

THESE

Présentée à
*L' U.F.R. DES SCIENCES ET TECHNIQUES
DE L' UNIVERSITE DE FRANCHE-COMTE*

Pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L' UNIVERSITE DE FRANCHE-COMTE
Spécialité : Mathématiques et Applications

MODELISATION ET SIMULATION NUMERIQUE POUR DES PROBLEMES DE PIEZOELECTRICITE ET DE TRANSPORT DE RADON DANS UN MILIEU POREUX PAR PHASE GAZEUSE.

Par
Rachid MAHRAOUI

Soutenue le 19 juillet 2007 devant la commission d'examen composée par

Président : **G. NAMAHA**, Professeur, ENSMM, Besançon

Rapporteurs : **M. EI HATRI**, Professeur, Ecole Supérieure de Technologie, Fès, Maroc
H. SAHBI, Professeur, Université Moulay Ismail, Meknès, Maroc

Examineurs : **D. G. CALUGARU**, Ingénieur de Recherche, Université de Franche-Comté, Besançon
M. RACILA, Lecteur, Université de Craiova, Roumanie

Directeur de thèse : **J. M. CROLET**, Professeur, Université de Franche-Comté, Besançon

A mes parents,
A mon épouse, mes frères et sœurs

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein de l'Equipe de Calcul Scientifique du Laboratoire de Mathématiques de Besançon, UMR CNRS 6623.

Je tiens avant tout à remercier Monsieur le Professeur Jean-Marie Crolet, pour avoir accepté de me diriger pendant ces années de thèse, pour sa permanente disponibilité et les nombreux conseils lors du déroulement de cette dernière.

Je remercie Messieurs Mohamed El Hatri, Professeur à l'Ecole Supérieure de Technologie de Fès (Maroc) et Hassane Sahbi, Professeur à l'Université Moulay Ismail de Meknès (Maroc) d'avoir accepté la charge de rapporteur, l'attention qu'ils ont porté à la lecture du manuscrit et leurs remarques.

Je remercie Monsieur Gwantum NAMAH, Professeur à l'ENSMM, Besançon pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de ma thèse.

J'adresse également mes remerciements à Monsieur Dan-Gabriel Calucaru, Ingénieur de recherches à l'Université de Franche-Comté pour ses conseils liés au code SETMP.

Je remercie Madame Mihaela Racila, Lecteur à l'Université de Craiova (Roumanie) pour l'attention qu'elle a portée à la lecture de ce manuscrit.

Je remercie aussi tous les collègues et amis qui m'ont apporté un soutien au cours de mes études doctorales.

Je remercie enfin toute ma famille et en particulier ma mère, mon père et mon épouse pour leur soutien moral, leur amour et leurs encouragements constants.

Table des matières

Introduction générale	3
Partie I	
Introduction	7
1. Homogénéisation d'une structure piézoélectrique et résolution numérique	9
1.1 Phase d'homogénéisation.	9
1.2 Résolution des problèmes cellulaires par la méthode des éléments finis.	22
2. Application à la structure corticale humaine	29
Discussion et conclusion	41
Bibliographie I	43
Partie II	
Introduction	47
1. Séismes et la prévision	49
1.1 Origine des séismes	49
1.2 La prévision sismique	49
1.3 Activité sismique et l'origine du gaz radon.	51
2. Mécanismes de migration d'un gaz	53
2.1 La diffusion.	53
2.2 Advection.	56
3. Mécanismes de migration de gaz sous forme des bulles.	61
4. Modélisation du transport du radon contenu dans une bulle	63
4.1 Pression interne dans la bulle	63
4.2 Vitesse de déplacement d'une bulle dans le fluide ambiant	65
4.2.1 Vitesse de déplacement d'une bulle sans oscillations	66
4.2.2 Vitesse de déplacement d'une bulle ayant des oscillations	66
4.3 Coefficient de transfert de gaz pour une bulle	69
4.4 Flux du gaz au travers de la paroi de la bulle	70
4.5 Variation du rayon de la bulle en fonction du temps	72
4.6 Résultats numériques.	75
5. Etude d'un ensemble de bulles	81
5.1 Cadre de l'étude.	81
5.2 Méthode d'étude d'un ensemble de bulles	82
5.3 Domaine de simulation	84
5.4 Simulations numériques.	84

5.4.1 Effet des rayons et du nombre de bulles.	84
5.4.2 Effet de la pression extérieure sur les bulles	92
5.4.3 Comparaison du transport de radon selon les deux modélisations	100
Conclusions	109
Bibliographie II	111
Conclusion générale	113

Introduction générale

On a étudié, dans le cadre de la théorie mathématique de l'homogénéisation, le formalisme et la résolution numérique d'un problème périodique à deux composants dont seul l'un d'eux est piézoélectrique.

On a d'abord étudié le cas d'une structure fibreuse. Ensuite on a conçu et étudié un nouvel élément fini, de type piézoélectrique, permettant la résolution des problèmes auxiliaires précédemment écrits. Enfin on a programmé la résolution de ce problème dans un cadre à deux échelles. Dans le cadre des travaux de modélisation réalisés sur l'os cortical humain au sein de l'équipe de calcul scientifique du laboratoire de mathématique, on a appliqué ces développements à cette structure osseuse. Ces résultats, obtenus à partir du travail fait lors de mon Dea, sont résumés dans la partie 1.

Mais le support financier qui m'a été accordé à l'automne 2002 correspondait en fait à un autre sujet qui est le transport de radon dans un aquifère simultanément sous forme gazeuse et sous forme dissoute. Ce sujet de recherche toujours mené au sein de l'équipe de calcul scientifique de l'UMR 6623 est présenté dans la seconde partie.

Partie I

Introduction

Le problème de la piézoélectricité peut être considéré comme une généralisation du problème de l'élasticité. En effet, un corps (céramique, polymère, ...) piézoélectrique est en fait un matériau élastique capable de coupler les énergies élastique et électrique. En d'autres termes, sous l'effet d'un champ électrique, une structure piézoélectrique est le siège de champs de déformations et de contraintes induites. Inversement, un corps piézoélectrique soumis à des efforts extérieurs est le siège de champs de déformations et de contraintes qui engendrent un champ électrique. Pour prendre en compte ce phénomène, en plus des équations fondamentales de l'élasticité et des lois de comportement traduisant les couplages élastoélectriques on introduit une équation aux dérivées partielles régissant le comportement électrique.

Le but de ce travail est d'appliquer la théorie mathématique de l'homogénéisation au problème piézoélectrique dans le cas d'une structure périodique fibreuse. Notons que cette technique consiste à remplacer un problème fortement hétérogène (dont les caractéristiques dépendent d'un petit paramètre) par un problème homogène équivalent.

Parmi les méthodes de l'homogénéisation existantes on peut citer (par exemple) : la méthode de l'énergie introduite par Tartar [7], la méthode de Γ -convergence proposée par Giorgi [4], la méthode de G -convergence [6], la méthode de H -convergence introduite par Tartar [7], la méthode de convergence à double-échelle introduite dans [1] et la méthode des développements asymptotiques, qui est utilisée dans ce travail, développée dans [2].

Dans le premier chapitre, on présente le problème de piézoélectricité et on rappelle comment on peut passer du problème fortement hétérogène périodique à un problème homogène équivalent en utilisant la technique de l'homogénéisation à double-échelle. On montre que ce problème équivalent est caractérisé par des coefficients homogènes dont le calcul nécessite la détermination de fonctions solutions sur la cellule représentative (ou cellule de base) de problèmes tridimensionnels de type piézoélectrique dont la résolution numérique nécessite le développement d'outil d'interpolation, comme par exemple un élément fini.

Dans le deuxième chapitre, on applique les résultats du chapitre 1 à une structure composite constituée de fibres unidirectionnelles noyées dans une matrice de manière périodique. On montre comment l'exploitation de certaines hypothèses que présente la cellule de base et ses constituants permet la résolution des problèmes cellulaires en dimension 2. Dans ce cas, le calcul des coefficients homogénéisés nécessite la résolution de problèmes bidimensionnels de types élastique et piézoélectrique.

En résumé, on cherche le comportement piézoélectrique d'une structure composite fibreuse. Pour la première application on montre que l'exploitation de certaines hypothèses

que peut prendre la cellule de base et ses constituants permet de résoudre les problèmes cellulaires en dimension deux. Pour la seconde application, on montre que l'utilisation des hypothèses vérifiées par la cellule de base et ses constituants permet de déterminer analytiquement les fonctions solutions des problèmes cellulaires et par suite le calcul des coefficients homogénéisés se fait aussi analytiquement.

1 Homogénéisation d'une structure piézoélectrique et résolution numérique

Introduction

Dans ce chapitre, on rappelle le problème piézoélectrique, et on introduit la méthode des développements asymptotiques [2] pour passer du problème fortement hétérogène à un problème homogène équivalent. Pour les résultats de convergence, on peut consulter par exemple [8].

Notations et préliminaires

Soient Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^n ($n = 2$ ou 3), de frontière $\partial\Omega$ suffisamment régulière. Une structure de nature périodique, de période Y , occupe ce domaine Ω .

On utilise les espaces de fonctions $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m)$ à composantes dans $L^2(\Omega)$, $H^1(\Omega)$, $H_0^1(\Omega)$ qu'on note respectivement : $\mathbf{L}^2(\Omega)$, $\mathbf{H}^1(\Omega)$, $\mathbf{H}_0^1(\Omega)$. On note par $\mathbf{C} = (c_{ijkl})$, $\mathbf{G} = (g_{ijk})$, $\mathbf{E} = (\epsilon_{ij})$ des tenseurs respectivement d'ordre 4, 3 et 2, et par $\langle F \rangle$ la moyenne sur la période Y d'une fonction F :

$$\langle F \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y F dy$$

et on introduit les espaces suivants :

$$H_{per}(Y) = \{v \in H^1(Y) \text{ telle que } v \text{ est } Y \text{-périodique}\}$$

$$H_{per}(Y, \mathbb{R}^3) = \{\mathbf{v} = (v_i) \text{ telle que } v_i \in H_{per}(Y)\}$$

1.1 Phase d'homogénéisation

On suppose que la structure est de nature piézoélectrique et on considère les conditions aux limites de Dirichlet suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{0} & \text{sur } \partial\Omega \\ \varphi &= 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1)$$

Les équations d'équilibre piézoélectrique s'écrivent :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}) &= b_i & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial}{\partial x_i}(D_i) &= 0 & \text{dans } \Omega \end{aligned} \quad (2)$$

avec les lois de comportement

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl} - g_{kij}E_k \quad (3)$$

$$D_i = g_{ikl}e_{kl} + \epsilon_{ik}E_k \quad (4)$$

et les relations géométriques

$$e_{kh}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_h} + \frac{\partial u_h}{\partial x_k} \right) \quad (5)$$

$$E_k = - \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}$$

où

- \mathbf{u} : vecteur déplacement
- $\boldsymbol{\sigma}$: tenseur des contraintes
- b : densité volumique de forces dans Ω
- E : vecteur champ électrique
- D : vecteur déplacement électrique
- φ : potentiel électrique

D'après ce qui précède on peut formaliser le problème de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (u, \varphi) \\ - \frac{\partial}{\partial x_j} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] = b_i \quad \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \\ \varphi = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (6)$$

On suppose que les coefficients C_{ijkl} (élastiques), g_{ijk} (piézoélectriques) et ϵ_{ij} (diélectriques) satisfont les conditions suivantes :

- symétrie :

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= C_{klij} = C_{jikl} = C_{ijlk} \\ g_{ijk} &= g_{ikj} \\ \epsilon_{ij} &= \epsilon_{ji} \end{aligned} \quad (7)$$

- positivité :

$$\begin{aligned} \exists \alpha > 0 \quad C_{ijkl} e_{kl} e_{ij} &\geq \alpha |e|^2 & \forall e \in E_s^3 \\ \exists \beta > 0 \quad \epsilon_{ij} a_i a_j &\geq \beta |a|^2 & \forall a \in \mathbb{R}^3 \end{aligned} \quad (8)$$

E_s^3 étant l'espace des matrices 3×3 symétriques.

- bornétude :

$$C_{ijkl}, g_{ijk}, \epsilon_{ij} \quad \text{sont dans } L^\infty(\Omega) \quad (9)$$

Existence et unicité de la solution

On introduit les espaces fonctionnels suivants :

$$\mathbf{V} = \{ \mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3) \in \mathbf{H}^1(\Omega) ; v_i = 0 \text{ sur } \partial\Omega \}$$

$$\Theta = \{ \Psi \in H^1(\Omega) ; \Psi = 0 \text{ sur } \partial\Omega \}$$

Le produit $\mathbf{V} \times \Theta$ est un espace de Hilbert.

Soient (\mathbf{v}, Ψ) dans $\mathbf{V} \times \Theta$ où $\mathbf{v} = (v_i)$. En multipliant la première équation de (6) par \mathbf{v} et la seconde par Ψ et en intégrant sur Ω on obtient

$$\begin{cases} \int_{\Omega} -\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] v_i dx = \int_{\Omega} b_i v_i dx \\ \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \Psi dx = 0. \end{cases}$$

En regroupant les deux termes et en appliquant la formule de Green on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dx - \int_{\partial\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] v_i \eta_j dx \\ & - \int_{\Omega} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} dx + \int_{\partial\Omega} [g_{ijk} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \Psi \eta_i d\sigma = \int_{\Omega} b_i v_i dx \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] e_{ij}(\mathbf{v}) dx \\ & - \int_{\Omega} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} dx = \int_{\Omega} b_i v_i dx \end{aligned}$$

En posant

$$\begin{aligned} a((u, \varphi); (v, \Psi)) &= \int_{\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}) + \mathbf{g}_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] e_{ij}(\mathbf{v}) dx \\ & - \int_{\Omega} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}] \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} dx \end{aligned}$$

et

$$L(v, \Psi) = \int_{\Omega} b_i v_i dx$$

le problème précédent se formule alors

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u, \varphi) \text{ dans } \mathbf{V} \times \Theta \\ a((u, \varphi); (v, \Psi)) = L(v, \Psi) \quad \forall (v, \Psi) \in \mathbf{V} \times \Theta \end{cases} \quad (10)$$

Lemme 1 : Sous les hypothèses (7), (8) et (9), le problème (10) admet une solution unique

Preuve. Il est facile de montrer que $a(., .)$ est une forme bilinéaire continue et $L(.)$ est une forme linéaire continue sur l'espace $\mathbf{V} \times \Theta$.

Il reste à montrer la positivité de la forme bilinéaire

$$\begin{aligned}
a((\mathbf{v}, \Psi), (\mathbf{v}, \Psi)) &= \int_{\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{v}) + \mathbf{g}_{kij} \frac{\partial \Psi}{\partial x_k}] e_{ij}(\mathbf{v}) dx \\
&\quad - \int_{\Omega} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{v}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \Psi}{\partial x_k}] \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} dx \\
&= \int_{\Omega} [c_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{v}) e_{ij}(\mathbf{v}) + \epsilon_{jk} \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j}] dx \\
&\geq \alpha \sum_{i=1}^3 \|v_i\|_{1,\Omega}^2 + \beta \|\Psi\|_{1,\Omega}^2
\end{aligned}$$

ainsi on a la positivité, et d'après le lemme de Lax Milgram on a l'existence et l'unicité de la solution. ■

On s'intéresse maintenant à la spécificité de la structure occupant le domaine Ω : son caractère périodique en x .

On considère deux échelles en espace :

- la première, macroscopique, est utilisée pour repérer un point M dans Ω par ses coordonnées x .

- la seconde, microscopique, pour repérer ce même point M , comme un point de Y par des coordonnées y .

on introduit $Y = [0, Y_1] \times [0, Y_2] \times [0, Y_3]$ une cellule de base et des fonctions $C_{ijkl}(y)$, $g_{ijk}(y)$ et $\epsilon_{ij}(y)$ définies sur cette cellule Y . On suppose que ces fonctions satisfont à (7), (8) et (9). Soit un scalaire $\varepsilon > 0$ destiné à tendre vers 0. On définit alors

$$\begin{aligned}
C_{ijkl}^{\varepsilon}(x) &= C_{ijkl}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \\
g_{ijk}^{\varepsilon}(x) &= g_{ijk}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \\
\epsilon_{ij}^{\varepsilon}(x) &= \epsilon_{ij}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)
\end{aligned} \tag{11}$$

où l'on a posé $\frac{x}{\varepsilon} = y$ pour $x \in \Omega$.

Les fonctions C_{ijkl}^{ε} , g_{ijk}^{ε} , $\epsilon_{ij}^{\varepsilon}$ sont $\varepsilon - Y$ périodiques. Pour $\varepsilon > 0$ fixé, le problème hétérogène, peut se formaliser à partir de (6) comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}^{\varepsilon}, \varphi^{\varepsilon}) \\ -\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl}^{\varepsilon} e_{kl}(\mathbf{u}^{\varepsilon}) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^{\varepsilon}}{\partial x_k}] = b_i \\ \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kl}(\mathbf{u}^{\varepsilon}) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^{\varepsilon}}{\partial x_k}] = 0 \\ \mathbf{u}^{\varepsilon} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \partial\Omega \\ \varphi^{\varepsilon} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right. \tag{12}$$

et il admet une solution unique $(\mathbf{u}^{\varepsilon}, \varphi^{\varepsilon})$. Pour déterminer un problème homogène équivalent à (12), on suppose qu'il existe un développement asymptotique de \mathbf{u}^{ε} et φ^{ε} sous la forme :

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}^{\varepsilon}(x) &= \mathbf{u}^0(x, y) + \varepsilon \mathbf{u}^1(x, y) + \varepsilon^2 \mathbf{u}^2(x, y) + \dots \\
\varphi^{\varepsilon}(x) &= \varphi^0(x, y) + \varepsilon \varphi^1(x, y) + \varepsilon^2 \varphi^2(x, y) + \dots
\end{aligned} \tag{13}$$

où les fonctions \mathbf{u}^i et φ^i sont Y -périodiques. En tenant compte des règles de dérivation l'opérateur $\frac{\partial}{\partial x_i}$ devient

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \rightsquigarrow \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i}$$

et par conséquent

$$e_{ij}(\Phi^\varepsilon(x)) = e_{ijx}(\Phi(x; y)) + \frac{1}{\varepsilon} e_{ijy}(\Phi(x; y))$$

où $\Phi^\varepsilon(x) = \Phi(x, \frac{x}{\varepsilon})$.

