
Modélisation du couplage transport-dépôt de particules en suspension en milieu poreux saturés

E. Ma¹, T. Ouahbi^{1*}, H. Wang¹, N-D Ahfir¹, A. Alem¹

¹ UMR CNRS 6294, Laboratoire d'Ondes et Milieux Complexes, Normandie Université

53 rue de prony BP540, 76058 le Havre, France

*E-mail : tariq.ouahbi@univ-lehavre.fr

RÉSUMÉ. La compréhension du transfert des particules en suspension dans un milieu poreux a une grande implication sur la réduction du risque de contamination des ressources hydriques. Le transport de particules en suspension joue un rôle crucial dans des domaines aussi divers que l'industrie (filtration, chromatographie, traitement de l'eau) ou les sciences de la terre et le génie civil (hydrogéologie, environnement, ..).

La migration des particules dans le sol peut d'une part favoriser la propagation des polluants vers les nappes souterraines. D'autre part, elle peut mener à l'instabilité voir même la rupture d'ouvrages hydrauliques (érosion interne).

Dans ce travail, une modélisation numérique du couplage transport-dépôt de particules en suspension en milieu poreux est proposée. Cette modélisation combinée à une étude expérimentale de transport et dépôt de particules de Kaolinite dans une colonne de laboratoire avec un écoulement à débit imposé, a permis l'étude (par méthode inverse) de l'effet de plusieurs facteurs sur les mécanismes de transport et de dépôt dans un milieu poreux.

ABSTRACT. Understanding the transport of suspended particles in a porous medium has great implications for reducing the risk of contamination of water resources. The transport of suspended particles (SP) plays a crucial role in diverse industries (filtration, chromatography, and water treatment), earth sciences and civil engineering (hydrogeology, environment...).

The migration of particles in the soil can facilitate the spread of pollutants to groundwater, while it can also lead to instability or even rupture of hydraulic structures (internal erosion). The "clean bed" theory, however, was found not to be sufficient to describe transport of suspended particles, especially to predict the profile of retention in many previous studies.

In this work, a time-distance dependent deposition model was proposed on the transport of suspended particles in the porous media. This model described well the change of the structure of porous media and apparent decrease in deposition rate coefficient with increasing distance. Numerical simulations were applied in a series of sand column experiments to determine the effects of flow rate and grain size distribution (GSD) on transport and deposition of SP in saturated porous media.

MOTS-CLÉS : Modélisation numérique, Milieux poreux, Transport-dépôt, Matière en Suspension (MES).

KEY WORDS: Modelling, Porous medium, Transport-deposition, Suspended particles (SP)

1. Introduction

La compréhension du transfert des particules en suspension dans un milieu poreux a une grande implication sur la réduction du risque de contamination des ressources hydriques. Le transport de particules en suspension joue un rôle crucial dans des domaines aussi divers que l'industrie (filtration, chromatographie, traitement de l'eau) ou les sciences de la terre et le génie civil (hydrogéologie, environnement, ..).

La migration des particules dans le sol peut d'une part favoriser la propagation des polluants vers les nappes souterraines. D'autre part, elle peut mener à l'instabilité voir même la rupture d'ouvrages hydrauliques (érosion interne). Les matières en suspension (MES) jouent également un rôle déterminant dans la contamination des sols et des aquifères en raison de la capacité d'adsorption de certains polluants et des bactéries sur le matériel particulaire.

Plusieurs modèles numériques avec différents facteurs physico-chimiques ont été envisagées pour modéliser le dépôt de MES. On peut citer parmi eux : les modèles de dépôt dans le minimum d'énergie secondaire [LI 2010], hétérogénéités dans la population de colloïde [LI 2004] et la charge de surface [TUF 2005], d'autres chercheurs ont suggéré certains facteurs physiques, y compris le forçage mécanique [BRA 2003; XU 2006], la rugosité de surface (échelle microscopique) des milieux poreux [TOR 2016] et les forces hydrodynamiques. De ce fait, certains modèles de dépôt ont également été développés. Li et al. en 2004 a appliqué la distribution log-normale sur le coefficient de vitesse de dépôt pour les hétérogénéités dans la population de colloïde et Tufenkji et Elimelech en 2005 ont utilisé le double mode de dépôt pour les hétérogénéités de charge de surface. Bradford et al. 2003 et Xu et al. 2006 ont introduit le terme de forçage mécanique à l'équation de convection-diffusion.

