

LE PROCESSUS D'AGREGATION Et BILAN DE POPULATION

Les expériences in-situ ont révélé que le colmatage était lié à l'agglomération de particules argileuses. Il apparaît donc nécessaire de détailler ces phénomènes afin de mettre en œuvre des expériences pour tester l'impact de ces processus sur le colmatage des goutteurs.

La turbidité d'une eau est principalement causée par des particules très petites, (Tableau III-1) dites particules colloïdales maintenues en suspension. Ces particules, qui peuvent rester en suspension dans l'eau durant de très longues périodes sans sédimenter ont une taille de l'ordre du micron. Lorsque ces particules colloïdales ont des interactions répulsives entre voisines, celles-ci n'ont pas tendance à s'accrocher les unes aux autres et la dispersion colloïdale reste stable. La stabilité de ces particules en suspension dépend de leur nature et des propriétés physico-chimiques de l'eau. Si au contraire les caractéristiques du système induisent des interactions entre particules de nature attractive, les particules peuvent se coller alors les unes aux autres et former des agrégats qui sont ensuite éliminés de la solution par sédimentation gravitaire lorsque leur taille est suffisante. Dans le cas de notre étude, ces particules peuvent colmater les dispositifs d'irrigation.

Diamètre des particules (μm)	Etat	Exemple
<0.001	<i>Etat dissous</i>	<i>Molécules organiques</i>
$0.001 - 1$	<i>Etat colloïdal</i>	<i>Argile, Bactérie</i>
>1	<i>Solides décantables</i>	<i>Limon, Sables, Pollen</i>

Tableau III-1 : Ordre des grandeurs des particules susceptibles d'être présentes dans les eaux d'irrigation

Dans le cadre de notre étude pour approcher le comportement de ces particules, il est nécessaire de connaître :

- Les conditions physico-chimiques qui conduisent à la déstabilisation des particules, et qui peuvent conduire à l'agglomération ;
- La façon dont elles s'agglomèrent, et l'influence de la structure de l'agrégat formé sur ses propriétés de sédimentation ;
- La cinétique de l'agrégation en lien avec les caractéristiques de l'écoulement du fluide transporteur.

III.1. Conditions de stabilité colloïdale

La formation des agrégats dépend de la possibilité de collage entre les particules initialement dispersées dans la phase liquide. Dans un système liquide-solide, deux grandeurs principales entrent en jeu et peuvent influer sur le collage lors du rapprochement des particules :

- les forces de van der Waals ;
- les forces électrostatiques.

III.1.1. Les forces de Van der Waals

Les forces attractives intermoléculaires connues sous le nom de forces *de van der Waals*, englobent un ensemble de forces qui sont :

- les forces d'induction ou forces de Debye-Van der Waals ;
- les forces d'orientation ou forces de Keesom-Van der Waals ;
- les forces de dispersion ou forces de London-Van der Waals.

Les deux premières forces (orientation et induction) sont d'origine électrostatique ; elles interviennent si l'une des molécules est polaire. Les forces de dispersion agissent indépendamment de la polarité. En termes d'énergie, l'expression des interactions entre deux corps de rayon r_1 et r_2 , distants d'une longueur d , entre leurs surfaces est (Hamaker 1937) :

$$V_{vdw}(d) = -\frac{A}{12} \left[\frac{y}{x^2 + xy + x} + \frac{y}{x^2 + xy + x + y} + 2 \ln \left(\frac{x^2 + xy + x}{x^2 + xy + x + y} \right) \right] \quad \text{Eq III-1}$$

Où A est la constante de Hamaker, x = d/2r₁, et y = r₂/r₁

III.1.2. La polarité

La polarité est la caractéristique d'une molécule dont les charges négatives et positives sont concentrées les unes à l'opposé des autres, aux deux extrémités de la molécule. L'électronégativité est à l'origine de la polarité de certaines molécules. Une molécule polaire est caractérisée par son moment dipolaire : plus celui-ci est élevé, plus la molécule est polaire (il est nul pour les molécules apolaires). La polarité (ou non) des groupements de surface d'une particule influe sur son affinité avec le milieu dispersant. Les surfaces polaires ont une grande affinité pour les solvants polaires, et inversement. Dans le cas de l'eau, la polarité de la molécule H₂O implique que les surfaces hydrophiles soient polarisées (exemple : oxydes métallique). Au contraire, une surface non polarisée est typiquement hydrophobe (exemple : charbon).

III.1.3. Répulsion des double-couche électriques

Une particule chargée immergée dans un électrolyte, induit par électro-neutralisation l'organisation d'un nuage ionique de contre-ions qui l'enveloppe. Ce nuage se structure en une double couche (Figure III-1) :

- La couche de STERN est constituée des contre-ions adsorbés sur la surface de la particule.
- La couche diffuse est composée de contre-ions non adsorbés. Leur concentration y décroît exponentiellement et de manière concentrique en s'éloignant de la particule (Figure III-2).

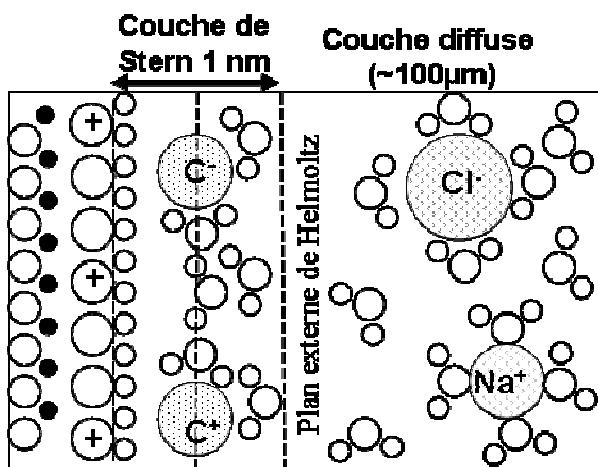


Figure III-1: Distribution des contre-ions à la surface d'une particule chargée en suspension selon le modèle de la double-couche électrique.