En tenant compte de ce qui précède, le système (12) se formalise :

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-2} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^\varepsilon) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial y_k}] \right) \\ -\varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^\varepsilon) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^\varepsilon) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}] \right) \\ & -\varepsilon^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^\varepsilon) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}] \right) = b_i \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-2} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^\varepsilon) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial y_k}] \right) \\ -\varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^\varepsilon) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^\varepsilon) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}] \right) \\ & -\varepsilon^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^\varepsilon) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}] \right) = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

En remplaçant \mathbf{u}^ε et φ^ε par leurs développements dans (14) et (15) on obtient :

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-2} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] \right) \\ & -\varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] \\ & -\varepsilon^0 \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^2) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^2}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_k}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) - g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] - \varepsilon(\dots) - \dots = b_i \end{aligned} \quad (16)$$

et

$$\begin{aligned} & -\varepsilon^{-2} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] \right) \\ & -\varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] \\ & -\varepsilon^0 \left(\frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_k}] \right) \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^2) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^2}{\partial y_k}] - \varepsilon(\dots) - \dots = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Par identification des puissances de ε , on obtient une cascade de problèmes :

A partir de (16) on obtient

$$\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] = 0 \quad (18)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] - \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] \\ - \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^2) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^2}{\partial y_k}] - \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] \\ - \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^1) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_k}] - \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] = b_i \end{aligned} \quad (20)$$

⋮

et de (17) on obtient

$$\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] = 0 \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] \\ + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] = 0 \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_k}] \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl} e_{klx}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] + \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^2) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^2}{\partial y_k}] = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

Une condition suffisante pour obtenir la solution du problème (12) est de résoudre les trois problèmes suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}^0, \varphi^0) \text{ telle que} \\ \frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl} e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_k}] = 0 \\ \mathbf{u}^0 \text{ et } \varphi^0 \text{ Y - p\u00e9riodiques} \end{array} \right. \quad (24)$$

Puisque le problème (25) est linéaire, on peut mettre \mathbf{u}^1 et φ^1 sous la forme

$$\mathbf{u}_k^1(x, y) = \chi_k^{mn}(y)e_{mnx}(\mathbf{u}^0) + \Phi_k^m(y) \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_m} \quad (28)$$

$$\varphi^1(x, y) = \Psi^{mn}(y)e_{mnx}(\mathbf{u}^0) + R^m(y) \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_m} \quad (29)$$

où χ^{mn} , Φ^m , Ψ^{mn} et R^m sont des fonctions périodiques

On montre alors que ces fonctions sont solutions des problèmes cellulaires suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_Y (C_{ijkl}(y)e_{kly}(\chi^{mn}(y) + C_{ijmn}(y) + g_{kij}(y) \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_k}) e_{ij}(\mathbf{v})) dy = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H_{per}(Y, \mathbb{R}^3) \\ \int_Y (g_{jkl}(y)e_{kly}(\chi^{mn}) - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_k} + g_{jmn}(y)) \frac{\partial w}{\partial y_j} dy = 0 \quad \forall w \in H_{per}(Y) \end{array} \right. \quad (30)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_Y (g_{mij}(y) + C_{ijkl}(y)e_{kly}(\Phi^m(y)) + g_{kij}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k}) e_{ij}(\mathbf{v}) dy = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H_{per}(Y, \mathbb{R}^3) \\ \int_Y (\epsilon_{jm}(y) + \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} - g_{jkl}(y)e_{kly}(\Phi^m(y)) \frac{\partial w}{\partial y_j}) dy = 0 \quad \forall w \in H_{per}(Y) \end{array} \right. \quad (31)$$

D'après l'alternative de Fredholm le système (??) admet une solution périodique, si les deux seconds membres ont des moyennes nulles, ce qui conduit au système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_Y (\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl}(y)e_{kly}(\mathbf{u}^1) + g_{kij}(y) \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl}(y)e_{kly}(\mathbf{u}^0) + g_{kij}(y) \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}] + b_i) dy = 0 \\ \int_Y (\frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl}(y)e_{kly}(\mathbf{u}^1) - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_k}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [g_{jkl}(y)e_{kly}(\mathbf{u}^0) - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_k}]) dy = 0 \end{array} \right. \quad (32)$$

En remplaçant \mathbf{u}^1 et φ^1 par leurs expressions on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_Y [(C_{ijmn}(y)e_{mnx}(\chi^{kl}(y) + g_{mij}(y) \frac{\partial \Psi^{kl}(y)}{\partial y_m} + C_{ijkl}) \frac{\partial^2 u_k^0}{\partial x_j \partial x_l} \\ & + (g_{kij}(y) + C_{ijmn}(y) \frac{\partial \Phi_m^k(y)}{\partial y_n} + g_{mij}(y) \frac{\partial R^k(y)}{\partial y_m}) \frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial x_j \partial x_k} + b_i] dy = 0 \\ & \int_Y [(g_{jkl}(y)e_{kly}(\chi^{mn}(y) - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_k} + g_{jmn}(y)) \frac{\partial^2 u_m^0}{\partial x_j \partial x_n} \\ & + (g_{jkl}(y)e_{kly}(\Phi^m(y)) - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} - \epsilon_{jm}(y) \frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial x_j \partial x_m})] dy = 0 \end{aligned}$$

Cette condition conduit à deux équations d'états homogénéisées

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_Y [C_{ijkl}^h \frac{\partial^2(u_k^0)}{\partial x_j \partial x_l} + g_{kij}^h \frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial x_j \partial x_k} + b_i] dy = 0 \\ \int_Y [g_{jmn}^h \frac{\partial^2 u_m^0}{\partial x_j \partial x_n} - \epsilon_{jm}^h \frac{\partial^2 \varphi^0}{\partial x_j \partial x_m}] dy = 0 \\ \mathbf{u}^0 = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \\ \varphi^0 = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \end{array} \right. \quad (33)$$

où les tenseurs (C_{ijkl}^h) -tenseur élastique homogénéisé-, (g_{kij}^h) -tenseur piézoélectrique homogénéisé-, (ϵ_{jm}^h) -tenseur diélectrique homogénéisé-, sont définis par les relations

$$\begin{aligned} C_{ijkl}^h &= \langle C_{ijmn}(y) e_{mny}(\chi^{kl}(y)) + g_{mij}(y) \frac{\partial \Psi^{kl}(y)}{\partial y_m} + C_{ijkl}(y) \rangle \\ g_{kij}^h &= \langle g_{kij}(y) + g_{mij}(y) \frac{\partial R^k(y)}{\partial y_m} + C_{ijmn}(y) \frac{\partial \Phi_m^k(y)}{\partial y_n} \rangle \end{aligned} \quad (34)$$

$$\epsilon_{jm}^h = \langle \epsilon_{jm}(y) + \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} - g_{jkl}(y) e_{kly}(\Phi^m(y)) \rangle \quad (35)$$

Comme première application, on considère un composite constitué de fibres distribuées de manière périodique dans une matrice. On suppose que ce composite vérifie les hypothèses suivantes :

H_1 La cellule de base est définie par $Y = H \times [0, y_3]$ avec H : section transversale de Y incluse dans le plan Oy_1y_2 , y_3 étant un réel quelconque.

H_2 Les coefficients C_{ijkl} , g_{kij} et ϵ_{jk} caractérisant les constituants de la cellule de base Y sont indépendants de la variable y_3 i.e.

$$C_{ijkl}(y) = C_{ijkl}(y_1, y_2)$$

$$g_{kij}(y) = g_{kij}(y_1, y_2)$$

$$\epsilon_{jk}(y) = \epsilon_{jk}(y_1, y_2)$$

H_3 Le tenseur d'élasticité est de la forme

$$\begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix}$$

le tenseur de piézoélectricité est de la forme

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & g_{123} & g_{113} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{113} & g_{123} & 0 \\ g_{311} & g_{311} & g_{333} & 0 & 0 & g_{312} \end{pmatrix}$$

le tenseur de diélectricité est de la forme

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix}$$

Rappelons que les caractéristiques homogénéisées d'un tel composite s'obtiennent en deux étapes :

1. On résout les problèmes cellulaires (30)- (31) qui sont équivalents à (au sens des distributions) :

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl}(y) \frac{\partial \chi_l^{mn}(y)}{\partial y_k} + g_{kij}(y) \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_k}] = \frac{\partial}{\partial y_j} C_{ijmn}(y) \\ -\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{jkl}(y) \frac{\partial \chi_l^{mn}(y)}{\partial y_k} - \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_k}] = \frac{\partial}{\partial y_j} g_{mij}(y) \end{cases} \quad (36)$$

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial y_j} [g_{kij}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} + C_{ijkl}(y) \frac{\partial \Phi_l^m(y)}{\partial y_k}] = \frac{\partial}{\partial y_j} g_{mij}(y) \\ -\frac{\partial}{\partial y_j} [\epsilon_{jk}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} - g_{ikl}(y) \frac{\partial \Phi_l^m(y)}{\partial y_k}] = \frac{\partial}{\partial y_j} \epsilon_{jm}(y) \end{cases} \quad (37)$$

2. On calcule les moyennes "corrigées" :

$$C_{ijkl}^h = \langle C_{ijkl}(y) + C_{ijmn}(y) \frac{\partial \chi_m^{kl}(y)}{\partial y_n} + g_{mij}(y) \frac{\partial \Psi^{kl}(y)}{\partial y_m} \rangle \quad (38)$$

$$g_{kij}^h = \langle g_{kij}(y) + g_{mij}(y) \frac{\partial R^k(y)}{\partial y_m} + C_{ijmn}(y) \frac{\partial \Phi_m^k(y)}{\partial y_n} \rangle \quad (39)$$

$$\epsilon_{jm}^h = \langle \epsilon_{jm}(y) + \epsilon_{jk}(y) \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_k} - g_{jkl}(y) \frac{\partial \Phi_l^m(y)}{\partial y_k} \rangle \quad (40)$$

Pour limiter le nombre de fonctions à trouver, on fait appel aux hypothèses H_1 , H_2 et H_3 .

Remarque 1 1. De l'hypothèse H_2 on déduit que $\frac{\partial C_{ijkl}(y)}{\partial y_3} = 0$, $\frac{\partial g_{kij}(y)}{\partial y_3} = 0$,

$$\frac{\partial \epsilon_{jm}(y)}{\partial y_3} = 0.$$

2. Les fonctions χ^{mn} , Ψ^{mn} , R^m et Φ^m sont Y -périodiques de période Y_3 en y_3 , Y_3 étant un réel quelconque, donc ces fonctions sont indépendantes de y_3 . D'où :

$$\frac{\partial \chi_l^{mn}(y)}{\partial y_3} = 0, \quad \frac{\partial \Psi^{mn}(y)}{\partial y_3} = 0, \quad \frac{\partial R^m(y)}{\partial y_3} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \Phi_l^m(y)}{\partial y_3} = 0$$

et donc

$$\begin{aligned} \chi_l^{mn}(y) &= (\chi_1^{mn}(y_1, y_2); \chi_2^{mn}(y_1, y); \chi_3^{mn}(y_1, y_2)) \\ \Phi^m(y) &= (\Phi_1^m(y_1, y_2); \Phi_2^m(y_1, y_2); \Phi_3^m(y_1, y_2)) \end{aligned}$$

3. Grâce à la symétrie des tenseurs on a

$$\chi^{mn} = \chi^{nm} \quad \text{et} \quad \Psi^{mn} = \Psi^{nm}$$

par conséquent il reste 18 fonctions à déterminer :

$$\begin{aligned} &\chi^{11}, \chi^{12}, \chi^{13}, \chi^{22}, \chi^{23}, \chi^{33}. \\ &\Psi^{11}, \Psi^{12}, \Psi^{13}, \Psi^{22}, \Psi^{23}, \Psi^{33} \\ &\Phi^1, \Phi^2, \Phi^3. \\ &R^1, R^2, R^3 \end{aligned}$$

qui sont solutions des problèmes cellulaires suivants :

1. Fonctions χ^{mn} et Ψ^{mn} .

(a) Pour $(m, n) = (1, 1); (2, 2); (3, 3); (1, 2)$, on a

$$\Psi^{mn} = 0 \quad \text{et} \quad \chi^{mn} = (\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn}, 0)$$

où $(\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn})$ sont solutions des problèmes

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn}) \in W_2(H) \\ \int_H C_{ijkl} \frac{\partial \chi_l^{mn}}{\partial y_k} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dy = - \int_{\Gamma} [[C_{ijmn}]] v_i \eta_j^1 ds \quad \forall \mathbf{v} \in W_2(H) \end{array} \right. \quad (41)$$

où H est une section de la période de base.

$$W_2(H) = \{\mathbf{v}, \mathbf{v} \in [H^1(H)]^2, \mathbf{v} \text{ } H\text{-périodique}\}$$

[[.]] : le saut de la fonction à l'interface Γ .

(b) Pour $(m, n) = (1, 3); (2, 3)$, on a

$$\chi^{m3} = (0, 0, \chi_3^{m3})$$

où χ_3^{m3} et Ψ^{m3} sont telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\chi_3^{m3}, \Psi^{m3}) \in W_2(H) \text{ telle que} \\ \int_H [(C_{3jk3} \frac{\partial \chi_3^{m3}}{\partial y_k} + g_{k3j} \frac{\partial \Psi^{m3}}{\partial y_k}) \frac{\partial w}{\partial y_j} + (g_{jk3} \frac{\partial \chi_3^{m3}}{\partial y_k} \\ - \epsilon_{jk} \frac{\partial \Psi^{m3}}{\partial y_k}) \frac{\partial z}{\partial y_j}] dy = - \int_{\Gamma} [[C_{3jm3}]] w \eta_j^1 ds - \int_{\Gamma} [[g_{jm3}]] \eta_j^1 z ds \quad \forall (w, z) \in W_2(H) \end{array} \right. \quad (42)$$

2. Fonctions Φ^m et R^m .

(a) Cas où $m = 1, 2$, on a

$$\Phi^m = (0, 0, \Phi_3^m)$$

où Φ_3^m et R^m sont telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\Phi_3^m, R^m) \in W_2(H) \text{ telle que} \\ \int_H [(C_{3jk3} \frac{\partial \Phi_3^m}{\partial y_k} + g_{k3j} \frac{\partial R^m}{\partial y_k}) \frac{\partial w}{\partial y_j} \\ + (-g_{jk3} \frac{\partial \Phi_3^m}{\partial y_k} + \epsilon_{jk} \frac{\partial R^m}{\partial y_k}) \frac{\partial z}{\partial y_j}] dy = - \int_{\Gamma} [[g_{m3j}]] \eta_j^1 w ds - \int_{\Gamma} [[\epsilon_{jm}]] \eta_j^1 z ds \quad \forall (w, z) \in W_2(H) \end{array} \right. \quad (43)$$

(b) Cas où $m = 3$, on a

$R^3 = 0$ et $\Phi^3 = (\Phi_1^3, \Phi_2^3, 0)$ où (Φ_1^3, Φ_2^3) est solution de

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\Phi_1^3, \Phi_2^3) \in W_2(H) \text{ telle que} \\ \int_H C_{ijkl} \frac{\partial \Phi_l^3}{\partial y_k} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dy = - \int_{\Gamma} [[g_{3ij}]] v_i \eta_j^1 ds \quad \forall \mathbf{v} \in W_2(H) \end{array} \right. \quad (44)$$

Caractéristiques homogénéisées

Ayant résolu les problèmes cellulaires, les coefficients homogénéisés sont donnés par les expressions (38), (39) et (40). En tenant compte des hypothèses H_i ($i = 1, 2, 3$) et de la forme des fonctions d'influence, on vérifie facilement que les caractéristiques homogénéisées ont les formes suivantes :

1. pour le tenseur d'élasticité $C^h = (C_{ijkl}^h)$

$$\begin{pmatrix} C_{1111}^h & C_{1122}^h & C_{1133}^h & 0 & 0 & C_{1112}^h \\ C_{2211}^h & C_{2222}^h & C_{2233}^h & 0 & 0 & C_{2212}^h \\ C_{3311}^h & C_{3322}^h & C_{3333}^h & 0 & 0 & C_{3312}^h \\ 0 & 0 & 0 & C_{2323}^h & C_{2313}^h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1323}^h & C_{1313}^h & 0 \\ C_{1211}^h & C_{1222}^h & C_{1233}^h & 0 & 0 & C_{1212}^h \end{pmatrix}$$

Les coefficients non nuls s'obtiennent par la relation

$$C_{ijkl}^h = \langle C_{ijkl}(y_1, y_2) + C_{ijmn}(y_1, y_2) \frac{\partial \chi_m^{kl}(y)}{\partial y_n} + g_{mij}(y_1, y_2) \frac{\partial \Psi^{kl}(y)}{\partial y_m} \rangle_H$$

2. pour le tenseur piézoélectrique $G^h = (g_{kij}^h)$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & g_{123}^h & g_{113}^h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{223}^h & g_{213}^h & 0 \\ g_{311}^h & g_{322}^h & g_{333}^h & 0 & 0 & g_{312}^h \end{pmatrix}$$

avec

$$g_{kij}^h = \langle g_{kij}(y_1, y_2) + C_{ijmn}(y) \frac{\partial \Phi_m^k(y_1, y_2)}{\partial y_n} + g_{mij}(y_1, y_2) \frac{\partial R^k(y_1, y_2)}{\partial y_m} \rangle_H$$

3. pour le tenseur diélectrique $\epsilon = (\epsilon_{jm}^h)$

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11}^h & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22}^h & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^h \end{pmatrix}$$

avec

$$\epsilon_{jj}^h = \langle \epsilon_{jj}(y_1, y_2) + \epsilon_{jj}(y) \frac{\partial R^j(y_1, y_2)}{\partial y_k} - g_{jkl}(y_1, y_2) \frac{\partial \Phi_l^j(y_1, y_2)}{\partial y_k} \rangle_H$$

1.2 Résolution des problèmes cellulaires par la méthode des éléments finis

Lors de mon mémoire de DEA [5] un élément fini quadrilatéral à 4 nœuds a été construit afin de résoudre ce genre de problème piézoélectrique, on ne reprend pas ici ses caractéristiques. Cette méthode numérique écrite sous Matlab a été testée seulement sur quelques cas élémentaires.

