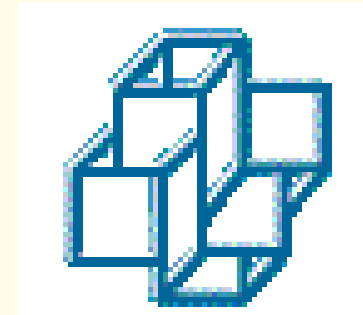


LEMTA



LNCC

**Comportement micromécanique des argiles gonflantes
Partie 1 : Modélisation**

Christian MOYNE, Thibault LEMAIRE, Didier STEMMELEN

Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée

CNRS – INPL – UHP (UMR 7563)

2, avenue de la Forêt de Haye, 54504 Vandœuvre lès Nancy, France

Márcio ARAB MURAD

Laboratório Nacional de Computação Científica

Avenida Getúlio Vargas, 333

25651-070 Petrópolis, RJ, Brésil

Plan

1. Applications : quels problèmes voulons-nous résoudre ?

2. Introduction aux argiles

2.1. Structure des argiles gonflantes

2.2. Organisation générale : milieu à n échelles ?

2.3. Forces électrochimiques

3. Modélisation mathématique

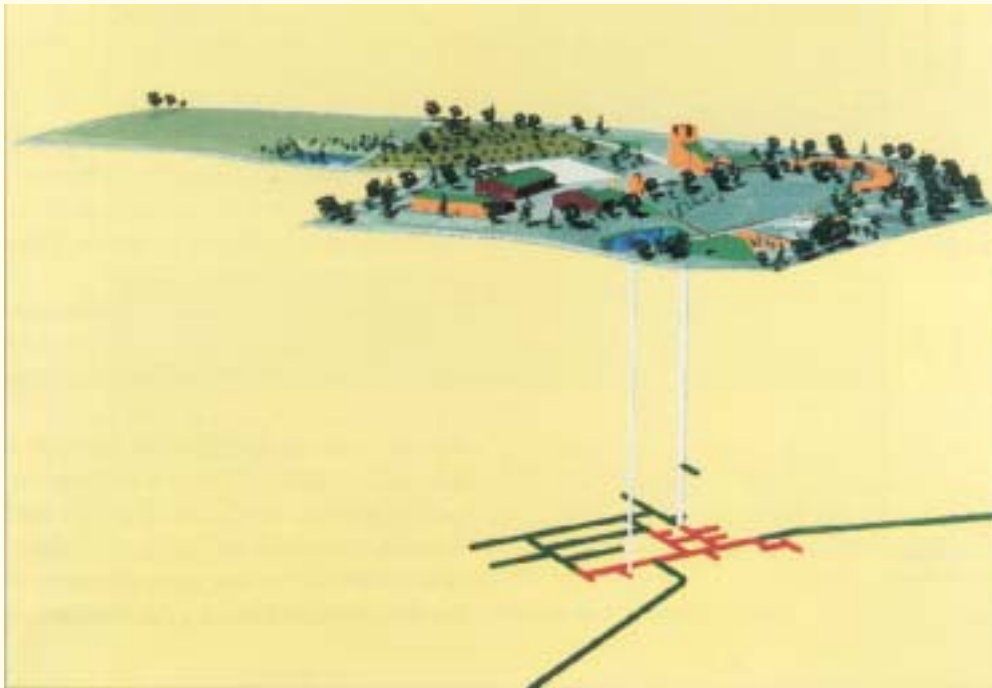
3.1. Equations à la microéchelle

3.2. Homogénéisation

4. Conclusion

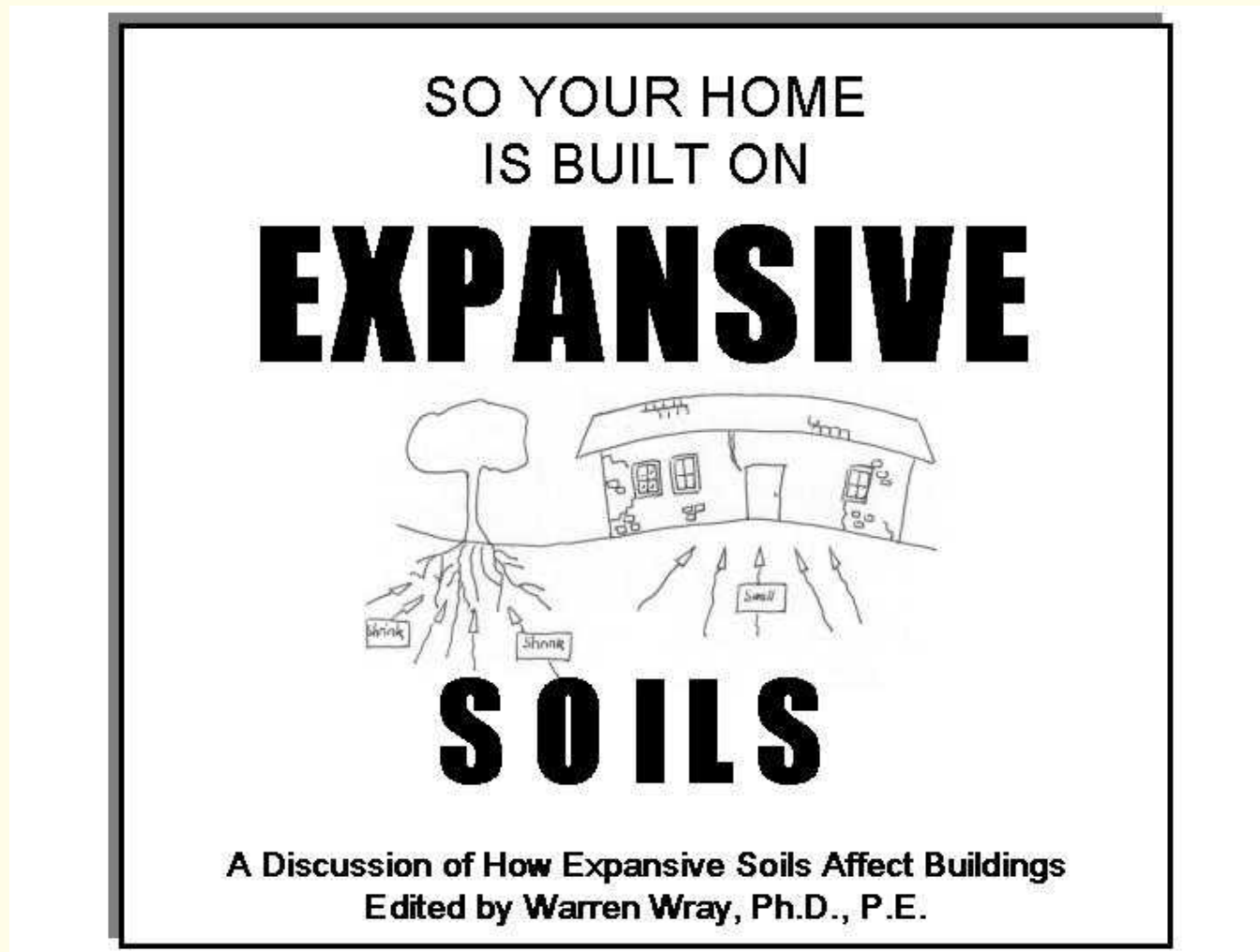
1. Applications

- **Déchets (nucléaires)** : Stockage géologique profond (500 m) des déchets radioactifs (France: 200 m³/an) de forte activité et/ou à longue durée de vie ($\approx 100\ 000$ années)