La limite entre les deux couches est appelée plan externe de Helmotz. La distribution des contre-ions dans la double couche diffuse est modélisée par l'équation de Poisson-Boltzmann

(Eq III-2) (Barrow, 1973), où le solvant est considéré comme un continuum idéal de constante diélectrique (ϵ)

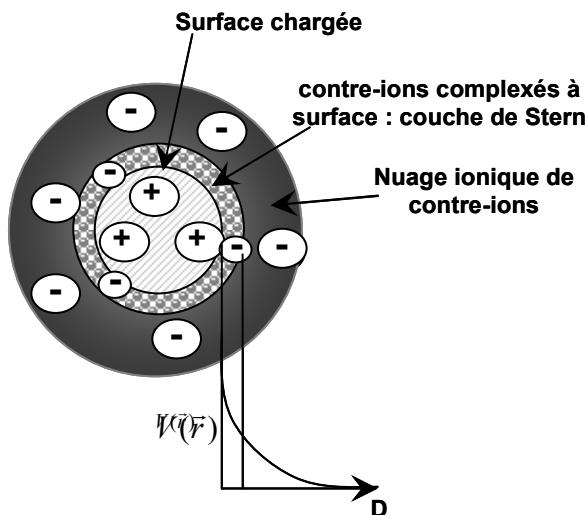


Figure III-2 : Modèle de la double-couche diffuse autour d'une particule chargée en suspension

L'équation de Poisson-Boltzmann est une combinaison de deux équations : celle de Poisson et celle de Boltzmann

$$\Delta V(\vec{r}) + \sum_{i=1}^n \frac{q_i c_i^0}{\epsilon_d} \exp\left(-\frac{q_i V(\vec{r})}{k_B T}\right) = 0 \quad \text{Eq III-2}$$

$V(\vec{r})$: le potentiel électrique

$\rho_e(\vec{r})$: densité de charge

ϵ_d et la permittivité diélectrique La permittivité diélectrique, est une propriété physique qui décrit la réponse d'un milieu donné à un champ électrique appliqué

$\epsilon_d = \epsilon_0 \epsilon_r$: la permittivité diélectrique du solvant (ϵ_0 étant la permittivité diélectrique du vide, et ϵ_r la permittivité relative du solvant : dans l'eau à température ambiante $\epsilon_r \approx 80$).

q_i : la charge de l'ion

$c_i(\vec{r})$: la concentration en ions de charge q_i

c_i^0 : la concentration en ions de charge q_i loin de la surface chargée, là où le champ électrique est nul

T : la température exprimée en Kelvin

k_B : la constante de Boltzmann qui relie température et énergie thermique.

III.2. Théorie DLVO et concentration critique de coagulation

Pour qu'il y ait une agrégation entre particules il faut que deux conditions soient réunies :

- que les particules entrent en collision ;
- suivant les conditions (hydrodynamiques, physico-chimiques) du milieu, il faut qu'elles puissent rester collées.

La première condition nécessite que les particules soient mises en mouvement les unes par rapport aux autres. Pour que la deuxième condition soit remplie, il faut qu'à l'occasion d'un choc, il existe une certaine attraction entre les particules.

Lorsque deux particules se rapprochent, il existe un potentiel d'interaction total entre les deux surfaces. L'allure de ce potentiel d'interaction dépend de la nature des particules et des conditions physico-chimiques du solvant. Toutefois, on peut toujours distinguer deux cas : interactions attractives ou interaction répulsives.

III.2.1. La théorie DLVO

Le modèle DLVO (d'après les noms de ses auteurs Derjaguin, Landau, Verwey et Overbeek) suppose que l'énergie potentielle d'interaction entre deux surfaces chargées est donnée par la somme de deux contributions : une interaction attractive due aux forces de van der Waals–London et une interaction répulsive due aux charges électrostatiques de même signe (Figure III-3). La dispersion colloïdale sera stable si l'interaction répulsive domine l'interaction attractive. Cette interaction électrostatique diminue par écrantage du champ électrique si la concentration en électrolyte dans la suspension augmente. Lorsque la force ionique (i.e. pression osmotique) du solvant est faible, la couche diffuse des particules est très épaisse, et les répulsions d'origine électrostatique sont importantes. Cette répulsion est forte, dominant le système qui lui confère une stabilité des particules dispersées. Dans le cas contraire, lorsque la force ionique de l'électrolyte est élevée, la couche diffuse se comprime, ce qui réduit la portée des forces de répulsion électrostatique. Dans ce cas les forces de Van der Waals attractives aux courtes distances deviennent prédominantes, et favorisent le collage des particules entrant en collision. Des agrégats se forment, de taille croissante, et sont soumis à la sédimentation gravitaire. La dispersion est déstabilisée. En fonction de la force ionique et de son influence sur la contribution électrostatique répulsive, on distingue les cas suivants (Figure III-3) :

- a** : les surfaces se repoussent, la dispersion est stable ;
- b à d** : les particules se placent au minimum d'énergie secondaire et commencent à s'agréger ;
- e** : les particules s'agrègent rapidement.

