



**HAL**  
open science

# **Modélisation du couplage chimique-mécanique du transport et écoulement en milieux granulaires**

Nadia Saiyouri, Atmane Katti

► **To cite this version:**

Nadia Saiyouri, Atmane Katti. Modélisation du couplage chimique-mécanique du transport et écoulement en milieux granulaires. CFM 2013 - 21ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2013, Bordeaux, France. <hal-03440646>

**HAL Id: hal-03440646**

**<https://hal.science/hal-03440646v1>**

Submitted on 22 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.



HAL Authorization

# Modélisation du couplage mécanique chimique du transport et écoulement dans les milieux granulaires

N. SAIYOURI<sup>a</sup>, A. KATTI<sup>a,b</sup>

a. Institut de Mécanique et d'Ingénierie (I2M UMR CNRS 5295), Université Bordeaux 1 Bât B18, 351 cours de la libération, 33405 TALENCE Cedex France.

b. Ecole Centrale de Nantes, 1 Rue Noé 44300 Nantes, France.

## Résumé :

*L'objectif de cet article est la présentation d'un modèle couplé non linéaire développé au laboratoire pour les transport et écoulement en milieux granulaires. Dans un premier temps, on expose le modèle mathématique du couplage d'érosion interne et du transport réactif des polluants, ainsi que le couplage érosion interne et déformation de la matrice solide. Dans un second temps, on présente l'approche numérique adoptée pour résoudre le modèle mathématique. Enfin, quelques résultats numériques seront donnés.*

## Abstract :

*The aim of this paper is the presentation of the nonlinear-coupled model developed in the laboratory. In a first step, the mathematical model of the coupling internal erosion and reactive transport of pollutants was presented. Also the mathematical model of the coupling internal erosion and solid matrix deformation was presented. In a second step, the numerical approach adopted to solve the mathematical model is developed. Finally, some numerical results are given.*

**Mots clefs : modélisation, couplage, transport réactif, érosion.**

## 1 Introduction

Le processus de transfert dans les matériaux poreux exposés aux polluants (réactif ou non réactif) est une problématique d'actualité. On sait que la mobilité de ces contaminants dans la phase fluide lors des différents processus physico-chimiques de transport est caractérisée par la capacité de rétention et de libération du milieu poreux. La rétention présente un risque de contamination durable sur les cultures et l'expansion urbaine, alors que la libération entraîne un risque majeur de contamination des nappes phréatiques entre autres.

Plusieurs travaux de modélisation ont été réalisés pour pouvoir répondre aux problématiques liées au transport dans les milieux poreux des différents polluants classés par le BRGM [1], Bouazza et Delage [2]. Les différents modèles de transport de polluant prennent en compte généralement des couplages du transport et des phénomènes de réaction physico-chimique. Ces modèles sont représentés par deux approches, l'une considère le transport réactif comme le couplage du transport de type convection – dispersion avec l'expression analytique de l'isotherme de sorption de l'espèce considéré et une loi cinétique [3] et [4]. Le second est défini comme un couplage géochimie et transport utilisant les lois d'action de masse et les lois cinétiques [5]. De plus de ces deux approches, la prise en compte du phénomène d'érosion interne [6] renseigne sur l'évolution spatiale et temporelle des matrices solides des milieux poreux, qui permet de prédire avec une échelle d'approximation appréciable, l'incidence des transferts réactifs sur la matrice solide initiale.

Les modèles de comportement mécanique couplé au transport dans les milieux poreux [7], [8] et [9], issus des travaux récents, donnent de meilleurs simulation des différents mécanismes physiques en présence dans le milieu étudié.

Le modèle développé au laboratoire, se compose d'un ensemble d'équations différentielles couplées non linéaires résolues en séquentiel, dans un code aux différences finies en temps et éléments finis en espace.

Ces équations se réfèrent au transport de masse en milieu poreux saturé de type convection-dispersion-diffusion implémenté par Chupin [10], utilisant la librairie d'éléments finis Diffpack. En tenant compte de la porosité, la perméabilité intrinsèque et la pression interstitielle du sol, ce modèle a permis de suivre l'évolution et la répartition spatiale de plusieurs grandeurs (concentration, pression, perméabilité intrinsèque et porosité).