—→ **Prédire le comportement de la barrière ouvragée en argile gonflante**

- Génie civil



- **Electro-osmose**



STOP

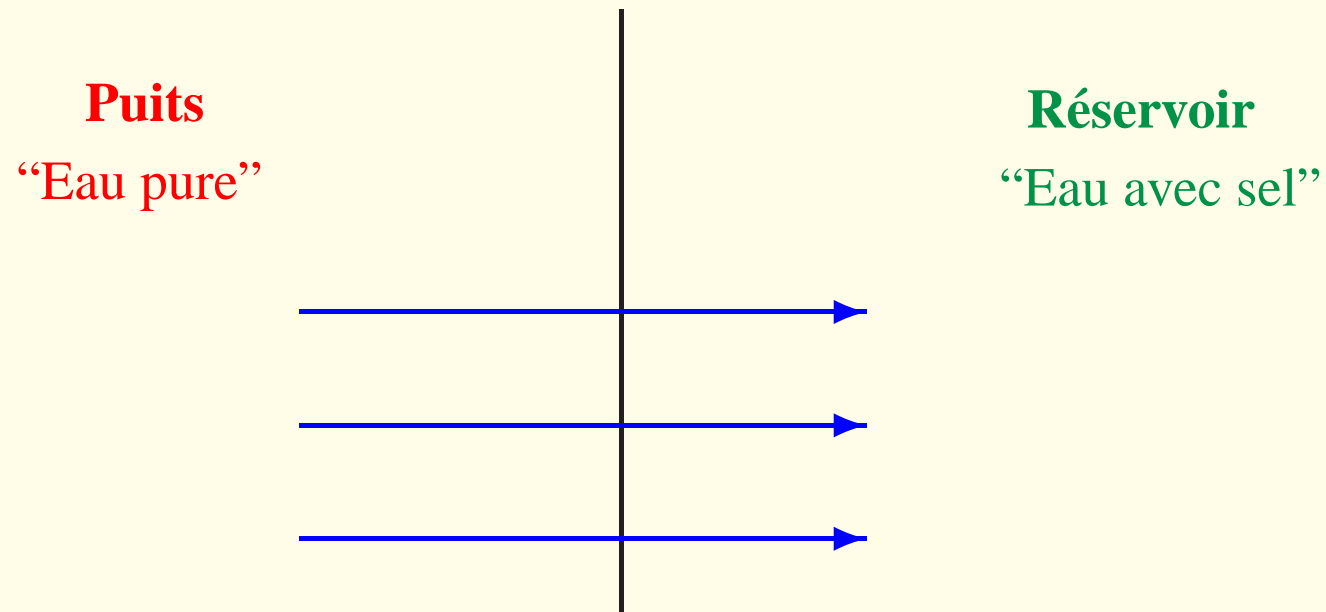
**A L'HUMIDITE GRIMPANTE
DANS LES MURS**

HYGRO**STOP**

**LE TRAITEMENT DE FOND DES
REMONTEES CAPILLAIRES**

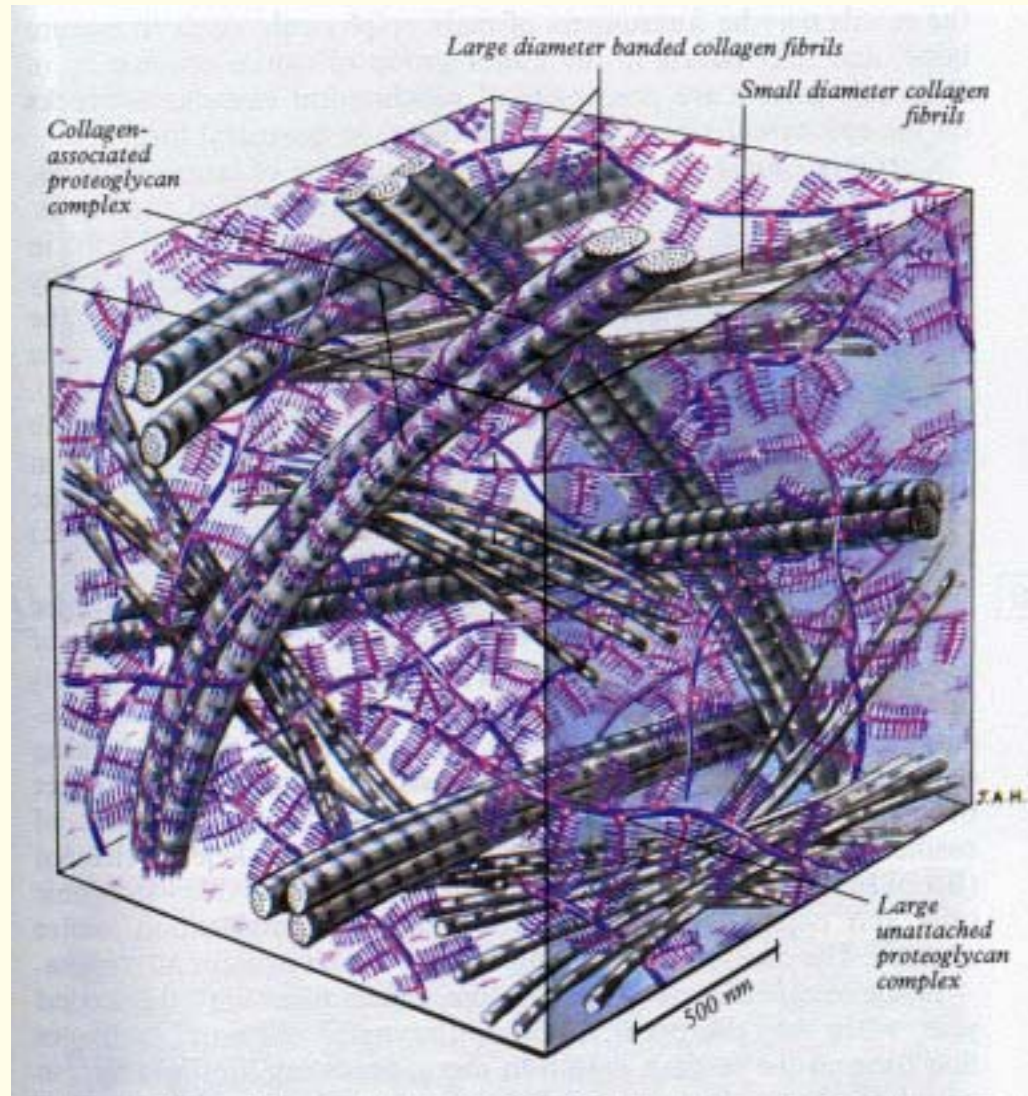
La centrale d'assèchement envoie dans les murs un courant électrique continu très basse tension (sans aucun danger) inverse à celui produit par les remontées capillaires. Ce courant repousse l'eau vers le bas.

- **Stabilité des puits pétroliers**



Mouvement d'eau par effet osmotique conduisant à des problèmes d'instabilité

- **Biomécanique du cartilage**



2. Introduction aux argiles

2.1. Structure des argiles gonflantes

- **Tetraèdre de silice et octaèdre d'alumine**

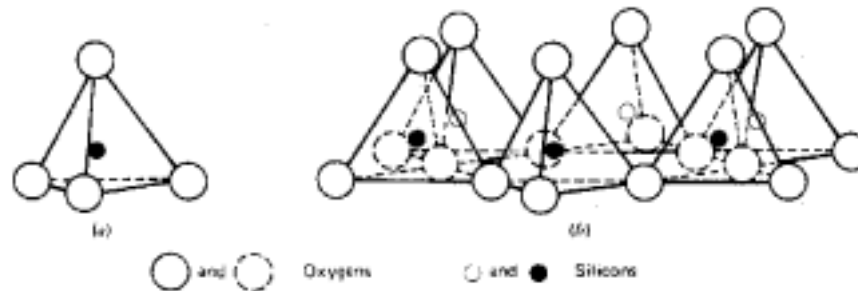


Figure 3.5 Silicon tetrahedron and silica tetrahedra arranged in a hexagonal network.

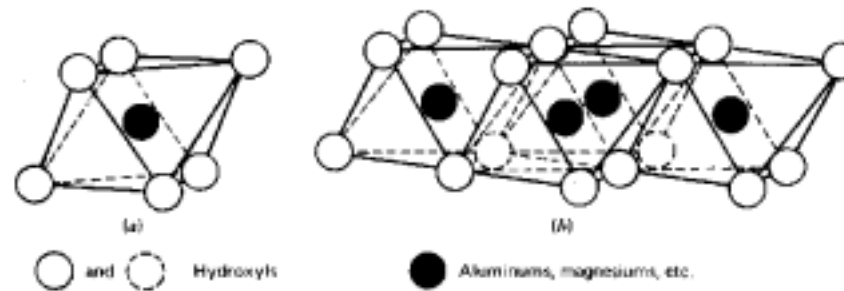
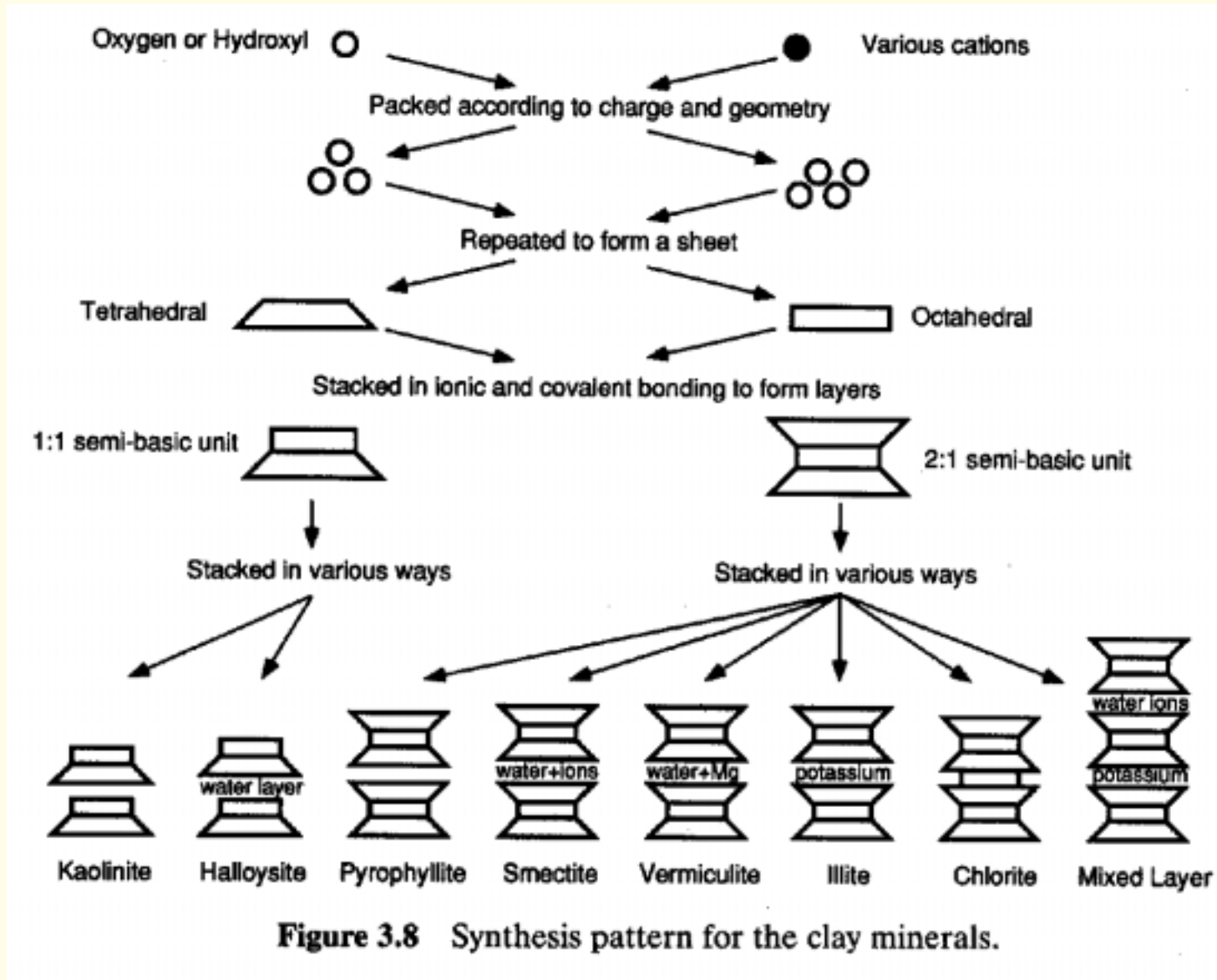


Figure 3.6 Octahedral unit and sheet structure of octahedral units.