Notations

- les fonctions de bases :

$$\begin{cases} \hat{N}_1(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ \hat{N}_2(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ \hat{N}_3(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\ \hat{N}_4(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \end{cases}$$

-

$$\int_H \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_2} dy_1 dy_2 = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} \left(\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi} \right) \left(-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi} \right) d\xi d\eta \quad (45)$$

- l'intégrale curviligne

$$I = \int_{-1}^1 f J_s d\tau \quad \text{avec } J_s = \sqrt{y_{1,\tau}^2 + y_{2,\tau}^2} \quad (46)$$

Traitement du problème cellulaire 1

Pour $(m, n) = (1, 1); (2, 2); (3, 3); (1, 2)$, on a

$$\Psi^{mn} = 0 \quad \text{et} \quad \chi^{mn} = (\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn}, 0)$$

où $(\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn})$ sont solutions des problèmes

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\chi_1^{mn}, \chi_2^{mn}) \in W_2(H) \\ \int_H C_{ijkl} \frac{\partial \chi_l^{mn}}{\partial y_k} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dy = - \int_{\Gamma} [[C_{ijmn}]] v_i \eta_j^1 ds \\ \text{Pour tout } \mathbf{v} \in W_2(H) \end{cases}$$

Posons

$$G = \int_H C_{ijkl} \frac{\partial \chi_l^{mn}}{\partial y_k} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dy, \quad H = - \int_{\Gamma} [[C_{ijmn}]] v_i \eta_j^1 ds$$

et

$$\chi_l^{mn} = \sum_{q=1}^4 \chi_{lq}^m N_q, \quad v_i = \sum_{q=1}^4 v_{iq} N_q$$

On écrit G sous forme explicite et on tient compte de l'hypothèse H_3 . En remplaçant χ_l^{mn} et v_i par leurs expressions on trouve :

$$\begin{aligned}
G &= \sum_{q=1}^4 \sum_{r=1}^4 v_{1r} \left[\int_H (C_{1111} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2 \right] \chi_{1q}^{mn} \\
&+ \sum_{q=1}^4 \sum_{r=1}^4 v_{1r} \left[\int_H (C_{1122} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2 \right] \chi_{2q}^{mn} \\
&+ \sum_{q=1}^4 \sum_{r=1}^4 v_{2r} \left[\int_H (C_{1122} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_2} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_1}) dy_1 dy_2 \right] \chi_{1q}^{mn} \\
&+ \sum_{q=1}^4 \sum_{r=1}^4 v_{2r} \left[\int_H (C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{2222} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2 \right] \chi_{2q}^{mn}
\end{aligned}$$

D'après ce qui précède on détermine les matrices élémentaires sur l'élément quadrilatéral :

$$\begin{aligned}
A_{rq} &= \int_H (C_{1111} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2 \\
B_{rq} &= \int_H (C_{1122} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2 \\
C_{rq} &= \int_H (C_{1122} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_2} + C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_1}) dy_1 dy_2 \\
D_{rq} &= \int_H (C_{1212} \frac{\partial N_q}{\partial y_1} \frac{\partial N_r}{\partial y_1} + C_{2222} \frac{\partial N_q}{\partial y_2} \frac{\partial N_r}{\partial y_2}) dy_1 dy_2
\end{aligned} \tag{47}$$

On applique le résultat de (45) pour passer à l'élément de référence

$$\begin{aligned}
A_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1111} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&+ C_{1212} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1122} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&+ C_{1212} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1122} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) \\
&+ C_{1212} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi})] d\xi d\eta
\end{aligned}$$

$$D_{rq} = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1212} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + C_{2222} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta$$

Pour traiter le second membre, on remplace v_1 et v_2 par leurs expressions :

$$H = -\sum_{q=1}^4 v_{1q} \int_{\Gamma} [[C_{11mn}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{12mn}]] N_q \eta_2^1 ds - \sum_{q=1}^4 v_{2q} \int_{\Gamma} [[C_{21mn}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{22mn}]] N_q \eta_2^1 ds$$

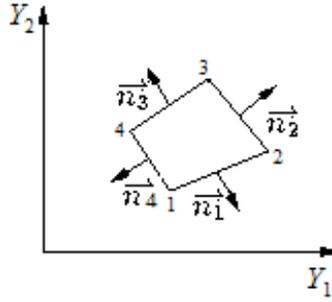
On pose

$$\begin{aligned} F_{1q} &= -\int_{\Gamma} [[C_{11mn}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{12mn}]] N_q \eta_2^1 ds \\ F_{2q} &= -\int_{\Gamma} [[C_{21mn}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{22mn}]] N_q \eta_2^1 ds \end{aligned} \quad (48)$$

Donc H devient :

$$H = \sum_{q=1}^4 v_{1q} F_{1q} + \sum_{q=1}^4 v_{2q} F_{2q}$$

Pour appliquer la transformation (46) on utilise le graphe suivant :



Remarque 2 par exemple si la normale est $\vec{\eta}_2$ ou $\vec{\eta}_4$, on intègre par rapport à η et on prend $\xi = \pm 1$, ou bien si la normale est $\vec{\eta}_1$ ou $\vec{\eta}_3$ l'intégration est faite selon ξ et on prend $\eta = \pm 1$.

a . pour $(m, n) = (1, 2)$

$$\begin{aligned} (F_{1q}) &= \int_{\Gamma} [[C_{1112}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{1212}]] N_q \eta_2^1 ds \\ (F_{2q}) &= \int_{\Gamma} [[C_{2112}]] N_q \eta_1^1 + [[C_{2212}]] N_q \eta_2^1 ds \end{aligned}$$

D'après l'hypothèse H_3 on a

$$[[C_{1112}]] = [[C_{2212}]] = 0$$

On suppose par exemple que $\vec{\eta} = \vec{\eta}_2$, et après la transformation (46) on a :

$$F_1 = [[C_{1212}]] \begin{pmatrix} 0 \\ \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1-\eta)d\eta \\ \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1+\eta)d\eta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_2^1 J_s$$

$$F_2 = [[C_{1212}]] \begin{pmatrix} 0 \\ \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1-\eta)d\eta \\ \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1+\eta)d\eta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_1^1 J_s$$

d'où

$$F_1 = [[C_{1212}]] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_2^1 J_s$$

$$F_2 = [[C_{1212}]] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_1^1 J_s$$

- b.pour $(m, n) = (1, 1), (2, 2)$ et $(3, 3)$

$$F_1 = [[C_{11mn}]] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_1^1 J_s$$

$$F_2 = [[C_{22mn}]] \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \eta_2^1 J_s$$

Traitement du problème cellulaire 2, 3 et 4

On traite de la même manière les autres problèmes cellulaires :

- Problème cellulaire 2

Matrices élémentaires :

$$A_{rq} = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{3113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + C_{3223} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta$$

$$B_{rq} = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [g_{113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + 2 \cdot g_{123} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + g_{113} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta$$

$$C_{rq} = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [g_{113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + 2 \cdot g_{123} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + g_{113} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta$$

$$D_{rq} = \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [g_{113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + 2 \cdot g_{123} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) + g_{113} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta$$

Seconds membres :

$$\begin{aligned} F_1 : F_{1q} &= - \int_{\Gamma} [[C_{31m3}] N_q \eta_1^1 + [[C_{32m3}] N_q \eta_2^1] ds \\ F_2 : F_{2q} &= - \int_{\Gamma} [[g_{1m3}] N_q \eta_1^1 + [[g_{2m3}] N_q \eta_2^1] ds \end{aligned} \tag{49}$$

• Problème cellulaire 3

Matrices élémentaires :

$$\begin{aligned}
A_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} (C_{3113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + C_{3223} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})) d\xi d\eta \\
B_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} (2.g_{123} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + g_{113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + g_{113} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})) d\xi d\eta \\
C_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} (-g_{113} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad - 2.g_{123} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad - g_{113} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})) d\xi d\eta \\
D_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} (\epsilon_{11} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + \epsilon_{22} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})) d\xi d\eta
\end{aligned} \tag{50}$$

Seconds membres :

$$\begin{aligned}
F_{1q} &= - \int_{\Gamma} [[g_{m31}]] N_q \eta_1^1 + [[g_{m23}]] N_q \eta_2^1 ds \\
F_{2q} &= - \int_{\Gamma} [[\epsilon_{1m}]] N_q \eta_1^1 + [[\epsilon_{1m}]] N_q \eta_2^1 ds
\end{aligned} \tag{51}$$

- Problème cellulaire 4 :

Matrices élémentaires :

$$\begin{aligned}
A_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1111} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + C_{1212} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta \\
B_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1122} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + C_{1212} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta \\
C_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1122} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) \\
&\quad + C_{1212} (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi})] d\xi d\eta \\
D_{rq} &= \int_{\hat{H}} \frac{1}{|J_H|} [C_{1212} (\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) (\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_2}{\partial \eta} - \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_2}{\partial \xi}) \\
&\quad + C_{2222} (-\frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_q}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi}) (-\frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \xi} \frac{\partial y_1}{\partial \eta} + \frac{\partial \hat{N}_r}{\partial \eta} \frac{\partial y_1}{\partial \xi})] d\xi d\eta
\end{aligned} \tag{52}$$

Seconds membres :

$$\begin{aligned}
F_{1q} &= - \int_{\Gamma} [[g_{311}]] N_q \eta_1^1 + [[g_{312}]] N_q \eta_2^1 ds \\
F_{2q} &= - \int_{\Gamma} [[g_{321}]] N_q \eta_1^1 + [[g_{322}]] N_q \eta_2^1 ds
\end{aligned} \tag{53}$$

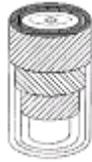
L'implémentation de ces modes de résolution a été réalisée sous Matlab.

2 Application à la structure corticale humaine

Très brièvement, le modèle d'os cortical sur lequel j'ai travaillé comprend quatre niveaux structurels qui sont : les niveaux macroscopique, ostéonal, lamellaire et le niveau des constituants de base. Dans le cas présent, ces constituants sont le collagène (sous forme de fibre) qui est un matériau ayant des propriétés piézoélectriques et l'hydroxyapatite, notée par la suite Hap (qui constitue la matrice) et dont les propriétés sont seulement élastiques.



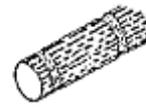
Os cortical



Ostéon



Lamelle



Fibre

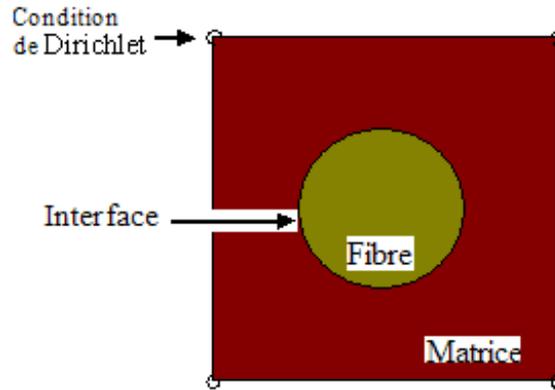
J'ai procédé, dans un cadre de pseudo périodicité, à trois homogénéisations successives :

- un matériau formé de fibres de collagène incluses dans de l'hydroxyapatite pour constituer les "lamelles"
- un matériau formé de lamelles concentriques emboîtées les une dans les autres pour former un "ostéon"
- un matériau formé d'un ensemble d'ostéons pour former la structure corticale.

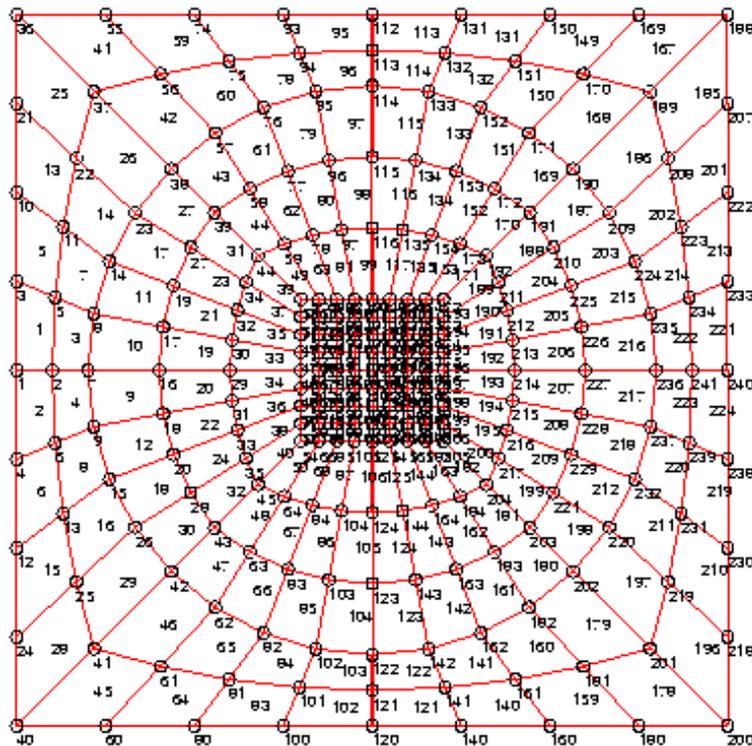
J'ai utilisé le code précédemment construit que j'ai adapté pour prendre en compte ces trois homogénéisations.

Domaine 1

Ce domaine représente la période servant à déterminer les coefficients homogénéisés pour la lamelle. Cette dernière est considérée comme un composite constitué d'une fibre noyée dans une matrice comme le montre le graphe suivant :



On travaille avec le maillage suivant (241 noeuds et 224 éléments), réalisé avec le mailleur MODULEF.



Données numériques :

a - pour la fibre : module d'Young ($E_c = 1.20 \text{ GPa}$) et coefficient de Poisson ($\nu_c = 0.35$)

on obtient un tenseur d'élasticité de la forme :

$$\begin{pmatrix} 1.925 & 1.037 & 1.037 & 0 & 0 & 0 \\ 1.037 & 1.925 & 1.037 & 0 & 0 & 0 \\ 1.037 & 1.037 & 1.925 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.444 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.444 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.444 \end{pmatrix}$$

On prend des valeurs unitaires pour le tenseur de piézoélectricité qui a la forme :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

et on fait de même pour le tenseur de diélectricité la forme :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

b-pour la matrice : module d'Young ($E_h = 114.0 \text{ GPa}$) et coefficient de Poisson ($\nu_h = 0.27$)

on obtient un tenseur d'élasticité de la forme :

$$\begin{pmatrix} 174.741 & 84.979 & 84.979 & 0 & 0 & 0 \\ 84.979 & 174.741 & 84.979 & 0 & 0 & 0 \\ 84.979 & 84.979 & 174.741 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 44.881 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 44.881 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 44.881 \end{pmatrix}$$

Pour le tenseur de piézoélectricité et de diélectricité, on prend des valeurs faibles (de l'ordre de 10^{-5} au lieu des valeurs unitaires).

Caractéristiques homogénéisées

Après calcul, on obtient comme propriétés physiques de la lamelle les tenseurs suivants :

a -Tenseur d'élasticité $C^h = (C_{ijkl}^h)$

$$\begin{pmatrix} 78.8238 & 36.094 & 37.6388 & 0 & 0 & 15.5101 \\ 36.094 & 71.0374 & 35.2323 & 0 & 0 & 12.8359 \\ 37.6388 & 35.2323 & 76.9611 & 0 & 0 & 9.2637 \\ 0 & 0 & 0 & 17.4157 & 5.4736 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5.4736 & 16.6343 & 0 \\ 15.5101 & 12.8359 & 9.2637 & 0 & 0 & 27.2547 \end{pmatrix}$$

b -Tenseur piézoélectrique $G^h = (g_{kij}^h)$

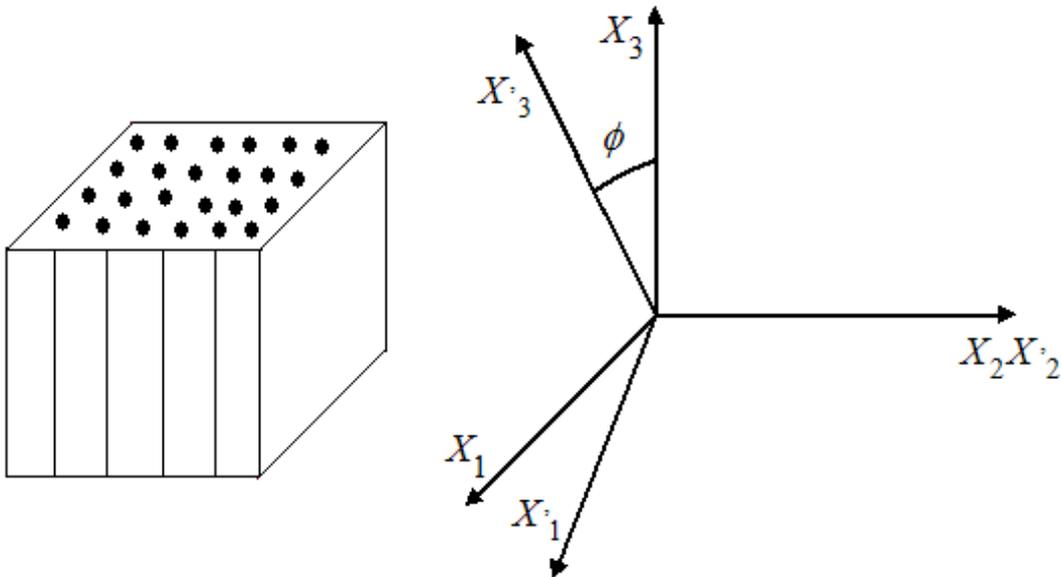
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1.0437 & 1.1204 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.4607 & 0.4870 & 0 \\ 0.2149 & 0.3038 & 0.3635 & 0 & 0 & 0.0036 \end{pmatrix}$$

c-Tenseur diélectrique $\epsilon^h = (\epsilon_{jlm}^h)$

$$\begin{pmatrix} 0.9069 & 0.0033 & 0 \\ 0.0033 & 0.5574 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5411 \end{pmatrix}$$

Les propriétés homogénéisées ainsi déterminées, nous permettent le passage des composants de base à une structure lamellaire possédant des fibres ayant une orientation verticale . Avec ces résultats on va déterminer les caractéristiques d'une structure lamellaire pour laquelle les fibres ont une orientation quelconque grâce à une rotation.

Dans un premier temps, considérons un matériau composite constitué de fibres unidirectionnelles incluses dans une matrice, considérons deux repères $(OX_1X_2X_3)$ et $(OX'_1X'_2X'_3)$



Le repère $(OX_1X_2X_3)$ est tel que les fibres sont orientées selon OX_3 . Le repère $(OX'_1X'_2X'_3)$ est obtenu à partir du repère précédent par une rotation d'angle ϕ autour de l'axe OX_2 .

Soient

- $T = (T_{ij})$: matrice de changement de repère (ou matrice de rotation d'angle ϕ)
- $B = (B_{ijkh})$: tenseur d'élasticité du matériau fibreux dans le repère $(OX_1X_2X_3)$
- $B' = (B'_{ijkh})$: tenseur du même matériau fibreux mais dans le repère $(OX'_1X'_2X'_3)$

La relation entre les deux tenseurs d'élasticité se formule comme suit :

$$B'_{ijkh} = T_{il}T_{jm}T_{kr}T_{hs}B_{lmrs}$$

De la même façon, la relation entre les deux tenseurs de piézoélectricité et de diélectricité se formule comme suit :

$$G'_{ijk} = T_{il}T_{jm}T_{kr}G_{lmr}$$

$$E'_{ij} = T_{il}T_{jm}E_{lm}$$

Après rotations, voici les tenseurs obtenus :

- Avec un angle de 45° :

a -Tenseur d'élasticité $C^h = (C^h_{ijkl})$

$$\begin{pmatrix} 111.1130 & 28.2577 & 45.6993 & 0 & 0 & 23.9710 \\ 28.2577 & 54.4209 & 27.1718 & 0 & 0 & 26.6452 \\ 45.6993 & 27.1718 & 76.9611 & 0 & 0 & -1.2032 \\ 0 & 0 & 0 & 11.5514 & 0.3907 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3907 & 22.4987 & 0 \\ 23.9710 & 26.6452 & -1.2032 & 0 & 0 & 19.4183 \end{pmatrix}$$

b -Tenseur piézoélectrique $G^h = (g^h_{kij})$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -0.0515 & 1.5559 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0252 & -0.6082 & 0 \\ 0.2630 & 0.2558 & 0.3635 & 0 & 0 & 0.0444 \end{pmatrix}$$

c-Tenseur diélectrique $\epsilon = (\epsilon^h_{jlm})$

$$\begin{pmatrix} 0.7355 & -0.1747 & 0 \\ -0.1747 & 0.7288 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5411 \end{pmatrix}$$

- Avec un angle de -45° :

a -Tenseur d'élasticité $C^h = (C_{ijkl}^h)$

$$\begin{pmatrix} 54.4209 & 28.2577 & 27.1718 & 0 & 0 & -26.6452 \\ 28.2577 & 111.1130 & 45.6993 & 0 & 0 & -23.9710 \\ 27.1718 & 45.6993 & 76.9611 & 0 & 0 & 1.2032 \\ 0 & 0 & 0 & 22.4987 & -0.3907 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.3907 & 11.5514 & 0 \\ -26.6452 & -23.9710 & 1.2032 & 0 & 0 & 19.4183 \end{pmatrix}$$

b -Tenseur piézoélectrique $G^h = (g_{kij}^h)$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0.6082 & 0.0252 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.5559 & 0.0515 & 0 \\ 0.2558 & 0.2630 & 0.3635 & 0 & 0 & -0.0444 \end{pmatrix}$$

c-Tenseur diélectrique $\epsilon = (\epsilon_{jm}^h)$

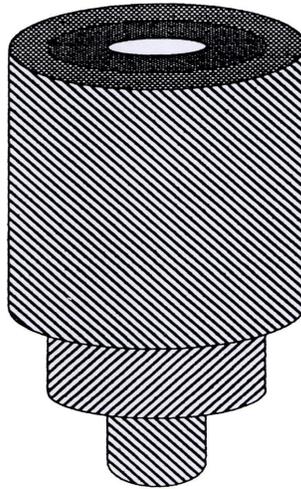
$$\begin{pmatrix} 0.7288 & 0.1747 & 0 \\ 0.1747 & 0.7355 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5411 \end{pmatrix}$$

Domaine 2

Dans cette partie, nous nous servons des coefficients homogénéisés calculés précédemment pour la lamelle afin de trouver les coefficients homogénéisés pour l'ostéon.