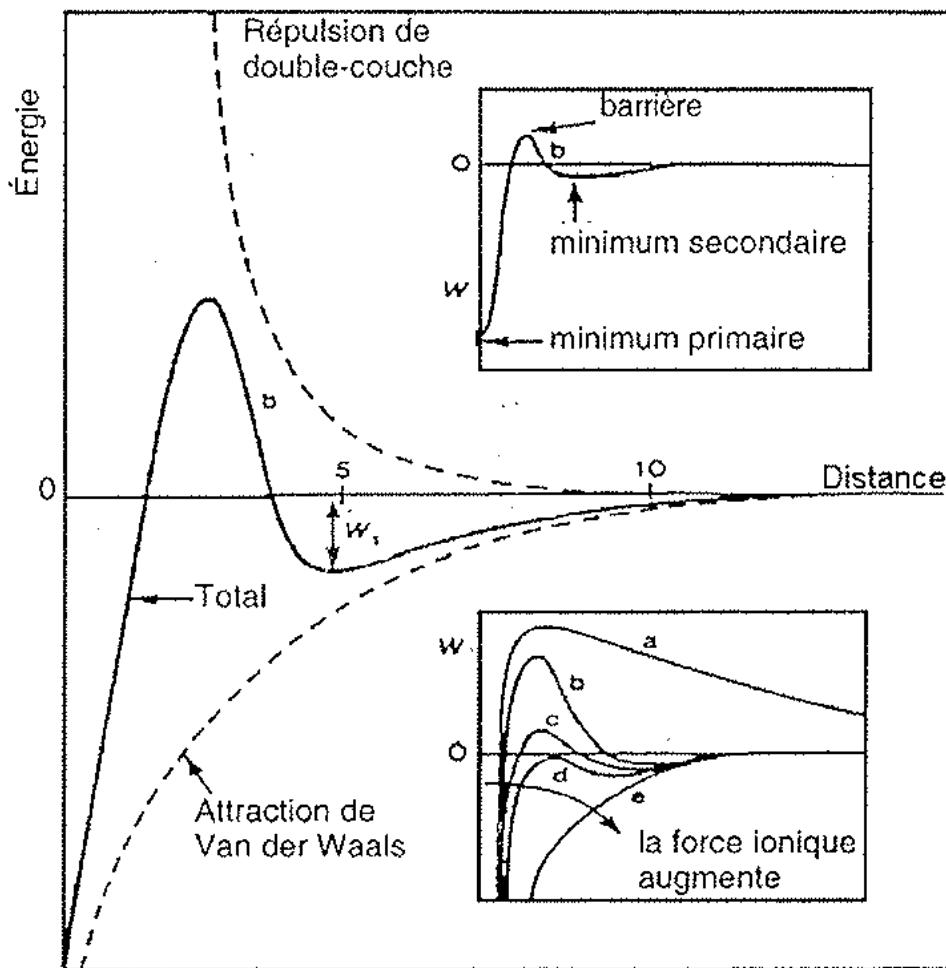


Figure III-3 : Représentation des énergies pour le calcul DLVO

III.2.2. La concentration critique de coagulation (CCC)

La concentration critique de coagulation (CCC) est la concentration de sel qu'il est nécessaire d'ajouter à une suspension colloïdale pour qu'elle soit déstabilisée (Van Olphen, 1977 ; Adachi, 1995 ; Gardner, 1999). Cette déstabilisation est due à l'annulation des forces de répulsions entre les particules colloïdales. La CCC (ρ_∞) est d'autant plus basse que la valence du sel (z) est importante, comme l'exprime la règle de Shulze- Hardy (Eq III-3) (Jyh-Ping Hsu et Yung-Chih Kuo, 1995) :

$$\rho_\infty(\text{ccc}) \propto \frac{1}{z^6} \quad \text{Eq III-3}$$

III.3. Probabilité de chocs efficaces

On définit le terme W , facteur de stabilité, comme le rapport du nombre de chocs total sur le nombre de chocs efficaces entraînant le collage :

$$W = \frac{\text{Chocs totaux}}{\text{Chocs efficaces}} \quad \text{Eq III-4}$$

L'inverse de ce facteur de stabilité est l'efficacité de collision α entre les particules colloïdales

$$\alpha = \frac{1}{W} \quad \text{Eq III-5}$$

Lorsque α est non nul, une certaine proportion de collisions conduit à un collage des particules.

Le calcul de W dépend de la comparaison du profil d'énergie d'interaction avec l'énergie cinétique des particules. Par exemple, des particules de plusieurs μm peuvent être extrêmement stables au repos et s'agréger rapidement si on les agite fortement. Lorsque le mécanisme de collision dominant est lié à l'agitation, il faut considérer le mouvement relatif des particules les unes par rapport aux autres. Les incertitudes liées à la fois à l'estimation de l'importance de la barrière d'énergie et à la détermination des énergies cinétiques des particules en solution font qu'en général, le paramètre α est un paramètre d'ajustement dans les modèles cinétiques.

III.4. Les fréquences de collisions : cas pour le modèle rectilinéaire.

On distingue trois mécanismes de transport prépondérant susceptibles d'entraîner le mouvement relatif des particules colloïdales les unes par rapport aux autres, selon le type d'agitation du milieu.

Nous développons, ici, les expressions des fréquences de collisions (β) dans le cas rectilinéaire où l'on suppose que les particules ne modifient pas mutuellement leur trajectoire lorsqu'elles se rapprochent jusqu'au choc. Par conséquent, la trajectoire est supposée rectiligne. Il existe aussi le cas curvilinéaire où les interactions hydrodynamiques des particules influent sur leur trajectoire. Dans ce cas, la trajectoire est incurvée.