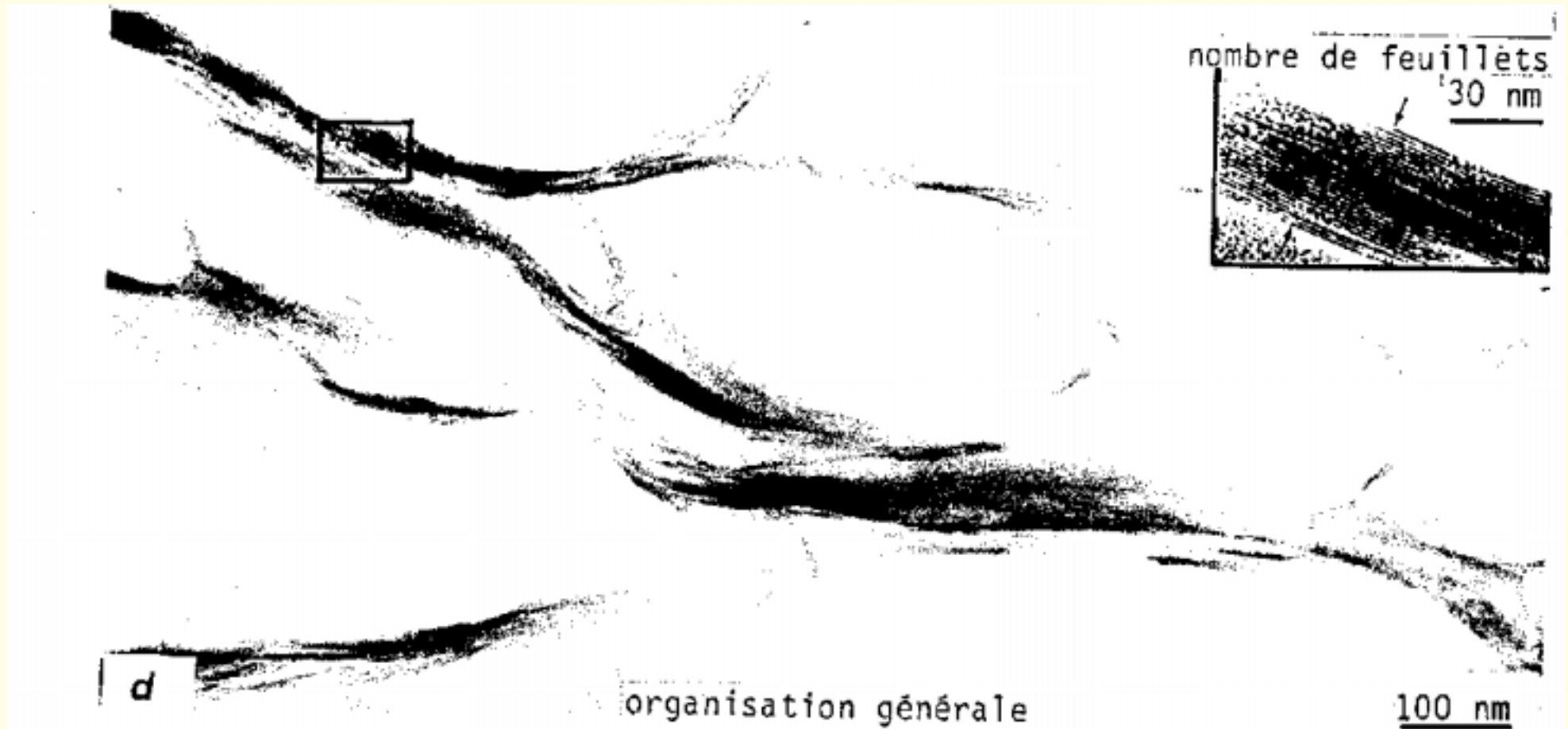
- **Substitutions isomorphes** : $\text{Al}^{3+} \longrightarrow \text{Mg}^{2+}$ ou $\text{Si}^{4+} \longrightarrow \text{Al}^{3+}$
 \Rightarrow Charge de surface négative ($\sigma < 0$)

• Arrangement microscopique



2.2. Arrangement général : milieu à n -échelles ?

- **Vue mésoscopique d'une smectite**



Micrographie de D. Teissier

• Milieu à trois échelles

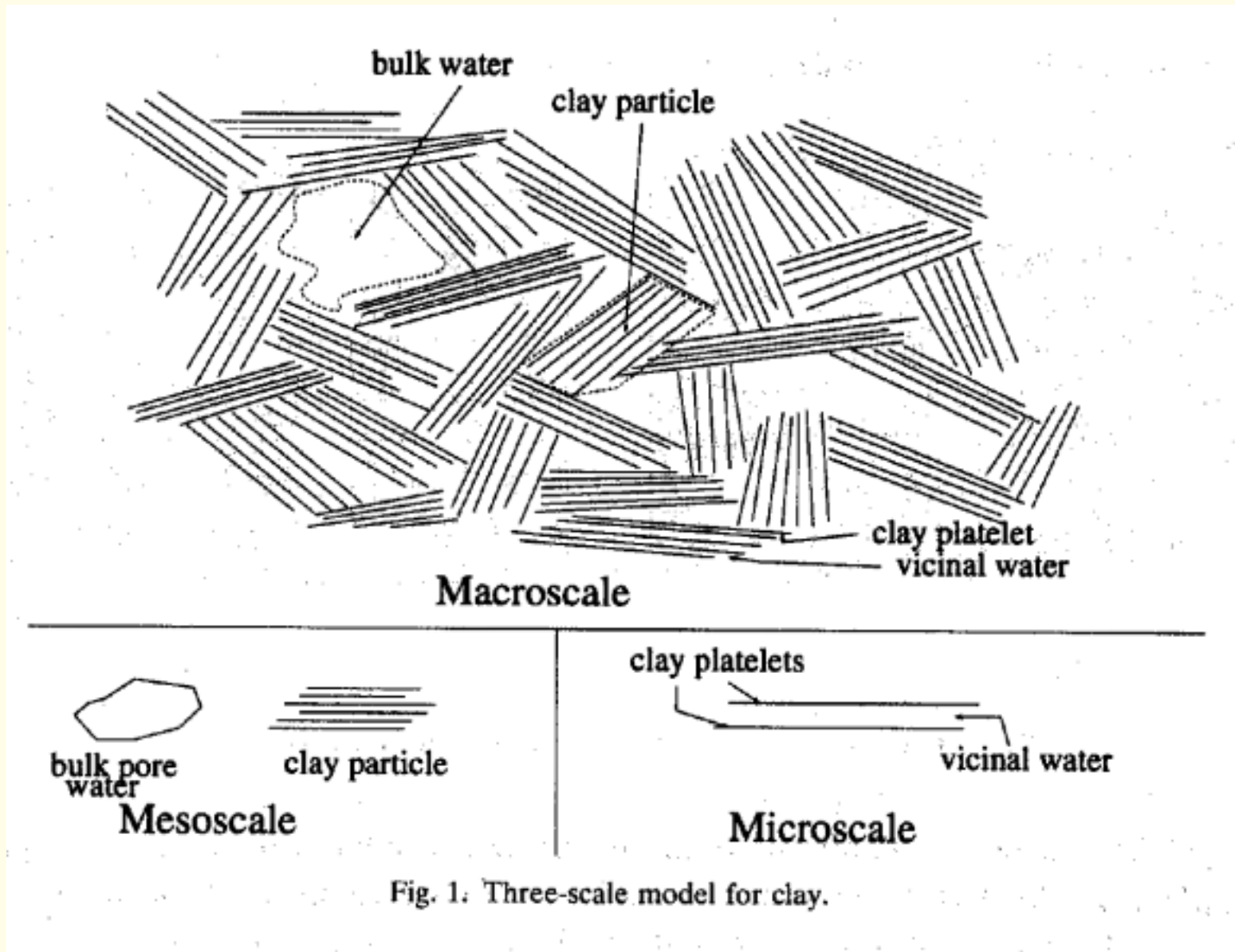
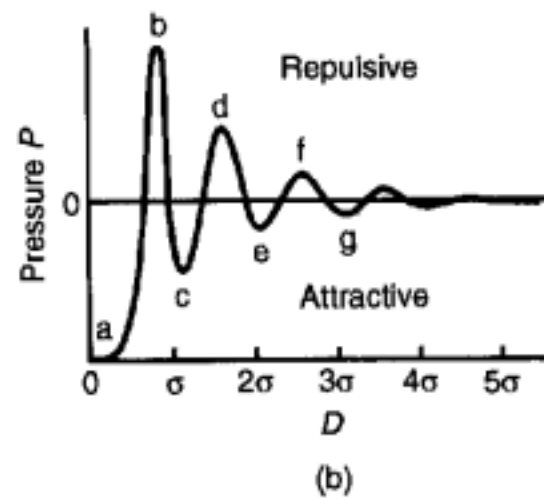
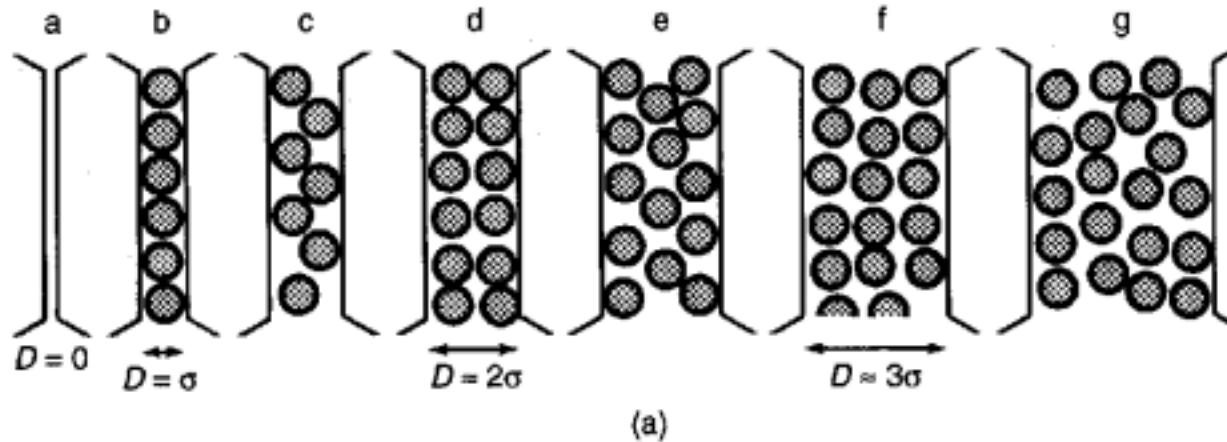