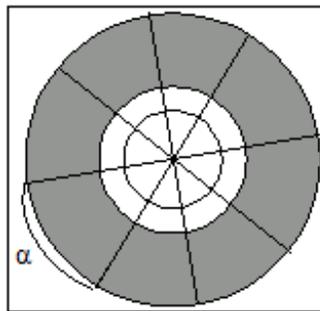
Description de la structure de l'ostéon.

L'ostéon est constitué d'un assemblage des lamelles cylindriques emboîtées les unes dans les autres, comme le montre la figure suivante :



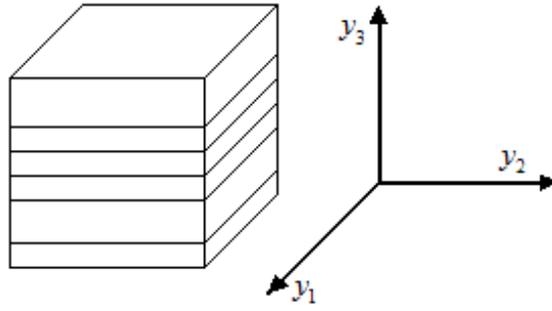
Cette architecture ne présente pas a priori de périodicité. Afin de pouvoir utiliser la méthode d'homogénéisation, il faut nous ramener à une structure périodique.

Pour cela, on découpe le domaine en tranches d'angle α comme le montre la figure ci-dessous :



découpage du domaine

Pour un angle α suffisamment petit, la structure de chacune des tranches du domaine est équivalente à un empilement de couches à structure périodique, comme le montre la figure suivante :



Structure couches empilées

Les différentes couches sont des lamelles caractérisées par l'orientation de leurs fibres qui change en alternance d'une couche à l'autre, faisant un angle ϕ ou $-\phi$ avec l'axe OX_1 .

Une fois les caractéristiques homogénéisées obtenues pour l'empilement de couches, les formules suivantes nous donnent les caractéristiques homogénéisées pour un point $M(r, \phi, z)$ de l'ostéon :

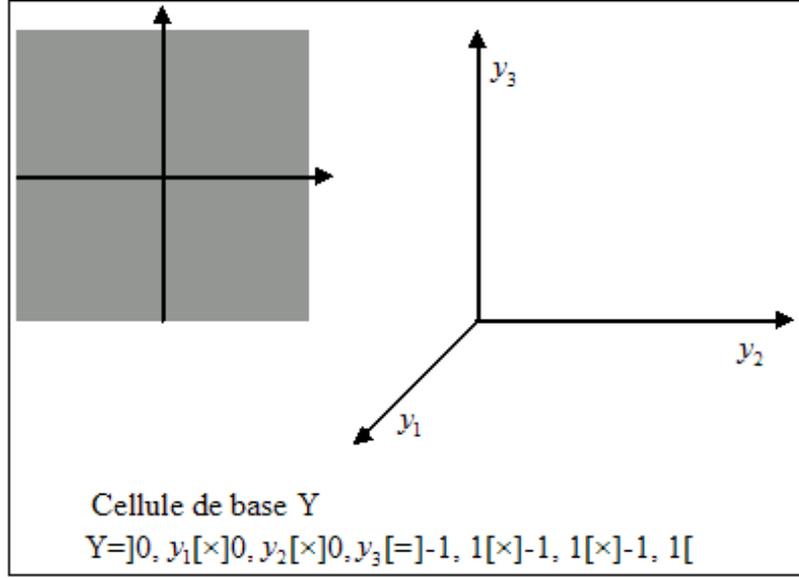
$$C_{ijkh} = t_{il}t_{jm}t_{kr}t_{hs}C_{lmrs}^{\phi}$$

Avec C_{lmrs}^{ϕ} tenseur homogénéisé de l'empilement de couches pour quel l'angle formé par la direction de deux couches consécutives est de 2ϕ , et

$$T = (t_{ij}) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Définition de la période de base et hypothèses

L'empilement est constitué de deux types de couches. La cellule de base étant la plus petite partie permettant de recouvrir le domaine tout entier (par des translations), on choisit la cellule représentée par la figure suivante :



On suppose que l'ostéon vérifie les hypothèses :

- H_1 : la cellule de base est définie par $Y = H * [0, y_3]$ avec H section incluse dans le plan OY_1Y_2 , y_3 : un réel quelconque
- H_2 : les coefficients C_{ijkl} , g_{kij} et ϵ_{jm} caractérisant les constituants de la cellule de base Y sont indépendants des variables y_1 et y_2 d'où :

$$\begin{aligned} C_{ijkl}(y) &= C_{ijkl}(y_3) \\ g_{kij}(y) &= g_{kij}(y_3) \\ \epsilon_{jm}(y) &= \epsilon_{jm}(y_3) \end{aligned}$$

Une méthode analytique permet d'obtenir les résultats suivants :

Après calcul on obtient les propriétés physiques de l'ostéon :

a - Tenseur d'élasticité $C^h = (C_{ijkl}^h)$ de la forme

$$\begin{pmatrix} 81.6549 & 29.3698 & 36.4355 & 0 & 0 & -1.1960 \\ 29.3698 & 81.6549 & 36.4355 & 0 & 0 & 1.1960 \\ 36.4355 & 36.4355 & 76.9611 & 0 & 0 & 2.0019e - 015 \\ 0 & 0 & 0 & 15.2562 & 1.1102e - 015 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.1102e - 015 & 15.2562 & 0 \\ -1.1960 & 1.1960 & 2.0019e - 015 & 0 & 0 & 19.4041 \end{pmatrix}$$

b -Tenseur piézoélectrique $G^h = (g_{kij}^h)$ de la forme

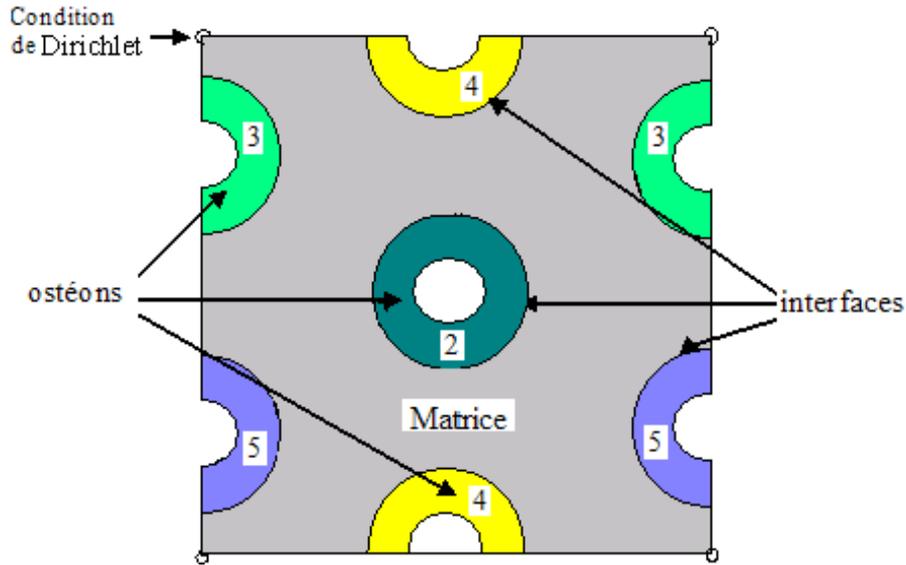
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0.1547 & 0.5521 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5521 & -0.1547 & 0 \\ 0.2594 & 0.2594 & 0.3635 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

c-Tenseur diélectrique $\epsilon = (\epsilon_{jm}^h)$ de la forme

$$\begin{pmatrix} 0.7729 & 0 & 0 \\ 0 & 0.7729 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5411 \end{pmatrix}$$

Domaine 3

Dans cette partie, nous nous servons des coefficients homogénéisés calculés pour l'ostéon afin de trouver les coefficients homogénéisés pour l'os cortical.



Ce domaine représente une période utilisée pour modéliser la structure haversienne de l'os cortical, constituée de quatre ostéons et d'une matrice.

Données numériques :

On prend comme données numériques les résultats du domaine 2, pour les ostéons respectifs 2, 3, 4 et 5. Alors on choisit les données de la matrice comme suit :

Pour un module d'Young ($E_h = 10.0 \text{ GPa}$) et coefficient de Poisson ($\nu_h = 0.25$) on obtient un tenseur d'élasticité de la forme :

$$\begin{pmatrix} 12.0 & 4.0 & 4.0 & 0 & 0 & 0 \\ 4.0 & 12.0 & 4.0 & 0 & 0 & 0 \\ 4.0 & 4.0 & 12.0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4.0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4.0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4.0 \end{pmatrix}$$

un tenseur de piézoélectricité de la forme :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0.00001 & 0.0001 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.00001 & 0.00001 & 0 \\ 0.00001 & 0.00001 & 0.00001 & 0 & 0 & 0.00001 \end{pmatrix}$$

et un tenseur de diélectricité de la forme :

$$\begin{pmatrix} 0.00001 & 0 & 0 \\ 0 & 0.00001 & 0 \\ 0 & 0 & 0.00001 \end{pmatrix}$$

Après calcul on obtient les propriétés physiques homogénéisées suivantes pour l'os cortical :

a -Tenseur d'élasticité $C^h = (C_{ijkl}^h)$ est de la forme

$$\begin{pmatrix} 24.8816 & 9.5115 & 10.2050 & 0 & 0 & 1.5109 \\ 9.5115 & 23.6438 & 9.9828 & 0 & 0 & 0.8853 \\ 10.2050 & 9.9828 & 25.2009 & 0 & 0 & 0.7837 \\ 0 & 0 & 0 & 5.0980 & 1.3608 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.3608 & 8.0216 & 0 \\ 1.5109 & 0.8853 & 0.7837 & 0 & 0 & 11.0348 \end{pmatrix}$$

b -Tenseur piézoélectrique $G^h = (g_{kij}^h)$ est de la forme

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0.8244 & 0.6148 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.1825 & 0.0363 & 0 \\ 0.0500 & 0.0486 & 0.0739 & 0 & 0 & 0.0450 \end{pmatrix}$$

c-Tenseur diélectrique $\epsilon^h = (\epsilon_{jm}^h)$ est de la forme

$$\begin{pmatrix} 0.1593 & -0.1168 & 0 \\ -0.1168 & 0.1661 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1162 \end{pmatrix}$$

3 Discussion et conclusion

Malheureusement, ces résultats trouvés comme propriétés physiques de l'os cortical ne sont pas conformes aux observations expérimentales. En effet, le rapport $\frac{C_{3333}}{C_{1111}}$ vaut dans nos simulations numériques $\frac{25.2009}{24.8816}$ et il est donc voisin de 1. Expérimentalement cette valeur est située aux environs de 1.5 et peut même atteindre la valeur 2.0. Ce rapport caractérisant l'anisotropie de l'os, il est un bon indicateur de la validité de notre modèle. Toutes les simulations numériques faites conduisent à un rapport d'anisotropie voisin de 1.

Il semble donc que la présente modélisation ne soit pas satisfaisante. Les travaux présentés dans cette première partie ont été réalisés pendant une période très courte (entre juillet et octobre 2002) et donc chacune des pièces du puzzle qui la constitue doit être remise en cause: la modélisation elle-même, les développements effectués dans le cadre de l'homogénéisation et le module de résolution numérique qui n'avait pas été totalement validé.

L'étape suivante consistait alors à chercher la provenance du dysfonctionnement observé. Une première vérification du module de résolution a permis de détecter une erreur mais la correction ne changeait pas la nature du constat. Par ailleurs, le support financier qui m'a été accordé par la Région de Franche-Comté en octobre 2002 concernait une autre thématique. J'ai donc arrêté mes développements sur cette modélisation pour me concentrer sur le nouveau sujet dont l'étude est présentée dans la seconde partie.

La simulation numérique de l'os cortical n'a pas été abandonnée pour autant. Le sujet a été repris à l'automne 2003 par M. Racila sous la direction du Pr. J.M. Crolet. Après s'être imprégnée du sujet, Racila a proposé de construire une modélisation plus réaliste en introduisant le fluide. Par contre, elle a été obligée de reprendre tous les développements du processus d'homogénéisation puisque les équations constitutives étaient modifiées. De plus, il a été décidé qu'elle réécrirait un module de résolution, ce qui serait plus facile que de valider le module existant. L'ensemble des tests qu'elle a effectués avec ses propres outils de simulation a permis de mettre en évidence une carence importante dans la modélisation qui avait été développée.

Pour combler la carence ainsi mise en évidence, elle a ensuite introduit un nouveau niveau architectural (qui joue un rôle important dans la modélisation du processus de minéralisation) puis un volume élémentaire de la structure cristalline et a tenu compte de l'aspect multi échelle que le fluide avait dans cette structure très complexe.

Ses résultats ont été publiés dans [3] et je la remercie pour m'avoir associé à cette publication.

Bibliographie I

- [1] G.Allaire. Homogenization and two-scale convergence. SIAM Journal on Mathematical Analysis, volume 23 issue 6, pages 1482-1518, 1992.
- [2] Bensoussan A., J.L. Lions et G.Papanicolaou, Asymptotic analysis for periodic structures. North-Holland publishing company, 1978.
- [3] Crolet J.M., Racila M., Mahraoui R., Meunier A., New numerical concept for hydroxyapa-tite in human cortical bone, Computer Methods in Biomechanics and biomedical Engineering, Vol. 8 (2), pp. 139-143, 2005
- [4] E.DE Giorgi, E. Magenès, U. Mosco, Pitagora Convergence problems for functionals and operators, Proceeding Rome 1978.
- [5] R. Mahraoui , Homogénéisation du comportement piézoélectrique d'une structure fibreuse, Mémoire de DEA, 2002
- [6] S. Spangolo, Sulla convergenza delle soluzioni di equazioni paraboliche ed ellitiche, ANN. Sc. Pisa. Cl.Sci.Fis.Mat(3), 22, 575-597, 1968.
- [7] Tartar. L. , Problèmes de contrôle des coefficient dans des équations aux dérivées partielles, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems 107, 420-426, 1974
- [8] J.J. Telega, Piezoelectricity and homogenization. Application to biomechanics, in Continu um Models and Discrete Systems, pp. 220-229 edited by G.A. Maugin, Longman, Essex 1991.

Partie II

Introduction

La formation des gaz souterrains et leur migration dans la géosphère sont des phénomènes qui sont de plus en plus étudiés car leur rôle dans les applications sismo-tectoniques ou environnementales est maintenant bien établi. Il faut cependant reconnaître que les difficultés de mener des investigations expérimentales dans ce milieu, ou même plus modestement au niveau de ses couches superficielles, sont telles que l'ensemble des processus de formation de ces gaz et de leur migration n'est pas encore maîtrisé.

La migration d'un gaz est liée à l'existence de sources (réservoirs naturels d'hydrocarbure en bassin sédimentaire, fluides géothermiques localisés dans des zones où la chaleur est élevée ou autres), et à l'existence d'itinéraires préférentiels pour leur écoulement comme par exemple des zones de haute perméabilité (bancs de sable dans un ensemble argileux favorisant une migration horizontale) ou des discontinuités tectoniques (réseaux de failles ou ruptures dans des couches géologiques favorisant une migration verticale).

La migration d'un gaz dans une couche géologique est engendrée par des forces résultant d'un gradient associé à deux entités distinctes: la concentration locale de ce gaz et la pression à laquelle il est soumis. Dans le premier cas, on a un phénomène de diffusion : il concerne les molécules et force ces dernières à se déplacer de façon à égaliser la concentration dans toutes les directions. Le second phénomène est celui de l'advection : il met en jeu le gaz en tant qu'entité volumique et il le force à se déplacer d'une zone de haute pression vers une zone de basse pression. Ces deux processus n'agissent presque jamais de manière indépendante et donc la nature de la sollicitation à laquelle est soumis le gaz peut évoluer pendant sa migration selon les conditions physiques, chimiques ou géologiques qu'il rencontre.

Dans ce mémoire nous nous intéressons au gaz "radon" qui est produit lors d'une activité sismique et nous reprenons le cadre d'une étude précédente [5].

On y considère un aquifère de surface dont la partie inférieure est imperméable et qui est le siège d'une activité sismique. Un séisme dont le foyer est éventuellement assez profond génère des ondes de chocs qui atteignent la partie basse de cet aquifère et y créent des fissures, voire des fractures. On sait que ce processus de fissuration ou de fracturation de la roche libère du radon sous forme gazeuse. L'intérêt de ce gaz est double : il est facilement observable car radioactif et il se dissout dans l'eau. Cependant il a une période très courte qui est d'environ 3,7 jours. Si certaines conditions sont vérifiées (voir [5]) alors une partie de ce radon libéré peut atteindre la surface de l'aquifère voire éventuellement passer dans l'air. Or la concentration de ce gaz est aisément mesurable dans un aquifère de surface à faible profondeur. Une variation importante de la concentration de radon observée est aujourd'hui classée comme un indicateur précurseur d'une activité sismique forte si cette variation s'accompagne d'une forte variation d'autres paramètres tels que le niveau piézométrique ou la température de l'eau. Dans l'étude précédemment citée [5], il a été supposé que le radon produit était immédiatement dissous dans l'eau environnante. Cette simplification dans la

modélisation a permis une première approche numérique des phénomènes rencontrés mais elle a été critiquée lors de présentations orales faites dans des congrès internationaux.