III.4.1. Le mouvement Brownien

Dans tous les cas, les particules colloïdales en suspension sont soumises au mouvement Brownien. Il est lié à l'agitation thermique aléatoire des molécules d'eau du milieu dispersant (Figure III-4). Ce phénomène est constant et indépendant de l'agitation mécanique du solvant. Il varie en fonction de la température et viscosité de celui-ci.

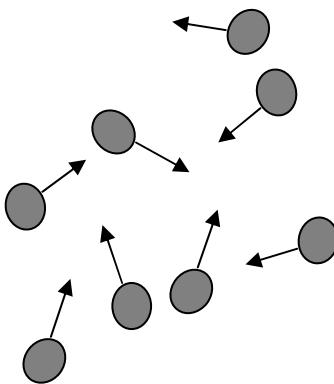


Figure III-4 : Collision par effet Brownien

III.4.2. Agitation mécanique du solvant

Lorsque le solvant est agité mécaniquement, il entraîne de par sa viscosité, les particules qu'il contient. Ainsi, les particules sont animées d'un mouvement qui peut entraîner leurs collisions (Figure III-5). On introduit G (s^{-1}), le gradient de dissipation du milieu, caractéristique du cisaillement apporté.

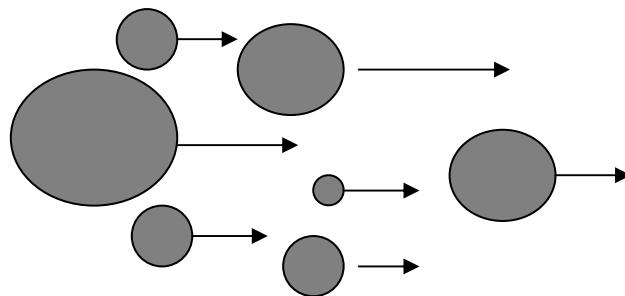


Figure III-5 : Collision par effet de l'agitation mécanique (G)

III.4.3. Séparation différentielle

D'après la loi de Stokes, la vitesse de décantation des agrégats, varie en fonction de leur taille et densité. Ainsi, les agrégats formés ne vont pas tous sédimerter à la même vitesse. Les agrégats les plus lourds vont entraîner, au cours de leur chute, les particules ou agrégats qui décantent moins vite (Figure III-6).

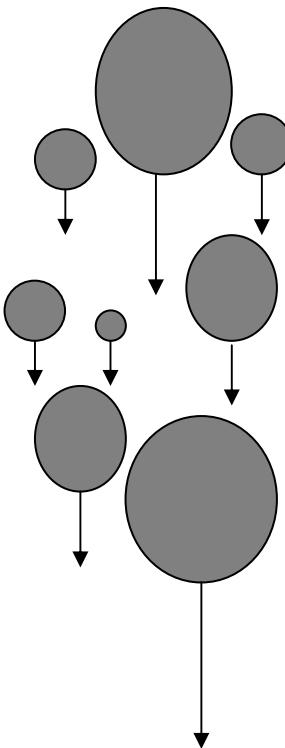


Figure III-6 : collision par effet de la sédimentation

Les fréquences de collision dues au mouvement Brownien (β_{br}), à l'agitation mécanique (β_{sh}) et à la sédimentation différentielle (β_{se}) peuvent être estimées par modélisation :

$$\beta_{br}(i, j) = \frac{2kT}{3\mu} \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \right) (r_i + r_j) \quad \text{Eq III-6}$$

$$\beta_{sh}(i, j) = \frac{4}{3} (r_i + r_j)^3 G \quad \text{Eq III-7}$$

$$\beta_{se}(i, j) = \pi (r_i + r_j)^2 |u_i - u_j| \quad \text{Eq III-8}$$

Avec :

k : constante de Boltzmann

r_i, r_j : rayon des agrégats i et j

u_i, u_j : vitesse de sédimentation des agrégats i et j

T : température

μ : viscosité cinétique du fluide

G : gradient de vitesse

On considère que la fréquence de choc des différentes contributions est additive :

$$\beta_{tot}(i, j) = \beta_{br}(i, j) + \beta_{sh}(i, j) + \beta_{se}(i, j) \quad \text{Eq III-9}$$

Selon les gammes de tailles et les différents paramètres concernant les particules, ce ne sont pas toujours les mêmes mécanismes de collision qui dominent. Dans le cas des particules inférieures à $1\mu\text{m}$, les collisions dues au mouvement Brownien dominent souvent. Pour les tailles supérieures, les collisions dues à l'agitation mécanique lorsqu'elles existent, sont souvent prépondérantes.

Pour le cas du modèle curvilinéaire, on utilise les fréquences de chocs rectilinéaires corrigées d'un terme (α) prenant en compte les interactions hydrodynamiques

$$\beta_{tot}^c(i, j) = \beta_{br}^c(i, j) + \beta_{sh}^c(i, j) + \beta_{se}^c(i, j) = \alpha_{br}^c \beta_{br}(i, j) + \alpha_{sh}^c \beta_{sh}(i, j) + \alpha_{se}^c \beta_{se}(i, j)$$

Eq III-10

III.5. Bilan de population

Après l'introduction des réactions à l'interface qui contrôlent la stabilité colloïdale des particules en suspension, dans la suite du chapitre III, nous nous intéresserons plus particulièrement à la cinétique de croissance des agrégats en fonction des conditions physico-chimiques et hydrodynamiques du milieu.