Dans ce travail, une modélisation numérique du couplage transport-dépôt de particules en suspension en milieu poreux est proposée. Cette modélisation combinée à une étude expérimentale de transport et dépôt de particules de Kaolinite dans une colonne de laboratoire avec un écoulement à débit imposé, a permis l'étude (par méthode inverse) de l'effet de plusieurs facteurs sur les mécanismes de transport et de dépôt dans un milieu poreux. Ainsi, les effets du débit et de la distribution granulométrique des milieux poreux sur le transport et le dépôt des MES ont été étudié.

2. Modélisation numérique

En régime d'écoulement permanent et en conditions saturées, la conservation de la masse des particules fines de kaolinite et leur transport à travers le milieu poreux peuvent être représentés par un problème macroscopique de transport (convection-diffusion des particules en suspension) :

$$\frac{\partial(\omega_0 - \omega_p)C}{\partial t} = \nabla(D \cdot \nabla(\omega_0 - \omega_p)C - (\omega_0 - \omega_p)uC) - \rho_b \frac{\partial \omega_p}{\partial t} \quad [1]$$

Où C [M L³] est la concentration des particules suspendues dans l'eau, t [T] le temps, ω_0 [L³/L³] est la porosité initiale, ω_p [L³/L³] est la fraction volumique des particules déposées (cm³ particule / cm³ milieu poreux), D est le coefficient de dispersion hydrodynamique, u [M/L] est la vitesse moyenne de pore, ρ_b [M/L³] est la densité des particules.

Le terme de dépôt est exprimé par :

$$\rho_b \frac{\partial \omega_p}{\partial t} = k_{dep}(\omega_0 - \omega_p)C \quad [2]$$

$$k_{dep} = k_0 \psi \quad [3]$$

Ici le terme k_{dep} est un coefficient qui représente le taux de la cinétique du dépôt, k_0 est un coefficient qui quantifie le taux de la cinétique du dépôt initial (dans des conditions de milieu poreux propre sans aucune déposition) et ψ est une fonction sans dimension de dépôt de particules.

La fonction ψ est modélisée comme une fonction de ω_p et d'une distance caractéristique :

$$\psi = e^{-\omega_p/\lambda} \cdot \left(\frac{L_c}{L_c + x} \right) \quad [4]$$

Où x [L] est la distance à partir de l'entrée de la colonne, L_c est une longueur caractéristique, λ est un coefficient de même unité que ω_p qui quantifie la diminution exponentielle du taux de dépôt.

La longueur caractéristique L_c (plutôt que le diamètre médian (d50) [BRA 2003, BRA 2006]) est introduite ici pour obtenir une diminution de k_{dep} avec la distance, car les particules suspendues utilisées dans ce travail sont des particules polydisperses, et donc la diminution de k_{dep} n'est pas dû seulement au forçage mécanique au niveau des pores mais également à la diminution du diamètre des particules déposées avec la distance.

A partir des résultats expérimentaux dont nous disposons [AHF 2016], une optimisation numérique est effectuée pour déterminer les paramètres du modèle (k_0 , L_c , λ) qui approche le mieux les données expérimentales. Pour cela, un outil numérique d'optimisation par méthode inverse a été développé et est basé sur l'algorithme de minimisation de fonctions de Lavenberg-Marquardt. Cette méthode a l'avantage d'avoir une convergence rapide et précise à la fois. Le principe de cette méthode consiste à déterminer les trois paramètres (k_0 , L_c , λ) par une minimisation au sens des moindres carrés.

3. Résultats et discussion

3.1 Comparaison de notre modèle avec la méthode analytique graphique linéaire

Pour valider le modèle de transport-dépôt proposé, le modèle développé a été appliqué à la simulation de certaines expériences de colonnes de sable précédemment publiés. Toutes les données sont sélectionnées parmi ceux dans l'article de Ahfir et al. (2016). Dans la Figure 1, les courbes en pointillés sont les résultats d'une solution semi-analytique, qui ont été obtenues par la méthode graphique linéaire [AHF 2016]; courbes en trait plein sont des résultats numériques.

