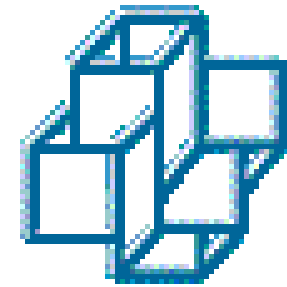


LEMTA



LNCC

Modélisation multi-échelles des argiles par homogénéisation périodique : synthèse des travaux effectués

Christian MOYNE, Didier STEMMELEN

Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée

CNRS – Nancy Université (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

1. Structure des argiles gonflantes : milieux à trois échelles

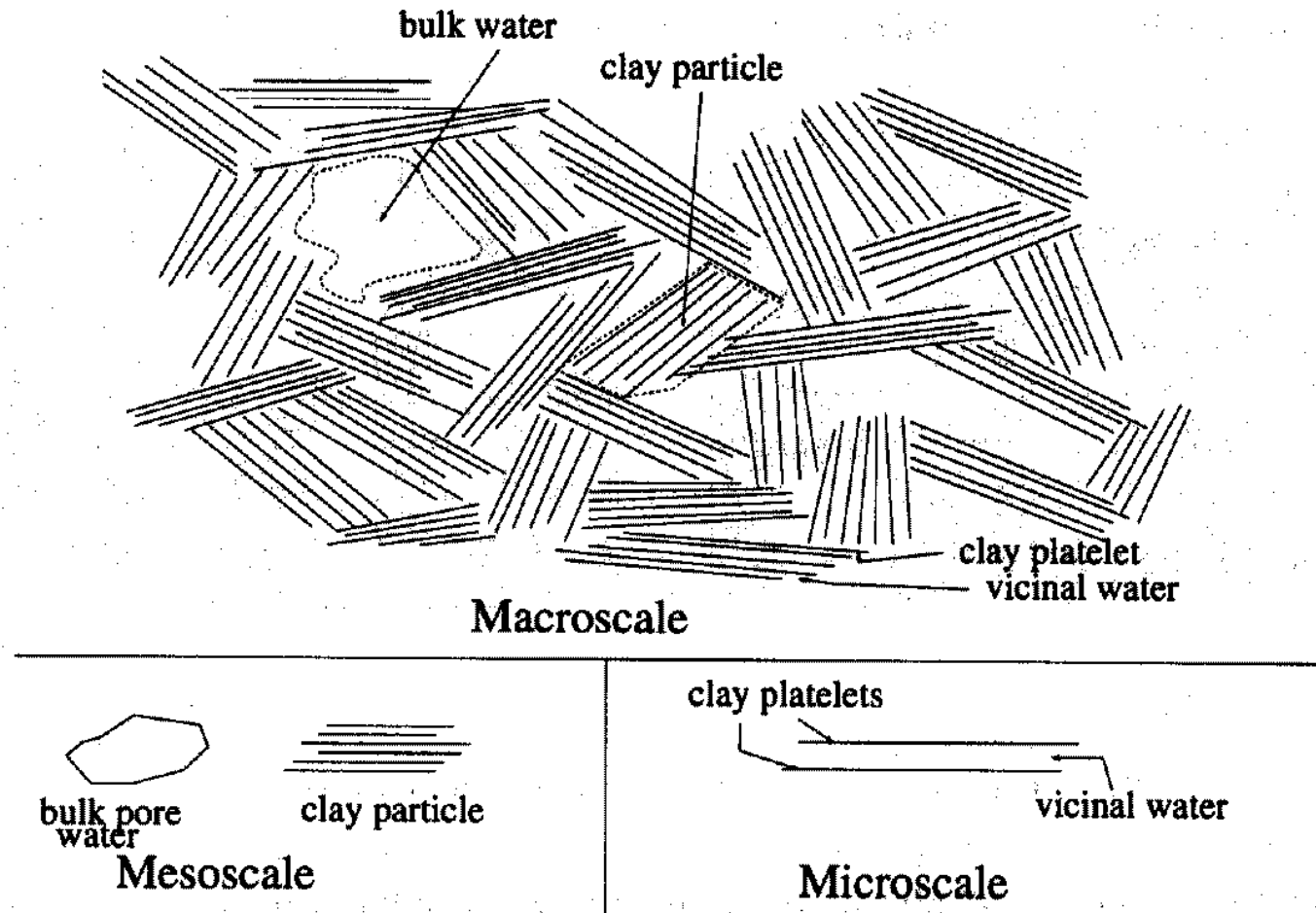


Fig. 1: Three-scale model for clay.

“Microéchelle”



“Mésoséchelle”



“Macroéchelle”

2. De la microéchelle à la mésoéchelle

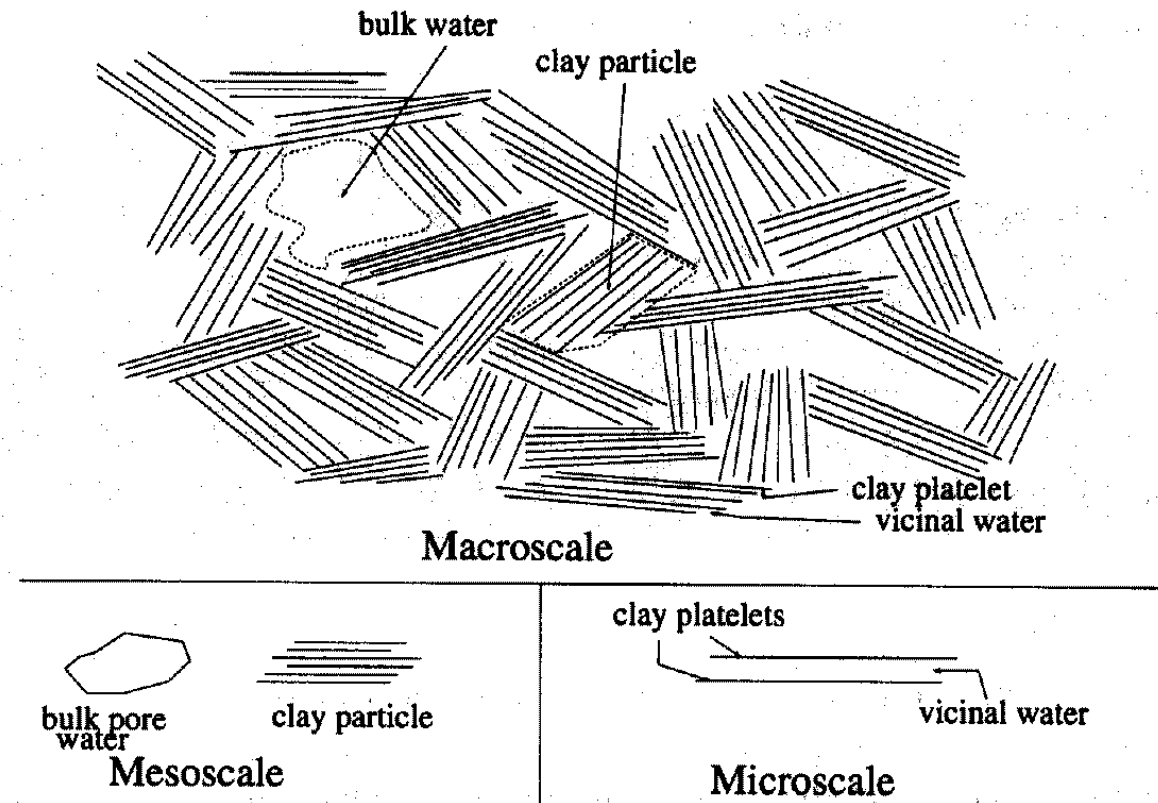


Fig. 1. Three-scale model for clay.

“Microéchelle” → “Mésoéchelle”

• Hypothèses

- * **Milieu poreux** : saturé par un fluide newtonien
- * **Sel monovalent** : Na^+ , Cl^-
- * **Gonflement osmotique** : forces électrostatiques prédominantes
- * **Phase solide** : élastique

• Inconnues

Vitesse du fluide	\mathbf{v}	Pression	p	
Potentiel électrique	Φ	Cations	c^+	Anions c^-
Déplacement solide	\mathbf{u}			

• Changement de variables

* **Solution** \rightleftharpoons **Bulk**

solution	bulk
c^+, c^-	c_b
Φ	ψ_b
p	p_b

$$\Phi = \underbrace{\varphi}_{\text{double couche}} + \underbrace{\psi_b}_{\text{courant}}$$

$$c^\pm = c_b \exp\left(\mp \frac{F \varphi}{RT}\right)$$

* **Pression du bulk**

$$p_b = p - \underbrace{2RT \left(\frac{c^+ + c^-}{2} - c_b \right)}_{\text{Pression de Donnan}} = p - 2RT c_b \left[\cosh\left(\frac{F \varphi}{RT}\right) - 1 \right]$$

Pression de Donnan

• Technique mathématique : développement multiéchelle

* **Milieu à deux échelles spatiales** : microscopique $\ell(y)$; macroscopique $L(x)$.