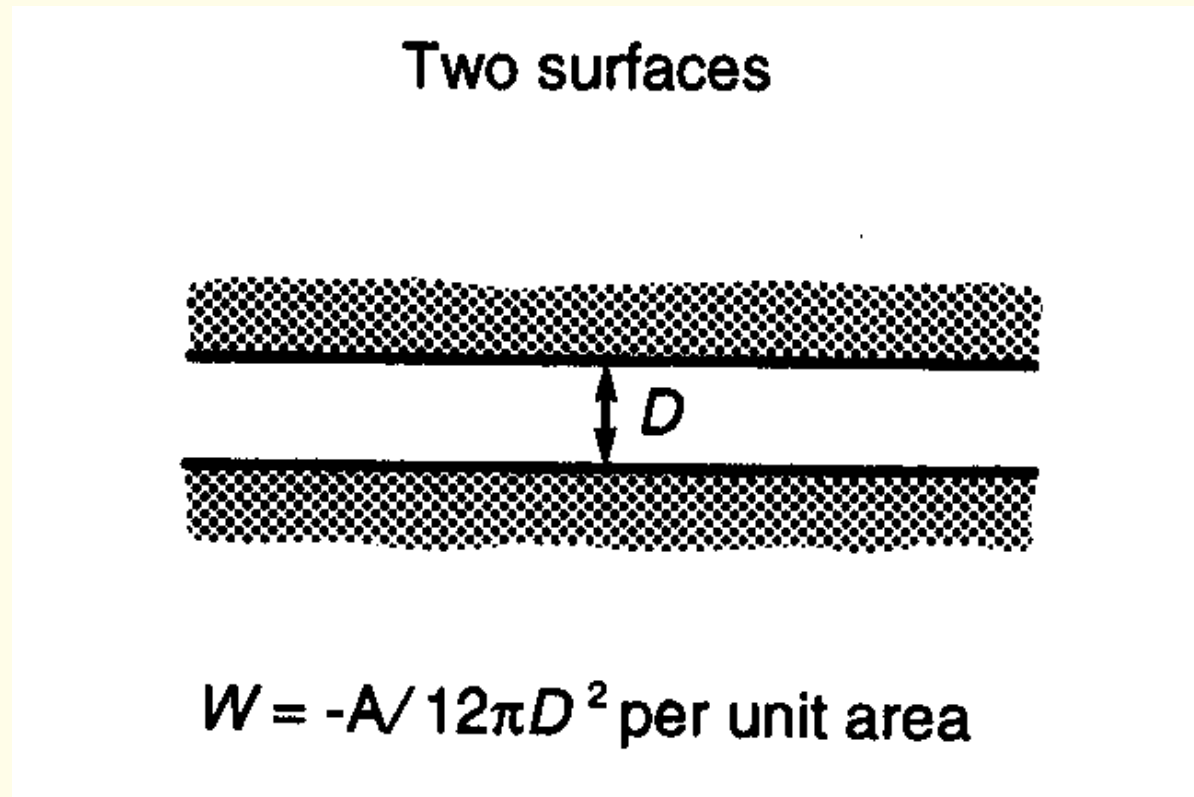
Fig. 1. Three-scale model for clay.

2.3. Forces électrochimiques

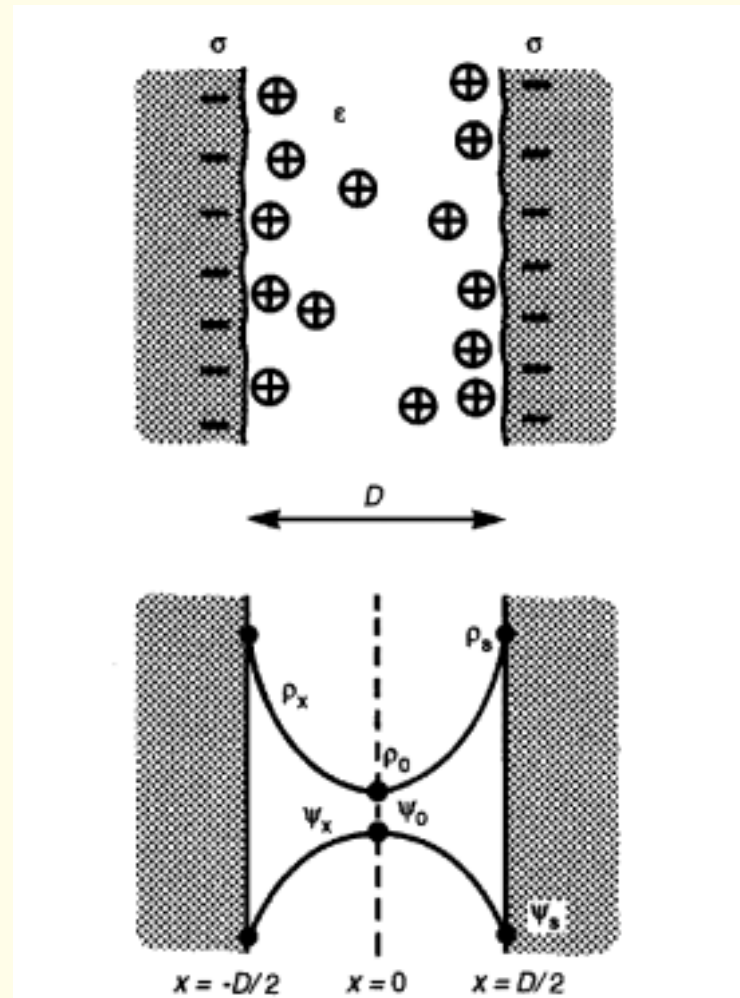
- $D < 3 \cdot 10^{-9}$ m : Forces d'hydratation (attractives-répulsives)



- Forces de Van der Walls (attractives)



- $D > 3 \cdot 10^{-9}$ m : Forces électrostatiques (répulsives)



3. Modélisation mathématique

3.1. Equations à la microéchelle

3.1.1. Champ électrique \mathbf{E}

Sel monovalent entièrement dissocié ($\text{NaCl} \longrightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$)

$c^{+(-)}$	concentration molaire de cations (anions)
F	constante de Faraday
$\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0$	constante diélectrique de l'eau

• Equation de Gauss-Poisson

$$\nabla \cdot (\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 \mathbf{E}) = F (c^+ - c^-) \quad \text{dans } V_f$$

- **E irrotationnel** (pas de champ magnétique) : $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ (Φ : potentiel électrique).