L'objectif de la présente étude est donc de simuler la migration de radon sous forme gazeuse et sous forme dissoute et d'intégrer les modules correspondants au code SETMP (Simulation de l'Écoulement et du Transport en Milieux Poreux). Il sera ainsi possible de comparer la migration du radon selon deux modes distincts : uniquement dissous et/ou gazeux et dissous. Par ailleurs, afin de ne rien enlever à la généralité de l'architecture géologique développée dans [5], nous gardons le cadre de cette étude. Plus précisément, nous supposons que, suite à une activité sismique, une "poche" de gaz est formée. Cette "poche" contient du radon associé à un gaz porteur. Elle va d'abord se déplacer dans la fracture ou les fissures puis se disloquer sous forme de bulles pour pénétrer le milieu poreux. Chaque bulle, au cours de sa migration, va voir une partie du radon qu'elle contient traverser sa paroi pour aller se dissoudre dans l'eau environnante. Avec un tel processus et en reprenant l'hypothèse classique en modélisation macroscopique des milieux poreux selon laquelle on peut définir en tout point les entités physiques se rapportant à la roche ou à un fluide, il apparaît donc que la concentration de radon existant en un point du milieu poreux et à un instant donné est la somme de deux concentrations : celle de radon dissout et celle de radon constant en tant que gaz.

L'écoulement d'eau dans un milieu poreux étant déjà modélisé et implémenté numériquement dans le code SETMP, nous allons orienter nos travaux de modélisation vers les deux phénomènes suivants : le transport d'une bulle dans un fluide, l'échange d'un gaz au travers de la paroi d'une bulle. Ensuite, il nous faudra prendre en compte le cas d'un très grand nombre de bulles et enfin, nous pourrons modéliser le transport de radon dans un aquifère simultanément sous forme gazeuse et sous forme dissoute. L'implémentation informatique sera ramenée à l'introduction de quelques modules dans le code SETMP.

Une analyse comparative entre les résultats obtenus par la version précédente et ceux obtenus avec notre nouvelle version sera alors menée pour apprécier l'introduction de ce facteur dans les simulations numériques.

1. Séismes et prévision

– Origine des séismes

L'écorce terrestre est composée de plaques tectoniques, qui sont toujours en mouvement. Celles-ci se rapprochent, s'écartent ou glissent les unes par rapport aux autres, ce qui provoque une déformation des roches, qui est d'abord élastique puis plastique à partir d'une certaine valeur seuil. C'est le plus souvent dans les 60 premiers kilomètres de la couche terrestre qu'une rupture est alors possible, en un point appelé foyer. L'énergie potentielle accumulée dans ces roches est libérée brutalement : un séisme s'est produit. Tous ces mouvements ont des conséquences sur les couches géologiques supérieures : fissures, failles voire fractures. Une onde de choc remonte alors vers la surface de la terre, parfois sans gravité, parfois avec des conséquences désastreuses.

Toute cette activité sismique majeure n'est pas permanente, elle est le résultat d'une activité géologique connue et fort complexe dont le mécanisme n'est pas encore connu. L'énergie générée par les mouvements des parois des failles ou des plaques entre elles est dissipée sous forme de chaleur voir parfois de vibrations. Des sismographes enregistrent à la surface de la terre ces dernières, appelées ondes sismiques, qui se propagent dans toutes les directions.

– La prévision sismique

Certains séismes, très désastreux, ont poussé l'homme à tout faire pour les prévoir. Mais le mécanisme de ces mouvements sous terrain est si compliqué que toute prédiction est quasi impossible. Trop de paramètres de ce phénomène nous sont encore inconnus à ce jour. Les sismologues distinguent la prédiction à long terme et la prédiction à court terme.

Pour la prédiction à long terme, l'histoire sismique d'une région particulière sujette à une telle activité est mémorisée et observée. On s'appuie sur les enregistrements et les témoignages historiques qui permettent d'établir pour la région considérée une carte de la sismicité. Pour une faille active, la situation devient inquiétante quand la période de calme sismique est longue. En effet, les couches géologiques accumulent de l'énergie qui est restituée ultérieurement de manière brutale mais ceci a lieu à un moment inattendu. La régularité sismique d'une région peut être fiable, à condition d'avoir relevé ses échéances, c'est-à-dire, d'avoir noté, pour une faille qui est le siège régulier d'une activité sismique, les dates auxquelles se produisent les séismes (ex : un séisme tout les vingt ans dans une région précise). Seules les zones connues pour être sismiquement actives et dont l'histoire est parfaitement répertoriée peuvent nous aider à prévenir les séismes mais malgré tout sans certitude.

La recherche et l'étude d'éléments précurseurs d'un séisme et leur interprétation de manière réaliste pourrait permettre la prévision à court terme. Les travaux menés dans cet objectif sont scientifiquement plus élaborés. On espère qu'ils permettront d'obtenir des informations un peu plus précises au moins quant à la période d'apparition des séismes.

Lors de certains tremblements de terre, on a constaté que l'on pouvait facilement observer divers paramètres et les mesurer tel le niveau piézométrique ou la température. Les jours précédents le séisme, ces derniers subissaient des variations importantes, comme par exemple dans la région de Tachkent en Ouzbékistan et celui de Kobe au Japon (voir figure 1.2.1). Notre objectif n'est pas de faire une étude exhaustive de tous les paramètres ainsi recensés. Notre intérêt se porte sur le radon. Depuis 1920 le phénomène d'émission du radon à partir des minéraux naturels est connu, mais la possibilité d'utiliser le radon précurseur des séismes n'a été envisagée qu'à la fin des années 60. Ce genre de prévision est le théâtre d'une activité scientifique de plus en plus intense mais aucun résultat notoire ne peut encore être cité.

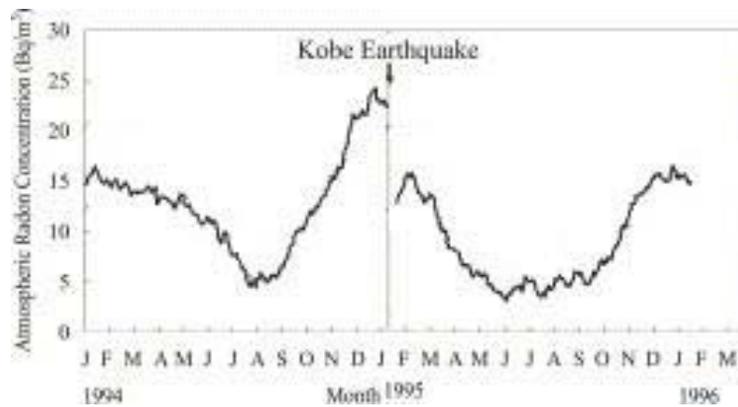


Figure 1.2.1 Evolution de la concentration de radon mesurée dans la région de Kobe au Japon [26]

1.3 - Activité sismique et l'origine du gaz radon

Nous avons vu précédemment que des ondes de choc dissipent en partie l'énergie produite par l'activité sismique qui a lieu en profondeur. Des fissures et des fractures peuvent être causées à la base d'un aquifère profond (500-1000 m) lorsque les ondes de choc l'atteignent, si elle sont suffisamment fortes. Du radon qui est un gaz radioactif provenant de la transformation de l'uranium est alors libéré grâce à ce mécanisme de fissuration.

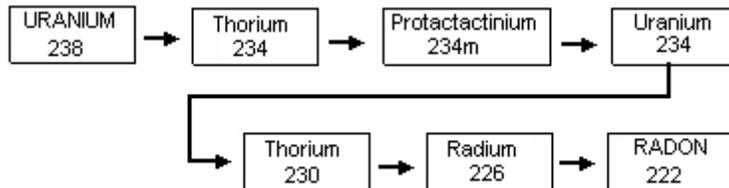


Figure 1.3.1 Origine de l'élément radon

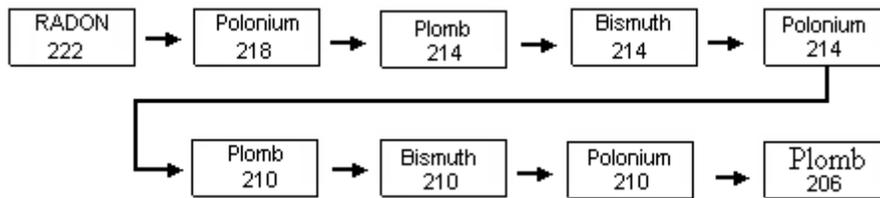


Figure 1.3.2 Transformation de l'élément radon

Le radon est donc un gaz d'origine naturelle présent partout à la surface de la terre, en particulier dans les roches granitiques et volcaniques. Il est d'abord généré sous forme gazeuse et, associé à d'autres gaz, il va constituer des bulles qui vont monter vers la surface de la terre et qui vont se transformer peu à peu : le radon, en traversant la paroi des bulles va quitter la bulle pour aller se dissoudre petit à petit dans l'eau environnante.

2. Mécanismes de migration d'un gaz

Dans ce paragraphe, on considère un gaz quelconque.

2.1 La diffusion

Un tel mouvement diffusif est habituellement modélisé par la loi de Fick : le flux de gaz est proportionnel au gradient de la concentration, la constante D_m étant appelée coefficient de diffusion moléculaire (cm^2/s):

$$F = -D_m \nabla C \quad \text{où } \nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \quad (1)$$

Le coefficient de diffusion moléculaire est une constante spécifique du gaz qui varie avec la température, la pression et la nature physique du milieu dans lequel le mouvement moléculaire a lieu. Dans les pores de la roche, cette substance est généralement de l'eau, de l'air ou un mélange de gaz. Il faut donc préciser, pour chaque gaz, la nature du milieu : par exemple, le coefficient de diffusion dans l'eau (D_{mw} ou simplement D_w) doit être distingué du coefficient de diffusion dans l'air (D_{ma} ou simplement D_m). En outre, considérer la diffusion de gaz dans les milieux poreux nécessite de tenir compte du fait que le volume dans lequel le gaz se propage est réduit et que la distance moyenne entre deux points géométriques n'est pas forcément la longueur du segment joignant ces deux points mais qu'elle est augmentée du fait de la tortuosité.

Il est important de ne pas confondre les trois processus suivants : la diffusion moléculaire du gaz dans un fluide, la diffusion interstitielle du gaz dans un milieu et la diffusion globale du gaz dans un milieu.

La diffusion interstitielle est caractérisée par le coefficient de diffusion "effective" (D_e):

$$D_e = D_m \varepsilon_c \quad (2)$$

où ε_c est la porosité efficace du milieu exprimée en % et définie par

$$\varepsilon_c = \frac{\text{volume d'eau pouvant circuler dans et entre les pores}}{\text{volume total}}$$

Notons que

D_e représente la diffusion en considérant le mouvement des molécules de gaz dans une structure poreuse.

La diffusion globale est caractérisée par le coefficient de diffusion “apparent” (D) ; il inclut les effets de la porosité ε et de la tortuosité τ du milieu. Pour le sol, il est admis de définir ce coefficient de diffusion globale par [13] :

$$D = D_e \varepsilon_c = D_m \varepsilon_c^2 = D_m \frac{\varepsilon_c}{\tau} \quad (3)$$

Il y a lieu de noter la relation d'ordre $D_m > D_e > D$

Précisons sur un exemple concernant le radon la différence entre D et D_e . Le flux diffusif d'exhalaison du radon selon la direction verticale est décrit par l'équation suivante [17] :

$$F = D \frac{dC}{dz} = \lambda C_{Ra} \rho \gamma X_d \quad (4)$$

avec les notations suivantes :

λ coefficient d'émanation du radon ^{222}Rn (%)

C_{Ra} concentration de ^{226}Ra (radium) dans le sol (Bq / kg)

Bq Becquerel : unité d'activité dérivée du Système International (SI) et correspondant à une désintégration par seconde ou à 476000 atomes de ^{222}Rn

ρ densité du sol (kg / m³)

γ constante de désintégration du radon ($2.1 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$)

et

$$X_d = (D_e / \gamma)^{0.5}$$

On peut noter que X_d est une grandeur représentant une distance de diffusion (m). L'équation (4) montre que la diffusion d'un gaz dans le sol peut être considérée comme un flux global. Cette même équation montre aussi que pendant l'exhalaison de radon, il est nécessaire de considérer le coefficient effectif D_e .

Il n'y a donc pas un seul coefficient de diffusion mais trois puisqu'à chacun de ces trois processus doit être associé un coefficient dont la signification et la grandeur sont regroupées au tableau 2.1.

Dans les milieux poreux où les canaux ont des petits diamètres comparés au chemin moyen libre des molécules de gaz (environ $0.1 \mu\text{ m}$ à STP : standard température et pression), le taux de diffusion du gaz est dû à la collision des molécules avec les parois du canal (diffusion de Knudsen [21] et [25]).

	D_m	D_w	D_e	D
Rn	0.12	1.37×10^{-5}	0.03-0.05 sol	2×10^{-6} sol saturé sol
He	0.7	2.12×10^{-5}	4×10^{-4} chaux	10^{-9} roche saturée
CO ₂	0.15	1.95×10^{-5}	0.02-0.03 sol	0.007 sol

Tableau 2.1 Diverses valeurs de coefficients de diffusion

Lors de sa dispersion, un gaz se déplace, en un temps t , d'une distance :

$$z_d = (Dt)^{0.5} \quad (5)$$

et donc, un gaz transporté dans l'eau par le seul phénomène de diffusion (tableau 2.1) effectuera 1.3 centimètres en 1 jour soit 25 centimètres par an ou encore 8 mètres en 1000 ans.

Pour calculer le gradient de concentration résultant de la diffusion de l'élément ²²²Rn dans un milieu isotrope, Andrews et al [1] ont employé l'équation suivante :

$$C_x = C_0 \exp\left(\frac{-x}{L}\right) \quad (6)$$

avec les notations :

- L longueur de la diffusion du ²²²Rn en centimètre, définie par $L = (D/\gamma)^{1/2}$
- D coefficient de diffusion du ²²²Rn
- γ constante de désintégration du ²²²Rn
- C_x concentration du ²²²Rn à une distance x de l'origine dans la direction de la diffusion
- C_0 concentration initiale du ²²²Rn

L'équation (6) montre, par exemple que seul 5% du ²²²Rn peut parcourir une distance de $5L$.

Dans un milieu poreux saturé, la modélisation avec l'équation (1) est encore valable : on remplace alors le coefficient D_m par le coefficient D_w (voir le tableau 2.1). La concentration du gaz dissous dans l'eau dépend du gradient de concentration [8].

2.2. Advection

L'advection est liée au mouvement de la matière qui est soumise à des forces externes comme par exemple le gradient de pression [13], la précipitation atmosphérique, l'évaporation, le vent, le dépôt de sédiments, l'écoulement d'eaux souterraines, les mouvements des plateaux dans la croûte terrestre.

Toute migration advective exige un débit de gaz libre, c'est-à-dire que les forces de gravitation qui agissent sur le gaz doivent produire des concentrations suffisantes. Pour qu'un jet d'une espèce gazeuse donnée puisse se former, il faut qu'un grand nombre d'atomes de cette espèce soit disponible au même endroit et au même instant. Les gaz nobles, comme l'hélium et le radon, sont produits dans la sous surface en très faible quantité : de l'ordre de 1 ppm pour l'hélium et de 10^{-10} ppm pour le radon [8] en temps normal. Ceci constitue une faible quantité de gaz qui peut cependant réagir aux gradients de pression et s'écouler de façon autonome par advection. De tels gaz ne peuvent donc être transportés par advection que s'ils sont associés à un autre gaz dit gaz "porteur". On peut par exemple citer le méthane (CH_4), l'azote (N_2) ou encore le dioxyde de carbone (CO_2) qui existent en quantité suffisante. On les appelle aussi des "géogaz" selon la dénomination introduite par Etiope [7]. En résumé, on ne doit pas considérer un seul gaz comme par exemple le radon mais plutôt un mélange de gaz ayant plusieurs composants : les composants primaires (gaz porteurs) et les composants secondaires (gaz rares).

Le flux de gaz est lié à la concentration C (kg/m^3) et à la vitesse de filtration q_g exprimée en m/s par la relation :

$$F = Cq_g \quad (7)$$

La vitesse de filtration q dépend du gradient de pression et d'un coefficient de mobilité lié à la géométrie du milieu et à la viscosité du gaz. Dans le cas de l'advection et en milieu poreux sec, le coefficient de mobilité dépend de la perméabilité intrinsèque du milieu, selon la loi de Darcy :

$$q_g = -\frac{k \nabla P}{\mu} \quad (8)$$

avec les notations :

k perméabilité intrinsèque

μ viscosité dynamique du gaz ($kg/m \cdot s$)

On trouve dans la littérature des expressions de cette vitesse de filtration établies dans des cas particuliers et dans un cadre monodimensionnel selon la direction Oz. Elles sont reprises ci-dessous en utilisant les variations infinitésimales de la pression (dP) et du déplacement selon Oz (dz) :

a) dans le cas des fissures planaires, on considère ([9]) :

$$q_z = \frac{b^2}{12\mu} \frac{dP}{dz} \quad (9)$$

où, si l'on appelle b la largeur de fissure, le terme $b^2/12$ représente la perméabilité de la fissure.

b) dans le cas d'un milieu fracturé (système des fissures d'intersection), il est possible d'utiliser une loi cubique ([19]):

$$q_z = \frac{b^2}{6d\mu} \frac{dP}{dz} \quad (10)$$

où d est la distance moyenne entre les fissures d'intersection (m).

Des expressions plus ou moins simples de l'équation de Darcy ont été données selon la nature de l'écoulement : visqueux ou laminaire. Dans ce dernier cas, l'influence de la gravitation peut être négligée. De plus, une restriction concernant la validité de cette équation a été établie. Il s'agit du cas où l'écoulement devient turbulent. Il a été estimé par Baer [2] que pour un milieu poreux ayant comme moyenne de diamètre de grain un coefficient d_G , le flux de gaz devient turbulent, et donc que la loi de Darcy n'est plus valide, lorsque le nombre de Reynolds (non- dimensionnel) vérifie :

$$R = d_G \mathbf{q} \frac{\rho}{\mu} > 4 \quad (11)$$

La loi de Darcy doit alors être remplacée par la loi de Forchheimer :

$$\left(1 + c_F \frac{q\rho\sqrt{k}}{\mu} \right) \mathbf{q}^{MP} = -\frac{k}{\mu} (\nabla P^{MP} - \rho \mathbf{g}) \quad (12)$$

Le processus d'advection dans le sous-sol se produit chaque fois qu'il existe un gradient de pression entre deux points. De tels gradients peuvent être induits par des efforts tectoniques, des variations du chargement lithostatique, une fracturation de la roche, la fonction localisée de gaz, la recharge et la décharge des couches aquifères et des réservoirs liquides profonds et, près de la surface, par le fait de la pression atmosphérique. En outre les gaz, en raison de leur faible densité, montent plus rapidement vers la surface de la terre : c'est un phénomène advectif : en fait, un gaz de densité ρ_1 se déplace vers le haut s'il est lié à une phase gazeuse de densité ρ_2 telle $\rho_2 > \rho_1$. Le gaz est soumis à un gradient de pression $\rho_2 g$. On peut dire que le terme $g(\rho_2 - \rho_1)$ est équivalent à un gradient de pression d'où :

$$\nabla P = -g(\rho_2 - \rho_1)$$

Alors (8) s'écrit :

$$q = kg \frac{\rho_2 - \rho_1}{\mu} \quad (13)$$

- Advection dans les milieux poreux

Dans les milieux poreux secs, fracturés ou non, le gaz s'écoule par advection d'abord dans la zone décrite ci-dessus. L'équation (8) est alors valide.