* **Séparation des échelles** : $\epsilon = \frac{\ell}{L} \ll 1$; x et y : variables indépendantes.

* **Milieu périodique (cellule-unité Y)**

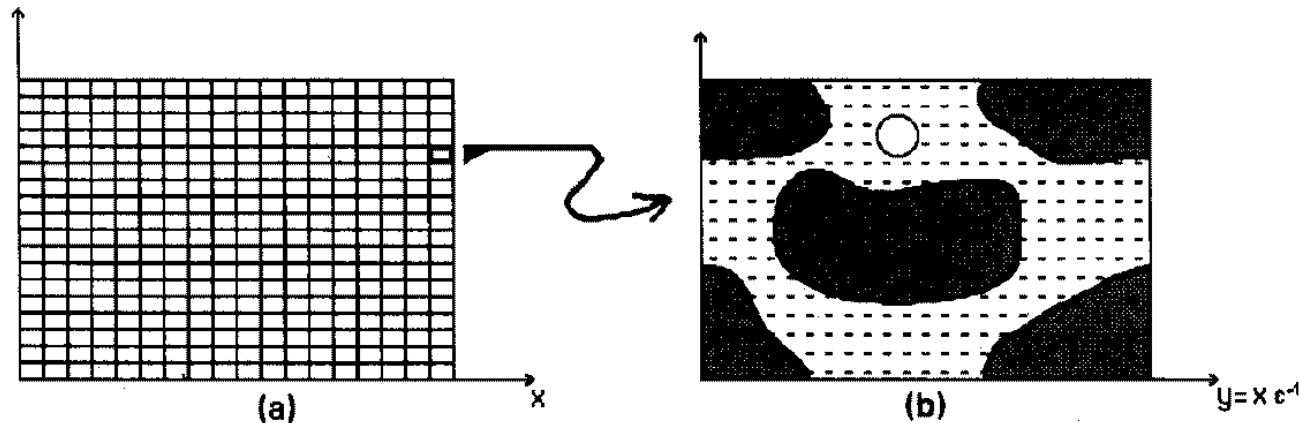


FIG. 1. (a) Macroscopic scale. (b) Microscopic scale, period Ω .

* **Dérivée spatiale** : $\nabla = \nabla_x + \frac{1}{\epsilon} \nabla_y$ (L : longueur de référence)

* **Expansion asymptotique à deux échelles** : $\theta(x, y, t) = \sum_{k=0}^{k=\infty} \epsilon^k \theta^k(x, y, t)$

* **Valeurs de référence :** θ_{ref}

$$\theta^* = \frac{\theta}{\theta_{ref}} = \mathcal{O}(1)$$

* **Mise des équations sous forme adimensionnelle**

* **Valeurs du bulk :** c_b, ψ_b, p_b

- **variables lentes : indépendantes de y à l'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^0)$**
- **continues à l'interface avec le bulk**

• Equations à résoudre

- **Equation de Poisson dans Y_f**

$$\epsilon^2 \nabla^2 (\varphi + \psi_b) = - \frac{F(c^+ - c^-)}{\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}_0}, \quad c^\pm = c_b \exp(\mp \bar{\varphi}) \quad \text{et} \quad \bar{\varphi} = \frac{F \varphi}{RT}$$

$$\mathbf{E} = -\epsilon \nabla (\varphi + \psi_b)$$

- **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**

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

(*) **Nombre de Péclet** : $\text{Pe} = \frac{v_{ref} L}{\mathcal{D}_\pm} = \mathcal{O}(\epsilon^m)$; $m = 1$ (**diffusion**); $= 0$ (+ **convection**)

• Procédure d'homogénéisation

Loi de Darcy généralisée

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}_D^0 \equiv \langle \mathbf{v}^0 - \partial \mathbf{u}^0 / \partial t \rangle &= \overbrace{\langle \mathbf{v}_p^0 - \partial \mathbf{u}^0 / \partial t \rangle}^{\text{Darcy}} + \overbrace{\langle \mathbf{v}_c^0 \rangle}^{\text{osmose chimique}} + \overbrace{\langle \mathbf{v}_e^0 \rangle}^{\text{électro-osmose}} \\
 &= -\mathbf{K}_P \nabla_x p_b^0 - \mathbf{K}_C \nabla_x c_b^0 - \mathbf{K}_E \nabla_x \bar{\psi}_b^0
 \end{aligned}$$

* **Valeur moyenne :** $\langle \theta_f \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_f} \theta_f \, dY$

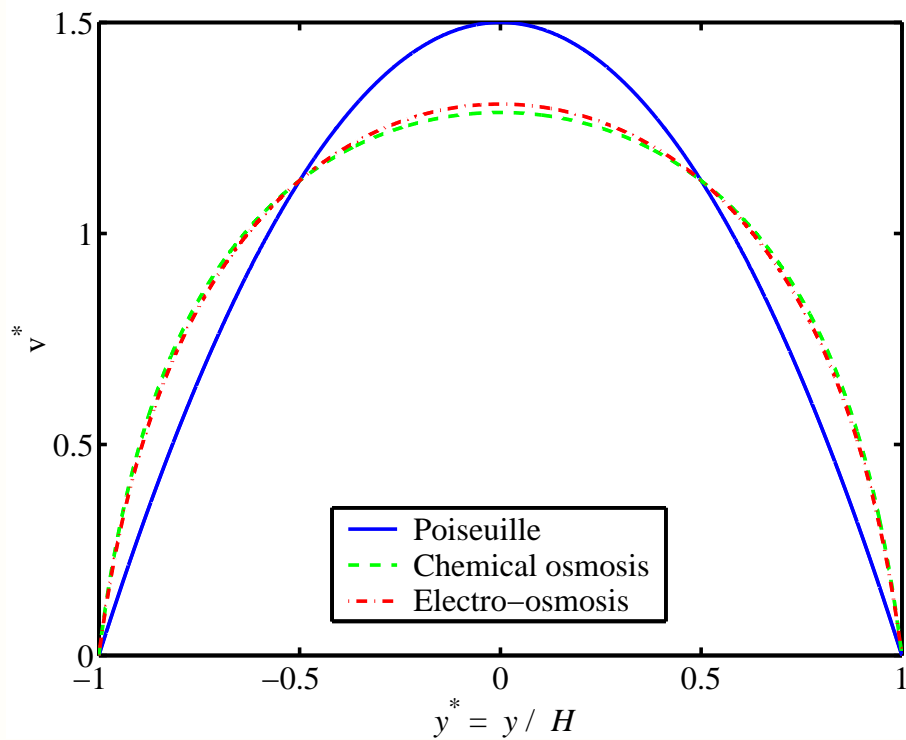
* **Problèmes de fermeture pour calculer K_P, K_C, K_E**

$m = 1$: K_P = perméabilité hydraulique ; $m = 0$: K_P inclut des effets électrovisqueux.