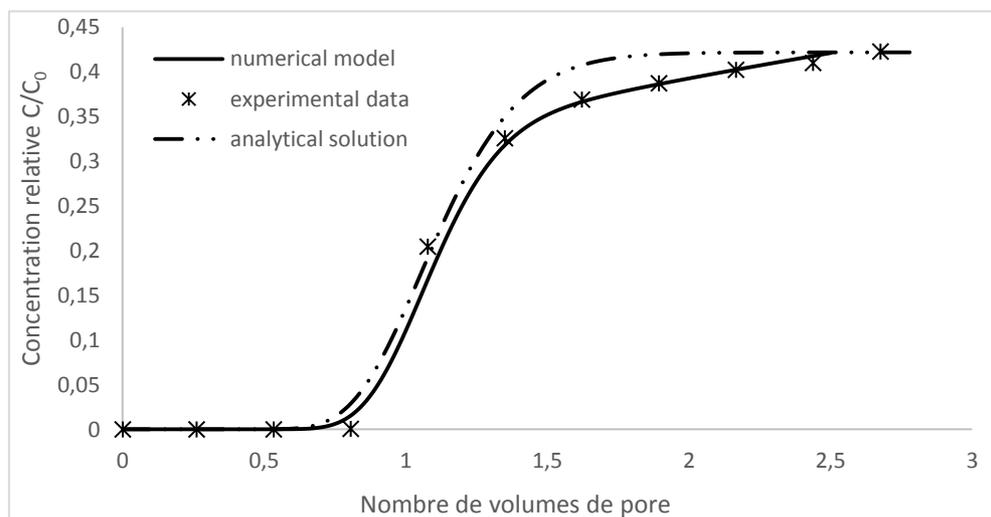


Figure 1. Comparaison de la concentration des effluents : Analytique, Numérique et Expérimentale.

Le modèle analytique est capable de simuler approximativement les données de concentration des effluents, et ne permet pas par contre d'obtenir la légère augmentation de la concentration sur la courbe de restitution après environ 1,5 volumes de pores. Dans d'autres études, il n'y a pas de plateau sur la courbe de restitution qui apparaît après 1-2 Volumes de pores [BRA 2002, 2006; XU 2006; SUN 2015]. Ces résultats suggèrent que l'efficacité globale de la filtration de la colonne de sable a diminuée constamment plutôt que de rester invariante.

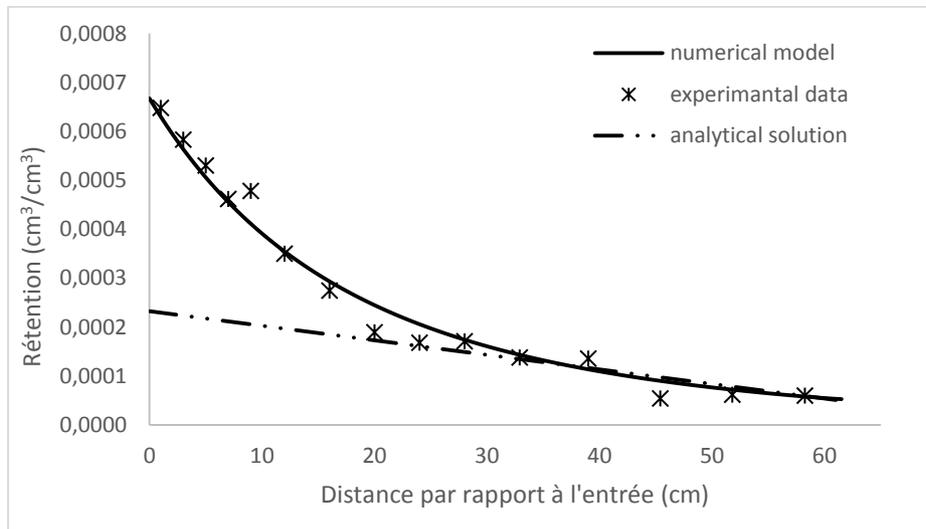


Figure 2. Comparaison des profils de rétention : Analytique, Numérique et Expérimental.

En ce qui concerne les profils rétention (Figure 2), le modèle avec un paramètre k_{dep} constant est totalement incapable de simuler ces courbes. Pour toutes les expériences, quel que soit le débit et milieu poreux, il existe un écart important entre profil de rétention issus des essais expérimentaux et ceux issus de la méthode analytique. En revanche, les simulations de transport-dépôt de premier ordre sont capables de bien callées les profils de retention (Figure 2).