Dans les milieux poreux saturés deux phénomènes possibles doivent être distingués. Soit le gaz est dissout dans le fluide et transporté par celui-ci (advection de l'eau), soit le gaz s'écoule en déplaçant l'eau (advection de gaz). Lorsque le gaz est dissout, il se déplace à la même vitesse que l'eau et par conséquent, l'équation de Darcy sous la forme utilisée en hydrogéologie est valide. Le graphe suivant donne une idée sur l'advection dans les milieux poreux [8] :

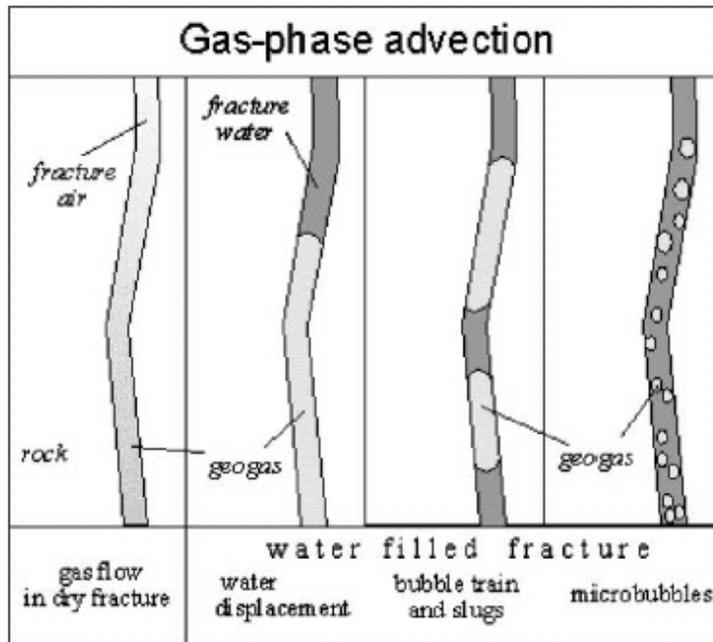


Figure 2.1 : représentation des formes de gaz en phase d'advection [8]

Dans l'advection de la phase gazeuse, le gaz ne peut traverser le milieu saturé en eau que s'il a une pression (P_g) plus importante que la somme de la pression hydrostatique (P_w) et de la pression capillaire (P_c) ($P_g > P_w + P_c$).

Remarques :

1) la pression hydrostatique est obtenue à partir du niveau piézométrique (H_w) au point considéré ($P_w = \rho_w g H_w$), ρ_w étant la densité de l'eau.

2) la pression capillaire est liée à la tension inter faciale de l'eau (σ) et au rayon du pore (r) par la loi de Laplace : $P_c = 2\sigma/r$

Des études menées sur l'écoulement d'un gaz au travers de roches argileuses [23], ont permis de distinguer trois cas :

- 1) $P_g < P_w + P_c$: le gaz dissous dans l'eau est transporté par diffusion.
- 2) $P_g > P_w + P_c$: on a un écoulement biphasique, l'eau étant déplacée par le gaz.
- 3) $P_g = P_{fr} \gg P_w + P_c$: le gaz fracture la roche
On appelle pression lithostatique en un point M la pression induite par l'empilement des roches situées au dessus du point M. La pression P_{fr} introduite ci-dessus est la pression à partir de laquelle la rupture peut avoir lieu et elle correspond approximativement à la pression lithostatique.

Quand la pression de gaz P_g atteint la valeur P_{fr} , l'écoulement de gaz se produit par les fissures ou les fractures.

Si, $P_{fr} < P_w + P_c$, alors l'écoulement de gaz se produit uniquement par les fractures et il n'y a aucune migration de gaz dans la matrice rocheuse. En raison de la perméabilité très élevée dans les fractures on peut considérer qu'il y a une augmentation de volume, dans lequel le gaz est stocké sans s'écouler. La pression peut s'élever et, ainsi, provoquer une propagation du réseau de fissures.

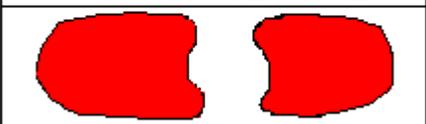
Si, au contraire, $P_{fr} > P_w + P_c$ le gaz s'écoule d'abord dans les fissures et puis dans la matrice [10]. Il faut remarquer que la pression hydrostatique et la pression lithostatique peuvent agir comme des forces d'entraînement pour le gaz.

Ainsi le déplacement de l'eau se produit en même temps que celui du gaz lorsque $P_g > P_w + P_c$ selon la dimension de l'avancée du front gazeux par rapport à la nature du milieu aquifère (milieu poreux homogène, rupture simple, etc.). Par exemple, dans une fissure saturée, le gaz se déplace sous forme d'une succession de grosses bulles dont les tailles minimales sont égales à la largeur de la fissure et qui peuvent être de longueur différente [10]. On peut alors employer l'équation (10) en utilisant le gradient de pression car il y a une différence de la densité entre le gaz et l'eau. Au contraire, dans le cas $P_g < P_w + P_c$, si le gaz se déplace toujours sous forme d'une succession de grosses bulles dont les tailles minimales sont égales à la largeur de la fissure et qui peuvent être de longueur différente, alors les bulles se divisent en des bulles de tailles plus petites jusqu'à ce que la relation $P_g > P_w + P_c$ soit à nouveau obtenue [7].

3. Mécanismes de migration de gaz sous forme des bulles.

Dans une étude théorique préliminaire sur le mouvement des bulles de gaz dans un milieu poreux saturé en eau, Varhegyi émet l'hypothèse que les bulles de gaz situées dans les eaux souterraines se déplacent selon la loi de Stokes [22].

La nature de la migration d'une bulle de gaz dans le milieu poreux dépend donc de la zone où est localisée la bulle et pourrait être résumée comme sur le schéma ci-dessous où l'on distingue quatre zones :

Domaine saturé		milieu poreux dans lequel le radon, transporté par l'eau, se dissout dans l'eau
		milieu poreux dans lequel le gaz s'écoule sous forme de bulles.
		advection de la phase gazeuse.
Domaine sec		zone où le milieu poreux ne contient que du gaz et où a eut lieu la fissuration de la roche.
Figure 2.2 : Zones du profil de migration des bulles		

Il faut prendre en compte le fait que le paramètre d (diamètre de la bulle) ne peut varier de manière quelconque mais qu'il doit être borné supérieurement car la bulle se déplace dans un milieu poreux. Plus précisément, on s'attend à ce que la taille maximale de la bulle soit limitée par la section transversale minimale du chemin de migration à travers le milieu poreux. Pour une roche fissurée, la taille des bulles peut être au plus égale à la largeur minimale existant entre les parois des fissures.

Varhegyi et Al. ont présenté un modèle théorique ([22]) pour estimer la taille d'une bulle (d_B), et par conséquent sa vitesse en fonction de la porosité moyenne (ε) et de la taille moyenne du grain (d_G) :

$$d_B = 1.26 d_G \varepsilon (\varepsilon + 0.21) \quad (14)$$

A l'aide de cette relation, et en supposant que la taille d'une bulle soit égale à celle des pores, il est possible de déterminer la vitesse maximale d'une bulle de gaz dans un milieu poreux homogène lorsque les grains ont tous la même dimension. Cependant, il s'agit là d'une configuration académique. Malheureusement, il est très difficile d'étudier expérimentalement la relation existant entre le coefficient d_G et la distribution de la taille des grains. Il est probable, dans le cas où cette distribution de taille est très large, que la section transversale disponible pour l'écoulement de la bulle corresponde à la distance minimale que l'on peut trouver entre les parois [22].

Il est cependant possible d'adapter la loi de Stokes pour estimer l'ordre de grandeur de la vitesse des micro bulles dans des milieux géologiques. Ce modèle a été développé en considérant la loi de Stokes pour le mouvement des bulles et en prenant comme diamètre de bulle une fonction de la porosité de la roche. Pour les milieux fracturés, la largeur des fissures détermine le diamètre maximum des bulles à employer dans l'équation de Varhegyi. Ce modèle très simple doit être considéré comme une première approche de la détermination des vitesses des bulles dans les environnements géologiques, car il ne tient pas compte d'un certain nombre d'autres facteurs se produisant dans des conditions réelles.

Premièrement, la vitesse obtenue via la loi de Stokes concerne le mouvement d'une bulle isolée lorsqu'il n'y a pas d'écoulement et pas de perturbation par d'autres bulles ou par un effet d'attraction des parois de la fissure.

En second lieu, quand le flux de gaz augmente, les bulles peuvent fusionner produisant des bulles plus grosses. Leurs formes peuvent alors évoluer et devenir ovale, la direction la plus grande étant celle de l'écoulement.

Il est possible d'identifier quatre modes d'écoulement d'une bulle en tant que circonstances possibles se produisant dans les fractures de la roche. Ces modèles dépendent de l'écoulement du gaz et de la taille de la fracture. Il nous faut analyser la vitesse d'une bulle de gaz en fonction de chacun de ces modes :

- a) bulles pour lesquelles l'effet de la paroi de la fracture est négligeable

Les équations classiques du mouvement d'une bulle peuvent être utilisées si l'on suppose qu'il n'y a aucune perturbation due aux parois de la fracture sur l'écoulement de la bulle. Cette condition peut se produire pour des micro bulles localisées dans des fissures ayant une taille relativement grande.

- b) bulles montant le long d'une fracture étroite

Dans ce cas, les parois de la fracture influent sur la montée de la bulle car la dimension de la largeur de la fracture est du même ordre de grandeur que le diamètre de la bulle. La vitesse de la bulle (q_B) normalisée à la vitesse de Stokes (v) a été modélisée par Lerman [13]. L'auteur considère la fracture comme deux plaques parallèles distantes d'une longueur b et il propose pour rapport entre les deux vitesses ci-dessus la relation suivante où r est le rayon de la bulle :

$$\frac{q_B}{v} = 1 - 1.004 \left(\frac{r}{b}\right) + 0.418 \left(\frac{r}{b}\right)^3 - 0.21 \left(\frac{r}{b}\right)^4 - 0.169 \left(\frac{r}{b}\right)^5 \quad (15)$$

- c) bulles situées dans une phase transitoire

Une telle phase transitoire apparaît par exemple lorsque le flux de gaz augmente ou lorsque la taille de la fissure se réduit. Les bulles en devenant ovales forment un écoulement typique de bulles alignées.

- d) panaches de bulles dans des milieux karstiques

En ce qui concerne la vitesse du fluide, un terme additionnel non négligeable (qui peut varier de 10 à 40 cm/s) doit être considéré lorsqu'il y a un effet de turbulence dans le déplacement des bulles [4]. Ceci arrive par exemple dans des environnements karstiques où des panaches de bulles peuvent s'élever sans que l'on puisse noter un effet significatif dû au frottement des bulles sur les parois.

4. Modélisation du transport du radon contenu dans une bulle

On s'intéresse maintenant à la modélisation du mouvement et au devenir d'une bulle contenant du radon à l'état gazeux. Plusieurs phénomènes apparaissent : le déplacement de la bulle dans l'eau, la scission en bulles de tailles plus petites, le transfert du radon contenu dans cette bulle au travers de la paroi vers l'eau et la dissolution de ce radon après sa sortie de la bulle.

Nous allons successivement modéliser : la pression interne du gaz dans la bulle, la vitesse de déplacement d'une bulle dans le fluide ambiant, le coefficient de transfert de gaz de la bulle, le flux de gaz au travers de la paroi de la bulle, la variation du rayon de la bulle en fonction du temps.

Hypothèse : dans cette partie, on suppose que :

- il n'y a pas d'écoulement de fluide dans l'aquifère
- la température est constante
- à l'instant initial la concentration du radon dans l'eau C est nulle

4.1 Pression interne dans la bulle

On considère les notations suivantes :

ρ_w densité de l'eau

g constante de gravitation

Z profondeur à laquelle se trouve la bulle dans l'aquifère

σ tension de la surface de la bulle

r rayon de la bulle

La quantité $\rho_w g Z$ représente la pression hydrostatique, le terme $\frac{2 \sigma}{r}$ est appelé pression de Laplace et P_A la pression atmosphérique. Alors la pression interne dans la bulle P_B s'écrit :

$$P_B = P_A + \rho_w g Z + \frac{2 \sigma}{r} \quad (16)$$

Les graphes suivants représentent cette pression intérieure P_B dans une bulle obtenue à partir de l'équation (16) en fonction de son rayon et de la profondeur à laquelle elle se trouve :

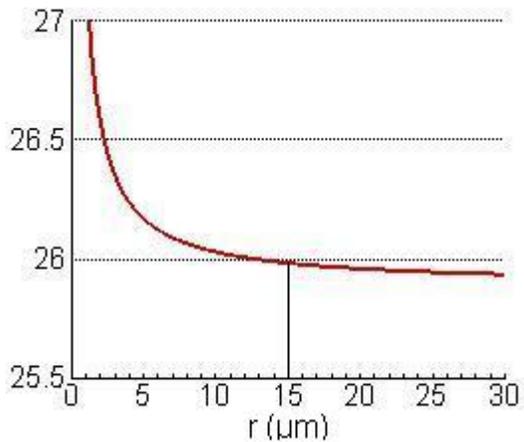


Figure 3.1 : Profondeur de 250 m.

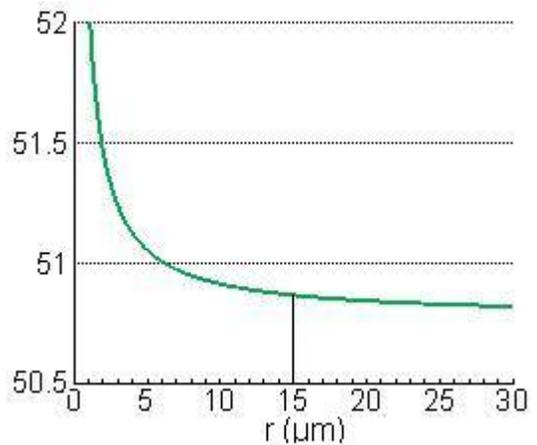


Figure 3.2 : Profondeur de 500 m.

On constate que les courbes ci-dessus ont approximativement la même allure et que les intervalles de variation autour d'une valeur moyenne sont relativement faibles. Les valeurs moyennes dépendent fortement de la profondeur comme le montre le graphe ci-dessous dans lequel on représente les deux graphes 3.1 et 3.2 avec le même spectre.

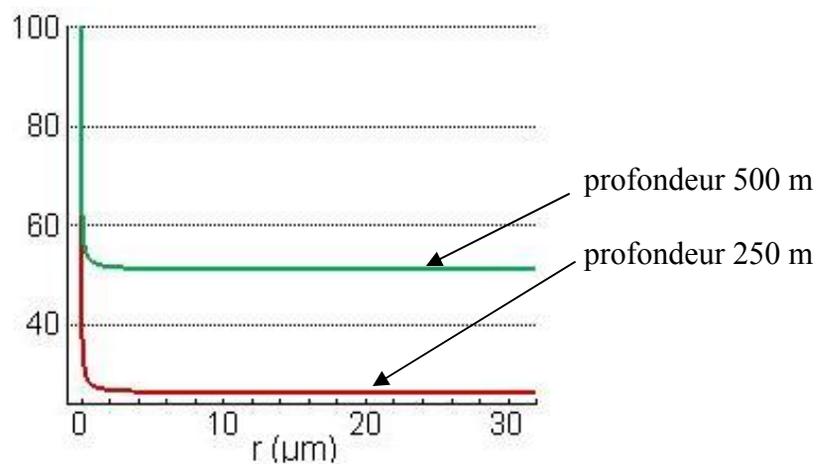


Figure 3.3 : Pression interne d'une bulle de en fonction de son rayon.

On constate aussi que l'intervalle de variation de cette pression est approximativement le même quelque soit la profondeur (≈ 0.2 atm).

Ces graphes mettent en évidence le fait que la pression interne dans une bulle est quasiment constante dès que le rayon est supérieur à $15 \mu m$ et que cette pression interne dépend essentiellement de la profondeur.

4.2 Vitesse de déplacement d'une bulle dans le fluide ambiant

Introduisons les notations suivantes :

ρ_g densité du gaz dans la bulle

μ_B viscosité du gaz dans la bulle

Suite à une étude combinant des développements théoriques et des observations expérimentales, Levich propose de caractériser la vitesse de la bulle V_B par la relation [14]:

$$V_B = \frac{2}{9} \frac{gr^2 (\rho_w - \rho_g)}{\mu_B} \quad \text{où } r = r(T) \quad (17)$$

En introduisant la viscosité cinématique du gaz ν , on peut alors définir le nombre de Reynolds de la bulle R_e [15] en posant:

$$R_e = 2r \frac{V_B}{\nu_g} \quad (18)$$

Plus r est grand, plus le flux de la bulle devient asymétrique au niveau des hémisphères amont et aval. On observe une séparation de ce flux lorsque le nombre de Reynolds R_e atteint la valeur critique de 20 [15]. Un sillage instable commence alors à se développer. Lorsque le nombre de Reynolds atteint la valeur de 150, le sillage devient totalement instable et les bulles se déforment, passant d'une géométrie sphérique à une géométrie ellipsoïdale [11]. Les expériences sur la variation de T en fonction de V_B ont validé l'équation (17) pour $r < 60 \mu m$, mais elles montrent aussi qu'une modification est nécessaire pour les grandes bulles [12].

Lors de son déplacement, la bulle peut se déplacer en décrivant soit une trajectoire régulière soit une trajectoire très irrégulière que l'on peut cependant interpréter comme des oscillations le long d'une trajectoire régulière. On analyse chacun des deux cas.

4.2.1 Vitesse de déplacement d'une bulle sans oscillations

Pour les bulles sans oscillation, Clift et al proposent [4] une version modifiée de l'équation (17) par l'expression de V_B :

$$V_B = 1/3 a g r^b v^m \quad (19)$$

où a et b sont des coefficients dépendant de la vitesse (voir tableau 3.2.1)
 v : viscosité cinématique cm^2s^{-1}

A partir d'observations faites par Leifer [12], on suppose que le coefficient m est linéaire par morceau selon la variable r , exprimée en μm , et on distingue deux cas :

- $R_e < 1$, $m = -1$
- $R_e \geq 1$, $m = 10.52r - 1.04$ (20)

R_e	$r(\mu\text{m})$	a	b
<1	<60	1.00	2.00
1-35	60-275	0.75	2.00
35-120	275-475	50.67	3.17
120-425	475-665	75150	5.57
425-520	665-785	1277	4.07
520-540	785-900	5042	4.61

Tableau 3.2.1 Expressions des coefficients a et b

4.2.2 Vitesse de déplacement d'une bulle ayant des oscillations

Dans ce paragraphe, on considère un milieu fracturé.