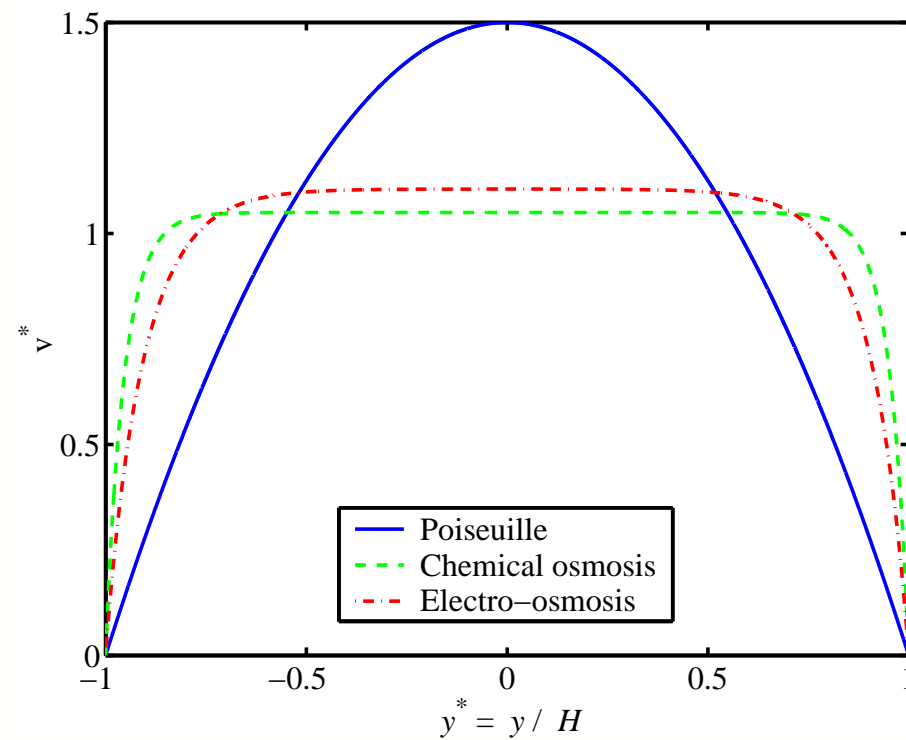
* **Exemple : 2 plaques parallèles distantes de $2H$**