L'expression de Smoluchowski (1917), qui relie le taux de collision entre deux particules au mouvement du fluide, a été établie pour un régime laminaire et met en évidence le cisaillement laminaire.

III.5.1. Agrégation irréversible

Une agrégation est dite irréversible lorsque la liaison qui entraîne le collage de deux particules s'entrechoquant est tellement forte que l'agrégat formé ne peut se désagréger. La

Figure III-7 montre la formation d'agrégats de masse k sous l'effet des chocs efficaces entre deux agrégats ou particules i et j plus petits que k . Lorsque l'agrégation est irréversible, l'unique voie de disparition d'agrégats de masse k est leur collage avec d'autre objets de masse quelconque pour former des agrégats plus gros. La variation de la concentration d'agrégats de masse k est de la forme :

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \alpha(i, j) \sum_{i+j=k} \beta(i, j) n_i n_j - \alpha(i, k) n_k \sum_i \beta(i, k) n_i \quad \text{Eq III-11}$$

$\beta(i, j)$ ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) est la fréquence de chocs entre particules de masse i et de masse j , $\alpha(i, j)$ correspond à la probabilité de chocs efficaces entre les particules de taille i et de taille j .

Ainsi $\alpha(i, j) \beta(i, j) n_i n_j$ donne le nombre de collisions efficaces par unité de volume et par unité de temps. Le premier terme de l'équation (Eq III-11) correspond à la fabrication d'agrégats de masse k . Le second terme traduit la fabrication d'agrégats plus gros et donc contribue à ce que n_k diminue. Cette équation qui reflète un grossissement continu des agrégats n'est en fait réaliste que dans un domaine fini de taille compatible avec les conditions du milieu. Par exemple l'effet du cisaillement, impose une taille maximale liée à la cohésion des agrégats. C'est pourquoi on peut introduire dans l'équation III-10 un terme de fractionnement des agrégats équivalent une réversibilité de leur croissance.

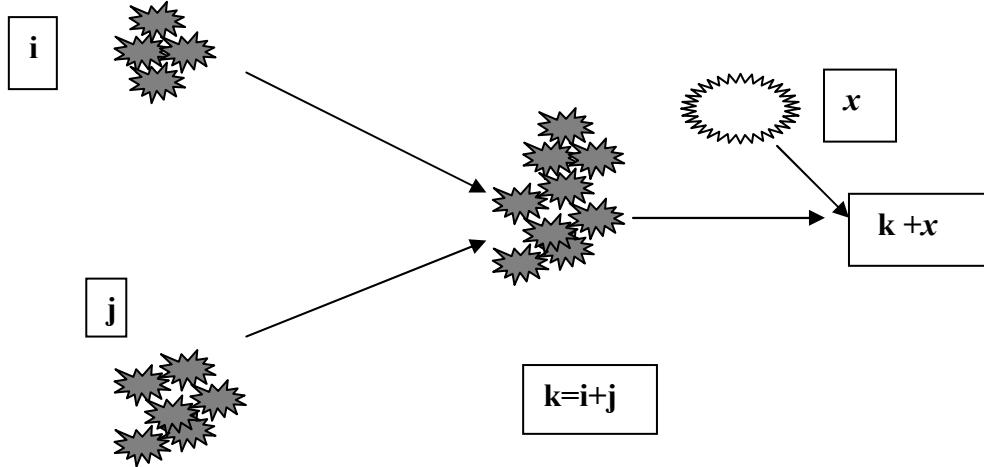


Figure III-7 : Processus d'évolution des agrégats

III.5.2. Agrégation réversible

Dans ce cas, on considère que la réaction d'agrégation a deux sens : le premier est la formation des agrégats, et l'autre, leur désagrégement.

III.5.2.1 Fréquence de rupture

Lorsqu'on prend en compte la rupture des liaisons entre les agrégats, le bilan de masse, ainsi que l'équation Eq III-11 changent. La Figure III-8 nous montre comment un agrégat de masse k peut aboutir de l'agrégation de deux particules plus petites de masse i et j ($i+j=k$) ou bien de la rupture d'un agrégat plus gros de masse $k+x$. Ces processus sont traduit par l'équation III-12.

$$\frac{dn_k}{dt} = \left(\sum_{i+j=k} \frac{1}{2} \alpha(i, j) \beta(i, j) n_i n_j - F(i, j) n_{i+j} \right) - \left(\sum_i \alpha(i, k) \beta(i, k) n_i n_k - F(i, k) n_{i+k} \right) \text{Eq III-12}$$

Comme dans le cas précédent, α et β sont respectivement les probabilités de chocs efficaces et les fréquences de chocs entre des particules. Les termes $F(i,j)$ traduisent la fréquence de rupture d'agrégats de taille k en agrégats de taille i et j et $F(i,k)$ la fréquence de rupture d'agrégats de taille $k+i$ en agrégats de taille k . Cette approche modèle est plus réaliste dans le sens où, selon les valeurs relatives des termes β et F , le processus d'agrégation conduit à une taille finale d'agrégats en équilibre avec les contributions de croissance et de rupture en présence. Les conditions pour lesquelles cette stabilité est atteinte ont été étudiées par Elminyawi et al.(1991); Vigil et al.(1989); parmi d'autre. Ces études ont permis d'établir les conditions de stabilité pour différentes formes simples de fréquences de collision et de rupture.