• Equation de Poisson

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{F}{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0} (c^+ - c^-) \quad \text{dans } V_f$$

- **Condition limite à l'interface A_{fs}**

$\sigma (< 0)$: densité de charges fixes à la surface des particules

\mathbf{n} : normale unité extérieure à la phase fluide

$$\nabla\Phi \cdot \mathbf{n} = \frac{\sigma}{\tilde{\varepsilon}\tilde{\varepsilon}_0} \quad \text{sur } A_{fs}$$

3.1.2. Mouvement du fluide

- Problème de Stokes modifié

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v}$$

$$0 = -\nabla p + F (c^+ - c^-) \mathbf{E} + \mu_f \nabla^2 \mathbf{v}$$

- Tenseur de Maxwell τ_M

$$F (c^+ - c^-) \mathbf{E} = \nabla \cdot \tau_M$$

$$\text{où } \tau_M = \frac{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0}{2} (2 \mathbf{E} \mathbf{E} - E^2 \mathbf{I})$$

- Equation pour le mouvement de la phase fluide

$$0 = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \tau_M) + \mu_f \nabla^2 \mathbf{v}$$

- Condition à l'interface A_{fs}

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \quad \text{où } \mathbf{u} \text{ est le déplacement de la phase solide.}$$

3.1.3 Transport des ions

- **Mouvement des ions**

- Convection
- Diffusion brownienne
- Diffusion forcée

- **Cas d'un sel monovalent : NaCl**

- **Mouvement des cations (Na^+) et des anions (Cl^-)**

$$\frac{\partial c^\pm}{\partial t} + \nabla \cdot (c^\pm \mathbf{v}) = \nabla \cdot [\mathcal{D}_{w\pm} (\nabla c^\pm \pm c^\pm \nabla \bar{\Phi})]$$

où $\bar{\Phi} = \frac{F \Phi}{RT}$ (R constante des gaz parfaits).

- **Condition limite sur A_{fs} (imperméable)**

$$-\mathcal{D}_{w\pm} (\nabla c^\pm \pm c^\pm \nabla \bar{\Phi}) \cdot \mathbf{n} = 0$$

3.1.4. Deformation des particules solides

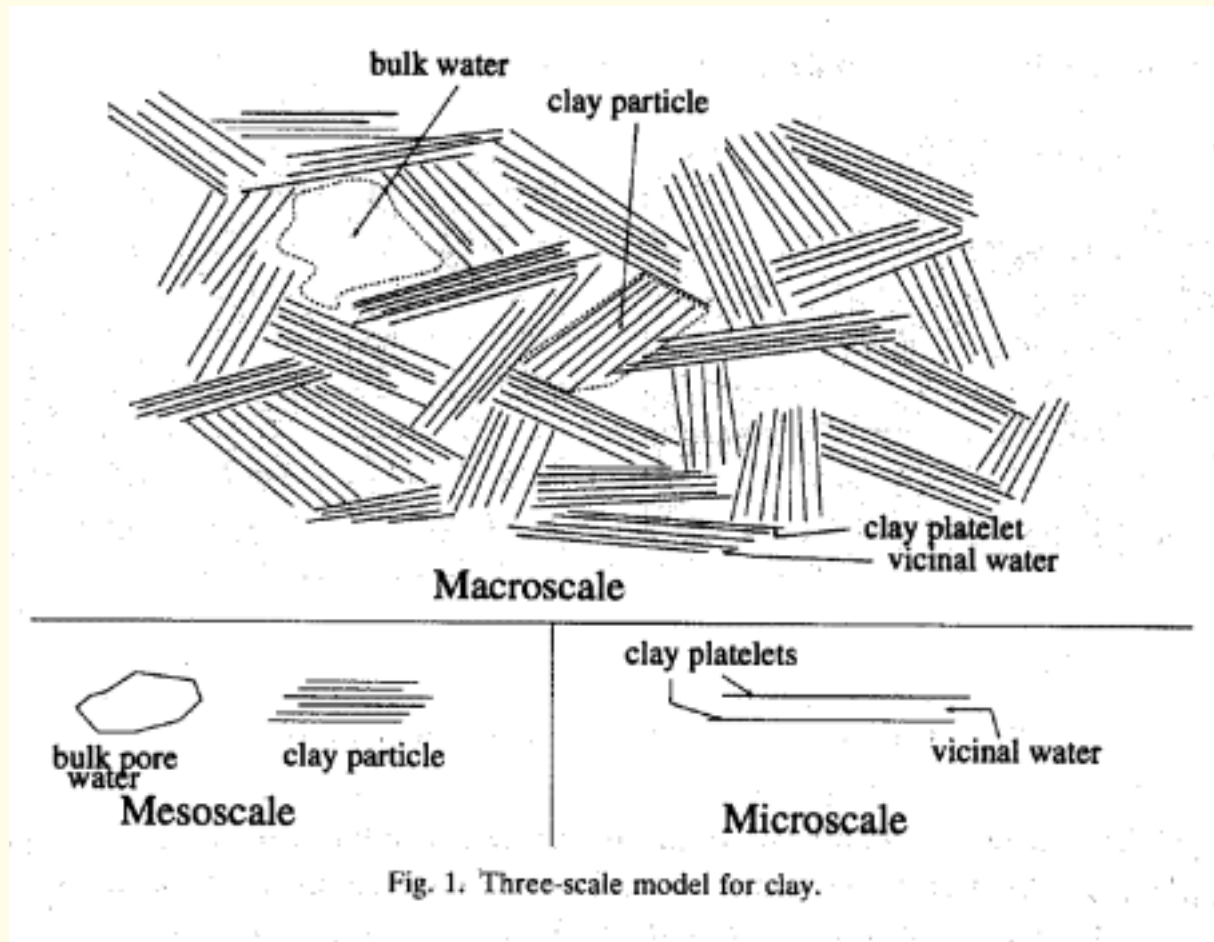
- Equations de l'élasticité

$$\mu_s \nabla^2 \mathbf{u} + (\lambda_s + \mu_s) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad \text{dans } V_s$$

- Condition limite sur A_{fs}

$$[-p \mathbf{I} + \mu_f (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \boldsymbol{\tau}_M] \cdot \mathbf{n} = [\lambda_s (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] \cdot \mathbf{n}$$

3.2. Homogénéisation



“Mésoéchelle” ← “Microéchelle”

3.2.1. Principe – Nombres adimensionnels

- **Deux échelles de longueur** : une échelle microscopique ℓ (\mathbf{y}) et une échelle macroscopique L (\mathbf{x})

- **Principe de séparation des échelles** : $\epsilon \equiv \ell/L \ll 1$.
 \mathbf{x} et \mathbf{y} sont des variables indépendantes.

- **Valeurs de référence**

- * $\ell_{ref} \equiv L$

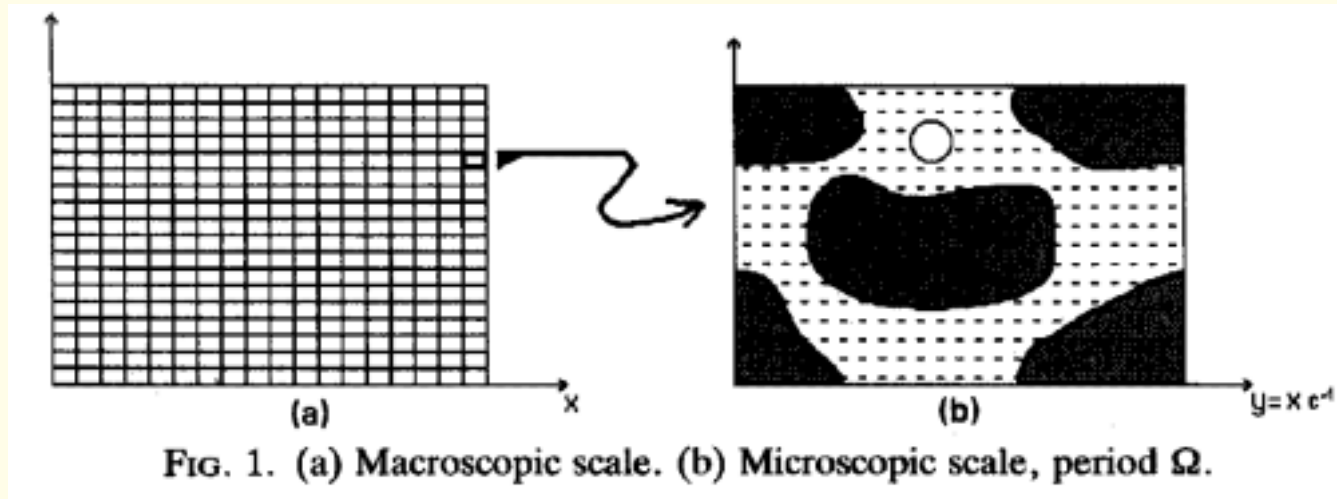
- * $E_{ref} \equiv \sigma / \tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0$

- * $\Phi_{ref} = \ell E_{ref} \quad (\ell \simeq L_D)$

- * $c_{ref} = \sigma / (F \ell)$

- * $(\lambda_s + 2\mu_s)(u_{ref}/L) = \max(p_{ref}, \frac{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}{2} E_{ref}^2)$

- Milieu périodique (cellule-unité Y)



$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L} \qquad \mathbf{y}^* = \frac{\mathbf{y}}{\ell}$$

$$\mathbf{y}^* = \mathbf{x}^* \frac{L}{\ell} = \frac{\mathbf{x}^*}{\epsilon}, \text{ ou } : \mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\epsilon}.$$

- Dérivée spatiale : $\nabla \longrightarrow \nabla_x + \epsilon^{-1} \nabla_y$

- **Nombres adimensionnels**

$$\frac{\mu_f v_{ref}}{p_{ref} L} = \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad : \text{scaling usuel pour la loi de Darcy}$$

$$Pe = \frac{v_{ref} L}{D_{w+} \sigma^2} = \mathcal{O}(\epsilon^m) \quad : \text{nombre de Péclet } (m = 0)$$

$$M_1 = \frac{\sigma^2}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0 p_{ref}} = \mathcal{O}(1)$$

$$M_2 = \frac{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0 E_{ref}^2 L}{2 u_{ref} (3 \lambda_s + 2 \mu_s)} = \mathcal{O}(1)$$

$$N = \frac{F \sigma \ell}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0 RT} = \mathcal{O}(1)$$