Une procédure de moyenne est employée pour coupler l'érosion interne et la déformation du sol dans les équations de continuité macroscopique. De plus, le couplage de l'érosion interne et du transport de polluant dans un milieu poreux saturé, a mis en évidence un lien entre le couplage des mécanismes de déformation et le processus de transfert réactif en milieu poreux saturé.

## 2 Matériaux utilisés et dispositifs expérimental

Les échantillons sont constitués de sable de Fontainebleau (SFB) d'une granulométrie comprise entre 50 – 400  $\mu\text{m}$ , d'une densité des particules de  $\sim 2600 \text{ kgm}^{-3}$  [6] et de 10% de Kaolinite Speswhite (KS). Les mélanges considérés homogènes sont compactés à l'intérieur des cellules d'érosion.

La figure 1 représente des cellules d'érosion connectée à un réservoir de solution chimique  $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$  de concentration initiale définie. L'injection de la solution dans l'échantillon se fait à une pression donnée (de l'ordre de quelques centaines de kPa selon l'échantillon). Un régulateur de pression permet de maintenir la pression à une valeur voulue. Les effluents sont récupérés à la sortie de la cellule de percolation et sont analysés pour étudier l'évolution de la concentration du polluant en fonction du temps.

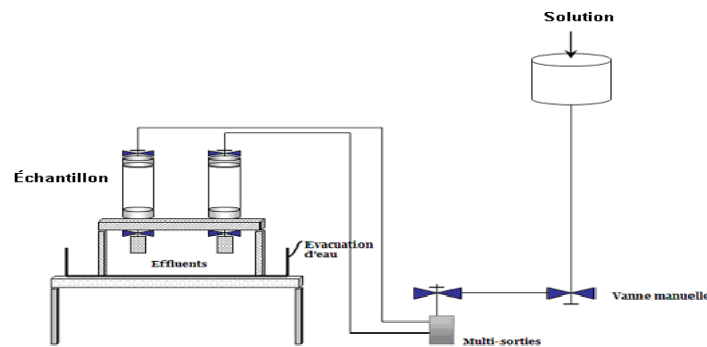


FIG. 1– Dispositif expérimental d'érosion couplée au transport de polluant [11].

## 3 Présentation des modèles mathématiques utilisés dans le code

Les milieux granulaires sont constitués par un assemblage de particules solides de différentes formes et tailles [12], entre lesquelles subsistent des espaces vides appelés pores [13 ; 14]. Ces derniers sont interconnectés par une ou plusieurs phases fluides caractérisées par une perméabilité intrinsèque, une porosité et une pression interstitielle.

Dans cet article, on va se limiter à l'étude d'un milieu poreux saturé, qu'on décrit dans une échelle macroscopique, caractérisée par la dimension VER (Volume Élémentaire Représentatif). Ce concept permet de considérer ce milieu comme homogène continu et de moyenniser les grandeurs physiques sur l'ensemble du volume. Le phénomène physique est décrit par deux principes : la conservation de masse et la loi de Darcy qui donnent les équations mathématiques du modèle [15]. Le modèle consiste à coupler le transport réactif et l'érosion interne dans une première phase, suivi d'une seconde phase par un couplage du transport des particules érodées issues de l'érosion interne et la déformation de la matrice solide.

### 3.1 Couplage transport réactif de polluants et érosion interne

L'érosion interne est définie comme un détachement des particules de la structure solide d'un sol sous l'action d'un agent physique ou chimique, ce phénomène est à l'origine du transport particulaire mais également de certains polluants associés aux particules érodées (Ex : Métaux lourds). Le phénomène d'érosion interne implique une évolution des phases fluide et solide du milieu poreux, une variation de la porosité ( $n$ ) et de la perméabilité intrinsèque ( $k$ ).

