

Modélisation du transport par diffusion/convection dans les milieux poreux avec prise en compte des réactions de dissolution et de précipitation.

Mustapha HELLOU *, Khaled BOURBATACHE†, Franck LOMINE‡
INSA-RENNES LGCGM§

April 11, 2018

Sujet :

Ce projet de thèse vise à parfaire la description et la compréhension de transferts de masse dans les matériaux du génie civil via l'utilisation de modèle numérique performants, adaptés aux aspects multi-physiques et multi-échelles. Plus spécifiquement, qu'il s'agisse d'un sol, de béton, de briques, ces matériaux peuvent être décrits comme des milieux poreux dans lesquels migrent des espèces chimiques inertes ou réactives par un processus de convection et/ou diffusion. Que ce soit la migration de polluants dans les sols dus aux écoulements ruisselants ou bien la migration d'ions chlorure dans les bétons, ces transferts de masse induisent bien souvent des désordres constitutifs au sein du matériau, ou des propagations d'agents pathogènes. Cela peut se traduire à terme par des dégradations sévères d'ouvrages ou par des risques de pollution de l'eau et du sol préjudiciable à la santé humaine.

La compréhension des mécanismes de transport de masse en milieu poreux est primordiale afin de localiser et quantifier la migration de ces espèces. Ces dernières interagissent avec la matrice solide via des réactions chimiques de précipitation et/ou de dissolution entraînant une modification de la microstructure qui à son tour modifie le transport des espèces. Le développement d'une modélisation numérique locale de ces phénomènes est donc nécessaire. Pour les besoins de l'application aux ouvrages ou de d'évaluation de l'impact sur l'environnement, cette modélisation locale devrait permettre de remonter aux paramètres de transport macroscopique tels que la perméabilité et la diffusivité.

A cette échelle locale, l'utilisation de la méthode "Lattice Boltzmann" (LBM) est envisagée. En effet, contrairement aux méthodes traditionnelles CFD (Computational Fluid Dynamics), l'emploi de la LBM ne nécessite pas d'avoir recours à des techniques complexes de suivi d'interfaces.

Le verrou scientifique de ce projet consiste à prendre en compte d'une part une description fine de l'évolution de cette interface à l'échelle du pore et d'autre part à intégrer la distribution microscopique des phases dissoutes où précipitées dans un modèle continu homogénéisé. L'élaboration de ce modèle homogénéisé conduira à la détermination à l'échelle macroscopique d'un champ de perméabilité et de diffusivité en fonction de l'évolution locale de la microstructure. Actuellement, les modèles macroscopiques de transport réactif d'espèces chimiques prennent en compte la modification du squelette solide par une modification volumique qui reste

*mustapha-hellou@insa-rennes.fr

†mohamed-khaled.bourbatache@insa-rennes.fr

‡franck.lomine@insa-rennes.fr

§INSA-Rennes: www.insa-rennes.fr, LGCGM: www.insa-rennes.fr/lgcm

globale. Il est évident que la localisation de la phase dissoute ou précipitée est un aspect important et influent sur les paramètres de transport.

Mots clés: Transport de masse; Réactions chimiques; Milieux poreux; Modification de la porosité; Perméabilité; Diffusivité; Modélisation multi-échelle. permeability and diffusivity tensor.

Compétences scientifiques : Transport dans les milieux poreux, mécanique des fluides, Diffusion-convection-migration, Homogénéisation, Modélisation multi-échelle et multi-physique, méthode de lattice Boltzmann.

Publications :

- [1] Modelling Particle Capture Efficiency with Lattice Boltzmann, J. Fan, F. Lominé, M. Hellou, Communications in Computational Physics, Global Science Press, 2018, 23 (4), pp.932-950 in Computational Physics, 2017
- [2] Multiscale periodic homogenization of ionic transfer in cementitious materials, K. Bourbatache, O. Millet, A. Aït Mokhtar, Heat Mass Transfer, 2(8), pp 1489-1499, 2016