– **Profils de vitesse**

– **Coefficients K_P, K_C, K_E**



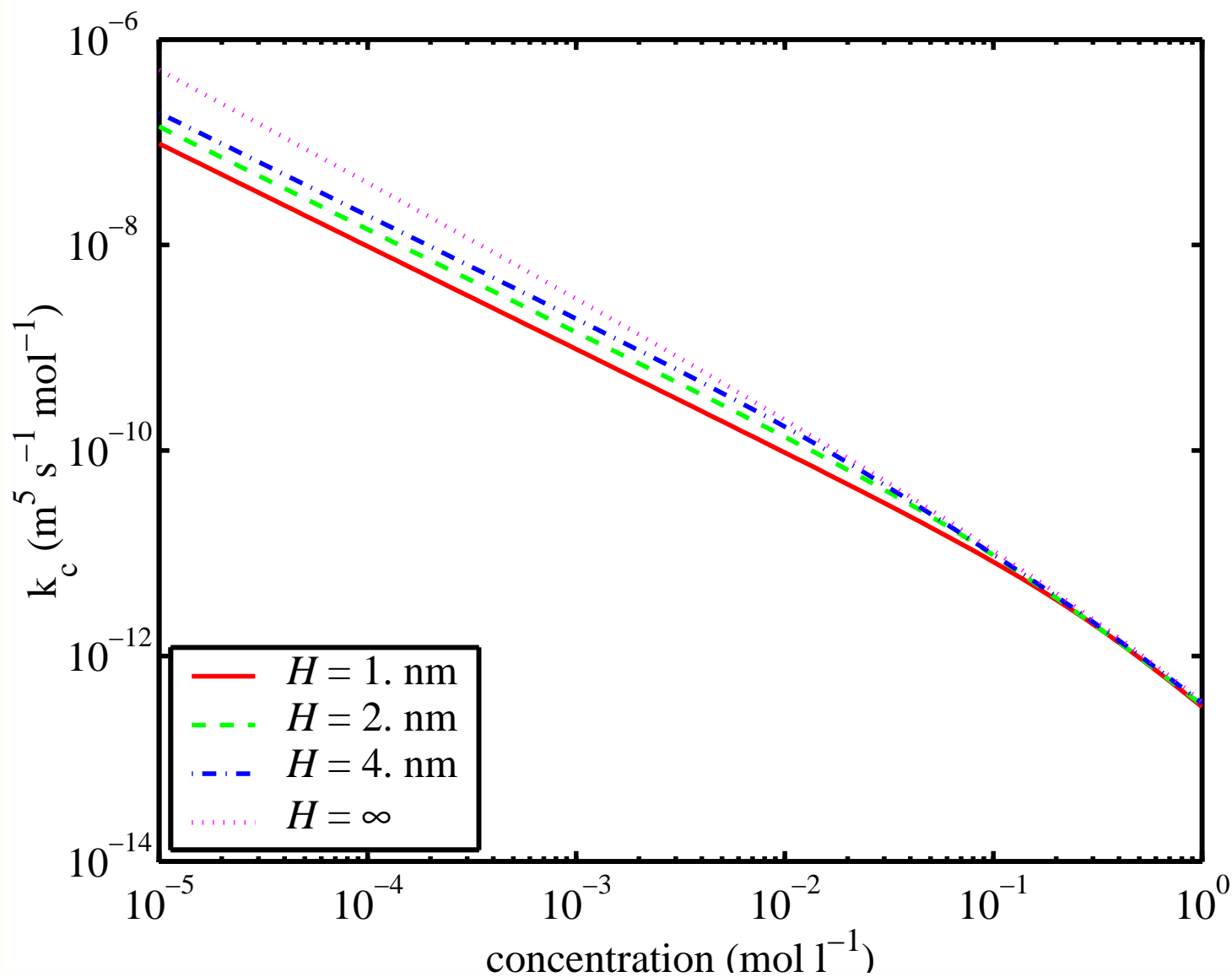
$$H/L_D = 1.$$



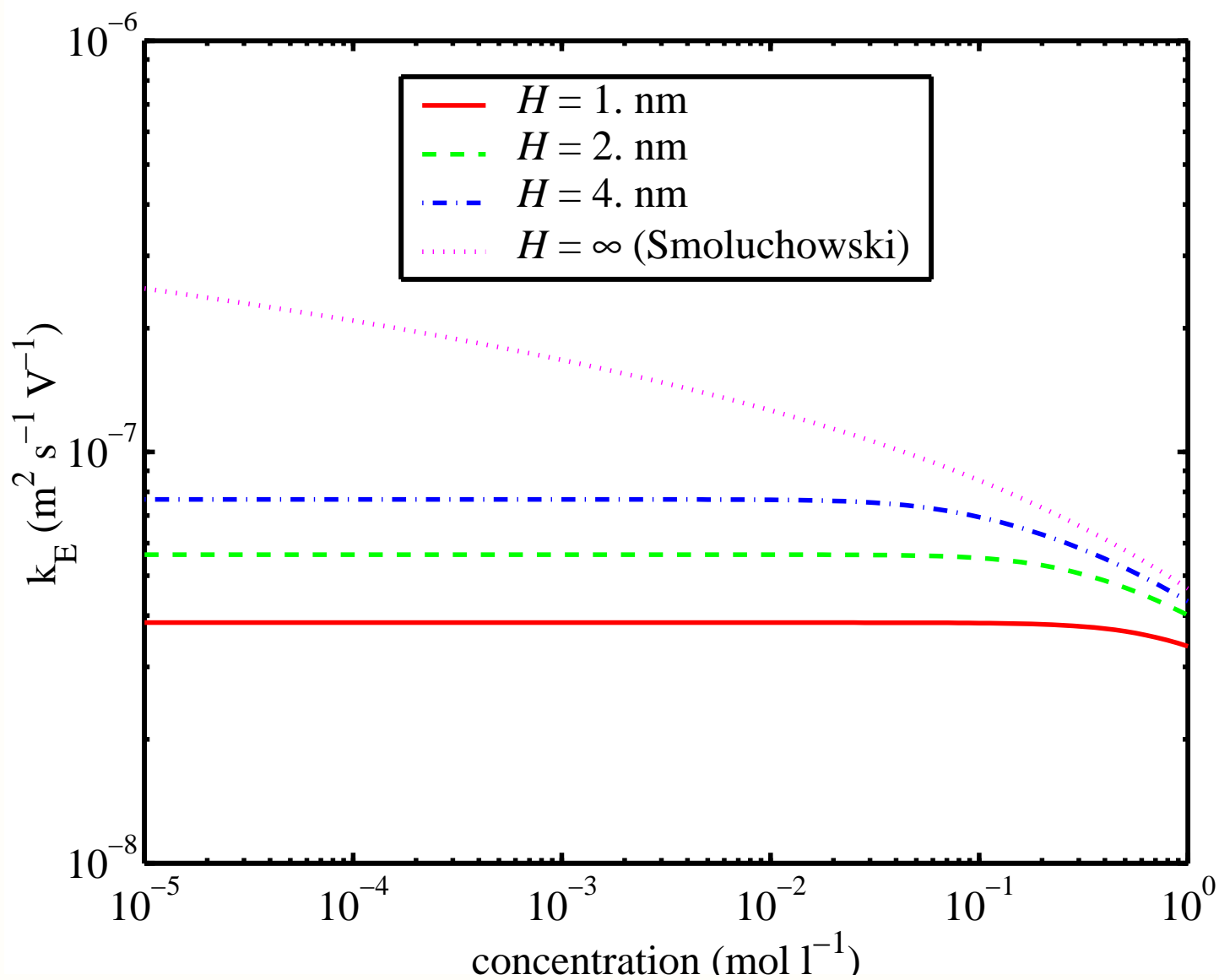
$$H/L_D = 10.$$

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 RT}{2 F^2 c_b}} :$$

Longueur de Debye



Coefficient d'osmose chimique K_C



Coefficient d'électro-osmose K_E

Transport des ions

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

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

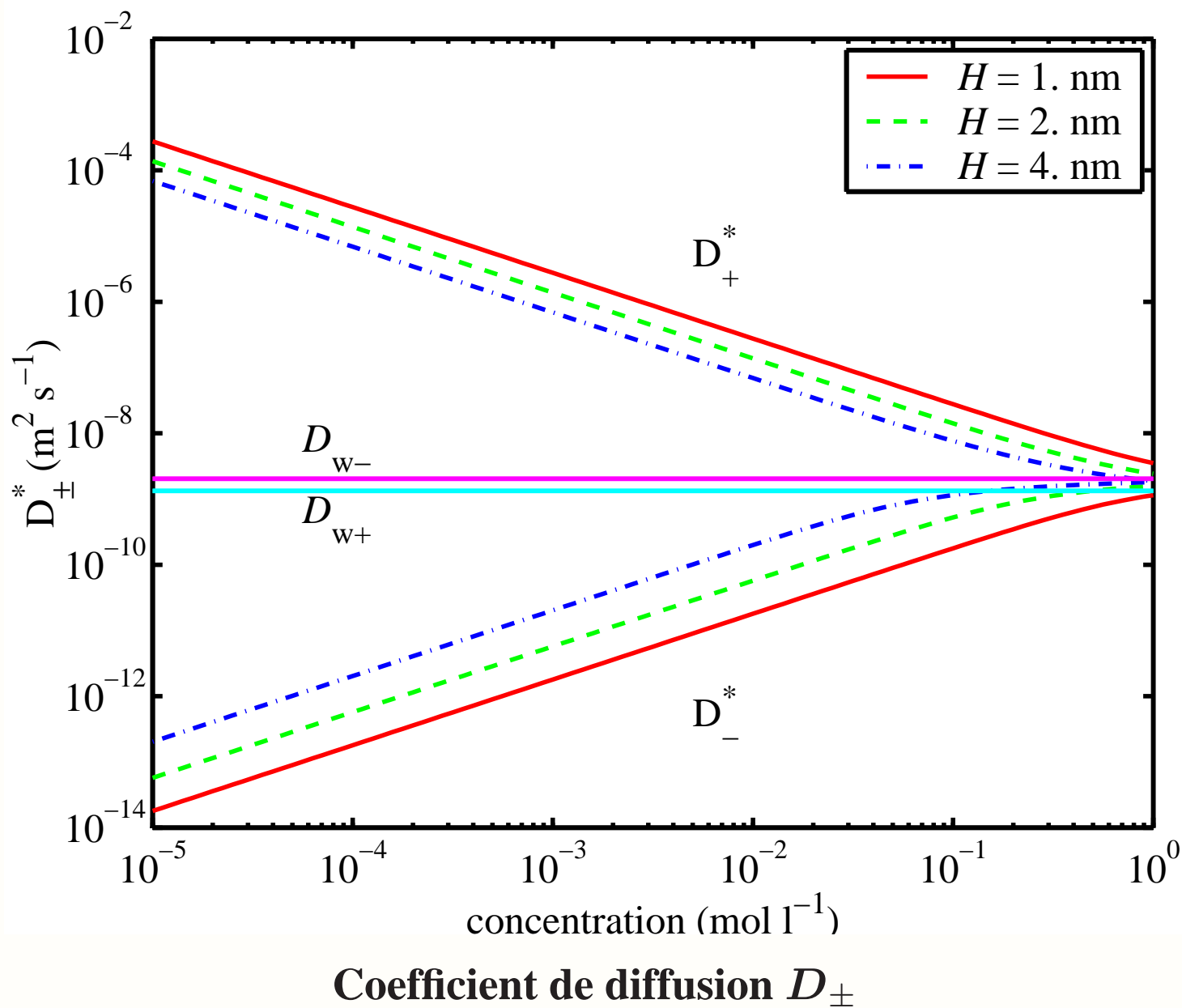
* **Problèmes de fermeture pour f^{\pm} et $h_{p,c,e}^{\pm}$**

$$G_{\pm}^* = \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \rangle^f ; \quad G_{\pm}^* \mathbf{v}_{\pm}^{*0} = \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \mathbf{v}^0 \rangle$$

$$D_{\pm}^p = \mathcal{D}_{\pm} \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) \nabla_y h_p^{\pm} \rangle^f ; \quad D_{\pm}^{c,e} = \mathcal{D}_{\pm} \langle \exp(\mp \bar{\varphi}^0) (\mathbf{I} + \nabla_y f^{\pm} + \nabla_y h_{c,e}^{\pm}) \rangle^f$$

* **Exemple : deux plaques parallèles distantes de $2H$**

- $D_{\pm}^c = D_{\pm}^e$
- $D_{\pm}^p = 0$



* **Formulation alternative**

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

– **Relations de réciprocité de Onsager**

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

– **Symétrie des coefficients ?**

Si le potentiel électrochimique ne fluctue pas au travers des micropores :

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

Equilibre mécanique

* Pression de disjonction π^0

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

pression de Donnan tenseur de Maxwell

* Tenseur des contraintes totales

$$\nabla_x \cdot \sigma_t^0 = 0$$

* Principe de Biot-Terzaghi modifié

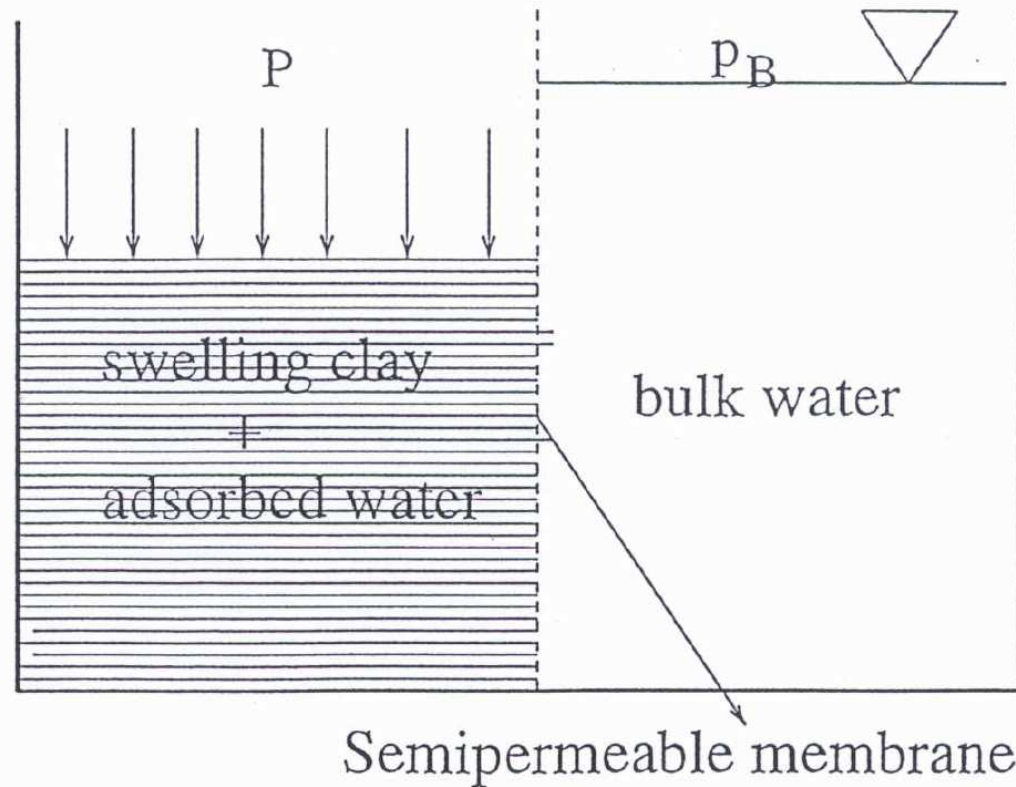
$$\sigma_t^0 = \underbrace{-p_b^0 (\phi \mathbf{I} - \langle \mathbf{c}_s \cdot \mathcal{E}_y(\zeta) \rangle)}_{\text{pression du pore}} + \underbrace{\langle \mathbf{c}_s \cdot (\mathbf{I} + \mathcal{E}_y(\xi)) \rangle \cdot \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0)}_{\text{contraintes de contact}} - \underbrace{\Pi^0}_{\text{tenseur de gonflement}}$$