Le modèle couplé de transport réactif de polluant et érosion interne est basé sur l'analyse d'un système

d'équations différentielles non linéaires. Il est composé d'une équation de transport de particules érodées (1), d'une équation de transport des polluants dans l'eau (2) et d'une équation adsorption et désorption des polluants sur les particules érodées (3).

$$\frac{\partial(nC_{\text{éros}})}{\partial t} + \nabla \cdot (C_{\text{éros}}q) - \nabla \cdot (D\nabla C_{\text{éros}}) = \lambda_{\text{éros}} \|q\| \chi \quad (1)$$

$$\frac{\partial(nC_e)}{\partial t} + \nabla \cdot (qC_e) - \nabla \cdot (D\nabla C_e) = -K_A C_e + K_D C_m \times C_{\text{éros}} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(nC_m C_{\text{éros}})}{\partial t} + \nabla \cdot (qC_m C_{\text{éros}}) - \nabla \cdot (D\nabla(C_m C_{\text{éros}})) = K_A C_e - K_D C_m \times C_{\text{éros}} \quad (3)$$

Avec :  $\lambda_{\text{éros}}$  est le coefficient d'érosion,  $q$  représente le flux (débit) de la loi de Darcy,  $\chi$  teneur en particule érodable ;  $C_{\text{éros}}$ ,  $C_e$  et  $C_m$  sont les concentrations, respectivement des particules érodées, des polluants dissous et particulaires.  $K_A$  et  $K_D$  sont les coefficients de la cinétique d'adsorption et de désorption du polluant, ces valeurs sont déterminées expérimentalement ou reprises dans la littérature. Le couplage entre érosion interne et transport réactif de polluant est représenté par l'équation (1), tandis que les équations (2) et (3) permettent de suivre l'évolution des processus chimiques des polluants.

### 3.2 Couplage transport des particules érodées et déformation

Le modèle de couplage transport des particules érodées et déformation tient compte des couplages entre l'écoulement fluide, le transport des particules de sol, l'érosion interne et la déformation du squelette solide. La déformation de la phase solide est déterminée par une variation de volume, qui engendre une augmentation de la porosité, liée au départ des particules.

Dans un milieu poreux saturé, la déformation du milieu dépend de la contrainte mécanique appliquée et de la pression du fluide à l'intérieur des pores [16].

$$\sigma = \sigma' + P \quad (4)$$

$\sigma'$  Contrainte effective en Pa,  $P$  pression interstitielle en Pa. Cette expression fait apparaître explicitement la pression interstitielle du liquide  $P$  qui va être reliée à la loi de Darcy. Ceci permettra un couplage entre la déformation de la matrice solide et le transport de la phase liquide.

Le modèle développé analyse les contraintes et les déformations de la matrice du sol suivant une loi élastique linéaire (loi de Hooke) (5).

$$\sigma' = E \varepsilon \quad (5)$$

Avec  $E$  module de Young constant (Pa),  $\varepsilon$  la déformation verticale égale au gradient du déplacement  $u$  (m).

L'équation d'équilibre d'un milieu poreux saturé à une dimension est donnée par l'équation (6).

$$E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nabla P + \rho g = 0 \quad (6)$$

Avec  $\rho$  est la masse volumique homogénéisée du milieu poreux ( $\text{kg/m}^3$ ).

Le couplage de la déformation élastique linéaire et l'érosion interne du milieu poreux, a été réalisé avec la formule de Terzaghi (4), qui lie la déformation à la loi de Darcy par la pression interstitielle dans un milieu poreux saturé.

L'évolution du modèle est décrit par les variables d'état suivant le déplacement  $u$ , la pression interstitielle  $P$ , la concentration du composant  $C$ , la teneur des particules érodées  $\chi_{\text{éros}}$ , la perméabilité  $k$  et la porosité  $n$ .

## 4 Approche numérique pour la résolution des systèmes mathématiques

La méthode de Gauss Seidel est adoptée pour la résolution numérique du modèle mathématique [17]. La caractéristique intéressante de la méthode d'itération de Gauss Seidel est que nous devons seulement résoudre des équations aux dérivées partielles aux normes scalaires.