Il a été observé par Leifer [12] qu'à une température donnée, la trajectoire des bulles se modifiait en fonction du nombre de Reynolds et en fonction du diamètre des bulles. Par exemple, pour une température de 20°C et un diamètre supérieur à $670\ \mu\text{m}$, la nature de la trajectoire se modifiait lorsque le nombre de Reynolds atteignait la valeur seuil de 400. En dessous de cette valeur, la trajectoire était régulière et au-delà, des oscillations apparaissaient. Ces auteurs ont également observé que la forme des bulles avait aussi un effet sur la nature de la trajectoire. Cette remarque avait déjà été faite par Duineveld [6] qui observait que, lorsque la taille des bulles augmentait, les oscillations devenaient hélicoïdales.

A cause de ces oscillations, la vitesse de la bulle dépend des variations de son rayon r qui lui-même dépend du nombre de Reynolds du fluide [12].

La relation liant le rayon r_p (exprimé en microns) à la température est donnée par Leifer [12] :

$$r_p = 1086 - 16.05 T_p \quad (21)$$

où la température T_p exprimée en degré Celsius vérifie $0 < T_p < 35$

Cette modélisation de V_B qui a été développée à partir d'observations de bulles oscillantes [12] est en bon accord avec les résultats de [4] pour une température de 20 °C et elle est applicable pour les bulles oscillant lorsque la température varie entre 0 et 30 °C et lorsque le rayon r varie entre r_p et $< 4\,000$ microns. On arrive à l'équation suivante d'après [8]

$$V_B = \left\{ V_{Bm} + j_1 (r - r_c)^{m_1} \right\} e^{\left\{ j_2 T (r - r_c)^{m_2} \right\}} \quad (22)$$

où

m_1 et m_2 coefficients dans la paramétrisation de la vitesse de la bulle V_B , sans dimensions

j_1 coefficient dans la paramétrisation de la vitesse de la bulle V_B

j_2 coefficient dans la paramétrisation de la vitesse de la bulle V_B

T température

r_c rayon critique : jusqu'à cette valeur les bulles n'oscillent pas quelque soit T

V_{Bm} valeur minimale de la vitesse à partir de laquelle l'oscillation de la bulle diminue

Les valeurs numériques de tous ces coefficients sont regroupées dans le tableau 3.2.2 ci-dessous :

$r (\mu m)$	j_1	j_2	$r_c (\mu m)$	V_{Bm}	m_1	m_2
$< 4 \times 10^3$	0.733	4.792×10^{-4}	585	22.16	-0.849	-0.815
$4 \times 10^3 - 10^4$	11.05	0.0	585	19.15	0.0	0.0

Tableau 3.2.2 Coefficients de la vitesse de la bulle

L'utilisation des équations (19), (21) et (22) nous permet de déterminer la vitesse d'une bulle en fonction de son rayon :

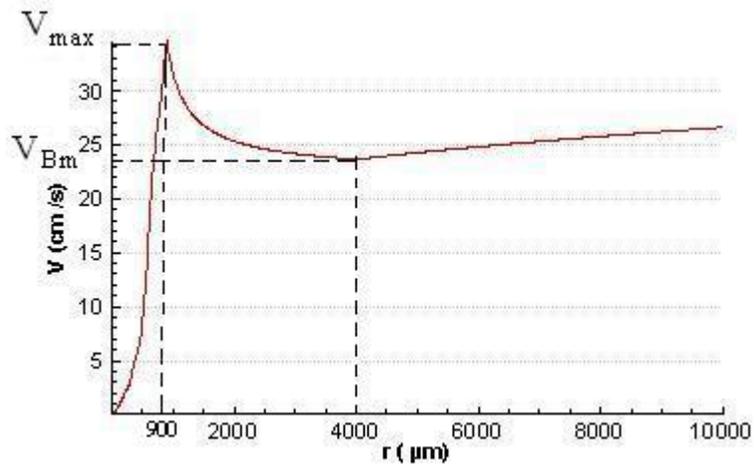


Figure 3.2.1 : Vitesse de la bulle V_B à une température de 20° C en fonction de son rayon r

Discussion

Si on regarde la courbe représentant la vitesse d'une bulle en fonction de son rayon (Figure 3.2.1) ci-dessus, trois zones peuvent être distinguées selon la valeur du rayon par rapport à deux valeurs seuil pour lesquelles il y a une modification importante dans le comportement de la bulle. Ces valeurs seuil sont respectivement 900 et 4000 μm et l'on constate que :

- pour un rayon inférieur à 900 μm , la vitesse augmente fortement et la bulle n'est pas soumise à des oscillations
- pour un rayon compris entre 900 et 4000 μm , la vitesse diminue et la bulle est soumise à des oscillations
- à partir d'un rayon de 4000 μm , la vitesse se stabilise pour croître légèrement et les oscillations diminuent pour devenir négligeables [4].

A partir de la relation (19) et des équations (20), (21) et (22), il est possible de tracer le nombre de Reynolds en fonction du rayon r :

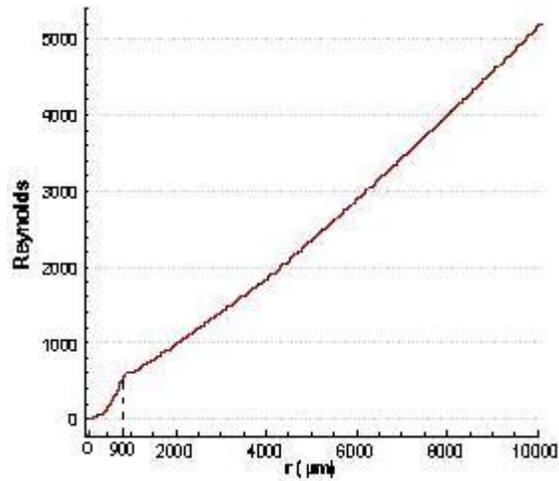


Figure 3.2.2 Nombre de Reynolds de la bulle à une température de 20° C en fonction de son rayon r

4.3. Coefficient de transfert de gaz pour une bulle :

Le transfert d'un gaz au travers de la paroi d'une bulle est dû à la différence de concentration existant de part et d'autre de cette paroi. Ainsi le taux du gaz qui sort dépend du paramètre k_B qui a été déterminé par Clift [4] selon les valeurs de r :

Premier cas : si $r \leq 180 \mu\text{m}$, alors ce coefficient est donné par :

$$k_B = \left\{ 0.212 \frac{DV_B}{r} \right\}^{0.5} \quad (23)$$

avec les notations

D constante de diffusion du radon

V_B vitesse de la bulle de gaz dans l'eau

r rayon de la bulle de gaz

Second cas : si $r > 180 \mu m$, alors ce coefficient est donné par :

$$k_B = \left\{ \frac{2}{\pi} \left(1 - 2.89 R_e^{-0.5} \right) \frac{D V_B}{r} \right\}^{0.5} \quad (24)$$

où R_e est le nombre de Reynolds.

Les équations (23) et (24) permettent de déterminer la vitesse du transfert du gaz considéré au travers de la paroi de la bulle en fonction de son rayon avec un coefficient de diffusion $D = 1.37 (10^{-5}) \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ et à une température de 20° C (voir figure 3.3.1).

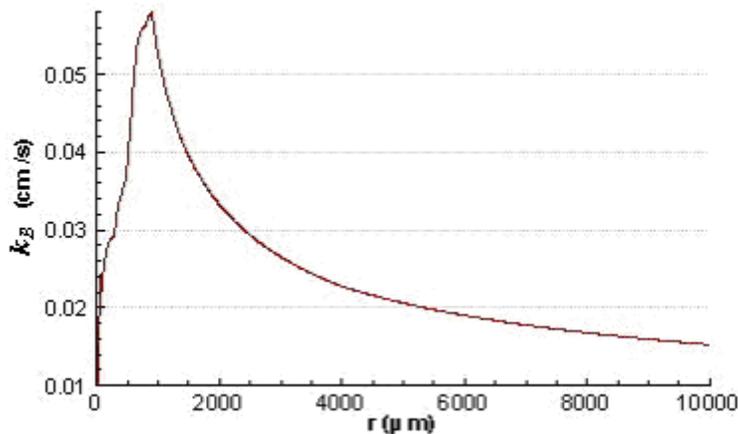


Figure 3.3.1 : Coefficient de transfert de gaz de radon, k_b en fonction du rayon r de la bulle,.

4.4 Flux du radon au travers de la paroi de la bulle

On suppose que :

- 1) l'eau contenue dans l'aquifère est partout de même nature
- 2) toutes les bulles contiennent le même mélange formé de (i-1) gaz porteurs et de radon
- 3) ce mélange est homogène dans toutes les bulles
- 4) seul le radon sort de la bulle.
- 5) seul le radon se dissous dans l'eau

L'équation la plus utilisée dans la littérature, et la plus plausible sur le plan physique, pour modéliser ce transfert est donnée par Tikuisis [20] :

$$\frac{dN_R}{dt} = F = k_b 4 \pi r^2 \left(C - \frac{P_{B_R}}{H} \right) \quad (25)$$

avec les notations :

F flux de radon au travers la paroi de la bulle

N_R nombre de moles de radon dans une bulle

t temps

P_{B_R} pression interne de gaz radon dans la bulle.

T température (Kelvin)

H constante de Henry

La loi de Henry dépend de la température et pour la déterminer, on utilise la relation donnée par Rolf et Sander [18] :

$$H(T) = \frac{1}{9.3 \times 10^{-6} \exp\left(-2600 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298.15}\right)\right)} \left[\text{atm cm}^3 \text{mol}^{-1} \right] \quad (26)$$

Remarques

1) Dans un cadre plus général que celui de notre étude, quand $HC < P_B$ le radon va de la bulle vers le fluide extérieur, tandis que si $HC > P_B$ le radon vient du fluide extérieur.

2) On doit prendre en compte la décroissance radioactive au niveau de la bulle. Pour déterminer la quantité qui se désintègre, on utilise la loi de décroissance radioactive :

$$N_R(t) = N_{R_0} e^{-\lambda t} \quad (27)$$

avec les notations

N_{R_0} nombre de noyaux radioactifs présents à l'instant $t_0 = 0$

$N_{R(t)}$ nombre de noyaux radioactifs présents à l'instant t

λ constante de désintégration radioactive $2.1 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$.

3) Pour déterminer le flux de radon qui sort de la bulle en fonction du temps, il faut prendre en compte les variations :

- du rayon de la bulle
- de la profondeur
- de la pression
- de la température.

4) Pour calculer la pression interne du radon dans la bulle, on utilise la relation suivante :

$$P_{B_R} = \frac{NR}{N} \times P_B \quad (28)$$

N nombre total de moles de gaz considéré

4.5. Variation du rayon de la bulle en fonction du temps

La bulle de gaz est soumise à son poids et à la poussée d'Archimède (Figure 3.5.1). Or la masse volumique d'un gaz étant bien inférieure à la masse volumique de l'eau, la poussée est supérieure au poids et donc la bulle "monte". La pression des gaz contenus dans la bulle diminuant lors de la montée, le volume de la bulle augmente c'est-à-dire que son rayon augmente. Pour déterminer la variation de ce rayon, on utilise la relation des gaz parfaits qui s'énonce :

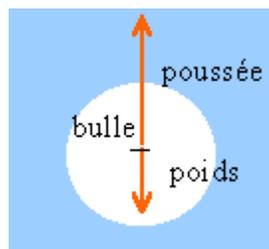


Figure 4.5.1 : Forces appliquées sur une bulle

$$P_B V = N R T \quad (29)$$

où l'on note :

V volume de gaz

N nombre total de moles de gaz considéré

R constante universelle du gaz de radon

T température absolue

Lorsqu'on dérive cette loi des gaz parfaits par rapport au temps on obtient :

$$V \frac{\partial P_B}{\partial t} + P_B \frac{\partial V}{\partial t} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt} \quad (30)$$

Or le volume des gaz dans la bulle vaut $V = \frac{4}{3} \pi r^3$, en remplaçant V par sa valeur dans la relation (30) et en utilisant l'expression de la pression de la bulle P_B (16) on obtient :

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \frac{d}{dt} \left(P_A + \rho_w g Z + 2 \frac{\sigma}{r} \right) + \left(P_A + \rho_w g Z + 2 \frac{\sigma}{r} \right) 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \left(\rho_w g \frac{dZ}{dt} - \frac{2\sigma}{r^2} \frac{dr}{dt} \right) + \left(P_A + \rho_w g Z + 2 \frac{\sigma}{r} \right) 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \rho_w g \frac{dZ}{dt} - \frac{4}{3} \pi r 2\sigma \frac{dr}{dt} + \left(P_A + \rho_w g Z + 2 \frac{\sigma}{r} \right) 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{4}{3} \pi r^3 \rho_w g \frac{dZ}{dt} + \left(\left(P_A + \rho_w g Z + 2 \frac{\sigma}{r} \right) 4\pi r^2 - \frac{4}{3} \pi r 2\sigma \right) \frac{dr}{dt} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt}$$

$$\left(4\pi P_A r^2 + 4\pi \rho_w g Z r^2 + \frac{16}{3} \pi r \sigma \right) \frac{dr}{dt} = RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt} - \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_w g \frac{dZ}{dt}$$

d'où

$$\frac{dr}{dt} = \left(RT \frac{dN}{dt} + RN \frac{dT}{dt} - \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_w g \frac{dZ}{dt} \right) \left(4\pi P_A r^2 + 4\pi \rho_w g Z r^2 + \frac{16}{3} \pi r \sigma \right)^{-1} \quad (31)$$

Le changement de r est lié à l'hydrostatique. L'évolution de la position de la bulle est :

$$\frac{dZ}{dt} = -V_B + V_F \quad (32)$$

où V_F représente le champ de vitesses.

Ces développements nous permettent de concevoir l'algorithme ci dessous

$$1) P_B = P_A + \rho_w g Z_j + \frac{2 \sigma}{r_j}$$

2) condition sur r_j pour calculer $V_B(r_j)$ et $k_B(r_j)$

si $r_j \leq 180 \mu m$

$$V_B(r_j) = 1/3agr_j^b v^m$$

$$m = 10.52r_j - 1.04$$

$$k_B(r_j) = \left\{ 0.212 \frac{DV_B(r_j)}{r_j} \right\}^{0.5}$$

si $180 \mu m < r_j < 900 \mu m$

$$V_B(r_j) = 1/3agr_j^b v^m$$

$$m = 10.52r_j - 1.04$$

$$k_B(r_j) = \left\{ \frac{2}{\pi} (1 - 2.89R_e^{-0.5}) \frac{DV_B(r_j)}{r_j} \right\}^{0.5}$$

si $r_j > 900 \mu m$

$$V_B(r_j) = \left\{ V_{Bm} + j_1 (r_j - r_c)^{m_1} \right\} e^{\left\{ j_2 T (r_j - r_c)^{m_2} \right\}}$$

$$k_B(r_j) = \left\{ \frac{2}{\pi} (1 - 2.89R_e^{-0.5}) \frac{DV_B(r_j)}{r_j} \right\}^{0.5}$$

$$3) \frac{dZ}{dt} = -V_B(r_j) + V_F$$

$$4) \frac{dN_j}{dt} = K_b(r_j) 4 \pi r_j^2 \left(C - \frac{P_B}{H} \right)$$

$$H(T) = \frac{1}{9.3 \times 10^{-6} \exp \left(-2600 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298.15} \right) \right)}$$

$$N_j(t_j) = N_0 e^{-\lambda t_j - 1}$$

$$5) \frac{dr}{dt} = \left(RT \frac{dN_j}{dt} + RN_j \frac{dT}{dt} - \frac{4}{3} \pi r_j^3 \rho_w g \frac{dZ}{dt} \right) \left(4\pi P_A r_j^2 + 4\pi \rho_w g Z_j r_j^2 + \frac{16}{3} \pi r_j \sigma \right)$$

$$N_{j+1} = N_j + \Delta t \frac{dN_j}{dt} - (N_j - N_0 e^{-\lambda t_j - 1})$$

$$r_{j+1} = r_j + \Delta t \frac{dr}{dt}$$

$$Z_{j+1} = Z_j + \Delta t \frac{dZ}{dt}$$

4.6 Résultats numériques

On suppose que

- la température est constante (20 ° C)
- le champ de vitesse V_F est nul
- la concentration du radon dans l'eau C est nulle (ce qui permettra d'avoir le flux maximal à travers la paroi de la bulle).

On note N_0 le nombre initial de moles de radon à l'intérieur de la bulle. L'étude numérique est faite en considérant quatre cas se construisant à partir des valeurs de deux paramètres :

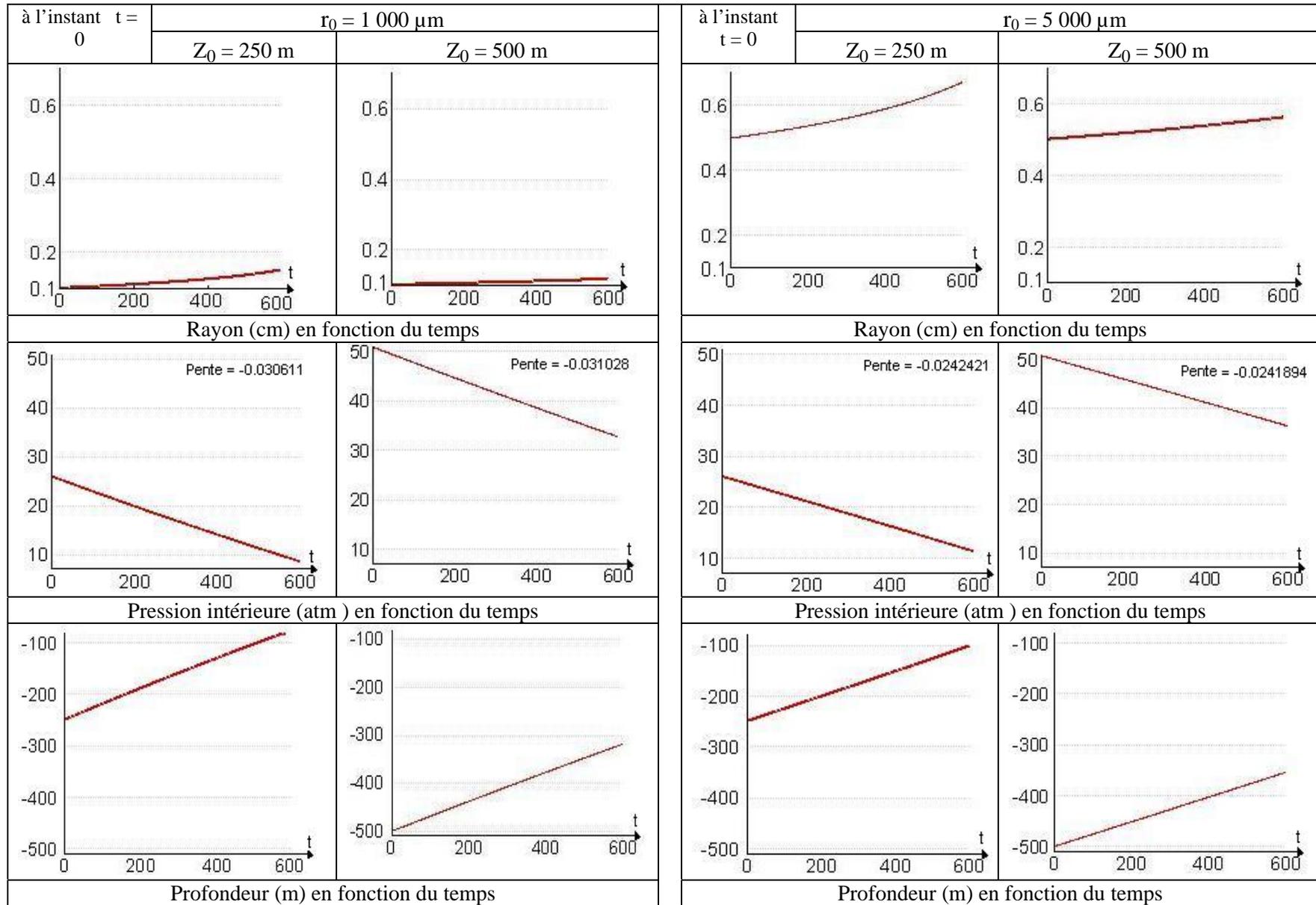
- le rayon initial de la bulle : 1000 ou 5000 μm
- la profondeur de la bulle : 250 ou 500 m

Comme résultats, on présente l'évolution de plusieurs entités en fonction du temps. On analyse successivement la concentration du radon à l'intérieur de la bulle, le flux de la masse de radon au travers de la paroi, la quantité de radon autour de la bulle, les variations du rayon, la pression de la bulle, la profondeur de la bulle dans l'eau, le nombre de moles radioactives à l'intérieur de la bulle. On choisit une discrétisation en temps de l'intervalle d'étude et l'on note t_j les instants où l'on calcule les valeurs des diverses variables.