- **Développement asymptotique à deux échelles en fonction de ϵ**

$$\theta(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \sum_{k=0}^{k=\infty} \epsilon^k \theta^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$$

3.2.2. Variables rapides \longrightarrow Variables lentes

- * **Phase fluide** (en chaque point) : $c^+(x, y)$, $c^-(x, y)$, $\Phi(x, y)$.
- * **Bulk virtuel** : concentration $c_b(x, y)$ et potentiel électrique $\psi_b(x, y)$
en équilibre thermodynamique avec la solution.

$$\mu^\pm = \pm F \Phi + RT \ln c^\pm = \pm F \psi_b + RT \ln c_b = \mu_b^\pm$$

D'où :

$$\begin{aligned} \Phi(x, y) &= \varphi(x, y) + \psi_b(x, y) \\ c^+(x, y) &= c_b(x, y) \exp(-F \varphi(x, y)/RT) \\ c^-(x, y) &= c_b(x, y) \exp(+F \varphi(x, y)/RT) \end{aligned}$$

- * $\varphi(x, y) \simeq \varphi^0(y, c_b)$: potentiel électrique de “double couche”
- * $\psi_b(x, y) \simeq \psi_b^0(x)$: potentiel de courant (streaming potential)
- * $c_b(x, y) \simeq c_b^0(x)$: concentration du bulk

● Pression du bulk

* A l'équilibre thermodynamique : $c_b = \text{constante}$, $\psi_b = \text{constante}$

$$0 = -\nabla p - F(c^+ - c^-)\nabla\varphi$$

$$0 = -\nabla \left[p + \int_0^\varphi F (c^+ - c^-) d\varphi \right]$$

$$\begin{aligned} p_b(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) (\simeq p_b^0(\mathbf{x}, t)) &= p + \int_0^\varphi F (c^+ - c^-) d\varphi \\ &= p - \underbrace{RT (c^+ + c^- - 2c_b)} \\ &= p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) - \pi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \end{aligned}$$

π est la pression osmotique de Donnan.

* Conclusion : à l'équilibre thermodynamique

$$0 = -\nabla p_b$$

3.2.3. Récapitulatif des équations

• Equation de Poisson dans Y_f

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \nabla^2 (\varphi + \psi_b) &= -\frac{q}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0} & \text{avec } q &= F(c^+ - c^-) \\ \mathbf{E} &= -\epsilon \nabla (\varphi + \psi_b) \end{aligned}$$

• Equations de Stokes dans Y_f

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v}$$

$$0 = -\nabla p_b - 2RT (\cosh \bar{\varphi} - 1) \nabla c_b + 2RT c_b \sinh \bar{\varphi} \nabla \bar{\psi}_b + \epsilon^2 \mu_f \nabla^2 \mathbf{v}$$

• Transport des ions dans Y_f

$$\frac{\partial}{\partial t} [\exp(\mp \bar{\varphi}) c_b] + \epsilon^m \nabla \cdot (\exp(\mp \bar{\varphi}) c_b \mathbf{v}) = \nabla \cdot [\mathcal{D}_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}) (\nabla c_b \pm c_b \nabla \bar{\psi}_b)]$$

• Déformation du solide dans Y_s

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s = 0 \quad \boldsymbol{\sigma}_s = c_s \mathcal{E}(\mathbf{u})$$

• **Condition limite à l'interface fluide–solide ∂Y_{fs}**

$$\epsilon \nabla(\varphi + \psi_b) \cdot \mathbf{n} = \frac{\sigma}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}$$

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$$

$$\mathcal{D}_\pm (\nabla c_b \pm c_b \nabla \bar{\psi}_b) \cdot \mathbf{n} = 0$$

$$\left[(-p \mathbf{I} + \frac{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}{2} (2 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} - E^2 \mathbf{I}) + 2 \epsilon^2 \mu_f \mathcal{E}(\mathbf{v})) \right] \mathbf{n} = c_s \mathcal{E}(\mathbf{u}) \mathbf{n}$$

3.2.4. Equation de Poisson-Boltzmann

- Dans Y_f ($\bar{\varphi} = F \varphi / RT$)

$$\boxed{\nabla_y^2 \bar{\varphi}^0 = \frac{1}{L_D^2} \sinh \bar{\varphi}^0} \quad \text{avec} \quad L_D = \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 RT}{2 F^2 c_b^0}} \quad (\text{longueur de Debye})$$

- Condition limite sur l'interface fluide-solide ∂Y_{fs}

$$\nabla_y \bar{\varphi}^0 \cdot \mathbf{n} = \frac{F \sigma}{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 RT}$$

- Conditions de périodicité sur ∂Y_{fe}

- Conservation de la charge : par intégration sur Y_f

$$\frac{|\partial Y_{fs}|}{|Y_f|} \sigma + c_b^0 F (G_+ - G_-) = 0$$

$$\text{avec} \quad G_{\pm} = \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \rangle^f$$

3.2.5. Transport des ions

• **Ordre $\mathcal{O}(\epsilon^{-2})$:** $c_b^0(\mathbf{x}, t) \quad \psi_b^0(\mathbf{x}, t)$

• **Ordre $\mathcal{O}(\epsilon^{-1})$:** dans Y_f

$$\begin{aligned} \nabla_y \cdot \left[\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\nabla_x c_b^0 \pm c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 + \nabla_y c_b^1 \pm c_b^0 \nabla_y \bar{\psi}_b^1) \right] &= \mp c_b^0 \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \mathbf{v}^0 \cdot \nabla_y \bar{\varphi}^0 \\ -\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \left[\nabla_x c_b^0 \pm c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 + \nabla_y c_b^1 \pm c_b^0 \nabla_y \bar{\psi}_b^1 \right] \cdot \mathbf{n} &= 0 \quad \text{sur } \partial Y_{fs} \end{aligned}$$

Fermeture : $c_b^1 \pm c_b^0 \bar{\psi}_b^1 = \chi^\pm c_b^0 + \mathbf{f}^\pm \left(\nabla_x c_b^0 \pm c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 \right) + \hat{c}^\pm(\mathbf{x}, t)$

Problème local pour χ^\pm :

$$\begin{aligned} \nabla_y \cdot \left[\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \chi^\pm \right] &= \mp \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \mathbf{v}^0 \cdot \nabla_y \bar{\varphi}^0 && \text{dans } Y_f \\ -\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \chi^\pm \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{sur } \partial Y_{fs} \end{aligned}$$

Problème local pour \mathbf{f}^\pm :

$$\begin{aligned} \nabla_y \cdot \left[\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\nabla_y \mathbf{f}^\pm + \mathbf{I}) \right] &= 0 && \text{dans } Y_f \\ -\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}^\pm) \cdot \mathbf{n} &= 0 && \text{sur } \partial Y_{fs} \end{aligned}$$

3.2.6. Loi de Darcy

• Problème de Stokes modifié

$$\mu_f \Delta_{yy} \mathbf{v}^0 - \nabla_y p_b^1 - A \nabla_y \chi^+ - B \nabla_y \chi^- = \nabla_x p_b^0 + \mathbf{F} \nabla_x c_b^0 + \mathbf{G} \nabla_x \bar{\psi}_b^0$$

$$\nabla_y \cdot \mathbf{v}^0 = 0 \quad \text{dans } Y_f \quad \text{et} \quad \mathbf{v}^0 = \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

avec

$$\mathbf{F} = RT \{ 2c_b^0 (\cosh \bar{\varphi}^0 - 1) \mathbf{I} + [\exp(-\bar{\varphi}^0) - 1] \nabla_y \mathbf{f}^+ + [\exp(+\bar{\varphi}^0) - 1] \nabla_y \mathbf{f}^- \}$$

$$\mathbf{G} = RT c_b^0 \{ -2 \sinh \bar{\varphi}^0 \mathbf{I} + [\exp(-\bar{\varphi}^0) - 1] \nabla_y \mathbf{f}^+ - [\exp(+\bar{\varphi}^0) - 1] \nabla_y \mathbf{f}^- \}$$

$$A = RT c_b^0 [\exp(-\bar{\varphi}^0) - 1], \quad B = RT c_b^0 [\exp(+\bar{\varphi}^0) - 1]$$

• Décompositions de la vitesse, de la pression et du potentiel de relaxation :

$$\mathbf{v}^0 = \mathbf{v}_p^0 + \mathbf{v}_c^0 + \mathbf{v}_e^0$$

$$p_b^1 = p_p^1 + p_c^1 + p_e^1$$

$$\chi^\pm = \chi_p^\pm + \chi_c^\pm + \chi_e^\pm$$

$$= \mathbf{h}_p^\pm \cdot \nabla_x p_b^0 + \mathbf{h}_c^\pm \cdot \nabla_x c_b^0 + \mathbf{h}_e^\pm \cdot \nabla_x \bar{\psi}_b^0$$

• Composante hydraulique

$$\mu_f \Delta_{yy} \mathbf{v}_p^0 - \nabla_y p_p^1 - A \nabla_y \chi_p^+ - B \nabla_y \chi_p^- = \nabla_x p_b^0$$

$$\nabla_y \cdot \mathbf{v}_p^0 = 0 \quad \text{dans } Y_f$$

$$\nabla_y \cdot [D_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \chi_p^{\pm}] \pm \mathbf{v}_p^0 \cdot \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \bar{\varphi}^0 = 0$$

$$\mathbf{v}_p^0 = \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t}; \quad \nabla_y \chi_p^{\pm} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