Dans le cas du transport des particules érodées dans un milieu déformable, l'équation de transport sera résolue par rapport à  $C$ , puis l'équation d'écoulement par rapport à  $P$ , en utilisant la valeur calculée de  $C$  la plus récente. Ensuite la loi d'érosion permet de calculer  $\chi_{\text{éros}}$  et l'équation d'équilibre mécanique donne  $u$  en utilisant les valeurs les plus récentes calculées de  $P$ ,  $C$  et  $\chi_{\text{éros}}$ .

L'algorithme de type Gauss Seidel, appliqué au modèle avec déformation, est décrit par l'ordre des étapes suivantes :

- Soient  $C^0$ ,  $p^0$ ,  $\chi_{\text{éros}}$  et  $u^0$  des approximations initiales de  $F^C(C, p, \chi_{\text{éros}}, u) = 0$ ,  $F^u(C, p, \chi_{\text{éros}}, u) = 0$ ,  
 $F^z(C, p, \chi_{\text{éros}}, u) = 0$  et  $F^p(C, p, \chi_{\text{éros}}, u) = 0$ ,
- Incrémenter  $k$ ,
- Résoudre  $F^C(C^{k-1}, p^{k-1}, \chi_{\text{éros}}^{k-1}, u^{k-1}) = 0$  selon  $p^k$ ,
- Résoudre  $F^C(C^k, p^k, \chi_{\text{éros}}^{k-1}, u^{k-1}) = 0$  selon  $C^k$ ,
- Résoudre  $F^C(C^k, p^k, \chi_{\text{éros}}^k, u^{k-1}) = 0$  selon  $\chi_{\text{éros}}^k$ ,
- Résoudre  $F^C(C^k, p^k, \chi_{\text{éros}}^k, u^k) = 0$  selon  $u^k$ ,
- Vérifier le critère de convergence.

La résolution numérique du modèle est réalisée par un code d'éléments finis à l'aide de la librairie Diffpack.

## 5 Résultats et discussion

### 5.1 Transport réactif de polluants et érosion interne

L'évolution de la concentration des particules érodées en un point  $z = 0.05$  m de la colonne est donnée sur la Figure 2. Cette figure montre les courbes obtenues par un calcul qui intègre l'érosion et un calcul sans érosion. On peut voir clairement que l'érosion accélère le transport de la contamination.

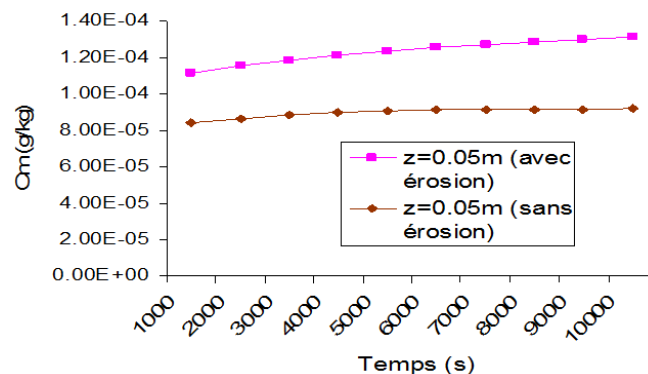


FIG. 2 – Evolution de la concentration du  $Pb(NO_3)_2$  sur les particules du sol en fonction du temps avec et sans érosion pour  $z = 0.05$  (m) [11].

Les résultats du modèle mathématique donnent une bonne tendance des effets du couplage érosion interne et transport réactif.

### 5.2 Transport des particules érodées et déformation

Les résultats de calcul numérique des équations de transport des particules érodées couplé avec la déformation du sol sont donnés par la figure 3, pour des paramètres de modélisation indiqués dans le tableau 1.