* Tenseur de gonflement

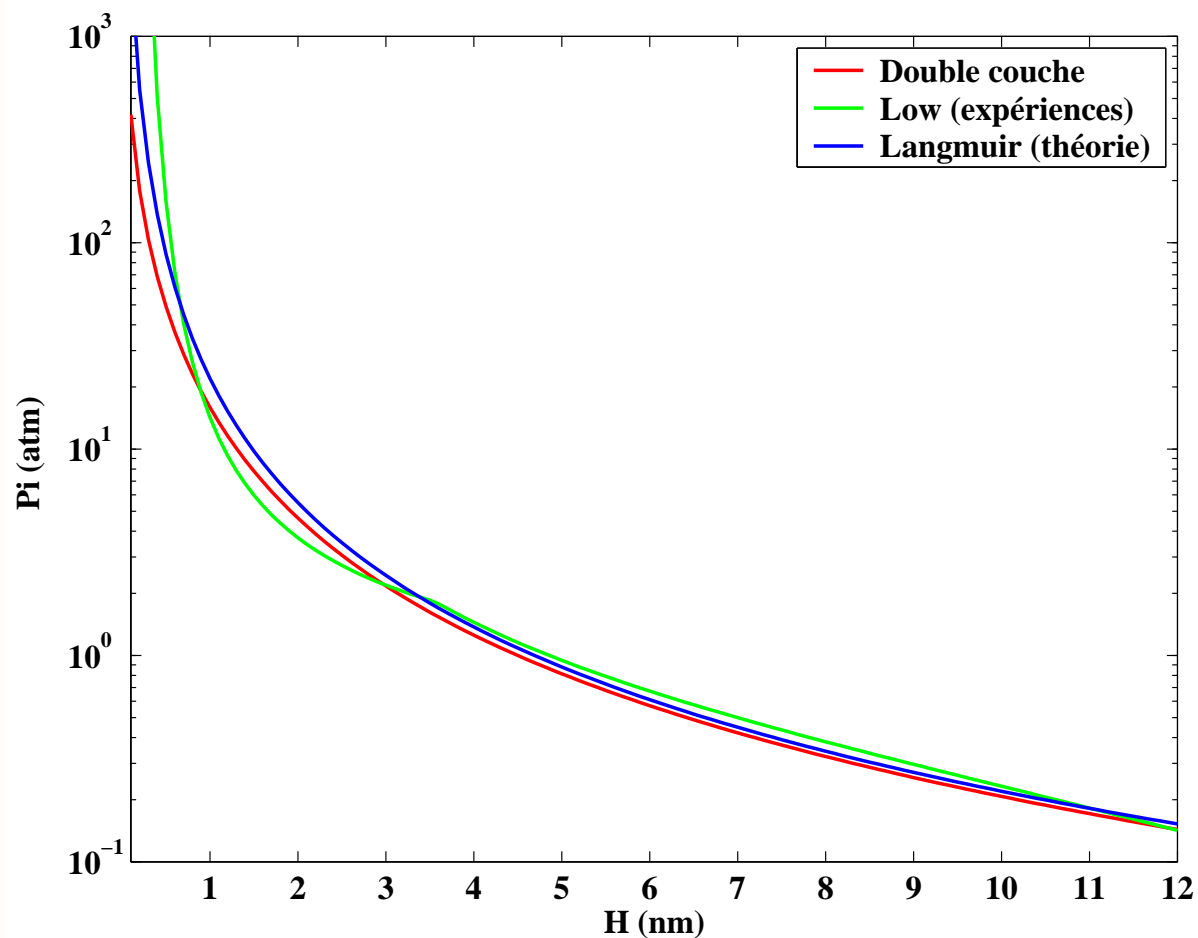
$$\Pi^0 = \underbrace{-(1 - \phi) \langle \mathbf{c}_s \cdot \mathcal{E}_y(\mathbf{u}_\pi^1) \rangle^s}_{\text{solide}} + \underbrace{\phi \langle \pi^0 \rangle^f}_{\text{fluide}}$$

* Expérience de Philip Low

- Particules d'argile alignées sans contact
- Pas de contrainte de contact dans la loi macroscopique



$$\Pi = (P - p_b) I$$



$$C = 10^{-4} \text{ mole/l}$$

Formule de Langmuir

$$\Pi \simeq \frac{\pi^2}{2} \epsilon \epsilon_0 \left(\frac{RT}{FH} \right)^2$$

• Equations à la mésoéchelle dans les particules d'argile

* **Inconnues :** \mathbf{u} , p_b , c_b , ψ_b , ϕ (“b” \equiv valeur du *bulk*)

* **Modèle à deux échelles** ($\nabla \equiv \nabla_x$; l'exposant “0” est sous-entendu)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_t = 0$$

Equilibre mécanique

$$\boldsymbol{\sigma}_t = -p_b \mathbf{I} + \mathbf{C} \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\Pi}$$

Principe de Terzaghi

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_D + \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = 0$$

Conservation masse totale

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = (1 - \phi) \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$$

Conservation fluide

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi G_c c_b) + \nabla \cdot \left(2 c_b \mathbf{v}_D + \phi G_c c_b \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{J}_d \right) = 0$$

Transport des ions

$$\nabla \cdot \mathbf{I}_e = 0$$

Bilan charge électrique

$$\mathbf{v}_D = -L_{PP} \nabla p_b - RT L_{PC} \nabla \ln c_b - L_{PE} \nabla \psi_b$$

Loi de Darcy

$$\mathbf{J}_d = -L_{CP} \nabla p_b - RT L_{CC} \nabla \ln c_b - L_{CE} \nabla \psi_b$$

Loi de Fick

$$\mathbf{I}_e = -L_{EP} \nabla p_b - RT L_{EC} \nabla \ln c_b - L_{EE} \nabla \psi_b$$

Loi d'Ohm

3. De la mésoéchelle à la macroéchelle

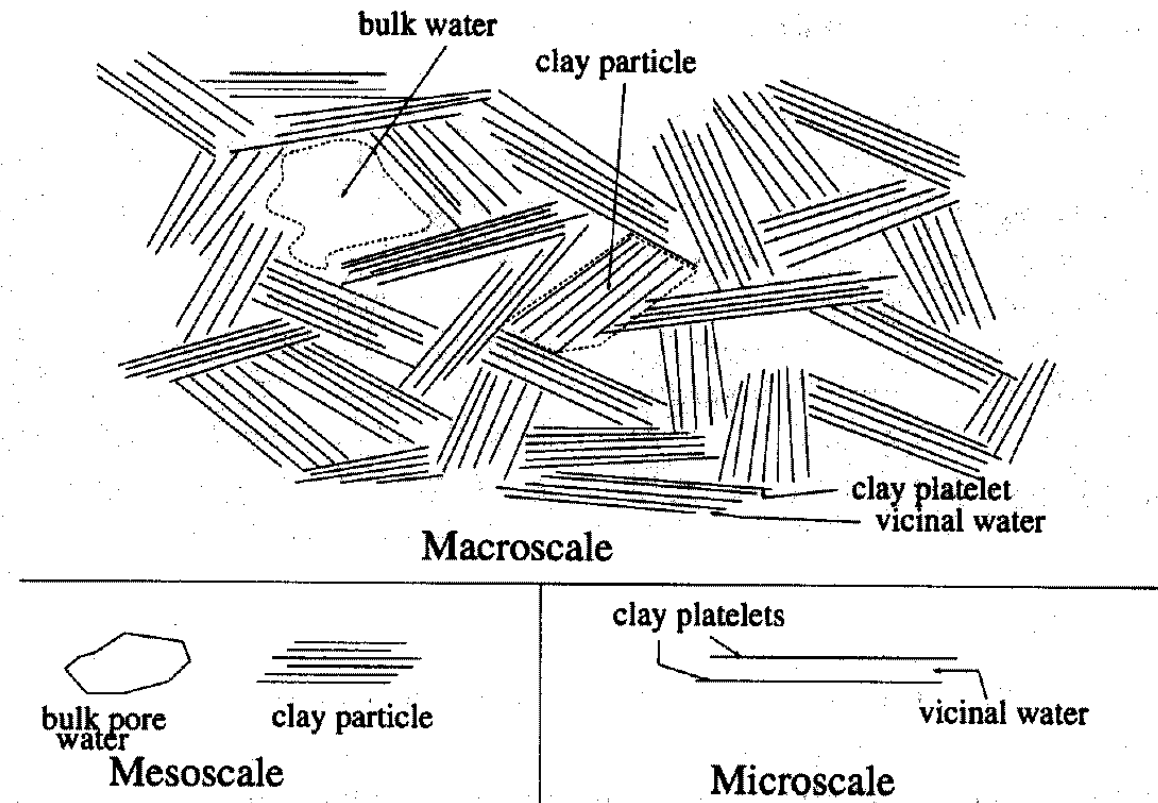


Fig. 1. Three-scale model for clay.