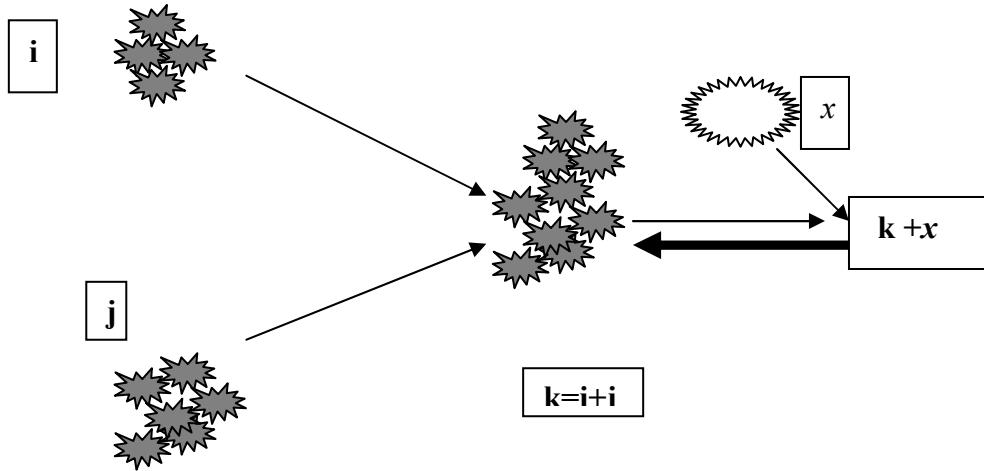


Figure III-8 : Evolution de la concentration de particules de masse k

III.5.2.2 Taille maximale de croissance

La détermination de la taille maximale que les agrégats peuvent atteindre n'est pas facile. Il est possible d'utiliser des expressions du type de celle proposée par Torre et al.(1991) qui propose pour une agitation laminaire une expression qui décrit les tailles maximales des couples de particules susceptibles de conduire à une liaison. Il est possible, également, d'estimer la taille maximale à partir de la micro échelle de Kolmogorov. Plus généralement, cette taille maximale est mesurée expérimentalement après équilibre du processus.

III.5.2.3 Prise en compte de la sédimentation

Il est possible que les agrégats formés finissent par atteindre des tailles pour lesquelles leur vitesse de décantation n'est plus négligeable devant leur vitesse d'agrégation. Lorsque cela se produit, l'évolution de la concentration des particules est aussi contrôlée par leur taux de sédimentation. La vitesse V_s de sédimentation contrôle, au même titre que les fréquences de chocs, l'évolution des populations de tailles de particules. Si l'on ne considère pas les fréquences de ruptures mais une taille maximale, on peut prendre en compte la sédimentation de la façon suivante :

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \alpha(i, j) \sum_{\substack{k < n_{max} \\ i+j=k}} \beta(i, j) n_i n_j - \alpha(i, k) n_k \sum_i^{i+k < n_{max}} \beta(i, k) n_i - \frac{V_k}{z} n_k \quad \text{Eq III-13}$$

Où V_k est la vitesse de décantation d'une particule de taille k . Lorsque l'on écrit l'équation de cette façon, on suit l'évolution de la concentration dans une couche de hauteur z . Dans cette couche, les concentrations sont considérées homogénéisées.

III.5.3. Initialisation d'un modèle cinétique

III.5.3.1 Principe de discréétisation

Dans l'initialisation du modèle, plusieurs tâches distinctes sont effectuées. La première consiste à découper les masses de particules en suspension (ou les volumes solides) en un nombre fini de classes. Plusieurs choix sont possibles pour effectuer ce découpage.

• Discréétisation linéaire

Dans l'équation de Smoluchowsky la plus simple qui correspond à une agrégation irréversible (équation III-10) on a :

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \alpha(i, j) \sum_{i+j=k} \beta(i, j) n_i n_j - \alpha(i, k) n_k \sum_i \beta(i, k) n_i$$

Soit :

$$\frac{dn_1}{dt} = -\alpha(1,1)\beta(1,1)n_1^2 - \alpha(1,2)\beta(1,2)n_1n_2 - \dots - \alpha(1,\infty)\beta(1,\infty)n_1n_\infty$$

$$\frac{dn_2}{dt} = \alpha(1,1)\beta(1,1)n_1^2 - \alpha(2,1)\beta(2,1)n_2n_1 - \dots - \alpha(2,\infty)\beta(2,\infty)n_2n_\infty$$

... suivant k.

Imaginons que l'on cherche à simuler l'agrégation de particules de $5 \mu\text{m}$ (d_0) jusqu'à une taille maximale d_{max} de $50 \mu\text{m}$ avec une dimension fractale de deux. Dans ce cas, le nombre de particules élémentaires par agrégat (n_{max}) suit la loi de puissance

$$n_{max} = \left(\frac{d_{max}}{d_0} \right)^{d_f} = \left(\frac{50}{5} \right)^2 = 100.$$

Dans ce cas, il convient de découper l'espace linéairement en 100 classes de taille intermédiaires entre d_0 et d_{max} . Ce type de discréétisation est simple à réaliser et facilite la résolution des équations différentielles. En effet, tout choc entre deux particules de taille i et j donne une particule de taille $k=i+j$ qui rentre dans une nouvelle classe de particule, comme l'illustre la figure (1)