Dans la suite, nous allons nous intéresser à l'explication de distributions décroissantes du taux de dépôt et de la rétention, en analysant les paramètres du modèle numérique.

3.2 Simulation numérique avec le modèle de dépôt spatio-temporel

Le modèle numérique de transport-dépôt a montré qu'il pouvait donner une bonne prédiction de la courbe de restitution et de la courbe de rétention (les deux à la fois). Ce modèle est basé sur une cinétique de dépôt spatio-temporelle.

A partir des résultats expérimentaux (courbe de restitution et courbe de rétention), notre outils d'optimisation numérique nous a permis d'ajuster les coefficients de dépôt pour les différentes contions. Un bon accord est observé avec des valeurs R^2 variaient de 0,9 à 0,98 pour les 15 cas de simulations étudiés (tableau 1).

Ces courbes (Figures 3-4) bien ajustées indiquent que ce modèle a fourni un ajustement raisonnable à la fois des courbes de concentration des effluents et des courbes de la distribution spatiale de la rétention. Les valeurs optimisées des paramètres pour les différentes expériences sont présentés dans le tableau 1. Dans ce tableau on remarque que : k_0 varie entre 33h⁻¹ et 90h⁻¹, L_c varie de 10cm à 20cm et λ varie entre 18e-5 et 180e- 5.

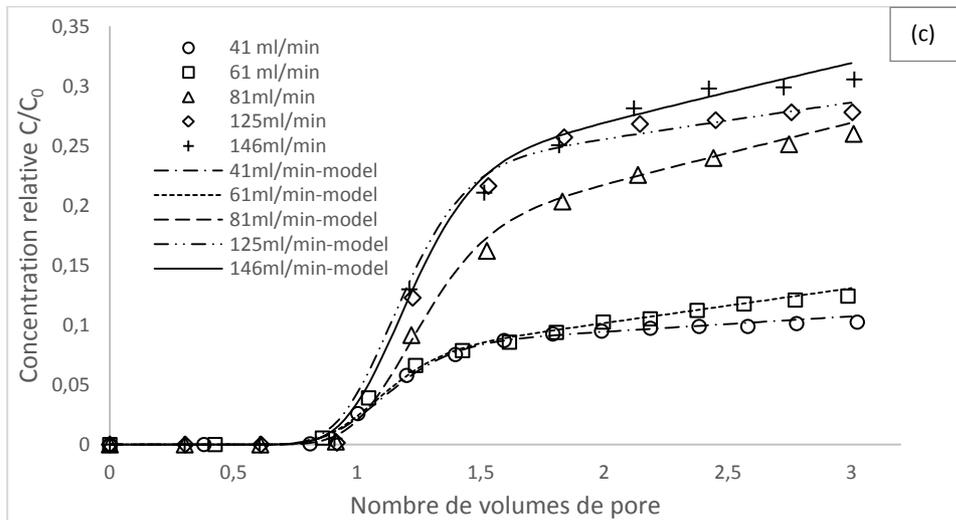
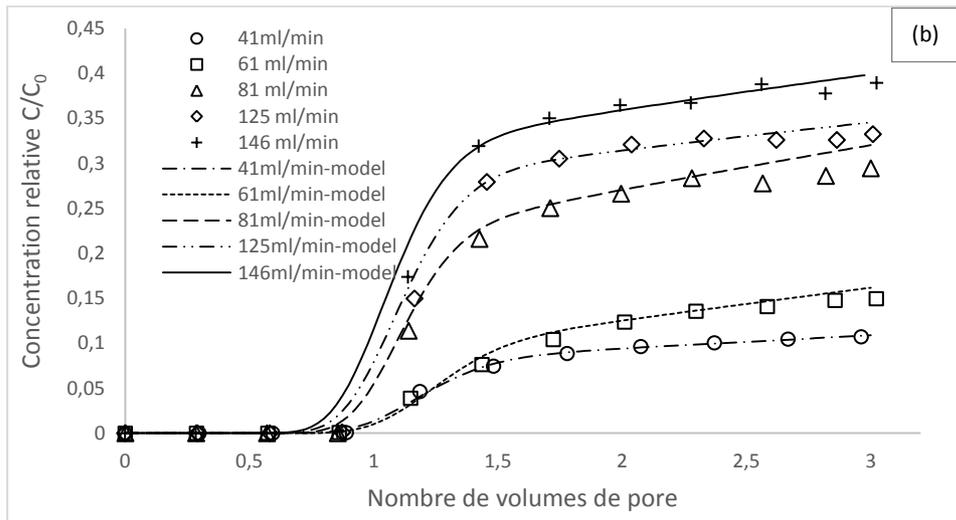
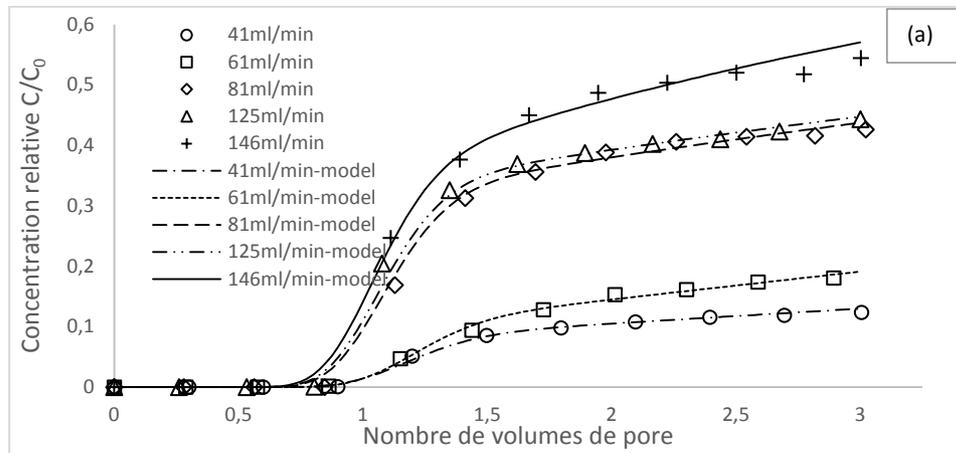