“Mésoéchelle”



“Macroéchelle”

- **Equations dans les macropores (fissures)**

- * **Fluide (Stokes)**

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f = 0 \\ \boldsymbol{\sigma}_f = -P_f \mathbf{I} + 2\mu_f \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{V}_f) \\ \nabla \cdot \mathbf{V}_f = 0 \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega_f$$

- * **Equations de transport** $C_f^+ = C_f^- \equiv C_f$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \frac{\partial C_f}{\partial t} + \nabla \cdot (2 C_f \mathbf{V}_f + \mathbf{J}_f) = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{I}_f = 0 \\ \mathbf{J}_f = -2 (D_f \nabla C_f + \Delta_f C_f \nabla \bar{\Psi}_f) \\ \mathbf{I}_f = -2 F (\Delta_f \nabla C_f + D_f C_f \nabla \bar{\Psi}_f) \\ D_f = \frac{\mathcal{D}_{w+} + \mathcal{D}_{w-}}{2} \quad \text{et} \quad \Delta_f = \frac{\mathcal{D}_{w+} - \mathcal{D}_{w-}}{2} \end{array} \right.$$

Transport du sel

Conservation de la charge

avec $\bar{\Psi}_f = \frac{F \Psi_f}{RT}$

• **Conditions à l'interface : sur Γ_{fs}**

* **Continuité**

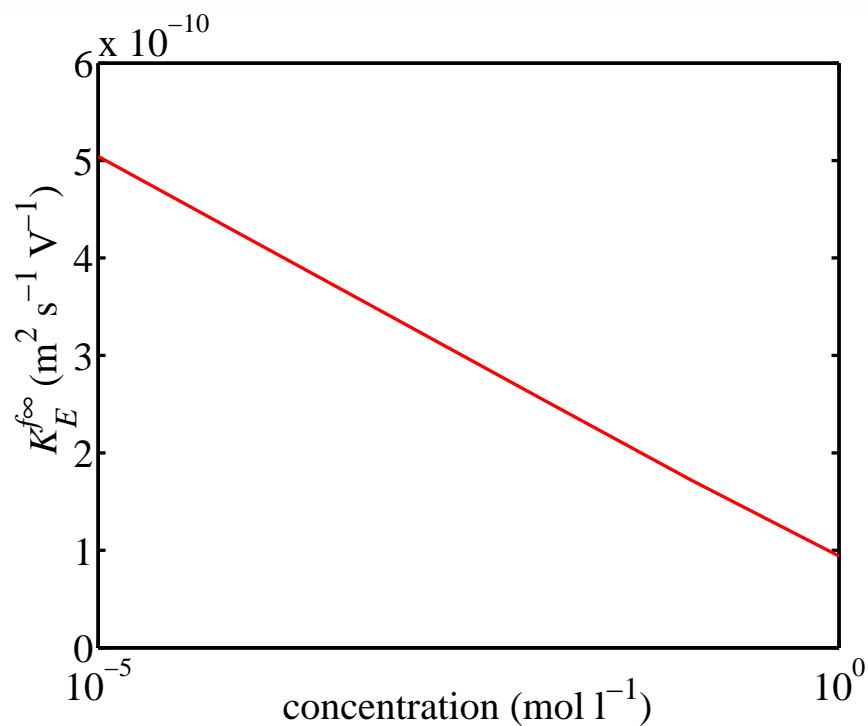
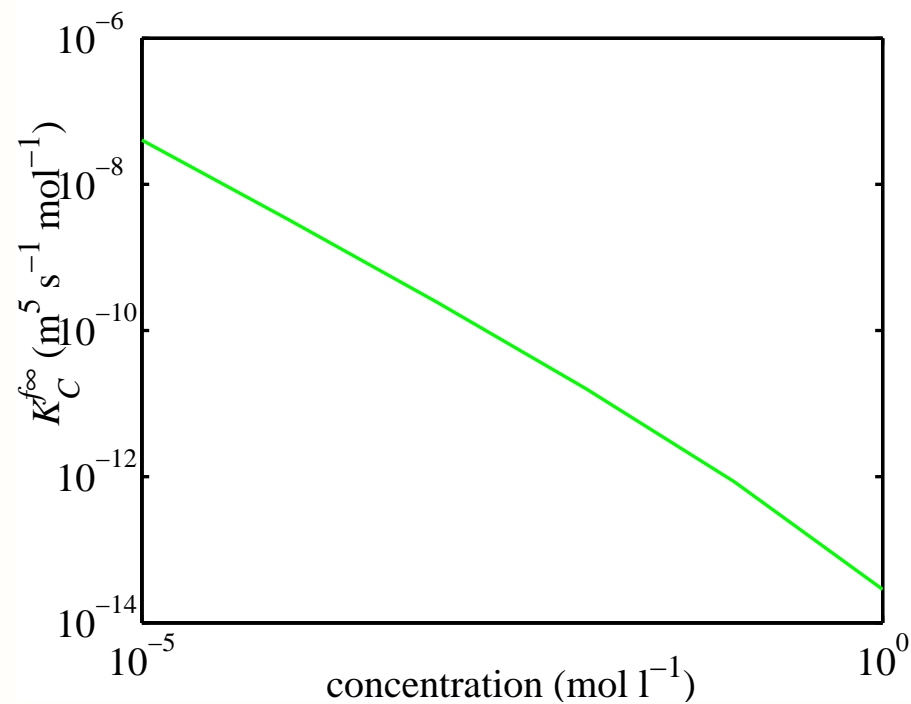
$$\left(\mathbf{V}_{fs} = \mathbf{V}_f - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)$$

	Particules		Macropores
pression	: p_b	=	P_f
concentration	: c_b	=	C_f
potentiel électrique	: ψ_b	=	Ψ_f
flux liquide	: $\mathbf{v}_D \cdot \mathbf{N}$	=	$\mathbf{V}_{fs} \cdot \mathbf{N}$
flux diffusif sel	: $\mathbf{J}_d \cdot \mathbf{N}$	=	$\mathbf{J}_f \cdot \mathbf{N}$
charge	: $\mathbf{I}_e \cdot \mathbf{N}$	=	$\mathbf{I}_f \cdot \mathbf{N}$
contrainte	: $\boldsymbol{\sigma}_t \cdot \mathbf{N}$	=	$\boldsymbol{\sigma}_f \cdot \mathbf{N}$

* Glissement

- Interface électriquement chargée
- Double couche électrique très fine à l'interface
- Glissement de la vitesse tangentielle

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{v}_D - \mathbf{V}_{fs}) \cdot \boldsymbol{\tau} &= \mathbf{V}_{match} \cdot \boldsymbol{\tau} \\
 \mathbf{V}_{match} &= -K_E^{f\infty} \nabla \Psi_f - K_C^{f\infty} \nabla C_f \\
 K_E^{f\infty} &= \frac{\tilde{\varepsilon} \tilde{\varepsilon}_0 \zeta}{\mu_f} && \text{(Smoluchovski)} \\
 K_C^{f\infty} &= \frac{8RTL_D^2}{\mu_f} \ln \cosh\left(\frac{\zeta}{4}\right) && \text{(Derjaguin)}
 \end{aligned}$$