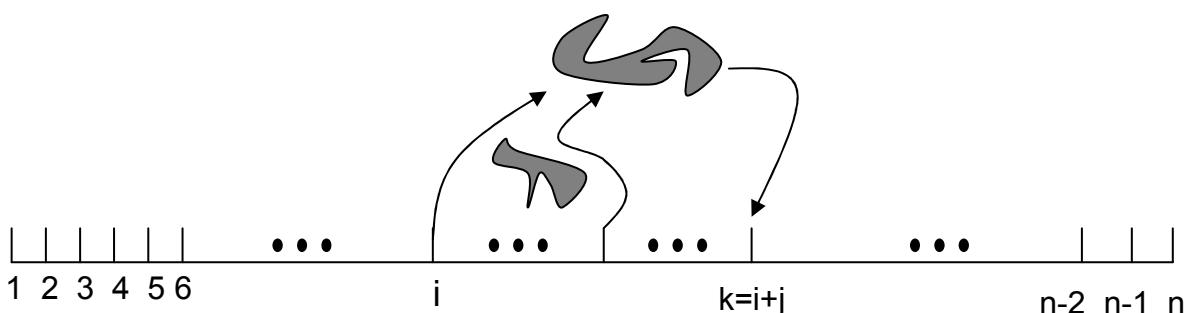


Figure III-9: Discréétisation linéaire en classe de taille

Cette méthode de discréétisation pose deux problèmes importants :

- le nombre d'équations différentielles à résoudre est très grand, et fera augmenter considérablement le temps de calcul

- ce type de discréétisation entraîne un fort comportement multi-échelle des équations différentielles. Autrement dit, les amplitudes d'évolution des différentes classes de tailles, pour un pas de temps donné, sont très variables. En effet, les classes de particules qui correspondent aux agrégats les plus petits vont fortement diminuer mais cela ne conduit qu'à la formation de quelques grandes particules. Il résulte d'un tel comportement que les algorithmes simples de résolution des équations différentielles sont très lents.

Finalement, malgré leur simplicité, les discréétisations linéaires sont quasiment inutilisables, car trop longues à calculer, et trop loin de la réalité.

• Discréétisation à progression géométrique

Les deux problèmes posés par la discréétisation linéaire sont résolus si l'on utilise une discréétisation à progression géométrique des classes de taille.

Le fichier d'entrée comporte les paramètres :

- dmin : le plus petit diamètre à considérer,
- dmax : le plus grand diamètre possible pour un agrégat
- df : la dimension fractale des agrégats,
- NBCLASSE : nombre de classes de taille à définir.

On va découper l'espace des tailles en NBCLASSE classes de taille ou de volume solide $V[i]$ avec $i \in [1, \text{NBCLASSE}]$. On écrit le volume de chaque classe de volume ($V[i]$) de la façon suivante :

$$V[i] = 10^{lv[i]} \quad \text{Eq III-14}$$

Les bornes des classes de volume solide sont connues à partir des paramètres du fichier d'entrée. On a :

$$V[1] = \frac{\pi}{6} ap^3 \left(\frac{d \min}{ap} \right)^{df} \quad \text{et} \quad \text{Eq III-15}$$

$$V[NBCLASSE] = \frac{\pi}{6} ap^3 \left(\frac{d \max}{ap} \right)^{df}$$

D'après l'équation (1) il est possible de calculer les valeurs de $lv[i]$ pour $i = 1$ et $i = \text{NBCLASSE}$. On a

$$lv[1] = \frac{\log(V[1])}{\log(10)} \quad \text{et} \quad \text{Eq III-16}$$

$$lv[NBCLASSE] = \frac{\log(V[NBCLASSE])}{\log(10)}$$

La progression géométrique des volumes solides se fait avec le pas $lvstep$ défini par :

$$lvstep = \frac{lv[NBCLASSE] - lv[1]}{NBCLASSE - 1} \quad \text{Eq III-17}$$

Et les classes de volume solide sont donc calculées selon la progression géométrique suivante :

$$V[i] = 10^{lv[1] + i * lvstep} \quad \text{où } i \in [0, NBCLASSE - 1] \quad \text{Eq III-18}$$

En procédant ainsi, il est possible de contrôler le nombre d'équations différentielles à résoudre quels que soient les paramètres $dmin$, $dmax$, ap et df fournis dans le fichier d'entrée. Le problème des temps de calcul (trop longs) posé par la discréétisation linéaire est ainsi résolu. Toutefois, le nombre réduit d'équations complique la gestion des chocs. En effet, si dans le cas d'une discréétisation linéaire tout choc conduit à la formation d'un amas, pour lequel il existe une classe de particule adaptée, ce n'est pas le cas d'une discréétisation géométrique. La figure 2 montre un choc pour lequel on a $m[k] \leq m[i] + m[j] \leq m[k + 1]$.

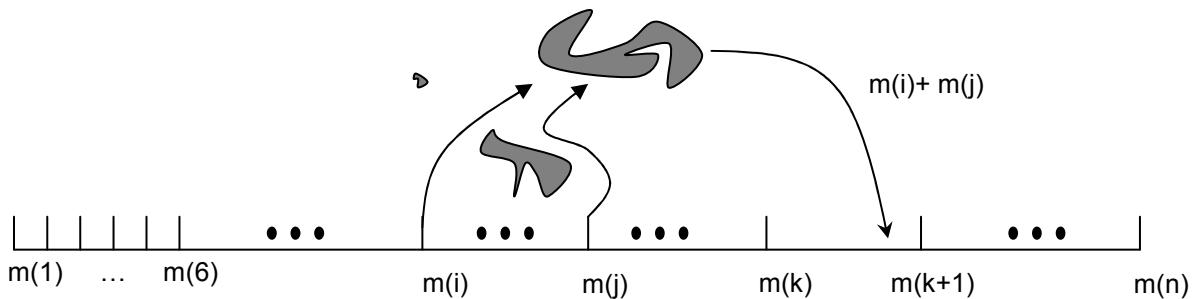


Figure III-10: Discréétisation géométrique en classe de taille

Il n'est pas possible d'attribuer ce choc à l'une des deux classes de volume adjacentes. En effet, en attribuant le choc à la classe de taille $m[i]$, on ralentit artificiellement la cinétique de croissance. Inversement si on attribue le choc à la classe de taille $m[k+1]$ la cinétique est accélérée. Pour résoudre ce problème, les agrégats issus du choc sont répartis entre les classes de taille adjacentes selon des quantités pondérées par le barycentre des tailles. On calcule le facteur $fract$ défini comme :

$$fract(i, j) = 1 - \frac{(V[i] + V[j]) - V[k]}{V[k+1] - V[k]} \quad \text{où } V = \frac{m}{\rho} \quad \text{Eq III-19}$$