	Notation	Valeur
Taille de la colonne	( $\emptyset$ , H)	(0.1 m, 0.1m)
Concentration initiale des particules érodables	$\chi_0$	1700 kg m <sup>-3</sup>
Concentration initiale des particules fluidisées (transportées)	$C_0$	0 kg m <sup>-3</sup>
Porosité initiale	$n_0$	0.242
Perméabilité intrinsèque initiale	$k_0$	1.31 10 <sup>-12</sup> m <sup>2</sup>

Coefficient de diffusion moléculaire	$D_d$	$10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Module de Young	$E$	140 MPa
Densité initiale de l'eau porale	$\rho_0$	$1,050 \text{ kg m}^{-3}$
Coefficient de pression	$\epsilon_P$	$3.8 \cdot 10^{-8} \text{ Pa}^{-1}$
Coefficient de concentration	$\epsilon_\chi$	$2.9 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$
Densité du sol érodé	$\rho_m$	$1,300 \text{ kg m}^{-3}$
Coefficient d'érosion	$\lambda$	$2.5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$
Coefficient de dommage	$\beta$	$7 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1}$

TAB. 1 – Valeurs des paramètres utilisés pour la modélisation.

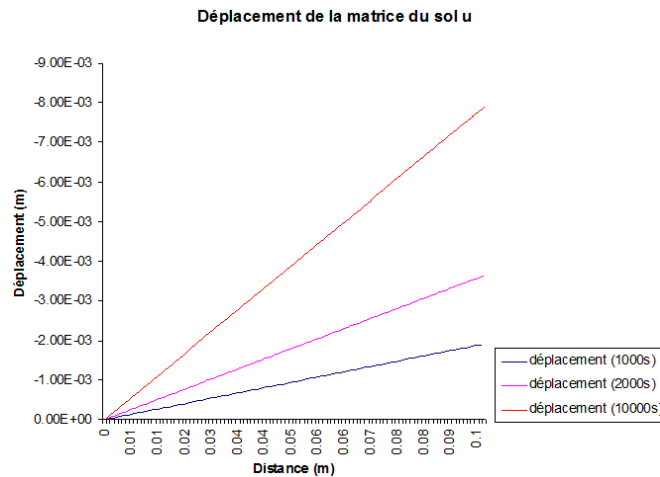


FIG. 3 – Evolution du déplacement de la matrice du sol en fonction du temps (s) et de la distance au point d'injection (m).

D'après la figure 3, le déplacement maximum est proche de 9 mm (valeur négative, car tassement de la cellule). Le modèle de couplage transport de particules érodées dans un milieu poreux déformable permet de mettre en évidence l'effet de la déformation du sol, pour un comportement élastique linéaire. Ce graphique reproduit la linéarité de l'évolution spatiale et temporelle sur la colonne de la déformation de la matrice solide.

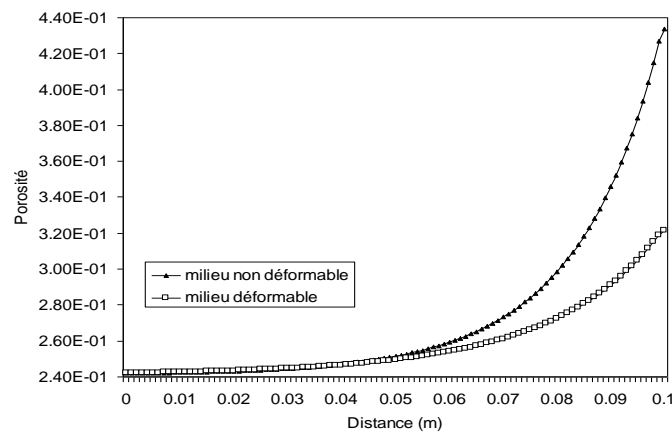


FIG. 4 – Comparaison des résultats de calcul de la porosité entre un milieu déformable et un milieu non déformable.

La figure 4 montre l'évolution de la porosité  $n$  en fonction de la hauteur sur la colonne pour un temps correspondant à 10000 secondes. La porosité augmente du point d'injection 0 m vers le point de sortie 0.1 m, l'évolution de cette variable et la perméabilité intrinsèque (courbe non représentée) est plus importante dans un milieu non déformable qu'en milieu déformable, sachant que la pression d'injection diminue en fonction de la hauteur. Ceci s'explique par le fait que dans un milieu poreux saturé déformable le déplacement des

particules engendre une réorganisation de la structure solide.