**Electro-osmose****Osmose inverse**

$$\sigma = -0.2 C \text{ m}^{-2}$$

• Modèle à double porosité

* Homogénéisation périodique

$$\left\| \begin{array}{ll} x & \text{macroéchelle } (L) \quad \text{variable lente} \\ y & \text{microéchelle } (\ell) \quad \text{variable rapide} \end{array} \right.$$

$$\epsilon = \frac{\ell}{L} \ll 1$$

$$\nabla = \frac{1}{\epsilon} \nabla_y + \nabla_x$$

$$\text{Cellule-unité périodique: } Y = Y_f \cup Y_s$$

* Dans les particules d'argile :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v}_D^1 \\ \mathbf{J}_c^1 \\ \mathbf{I}_e^1 \end{pmatrix} = -\epsilon^2 \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{PP} & \mathbf{L}_{PC} & \mathbf{L}_{PE} \\ \mathbf{L}_{CP} & \mathbf{L}_{CC} & \mathbf{L}_{CE} \\ \mathbf{L}_{EP} & \mathbf{L}_{EC} & \mathbf{L}_{EE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_y p_b^0 \\ RT \nabla_y \ln c_b^0 \\ \nabla_y \psi_b^0 \end{pmatrix}$$

• Transport des ions

* Transport du sel

$$2 \frac{\partial}{\partial t} (n_f C_f^0) + \nabla_x \cdot \left[2 C_f^0 \mathbf{V}_{Df}^0 - \left(\mathbf{D}_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + \Delta_f^{eff} C_f^0 \nabla \bar{\Psi}_f^0 \right) \right] = - \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi^0 G_c c_b^0 \rangle$$

où $\mathbf{D}_f^{eff} \equiv \mathcal{D}_f \Lambda$ $\Delta_f^{eff} \equiv \Delta_f \Lambda$
 avec $\Lambda = \langle \mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f} \rangle$: **tenseur de tortuosité**
 où \mathbf{f} est solution de :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla^2 \mathbf{f} & = 0 \quad \text{dans } Y_f \\ -\mathbf{N} \cdot (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}) & = 0 \quad \text{sur } \partial Y_{fs}. \\ C_f^1 & = \mathbf{f} \cdot \nabla_x C_f^0 \quad \text{à une fonction près de } \mathbf{x} \text{ et } t. \end{array} \right.$$

(diffusion linéaire dans les macropores avec des particules imperméables)

* Conservation de la charge électrique

$$\nabla_x \cdot \left(\Delta_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + C_f^0 \mathbf{D}_f^{eff} \nabla_x \bar{\Psi}_f^0 \right) = 0$$

• Loi de Darcy

* **Glissement à la paroi :**

$$\mathbf{V}_{fs}^0 \cdot \boldsymbol{\tau} = \left[K_E^{f\infty} (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}) \nabla_x \Psi_f^0 + K_C^{f\infty} (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}) \nabla_x C_f^0 \right] \cdot \boldsymbol{\tau} \quad \text{sur } \partial Y_{fs}.$$

* **Linéarité de Stokes :** $\mathbf{V}^0 = \mathbf{V}_p^0 + \mathbf{V}_e^0 + \mathbf{V}_c^0$

* **Problème en \mathbf{V}_p^0 :** **Darcy classique**

* **Problème en \mathbf{V}_e^0 (ou \mathbf{V}_c^0) :**

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mu_f \Delta_{yy} \mathbf{V}_e^0 - \nabla_y P_e^1 = 0 & \nabla_y \cdot \mathbf{V}_e^0 = 0 \quad \text{dans } Y_f \\ \mathbf{V}_e^0 \cdot \mathbf{N} = 0 & \mathbf{V}_e^0 \cdot \boldsymbol{\tau} = -K_E^{f\infty} (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}) \nabla_x \Psi_f^0 \cdot \boldsymbol{\tau} \quad \text{sur } \partial Y_{fs} \end{array} \right.$$

* **Solution :** $\mathbf{V}_e^0 = -K_E^{f\infty} (\mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{f}) \nabla_x \Psi_f^0$

* **Loi de Darcy :**

$$\mathbf{V}_{Df}^0 = -K_P^f \nabla_x P_f^0 - K_C^f \nabla_x C_f^0 - K_E^f \nabla_x \Psi_f^0$$

$$\mathbf{K}_C^f = K_C^{f\infty} \Lambda \quad \mathbf{K}_E^f = K_E^{f\infty} \Lambda \quad \text{(Smoluchovski)}$$

• Conservation de la masse totale

* **Intégration de la conservation de la masse dans les macropores :**

$$\begin{aligned} \langle \nabla_x \cdot \mathbf{V}_f^0 \rangle &= - \langle \nabla_y \cdot \mathbf{V}_f^1 \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \mathbf{V}_f^1 \cdot \mathbf{N} d\Gamma = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \left(\frac{\partial \mathbf{u}^1}{\partial t} + \mathbf{v}_D^1 \right) \cdot \mathbf{N} d\Gamma = \\ &= \frac{1}{|Y|} \int_{Y_s} \nabla_y \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{u}^1}{\partial t} + \mathbf{v}_D^1 \right) dY = - \frac{1}{|Y|} \int_{Y_s} \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} dY = - \left\langle \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \right\rangle \end{aligned}$$

\mathbf{N} : normale extérieure aux particules ; n_f : fraction volumique de macropores.

* **En introduisant la vitesse de Darcy macroscopique :** $\mathbf{V}_{Df}^0 = \langle \mathbf{V}_f^0 \rangle - n_f^0 \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t}$

$$\nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 = 0$$

• Equilibre mécanique

* Intégration des équations d'équilibre sur la cellule-unité

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot \langle \boldsymbol{\sigma}_t^0 \rangle &= \nabla_x \cdot \langle \boldsymbol{\sigma}_e^0 \rangle - \nabla_x \langle p_b^0 \rangle - \nabla_x \cdot \langle \boldsymbol{\Pi}^0 \rangle = -\frac{1}{|Y|} \int_{Y_s} \nabla_y \cdot \boldsymbol{\sigma}_t^1 dY = \\ &= -\frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \boldsymbol{\sigma}_t^1 \mathbf{N} d\Gamma = -\frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{fs}} \boldsymbol{\sigma}_f^1 \mathbf{N} d\Gamma = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_f} \nabla_y \cdot \boldsymbol{\sigma}_f^1 dY = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_f} \nabla_x P_f^0 dY = \langle \nabla_x P_f^0 \rangle \end{aligned}$$

* Equation d'équilibre mécanique

$$\nabla_x \cdot \left[\left(1 - n_f^0\right) \langle \boldsymbol{\sigma}_e^0 - p_b^0 \mathbf{I} - \boldsymbol{\Pi}^0 \rangle^s - n_f^0 P_f^0 \mathbf{I} \right] = 0$$

$$\boldsymbol{\sigma}_e^0 = \mathbf{C} (\boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}_y(\mathbf{u}^1))$$

* Condition à la limite mécanique sur ∂Y_{fs}

$$\mathbf{C} [\boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}_y(\mathbf{u}^1)] \mathbf{N} = \boldsymbol{\Pi}^0 \mathbf{N}$$

• Bilan de masse pour la phase fluide

* **A l'ordre $\mathcal{O}(1)$:**

$$\frac{\partial n_f^0}{\partial t} - (1 - n_f^0) \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} = - \left\langle \frac{1}{1 - \phi^0} \frac{\partial \phi^0}{\partial t} \right\rangle$$

qui combinée avec la conservation de la masse totale donne :

$$\boxed{\frac{\partial n_f^0}{\partial t} + (1 - n_f^0) \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 = - \left\langle \frac{1}{1 - \phi^0} \frac{\partial \phi^0}{\partial t} \right\rangle}$$

n_f^0 : fraction volumique de macropores

ϕ^0 : porosité interne des particules

Récapitulation du modèle à double porosité

$\nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}_T^0 = 0$	Equilibre mécanique
$\boldsymbol{\sigma}_T^0 = (1 - n_f^0) \left(\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) + \mathbf{C} \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^1) \rangle^s - \langle p_b^0 \rangle^s \mathbf{I} - \langle \boldsymbol{\Pi}^0 \rangle^s \right) - n_f^0 P_f^0 \mathbf{I}$	
$\nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 = 0$	Conservation masse totale
$\mathbf{V}_{Df}^0 = -\mathbf{K}_P^f \nabla_x P_f^0 - \mathbf{K}_C^f \nabla_x C_f^0 - \mathbf{K}_E^f \nabla_x \Psi_f^0$	
$\frac{\partial n_f^0}{\partial t} + (1 - n_f^0) \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 = - \left\langle \frac{1}{1 - \phi^0} \frac{\partial \phi^0}{\partial t} \right\rangle$	Conservation masse fluide
$2 \frac{\partial}{\partial t} (n_f^0 C_f^0) + \nabla_x \cdot \mathbf{J}_F^0 = - \frac{\partial}{\partial t} \langle \phi^0 G_c c_b^0 \rangle$	Conservation masse espèces
$\mathbf{J}_F^0 = 2 C_f^0 \mathbf{V}_{Df}^0 - 2 \left(\mathbf{D}_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + \Delta_f^{eff} C_f^0 \nabla_x \bar{\Psi}_f^0 \right)$	
$\nabla_x \cdot \mathbf{I}_F^0 = 0$	Conservation de la charge
$\mathbf{I}_F^0 = -2 F \left(\Delta_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + \mathbf{D}_f^{eff} C_f^0 \nabla_x \bar{\Psi}_f^0 \right)$	