Ainsi selon la position du choc relativement aux classes de taille adjacentes, la taille (ou le volume solide) sera réparti différemment

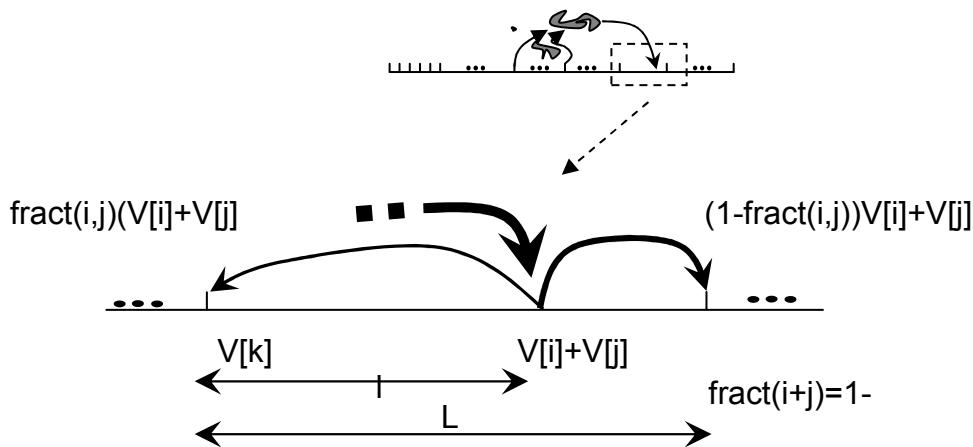


Figure III-11: Gestion des chocs dans le cas d'une discréétisation géométrique

Le deuxième problème lié à la discréétisation linéaire est la trop grande différence des amplitudes d'évolution des classes de particules correspondant aux petits volumes par rapport aux classes de volume plus grand. Avec la discréétisation géométrique cette différence d'amplitude est réduite, car pour les petits volumes, il y a un plus grand nombre de classes de particules dans une même fourchette de volume. Inversement, pour les grands volumes, il y a un grand nombre de classes de tailles linéaire pour peu de classes de volume géométrique.

III.6. Modélisation de l'agrégation et estimation de la taille des particules argileuses

Pour d'écrire l'évolution des populations des argiles testées, (chapitre IV) on a utilisé le modèle cinétique développé par A. Thill (1999) incluant :

- Discréétisation géométrique des classes de taille,
- Prise en compte de la géométrie fractale dans le calcul des fréquences de choc
- Calcul des fréquences de choc selon plusieurs modes d'approche (rectilinéaire, curvilinéaire ou intermédiaire)
- Prise en compte de la fragmentation des agrégats.

Pour le calcul des fréquences de chocs, Thill utilise le modèle de fréquence de choc intermédiaire (combinaison des deux modes de déplacements) proposé par Veerapaneni et Wiesner (1996). Ce modèle intermédiaire fait la somme entre les deux modèles curvilinéaire et rectilinéaire, moyennant le facteur η qui les contrôlera. On considère qu'une valeur de $\eta = 1$ correspond au mode d'approche rectilinéaire et qu'une valeur $\eta = 0$ traduit un mode de déplacement curvilinéaire. Ainsi, on obtient les fréquences de chocs pour l'approche intermédiaire $\beta_{\text{intermédiaire}}(i,j)$, en utilisant :

$$\beta_{\text{intermédiaire}}(i,j) = \eta \beta_{\text{rectilinéaire}}(i,j) + (1-\eta) \beta_{\text{curvilinéaire}}(i,j)$$

Le modèle intermédiaire est seulement valable pour les hypothèses suivantes :

- Les particules primaires sont homogènes. Il n'y a pas de mélange de différents types de particules aux propriétés variables mais un seul type de particule « moyenne » de densité constante.
- Les fréquences de chocs des différents mécanismes (Brownien, agitation et décantation différentielle) sont considérées additives.
- On ne considère que les collisions binaires (impliquant 2 particules).

- La probabilité de collage est indépendante de la taille des particules ; ainsi $\alpha(i, j) = \alpha \forall i, j$
- A (constante de Hamaker) est fixé comme paramètre d'entrée.
- Le modèle simule une seul entité de fluide homogène.

Ce modèle va nous servir à estimer la taille des particules pour les cisaillements atteints dans le labyrinthe. Afin d'initialiser ce modèle, nous avons réalisés des expériences de mesure d'agrégation dans un réacteur de type Taylor-Couette qui permet de contrôler les valeurs du taux de cisaillement. Ainsi, nous caractériserons la cinétique d'agglomération pour différents cisaillement et différentes concentrations en sel, de sorte à extrapoler ces résultats pour estimer la taille moyenne des argiles dans les systèmes d'irrigation testés.