• Composante chimico-osmotique

$$\mu_f \Delta_{yy} \mathbf{v}_c^0 - \nabla_y p_c^1 - A \nabla_y \chi_c^+ - B \nabla_y \chi_c^- = F \nabla_x c_b^0$$

$$\nabla_y \cdot \mathbf{v}_c^0 = 0 \quad \text{dans } Y_f$$

$$\nabla_y \cdot [D_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \chi_c^{\pm}] \pm \mathbf{v}_c^0 \cdot \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \bar{\varphi}^0 = 0$$

$$\mathbf{v}_c^0 = 0; \quad \nabla_y \chi_c^{\pm} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

• Composante électro-osmotique

$$\mu_f \Delta_{yy} \mathbf{v}_e^0 - \nabla_y p_e^1 - A \nabla_y \chi_e^+ - B \nabla_y \chi_e^- = \mathbf{G} \nabla_x \bar{\psi}_b^0$$

$$\nabla_y \cdot \mathbf{v}_e^0 = 0, \quad \text{dans } Y_f$$

$$\nabla_y \cdot [\mathcal{D}_\pm \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \chi_e^\pm] \pm \mathbf{v}_e^0 \cdot \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \bar{\varphi}^0 = 0$$

$$\mathbf{v}_e^0 = 0; \quad \nabla_y \chi_e^\pm \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial Y_{fs}.$$

• Loi de Darcy modifiée

$$\mathbf{v}_D^0 \equiv \langle \mathbf{v}_p^0 - \partial \mathbf{u}^0 / \partial t \rangle + \langle \mathbf{v}_c^0 \rangle + \langle \mathbf{v}_e^0 \rangle = \langle \mathbf{v}^0 - \partial \mathbf{u}^0 / \partial t \rangle$$

$$\mathbf{v}_D^0 = \langle \mathbf{v}^0 - \partial \mathbf{u}^0 / \partial t \rangle = -\mathbf{K}_P \nabla_x p_b^0 - \mathbf{K}_C \nabla_x c_b^0 - \mathbf{K}_E \nabla_x \bar{\psi}_b^0$$

3.2.7. Mouvement macroscopique des ions

• Prise de moyenne

Ψ_f défini sur la phase fluide

$$\text{Temps : } \left\langle \frac{\partial \Psi_f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi_f \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\epsilon |Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \Psi_f \mathbf{w}_{fs} \cdot \mathbf{n}_{fs} \, d\Gamma$$

$$\text{Espace : } \langle \nabla \cdot (\Psi_f \mathbf{v}) \rangle = \nabla \cdot \langle \Psi_f \mathbf{v} \rangle + \frac{1}{\epsilon |Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \Psi_f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{fs} \, d\Gamma$$

Comme $\mathbf{w}_{fs} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{fs}$ (condition de non-glissement)

$$\left\langle \frac{\partial \Psi_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\Psi_f \mathbf{v}) \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi_f \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \Psi_f \mathbf{v} \rangle$$

$$\left\langle \frac{\partial \Psi_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\Psi_f \mathbf{v}) \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi_f^0 \rangle}{\partial t} + \nabla_x \cdot \langle \Psi_f^0 \mathbf{v}^0 \rangle + o(\epsilon^0)$$

• Equations macroscopiques de transport des ions

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(n_f \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \rangle^f c_b^0 \right) + \nabla_x \cdot \left(n_f \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\mathbf{v}^0 - \mathcal{D}_\pm \nabla_y \chi^\pm) \rangle^f c_b^0 \right) \\ = \nabla_x \cdot \left[n_f \mathcal{D}_\pm \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}^\pm) \rangle^f \left(\nabla_x c_b^0 \pm c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 \right) \right] \end{aligned}$$

Soit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_f G_\pm^* c_b^0) + \nabla_x \cdot \mathbf{J}_\pm^0 = 0$$

avec
$$\mathbf{J}_\pm^0 \equiv G_\pm^* c_b^0 \mathbf{v}_\pm^{*0} - n_f \left(\mathbf{D}_\pm^c \nabla_x c_b^0 \pm \mathbf{D}_\pm^e c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 + \mathbf{D}_\pm^p \nabla_x p_b^0 \right)$$

$$\begin{aligned} G_\pm^* &= \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \rangle^f ; \quad G_\pm^* \mathbf{v}_\pm^{*0} = \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \mathbf{v}^0 \rangle ; \quad \mathbf{D}_\pm^p = \mathcal{D}_\pm \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y \mathbf{h}_p^\pm \rangle^f \\ \mathbf{D}_\pm^I &= \mathcal{D}_\pm \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}^\pm + \nabla_y \mathbf{h}_I^\pm) \rangle^f ; \quad I = c, e \end{aligned}$$

• **Formulation alternative :**

$$\mathbf{J}^0 \equiv \mathbf{J}_+^0 + \mathbf{J}_-^0 \quad \mathbf{I}_e^0 \equiv F(\mathbf{J}_+^0 - \mathbf{J}_-^0) \quad \mathbf{J}^0 = 2c_b^0 \mathbf{v}_D^0 + \mathbf{J}_c^0$$

* **Relations de réciprocité de Onsager**

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}_D^0 \\ \mathbf{J}_c^0 \\ \mathbf{I}_e^0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} L_{PP} & L_{PC} & L_{PE} \\ L_{CP} & L_{CC} & L_{CE} \\ L_{EP} & L_{EC} & L_{EE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_x p_b^0 \\ RT \nabla_x \ln c_b^0 \\ \nabla_x \psi_b^0 \end{pmatrix}$$

* **Symétrie des coefficients**

Si les potentiels electro-chimiques ne fluctuent pas au travers des micropores, i.e.

$$\nabla_y \chi^\pm = 0 \text{ et } \nabla_y f^\pm = 0 :$$

$$\begin{aligned} L_{PP} &= L_{PP}^T & L_{CC} &= L_{CC}^T & L_{EE} &= L_{EE}^T \\ L_{PC} &= L_{CP}^T & L_{PE} &= L_{EP}^T & L_{CE} &= L_{EC}^T \end{aligned}$$

• **Autre formulation de la condition d'électroneutralité**

* **Condition d'électroneutralité**

$$\frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \sigma \, d\Gamma = n_{fs} \langle \sigma \rangle^{fs} = 2 n_f F \langle \sinh \bar{\varphi}^0 \rangle^f c_b^0$$

* **Prise de moyenne pour une intégrale de surface (Gray et Hassanizadeh)**

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n_{fs} \langle \sigma \rangle^{fs} \right) + \nabla \cdot \left(n_{fs} \left\langle \sigma \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\rangle^{fs} \right) = 0$$

* **At $\mathcal{O}(1)$ (\mathbf{u}^0 indépendant de y):**

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n_{fs} \langle \sigma \rangle^{fs} \right) + \nabla_x \cdot \left(n_{fs} \langle \sigma \rangle^{fs} \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \right) = 0$$

* **Condition d'électroneutralité combinée avec la conservation de la charge**

$$\nabla_x \cdot \left(\mathbf{I}_e^0 + 2 n_f F \langle \sinh \bar{\varphi}^0 \rangle^f c_b^0 \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \right) = 0$$

* **Conserv. charge dans un référentiel se déplaçant avec la vitesse du solide**

3.2.8. Equation pour la phase solide

- **Ordre $\mathcal{O}(\epsilon^0)$:** $\mathbf{u}^0(\mathbf{x}, t)$

- **Ordre $\mathcal{O}(\epsilon)$:**

$$\mu_s \nabla_y^2 \mathbf{u}^1 + (\lambda_s + \mu_s) \nabla_y (\nabla_y \cdot \mathbf{u}^1) = 0 \quad \text{dans } Y_s$$

$$- [p_b^0(\mathbf{x}, t) \mathbf{I} + \mathbf{\Pi}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)] \cdot \mathbf{n} = [\lambda_s (\nabla_x \cdot \mathbf{u}^0 + \nabla_y \cdot \mathbf{u}^1) \mathbf{I} + 2 \mu_s (\mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0) + \mathcal{E}_y(\mathbf{u}^1))] \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial Y_{fs}$$

- **On ∂Y_{se} :** Conditions de périodicité

- **Pression de disjonction $\mathbf{\Pi}$**

$$\mathbf{\Pi} = \underbrace{- \int_0^{\varphi^0} F(c^{+0} - c^{-0}) d\varphi}_{\pi^0} \mathbf{I} - \underbrace{\frac{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}{2} (2 \mathbf{E}^0 \mathbf{E}^0 - (E^0)^2 \mathbf{I})}_{\tau_M^0}$$

- **Fermeture pour \mathbf{u}^1**

$$\mathbf{u}^1 = \zeta(\mathbf{y}) p_b^0(\mathbf{x}, t) + \xi(\mathbf{y}) : \boldsymbol{\mathcal{E}}_x(\mathbf{u}^0) + \mathbf{u}_\pi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) + \hat{\mathbf{u}}^1(\mathbf{x}, t)$$

- ζ et ξ : Auriault et Sanchez-Palencia, 1977.