et dans les particules d'argile

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \nabla_y \cdot (\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_y(\mathbf{u}^1)) - \nabla_y p_b^0 - \nabla_y \cdot \boldsymbol{\Pi}^0 = 0 \\
 \nabla_y \cdot \mathbf{v}_D^1 + \nabla_y \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^1}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \\
 \frac{\partial \phi^0}{\partial t} - (1 - \phi^0) \nabla_y \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^1}{\partial t} = (1 - \phi^0) \nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} \\
 \frac{\partial}{\partial t} (\phi^0 G_c c_b^0) + \nabla_y \cdot \mathbf{J}_d^1 + 2 \nabla_y \cdot (c_b^1 \mathbf{v}_D^1) = 0 \\
 \nabla_y \cdot \mathbf{I}_e^1 = 0 \\
 \mathbf{v}_D^1 = -L_{PP} \nabla_y p_b^0 - L_{PC} \nabla_y c_b^0 - L_{PE} \nabla_y \psi_b^0 \\
 \mathbf{J}_d^1 = -L_{CP} \nabla_y p_b^0 - L_{CC} \nabla_y c_b^0 - L_{CE} \nabla_y \psi_b^0 \\
 \mathbf{I}_e^1 = -L_{EP} \nabla_y p_b^0 - L_{EC} \nabla_y c_b^0 - L_{EE} \nabla_y \psi_b^0
 \end{array} \right.$$

avec les conditions limites suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \mathbf{C} (\boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}_y(\mathbf{u}^1)) \mathbf{N} = \boldsymbol{\Pi}^0 \mathbf{N} \\
 p_b^0 = P_f^0 \quad c_b^0 = C_f^0 \quad \psi_b^0 = \Psi_f^0
 \end{array} \right.$$

• Modèle à trois échelles quasi permanent

* Equilibre instantané entre les “particules” and les “macropores”

$$p_b^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \equiv P_f^0(\mathbf{x}, t); c_b^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \equiv C_f^0(\mathbf{x}, t); \psi_b^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \equiv \Psi_f^0(\mathbf{x}, t); \boxed{\phi^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = ???}$$

* Fermeture pour l'équilibre mécanique

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}^1)) - \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \boldsymbol{\Pi}^0 = 0 & \text{dans } Y_s \\ \mathbf{C} [\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}^1)] \mathbf{N} = \boldsymbol{\Pi}^0 \mathbf{N} & \text{sur } \partial Y_{fs} \end{cases}$$

$$\mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^0(\mathbf{x}, t)) + \mathbf{u}_{\pi}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) + \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$$

$$\begin{array}{l|l} \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\xi})) = 0 & \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}_{\pi}^1)) = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \boldsymbol{\Pi}^0 \text{ dans } Y_s \\ (\mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\xi})) \mathbf{N} = -\mathbf{C} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) \mathbf{N} & \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}_{\pi}^1) \mathbf{N} = \boldsymbol{\Pi}^0 \mathbf{N} \text{ sur } \partial Y_{fs} \end{array}$$

* Décomposition de Terzaghi pour l'approximation quasi stationnaire

$$\boldsymbol{\sigma}_T^0 = -P_f^0 \mathbf{I} + \mathbf{C}^{eff} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^0) - \boldsymbol{\Pi}^{eff}$$

* Propriétés homogénéisées

$$\mathbf{C}^{eff} \equiv \langle \mathbf{C} [\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\boldsymbol{\xi})] \rangle \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\Pi}^{eff} \equiv \langle \boldsymbol{\Pi}^0 - \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}_{\pi}^1) \rangle$$

- **Tenseur macroscopique de gonflement Π^{eff}**

- * **Problème de fermeture pour \mathbf{u}_π^1**

$$\text{Si } \Pi^0 = \Pi^0 \left(C_f^0(\mathbf{x}, t), \phi^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \right)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_y \cdot (C \mathcal{E}_y(\mathbf{u}_\pi^1)) = \frac{\partial \Pi^0}{\partial \phi^0} \nabla_y \phi^0 \quad \text{dans } Y_s \\ C \mathcal{E}_y(\mathbf{u}_\pi^1) N = \Pi^0 N \quad \text{sur } \partial Y_{fs} \end{array} \right.$$

- * **Equation pour la porosité interne des particules ϕ^0**

$$\frac{1}{1 - \phi^0} \frac{\partial \phi^0}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}^0) + (\nabla_y \cdot \boldsymbol{\xi}) : \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{E}_x(\mathbf{u}^0) + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla_y \cdot \mathbf{u}_\pi^1)$$

- * **Tenseur de gonflement Π^{eff}**

$$\Pi^{eff} \equiv (1 - n_f^0) \langle \Pi^0 - C \mathcal{E}_y(\mathbf{u}_\pi^1) \rangle^s$$

• Conclusion: modèle à double porosité quasi stationnaire

$\nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}_T^0 = 0$	Equilibre mécanique
$\boldsymbol{\sigma}_T^0 = -P_f^0 \mathbf{I} + \mathbf{C}^{eff} \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) - \Pi^{eff}$	Principe de Terzaghi
$\nabla_x \cdot \frac{\partial \mathbf{u}^0}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 = 0$	Conserv. masse totale
$\mathbf{V}_{Df}^0 = -\mathbf{K}_P^f \nabla_x P_f^0 - \mathbf{K}_C^f \nabla_x C_f^0 - \mathbf{K}_E^f \nabla_x \Psi_f^0$	Loi de Darcy
$\frac{\partial n_f^0}{\partial t} + (1 - n_f^0) \nabla_x \cdot \mathbf{V}_{Df}^0 + \boldsymbol{\alpha} : \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\varepsilon}_x(\mathbf{u}^0) = - \left\langle \nabla_y \cdot \frac{\partial \mathbf{u}_\pi^1}{\partial t} \right\rangle$	Conserv. fluide
$\frac{\partial}{\partial t} \left[\left(2n_f^0 + \langle \phi^0 G_c \rangle \right) C_f^0 \right] + \nabla_x \cdot \left(2C_f^0 \mathbf{V}_{Df}^0 + \mathbf{J}_F^0 \right) = 0$	Transport sel
$\mathbf{J}_F^0 = - \left(\mathbf{D}_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + \Delta_f^{eff} C_f^0 \nabla_x \bar{\Psi}_f^0 \right)$	Loi de Fick
$\nabla_x \cdot \mathbf{I}_F^0 = 0$	Conserv. charge électrique
$\mathbf{I}_F^0 = -2F \left(\Delta_f^{eff} \nabla_x C_f^0 + \mathbf{D}_f^{eff} C_f^0 \nabla_x \bar{\Psi}_f^0 \right)$	Loi d'Ohm

+ le problème précédent pour \mathbf{u}_π^1 et ϕ^0 dans les “particules”.

References

- [1] **Christian Moyne and Márcio Murad. Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from micro/macro homogenization procedure. *International Journal of Solids and Structures*, 39:6159–6190, 2002.**
- [2] **M.A. Murad and C. Moyne. Micromechanical computational modeling of expansive porous media. *C. R. Mecanique*, 330:865–870, 2002.**
- [3] **Christian Moyne and Márcio A. Murad. A two-scale model for coupled electro-chemo-mechanical phenomena and Onsager's reciprocity relations in expansive clays: I Homogenization analysis. *Transport in Porous Media*, 62:333–380, 2006.**
- [4] **Christian Moyne and Márcio A. Murad. A two-scale model for coupled electro-chemo-mechanical phenomena and Onsager's reciprocity relations in expansive clays: II Computational validation. *Transport in Porous Media*, 63:13–56, 2006.**