Figure 3. Courbes de restitutions (Numériques/Expérimentales) (a-c) kaolinite P300 à différent débit et pour différent type de milieu poreux : Coarse (a), Fine (b) and MIX (c).

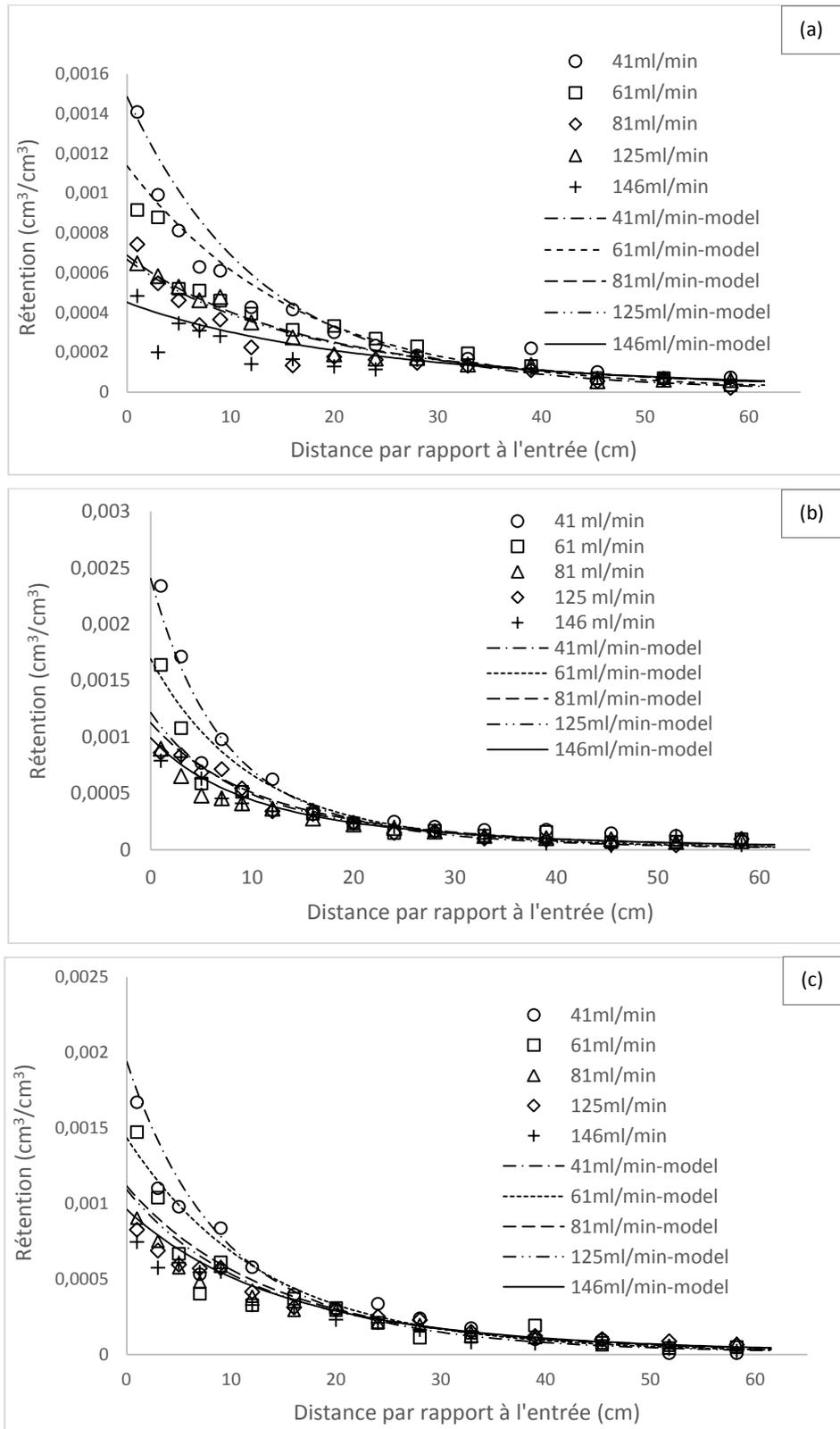


Figure 4. Profils de rétention (Numériques/Expérimentales) (a-c) kaolinite P300 à différent débit et pour différent type de milieu poreux : Coarse (a), Fine (b) and MIX (c).

Table 1. Valeurs des paramètres optimaux obtenus.

<i>Sand diameter</i> (μm)	<i>U</i> (cm/s)	<i>K₀</i> ($1/\text{h}$)	<i>Lc</i> (cm)	$\lambda \cdot 10^5$ (cm^3/cm^3)	<i>K_{dep,av}</i> ($1/\text{h}$)	<i>K_{dep,ana}</i> ($1/\text{h}$)	<i>R²</i>
630-800	0.045	33.00	20.00	95.00	13.24	10.03	0.95
630-800	0.067	40.00	20.00	75.00	15.77	10.94	0.93
630-800	0.089	35.50	18.00	42.00	12.84	11.41	0.96
630-800	0.137	53.20	18.00	42.00	19.32	14.30	0.94
630-800	0.160	60.00	18.00	18.00	18.24	14.17	0.95
315-630	0.045	48.90	10.00	185.00	14.28	10.71	0.95
315-630	0.067	66.00	10.00	80.00	17.68	12.79	0.93
315-630	0.089	62.50	10.00	60.00	16.68	13.51	0.97
315-630	0.137	83.00	10.00	100.00	23.80	17.87	0.91
315-630	0.160	90.00	10.00	60.00	24.95	19.44	0.96
MIX	0.045	39.00	16.00	180.00	14.78	10.73	0.94
MIX	0.067	59.20	16.80	75.00	21.08	15.10	0.95
MIX	0.089	54.20	15.00	60.00	18.04	12.97	0.96
MIX	0.137	70.00	17.00	100.00	26.70	19.40	0.98
MIX	0.160	80.00	17.50	60.00	29.26	20.45	0.94

Les variations des trois paramètres (k_0 , L_c , λ) du modèle proposé caractérisent précisément les effets des forces hydrodynamiques et de la distribution granulométrique des milieux poreux sur le dépôt des particules.