## 6 Conclusion et perspectives

L'utilisation du principe de conservation de la masse et de la loi de Darcy, a permis de construire un modèle de transport et d'écoulement en milieu poreux saturé. L'intégration de la masse érodée dans le modèle a mis en évidence le couplage érosion interne et transport réactif, validé par des essais expérimentaux et des simulations numériques. Le comportement mécanique du milieu poreux a été intégré en exploitant le principe de Terzaghi, permettant un couplage mécanique et transport de particules érodées. La modélisation de ce couplage est en fonction des variations de la porosité, de la perméabilité intrinsèque et de la pression interstitielle.

Dans un premier temps, une première perspective de cette étude, serait une amélioration du modèle élastique (loi de Hooke) qui permettrait la prise en compte de l'élasticité non linéaire et la plasticité du sol. Dans une seconde phase, une amélioration du couplage transport réactif avec le comportement mécanique en prenant compte l'interactivité de l'érosion interne. Enfin, une comparaison entre les résultats numériques du modèle et les résultats des essais expérimentaux sont nécessaires pour valider le code.

## Références

- [1] BRGM « Bureau de Recherches géologiques et minières », Gestion des sites pollués, 2000.
- [2] Bouazza A., Delage P., Wojnarowics M., Nature et reconnaissance de la pollution des sols, Géomécanique environnementale : Sols Pollués et Déchets. Delage P., Schrefler B., Hermes Science Publications, Chapter 1, pp. 17-49, 2005.
- [3] Freundlich H., Colloid and capillary chemistry, Methuen, London, 1926.
- [4] Langmuir D., Whittemore D.O., Variations in stability of precipitated ferrie oxyhydroxides, In non equilibrium systems in natural water chemistry, advances in chemistry Series 106: 5J.D. Hem, Ed) Advances in chemistry Series 106 : 5 J.D. HEM, Ed.), Washington, D.C. 1971.
- [5] Lanini S. Modélisation couplée chimie-transport : Etude théorique et bibliographique. Rapport BRGM R40879, p 47, 1999.
- [6] Muresan B., Saiyouri N., Guefrech A., Hicher P-Y., Internal erosion of chemically reinforced granular materials : A granulometric approach. Journal of Hydrology 411, pp 178–184, 2011.
- [7] Papamichos E., Vardoulakis I., Tronvoll J., Skjaerstein A., Volumetric sand production model and experiment, International journal for numerical and analytical methods in geomechanics, 25(8) : pp 789 - 808, 2001.
- [8] Wan R.G., Wang J., Modelling sand production within a continuum mechanics framework, Journal of Canadian petroleum technology, 41:46-52, 2002.
- [9] Papamichos E., Vardoulakis I., Sand erosion with a porosity diffusion law, computers and geotechnics, 32(1): 47-58, 2009.
- [10] Chupin O., Saiyouri N., Hicher P-Y., The effects of filtration on the injection of cement grouts in sand columns. Transport in Pours Media; 72 : 227 - 240, 2007.
- [11] Khalil T., Modélisation du transport réactif en milieu poreux saturé : étude des processus chimio-hydro-mécanique. Thèse de l'Ecole Centrale de Nantes, 2011.
- [12] Daouadji A., Hicher P-Y., Rahma A., An elastoplastic model for granular materials into account grain breakage, Eur. J. Mec A/Solids 20, 113-137, 2000.
- [13] Bear J., Hydraulic of groundwater, Mc Grew-Hill Series, in Water Resources and Environmental Engineering, New-York, 1979.
- [14] Yeh G.T., Computational subsurface Hydrology : Fluid Flows, Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [15] Domenico P.A., Physical and Chemical hydrogeology, John Wiley & Sons, New York [2nd ED]: 506 p, 1998.
- [16] Delage P., et CUI Y-J., Comportement mécanique des sols non saturés, Technique de l'ingénieur C320, 2011.
- [17] Langtangen H.P., Computational Differential Equations. Numerical Methods and Diffpack Programming, Springer-Verlag, Berlin, p 855, 1999.