- \mathbf{u}_π^1 vérifie dans Y_s :

$$\mu_s \nabla_y^2 \mathbf{u}_\pi^1 + (\lambda_s + \mu_s) \nabla_y (\nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1) = 0$$

et sur ∂Y_{fs} :

$$-\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{n} = \left[\lambda_s \nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1 \mathbf{I} + 2 \mu_s \boldsymbol{\mathcal{E}}_y(\mathbf{u}_\pi^1) \right] \cdot \mathbf{n}$$

avec des conditions de périodicité sur ∂Y_{se}

• Equations de Biot modifiées

* Tenseur de contrainte totale

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Dans } Y_f, \\ \text{In } Y_s, \end{array} \right. \sigma_t = \begin{array}{l} \sigma_f \\ \sigma_s \end{array} \quad \nabla_x \cdot \langle \sigma_t^0 \rangle = 0$$

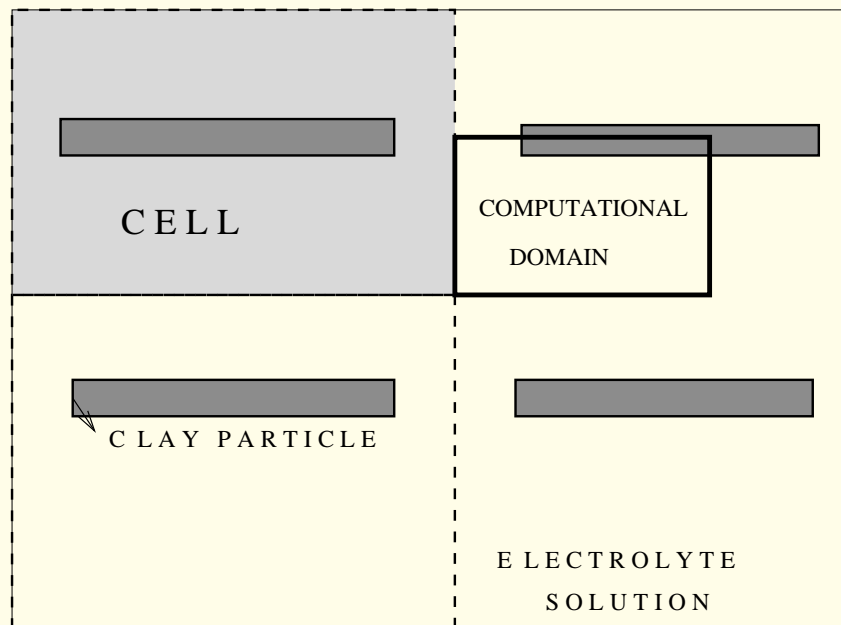
* Principe de Terzaghi modifié

$$\langle \sigma_t^0 \rangle = \underbrace{p_b^0 (-n_f \mathbf{I} + \langle \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_y(\zeta) \rangle)}_{\text{pression du pore}} + \underbrace{\langle \mathbf{C} \cdot (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_y(\xi)) \rangle \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0)}_{\text{contraintes de contact}} - \underbrace{\langle \boldsymbol{\Pi} \rangle_{SP}}_{\text{tenseur de gonflement}}$$

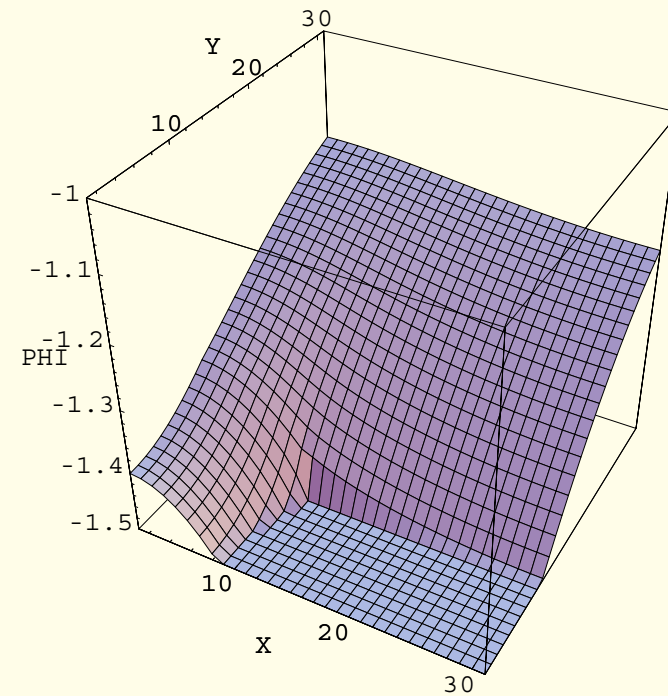
* “Pression de gonflement” (en fait un tenseur)

$$\langle \boldsymbol{\Pi} \rangle_{SP} = -n_s \langle \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_y(\mathbf{u}_\pi^1) \rangle^s + n_f \langle \boldsymbol{\Pi} \rangle^f$$

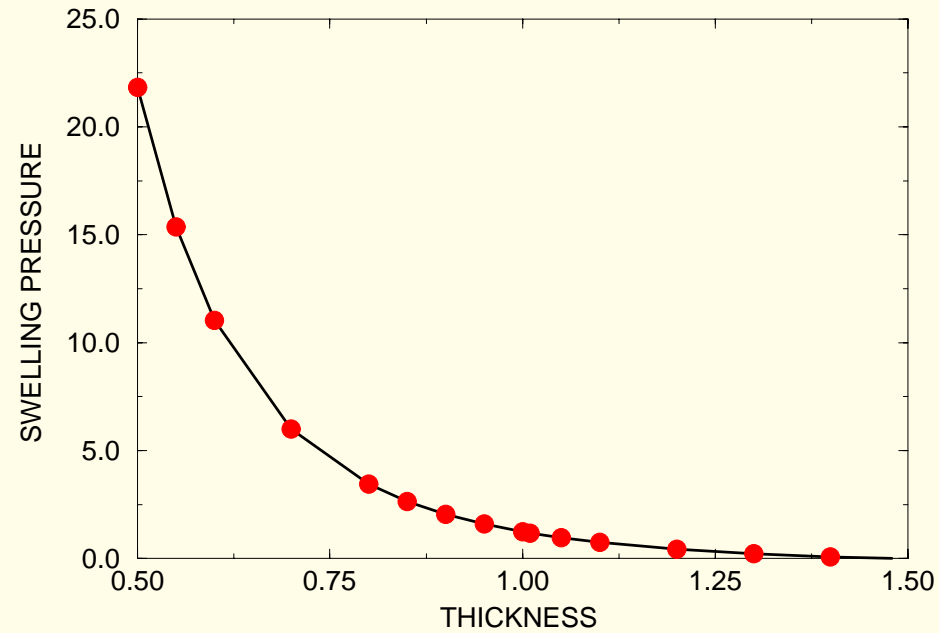
- Exemple



Cellule unité périodique
et domaine de calcul (carré de côté H)



$\varphi^* \equiv \varphi^0 \tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 / \sigma L_D$
en fonction $x^* = x / L_D$.



Pression de gonflement adimensionnelle $\Pi_S^* \equiv (2 \Pi_S^0 \tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 / \sigma^2)$
en fonction de l'espacement entre les couches H/L_D .

- Conservation de la masse “totale”

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot \left(\langle \mathbf{v}^0 \rangle - n_f \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \right) &= (-n_f \mathbf{I} + \langle \nabla_y \cdot \boldsymbol{\xi} \rangle) : \frac{\partial \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0)}{\partial t} \\ &+ \langle \nabla_y \cdot \boldsymbol{\zeta} \rangle \frac{\partial p_b^0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \langle \nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1 \rangle \end{aligned}$$

- Conservation de la masse pour le fluide

$$\frac{\partial n_f}{\partial t} + \nabla_x \cdot \langle \mathbf{v}^0 \rangle = 0$$

3.2.9. Récapitulatif du modèle à deux échelles

• Inconnues

$$\sigma_T^0, p_b^0, \mathbf{u}^0, \mathbf{v}_D^0, c_b^0, \psi_b^0, n_f$$

• Récapitulatif du modèle à deux échelles

$\nabla_x \cdot \sigma_T^0 = 0$	Equilibre mécanique
$\sigma_T^0 = -\alpha p_b^0 + \mathbf{C}_s \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0) - \Pi^0$	Principe de Terzaghi
$\mathbf{v}_D^0 = -\mathbf{K}_P \nabla_x p_b^0 - \mathbf{K}_C \nabla_x c_b^0 - \mathbf{K}_E \nabla_x \psi_b^0$	Loi de Darcy
$\nabla_x \cdot \mathbf{v}_D^0 + \alpha : \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0) = \beta \frac{\partial p_b^0}{\partial t} + \frac{\partial \gamma_\pi}{\partial t}$	Conserv. du volume total
$\frac{\partial}{\partial t} (n_f G_\pm^* c_b^0) + \nabla_x \cdot \mathbf{J}_\pm^0 = 0$	Conservation ions
$\mathbf{J}_\pm^0 = G_\pm^* c_b^0 \mathbf{v}_*^{\pm 0}$	Flux total des ions
$-n_f \left(D_\pm^c \nabla_x c_b^0 \pm D_\pm^e c_b^0 \nabla_x \bar{\psi}_b^0 + D_\pm^p \nabla_x p_b^0 \right)$	
$\frac{\partial n_f}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{v}_D^0 + n_f \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} = 0$	Conserv. volume fluide

4. Conclusions

- * **Théorie complète en propageant la physique de l'échelle du pore à l'échelle mésoscopique.**
- * **Le microscopique des uns est le macroscopique des autres :** forces d'hydratation, forces de Van der Waals forces, couplage avec la dynamique moléculaire ?
- * **Du mésoscopique au macroscopique :** milieux à trois échelles ou plus...
- * **Comprendre le fonctionnement du modèle à deux échelles...**