- Avec l'augmentation des vitesses de fluide, k_0 a augmenté, et inversement λ a diminué. Cela signifie qu'une vitesse de fluide élevée améliore la mobilité des MES à travers le milieu poreux, puis augmente la vitesse de dépôt; Pendant ce temps, des forces hydrodynamiques encore plus fortes compriment les zones de stagnation de l'écoulement et réduisent le nombre de sites de dépôt.
- Avec la diminution du diamètre moyen de grain (d_g), k_0 a augmenté, tandis que L_c a diminué. L'augmentation de k_0 indique que le sable plus fin dans l'état de "lit propre" a une efficacité de filtration supérieure. Cependant, la diminution de L_c suggère que le sable grossier et le sable avec une grande gamme de distribution granulométrique peuvent conserver des réseaux de pores plus conducteurs, puis les MES peuvent passer par plusieurs sites de dépôt. Ainsi le diamètre moyen de grain et la distribution granulométrique d'un milieu poreux déterminent ensemble le dépôt. La restitution supérieure du sable fin (315-630 μm) par rapport au mélange de sable (315-800 μm) dans la figure 4 confirme cette conclusion.

4. Conclusion

Dans cet article, un modèle de dépôt spatio-temporel est appliqué à la simulation de transport et de dépôt des MES dans des conditions défavorables dans la colonne de sable. Les variations systématiques dans les valeurs des

trois paramètres qui régissent ce modèle permettent d'identifier précisément les effets des forces hydrodynamiques et de la distribution granulométrique sur le dépôt des MES polydispersées. Le modèle contribue à la description quantitative du transport et du dépôt des MES dans un milieu poreux. Des analyses sur les mécanismes de dépôt ont été faites à l'aide de résultats numériques et expérimentaux à l'échelle macroscopique. Les variations des trois paramètres (k_0 , L_c , λ) du modèle proposé ont permis de caractériser les effets des forces hydrodynamiques et de la granulométrie du milieu poreux sur le dépôt des particules. D'une part, l'augmentation de la vitesse du fluide améliore la mobilité des MES à travers le milieu poreux. D'autre part, la diminution du diamètre moyen de grain et l'étalement de la courbe granulométrique permettent de déterminer l'efficacité de la filtration.

En perspective, des observations devraient être menées à l'échelle du pore pour confirmer les conclusions faites. Plusieurs possibilités sont envisageables pour expliquer les observations faites à l'échelle macroscopique, par exemple, les dépôts sont sur les surfaces des grains en raison de la rugosité microscopique ou les dépôts sont plus dues au forçage mécanique au niveau du réseau de pores.

REFERENCE

[AHF 2016] Ahfir N., Hammadi A., Alem A., Wang H., Le Bras G., Ouahbi T., « Porous Media Grain Size Distribution and Hydrodynamic Forces Effects on Transport and Deposition of Suspended Particles », *Journal of Environmental Sciences*, 2016 (in press)

[BRA 2002] Bradford S., Yates S., Bettahar M., Simunek J., « Physical factors affecting the transport and fate of colloids in saturated porous media », *Water Resources Research*, vol. 38, no 12, 2002, p. 1327-1338

[BRA 2003] Bradford S., Simunek J., Bettahar M., Van Genuchten M., Yates S., « Modeling colloid attachment, straining, and exclusion in saturated porous media », *Environmental Science and Technology*, vol. 37, 2003, p.2242-2250

[LI 2004] Li X., Scheibe T., Johnson W., « Apparent decreases in colloid deposition rate coefficient with distance of transport under unfavorable deposition conditions: A general phenomenon », *Environmental Science and Technology*, vol. 38, 2004, p.5616-5625

[LI 2010] Li X., Li Z., Zhang D., « Role of low flow and backward flow zones on colloid transport in pore structures derived from real porous media » *Environmental Science and Technology*, vol. 44, 2010, p.4936-4942

[TOR 2016] Torkzaban S., Bradford S., « Critical role of surface roughness on colloid retention and release in porous media » *Water Resources Research*, vol. 88, 2016, p. 274-284

[TUF 2005] Tufenkji N., Elimelech M., « Breakdown of Colloid Filtration Theory: Role of the Secondary Energy Minimum and Surface Charge Heterogeneities » *Langmuir*, vol. 21, 2005, p. 841-852

[XU 2006] Xu S., Gao B., Saiers J., « Straining of colloidal particles in saturated porous media » *Water Resources Research*, vol. 42, 2006, W12S16