modèle mathématique proposé permet un bon ajustement des résultats expérimentaux de restitution sur toute la durée très longue des essais. La forme des courbes est bien simulée. La présence d'un palier au début de certains essais est correctement prise en compte par le modèle. Ce bon accord prouve la bonne adéquation du modèle à la réalité expérimentale, par la prise en compte rigoureuse des processus de dépôt et du

relargage conditionné par un critère basé sur les contraintes de cisaillement. Les évolutions en cours de la filtration des processus de dépôt et de relargage sont bien modélisées par les formulations mathématiques proposées.

Il est intéressant de noter que le modèle permet de prévoir correctement les modifications des caractéristiques du milieu suite au processus de transfert et dépôt de particules. Ceci est illustré par l'accord global satisfaisant des profils de porosité, prédis et expérimentaux, dans les milieux en fin des essais (fig.4) et ceci même pour les très fortes concentrations. Le profil de porosité est obtenu selon la démarche décrite dans le paragraphe 2. Cependant, on relève que pour les très fortes concentrations (Co>1,5g/l) le modèle conduit à une surestimation de la chute de porosité dans les premiers centimètres à l'entrée du milieu. La fonction  $\theta(x)$  prenant en compte le blocage mécanique surestime donc le dépôt dans cette partie du milieu. Cette divergence est accentuée lorsque la concentration augmente. D'autres simulations sont en cours afin d'améliorer le modèle. Enfin, l'accord entre résultats simulés et résultats expérimentaux est meilleur lorsque la concentration est faible.







Fig. 4 Calibration de porosité relative à la fin d'essai  $(83V_p)$  dans la colonne à (a) Co=0,25g/l, 0,5g/l et 1g/l (b) Co=1,5g/l et 2g/l (c) Co= 3g/l

#### 5. Conclusion et perspective

Les résultats de calage de certains résultats expérimentaux de filtration montrent que le modèle mathématique développé prend en compte de manière satisfaisante les différentes conditions qui contrôlent le transfert de matière dans un milieu poreux. Un des aspects importants de cette modélisation est qu'elle permet non seulement de simuler le comportement de transport en termes de restitution à la sortie sur des essais de très longue durée, mais surtout de prédire les modifications

spatio-temporelles des caractéristiques du milieu tel que la distribution de la porosité et de la perméabilité.

# Références

[1] Bai R. and Tien C., Effect of deposition in deep-bed filtration: determination and search of rate parameters, Journal of colloid and interface science, 231, 299-311, 2000

[2] Bradford S. A. and al., Modeling colloid attachment, straining, and exclusion in saturated porous media, Environment science & technology, 37, 2242-2250, 2003

[3] Bradford S.A. and al., Significance of straining in colloid deposition: evidence and implications, Water Resource Research, 42, W12S15, 2006

[4] Corapcioglu M. Y. and Jiang S., Colloid-facilitated groundwater contaminant transport, Water Resource Research, 29, 2215-2226, 1993

[5] Delay F. and al., Predicting solute transport in heterogenenous media from results obtained in homogeneous ones: an experimental approche, Journal of Contaminant Hydrology, 25, 63-84, 1997
[6] Ganaoui O. E., Modélisation de la dynamique sédimentaire pour les transferts des radionucléides dans les cours d'eau, Thèse de doctorat en Mécanique, l'Université d'Aix Marseille II, 2002
[7] Grelimund D. and al. Long term release kingties of colloidel particles from netural porous media

[7] Grolimund D., and al., Long-term release kinetics of colloidal particles from natural porous media, Environment science & technology, 33, 4054-4060, 1999

[8] Johnson R.P. and Elimelech M., Dynamics of colloid deposition in porous media: blocking based on random sequential adsorption, Langmuir, 11, 801-812, 1995

[9] Kretzschmar R., and al., Experimental determination of colloid deposition rates and collision efficiencies in natural porous media, Water Resource Research, 33, 1129-1137, 1997

[10] Loveland J.P. and al., Colloid transport in a geochemically heterogeneous porous medium: aquifer tank experiment and modeling, Journal of contaminant hydrology, 65, 161-182, 2003 [11] Reddi L.N. and al., Critical shear stress and its relationship with cohesion for sand-kaolinite

[11] Reddi L.N. and al., Critical shear stress and its relationship with cohesion for sand-kaolinite mixtures, Can. Geotech., 34, 26-33, 1997

[12] Szymczak P. and al., Boundary conditions for stochastic solutions of the convection-diffusion equation, Physical review E, 68, 2003

[13] Vigneswaran S., and al., Experimental testing of mathematical models describing the entire cycle of filtration, Water Resource Research, 23, 1413-1421, 1989