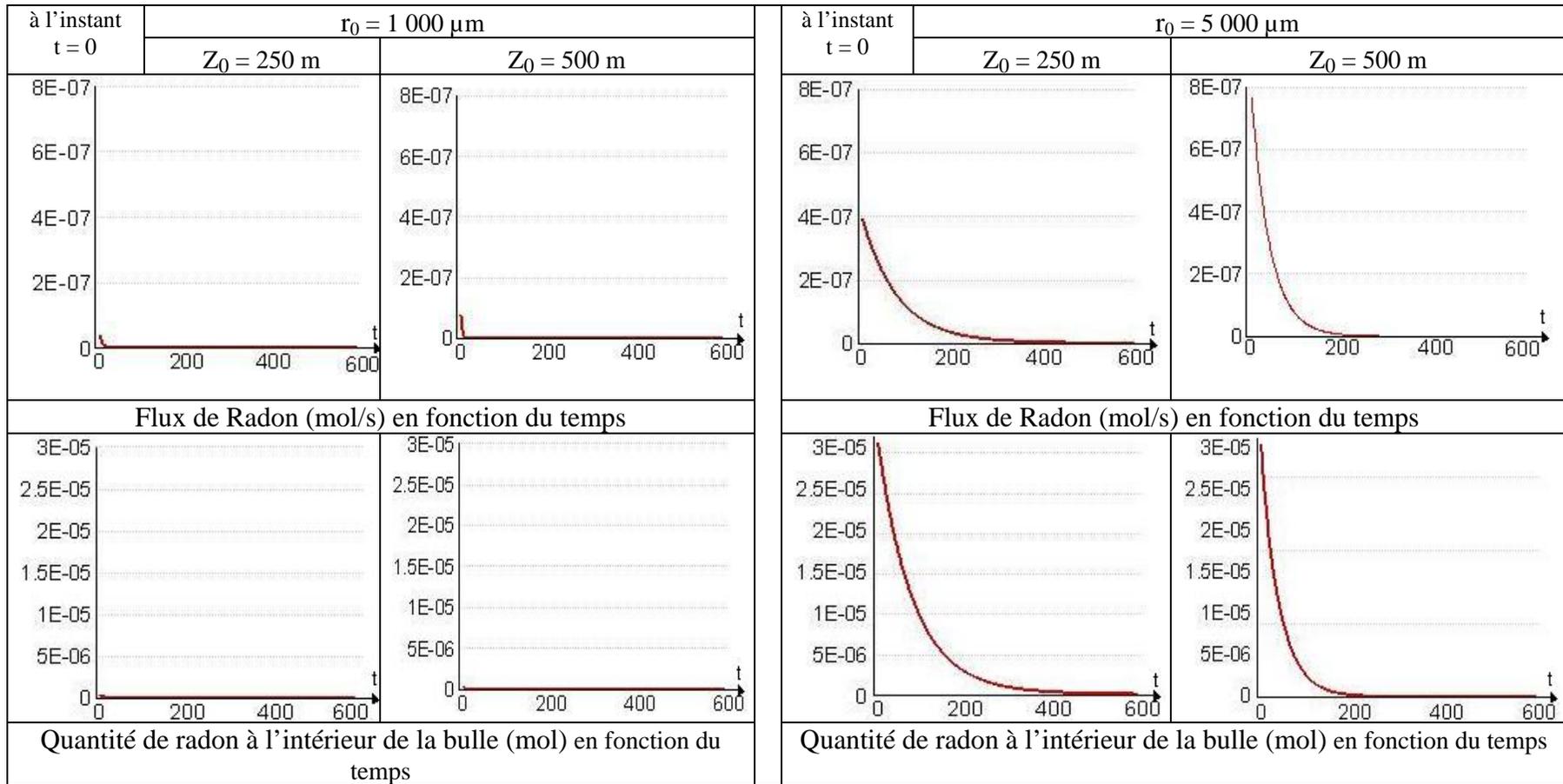
On peut ainsi mettre en évidence des changements de la pression intérieure de la bulle lorsque le temps j varie. Il en est de même pour le flux de gaz qui sort de la bulle et son rayon. Nous pouvons également effectuer plusieurs simulations avec des quantités initiales de gaz différentes.

On analyse de manière comparative sur plusieurs entités l'effet de la profondeur et celui du rayon de la bulle.

De plus nous supposons que la quantité initiale de radon est de 2.6442483×10^{-7} moles pour une bulle ayant un rayon initial de 1000 μm située à 250 m et que cette quantité vaut $3.12021383 \times 10^{-5}$ moles pour une bulle ayant un rayon initial de 5000 μm située à 500m.



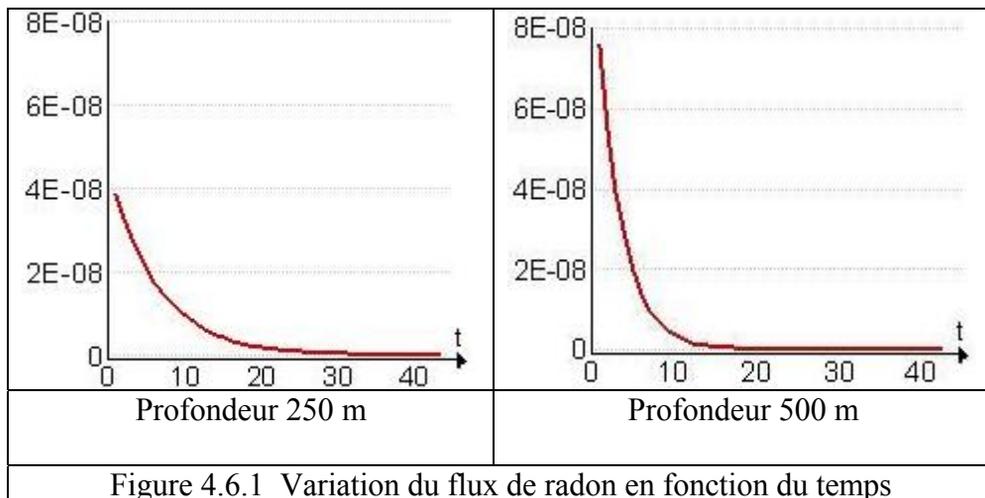
Variation du rayon, Pression intérieure et la profondeur de la bulle de gaz en fonction du temps



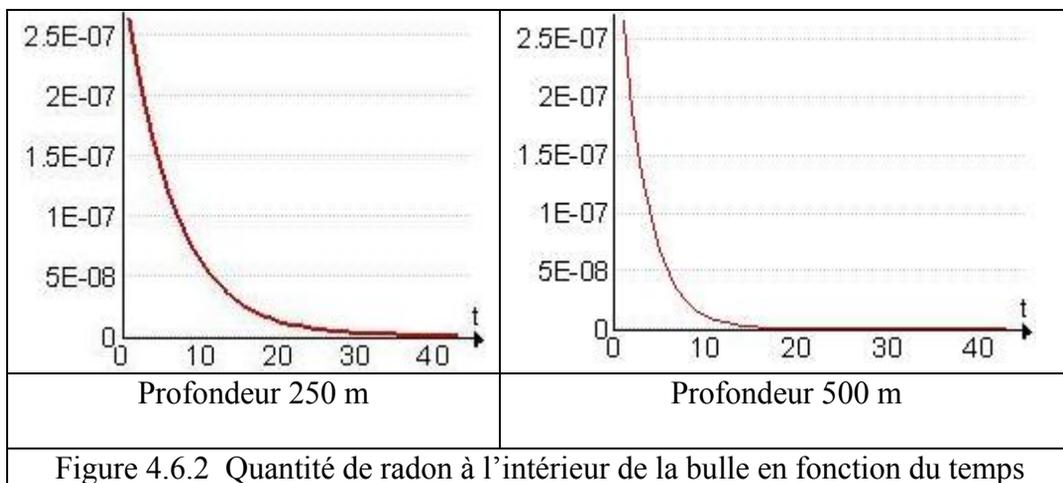
Flux de radon et la quantité de radon à l'intérieur de la bulle en fonction du temps

Discussion

- Le flux de radon pour une bulle de rayon $r_0 = 1\ 000\ \mu\text{m}$, n'est pas identiquement nul comme le graphe précédent pourrait le suggérer mais il varie entre $3.8\ \text{E}-08$ et 0 pendant un temps de 40 secondes lorsque la bulle est située à une profondeur de 250 m et il varie entre $7.56\ \text{E}-08$ et 0 pendant un temps de 15 secondes pour une profondeur de 500 m :



- de même, la quantité de radon à l'intérieur d'une bulle de rayon $r_0 = 1\ 000\ \mu\text{m}$, n'est pas identiquement nulle comme le graphe précédent le suggère mais elle varie entre $2.4\ \text{E}-07$ et 0 pendant un temps de 40 secondes lorsque la bulle est située à une profondeur de 250 m et il varie entre $2.4\ \text{E}-07$ et 0 pendant un temps de 15 secondes pour une profondeur de 500 m :



Analyse des résultats

Les quatre premières figures montrent que le rayon de la bulle augmente au cours du temps d'une façon très importante pour une profondeur de 250 m. Ceci est lié à une pression intérieure de la bulle qui diminue au fur et à mesure du temps comme le montre les graphes qui présentent la pression intérieure.

On constate que le flux de radon diminue au cours du temps d'une manière plus significative pour une pression très importante c'est-à-dire pour une profondeur de 500 m, ce qui entraîne une diminution de la quantité de radon à l'intérieur de la bulle plus rapidement lorsque la bulle est située à une profondeur plus grande.

On peut aussi constater que le flux de radon pour une bulle ayant un rayon initial de 5000 μm est dix fois plus grand que celui d'une bulle ayant un rayon initial de 1000 μm .

5 - Etude d'un ensemble de bulles

Le chapitre précédent nous a permis de modéliser et de simuler le mode d'évolution d'une bulle. Il nous faut maintenant considérer le cas où il y a une infinité de bulles. Il est nécessaire de réaliser un développement de masse spécifique car il n'est pas envisageable de traiter les bulles une par une. L'objectif reste bien de simuler numériquement l'évolution de la concentration de radon dans un aquifère suite à une activité sismique qui a eu pour conséquence la création de radon sous forme d'un ensemble de bulles, dans la partie inférieure de cet aquifère.

5.1 Cadre de l'étude

L'étude est tridimensionnelle. On considère un domaine de forme hexaédrique pour les développements numériques présentés, cependant ce cadre académique s'applique sans difficulté à un ouvert borné quelconque de \mathbb{R}^3 . Ce domaine hexaédrique est représenté à la figure ci-dessous. On y distingue deux zones : celles où l'activité sismique génère une production de radon (située dans la partie basse) et celle où les mesures sont effectuées (située dans la partie haute) :

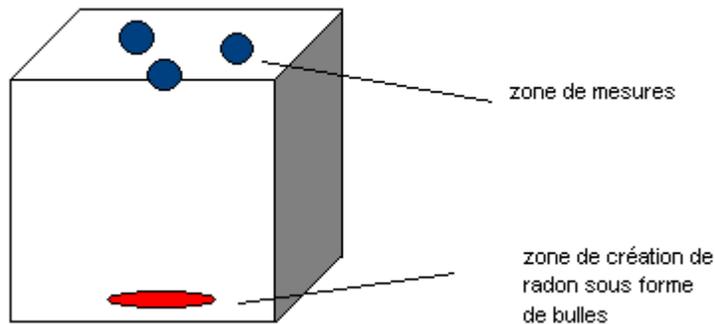


Figure 4.1 : Domaine d'étude

Ce domaine a pour dimensions $30 \times 100 \times 100$, l'unité considérée étant le mètre. Il est conforme au domaine utilisé dans [5].

Hypothèses

- 1) le milieu poreux est totalement saturé et il peut être multicouche
- 2) l'activité sismique dans la partie basse de l'aquifère a un double effet :
 - a) "cracker" certaines roches libérant ainsi du radon qui se combine avec un autre gaz porteur pour former des "bulles".
 - b) générer, à la base de l'aquifère une pression de fluide dans une direction donnée
- 3) les bulles sont de forme sphérique
- 4) le diamètre des bulles est limité par la largeur de la fracture ou des fissures (dans la partie basse) puis par le diamètre des pores (ailleurs)
- 5) le radon, initialement sous forme gazeuse peut se dissoudre très facilement dans l'eau

- 6) la concentration de radon qui est mesurée en surface correspond à la fois à la partie gazeuse qui atteint directement cette zone et au radon dissout dans l'eau

5.2 Méthode d'étude d'un ensemble de bulles

Pour traiter cette difficulté, il faut dans un premier temps, associer à chaque noeud du maillage considéré une entité E_i représentant un groupe de bulles dont le rayon r est tel que $|r - r_i| < \varepsilon$, ε étant un paramètre donné. L'étude de l'évolution de chaque groupe E_i consiste à regarder le mouvement d'une bulle de rayon r_i . On construit l'algorithme suivant :

Notations

- N_G : nombre de groupes E_i
- N_i : nombre de bulles dans le groupe E_i
- Q_0 : nombre de moles de radon à l'intérieur d'une bulle
- j : paramètre d'indexation du temps
- B_i : bulle de gaz numéro i
- V_{B_i} : vitesse de la bulle de gaz
- k_{B_i} : coefficient de transfert de gaz de radon
- C_i^{j+1} : concentration intérieure

Algorithme

On fait varier l'indice i de 1 jusqu'à N_G

$$P_{B_i}^j = P_A + \rho_w g Z_i^j + \frac{2\sigma}{r_i^j}$$

condition sur r_i^j pour calculer $V_{B_i}(r_i^j)$ et $k_{Bul}(r_i^j)$

si $r_i^j \leq 180 \mu m$

$$V_{B_i}(r_i^j) = 1/3ag(r_i^j)^b v^m$$

$$m = 10.52r_i^j - 1.04$$

$$k_{B_i}(r_i^j) = \left\{ 0.212 \frac{DV_{B_i}(r_i^j)}{r_i^j} \right\}^{0.5}$$

$$\text{si } 180 \mu m < r_i^j < 900 \mu m$$

$$V_{B_i}(r_i^j) = 1/3 a g (r_i^j)^b v^m$$

$$m = 10.52 r_i^j - 1.04$$

$$k_{B_i}(r_i^j) = \left\{ \frac{2}{\pi} (1 - 2.89 R_e^{-0.5}) \frac{D V_{B_i}(r_i^j)}{r_i^j} \right\}^{0.5}$$

$$\text{si } r_i^j > 900 \mu m$$

$$V_{B_i}(r_i^j) = \left\{ V_{B_m} + j_1 (r_i^j - r_c)^{m_1} \right\} e^{\left\{ j_2 T (r_i^j - r_c)^{m_2} \right\}}$$

$$k_{B_i}(r_i^j) = \left\{ \frac{2}{\pi} (1 - 2.89 R_e^{-0.5}) \frac{D V_{B_i}(r_i^j)}{r_i^j} \right\}^{0.5}$$

$$\frac{dZ_i}{dt} = -V_{B_i}(r_i^j) + V_F$$

$$H(T) = \frac{1}{9.3 \times 10^{-6} \exp \left(-2600 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298.15} \right) \right)}$$

$$\frac{dQ_i}{dt} = k_{B_i}(r_i) 4 \pi r_i^2 \left(C - \frac{P_{B_i}}{H} \right)$$

$$N_i(t_i) = N_0 e^{-\lambda t_i - 1}$$

$$\frac{dr_i}{dt} = \left(RT \frac{dQ_i^j}{dt} + RQ_i^j \frac{dT}{dt} - \frac{4}{3} \pi (r_i^j)^3 \rho_w g \frac{dZ_i}{dt} \right) \left(4\pi P_A (r_i^j)^2 + 4\pi \rho_w g Z_i (r_i^j)^2 + \frac{16}{3} \pi r_i^j \sigma \right)^{-1}$$

$$Q_i^{j+1} = Q_i^j + \Delta t \frac{dQ_i^j}{dt} - (Q_i^j - Q_0 e^{-\lambda t_i^{j-1}})$$

$$r_i^{j+1} = r_i^j + \Delta t \frac{dr_i}{dt}$$

$$Z_i^{j+1} = Z_i^j + \Delta t \frac{dZ_i}{dt}$$

$$C_i^{j+1} = N_i \frac{Q_i^{j+1}}{\frac{4}{3} \pi (r_i^{j+1})^3}$$

Conformément à ce processus, nous élaborerons deux modules de calcul : le premier BUL_1 qui gère l'évolution d'un groupe de bulles en utilisant l'algorithme précédent et le second BUL_2 qui gère l'évolution de la concentration de radon et qui réalise le couplage entre BUL_1 et le code SETMP.

5.3 Domaine de simulation

Considérons un domaine tridimensionnel, l'unité étant le mètre 30 x 100 x 100. Pour étudier un ensemble de bulles afin de déterminer la concentration de radon restant dans les bulles et aussi le flux de radon sortant de l'ensemble des bulles.

Le domaine d'étude est présenté dans la figure ci-dessous. Il est conforme au domaine géométrie testé dans [5] :

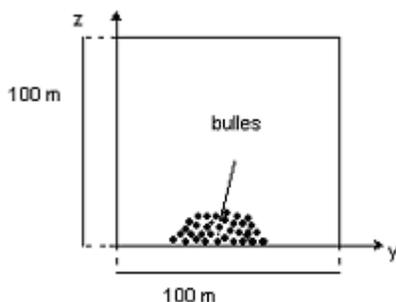


Figure 4.3.1 : Source de radon sous forme de bulles

5.4 Simulations numériques

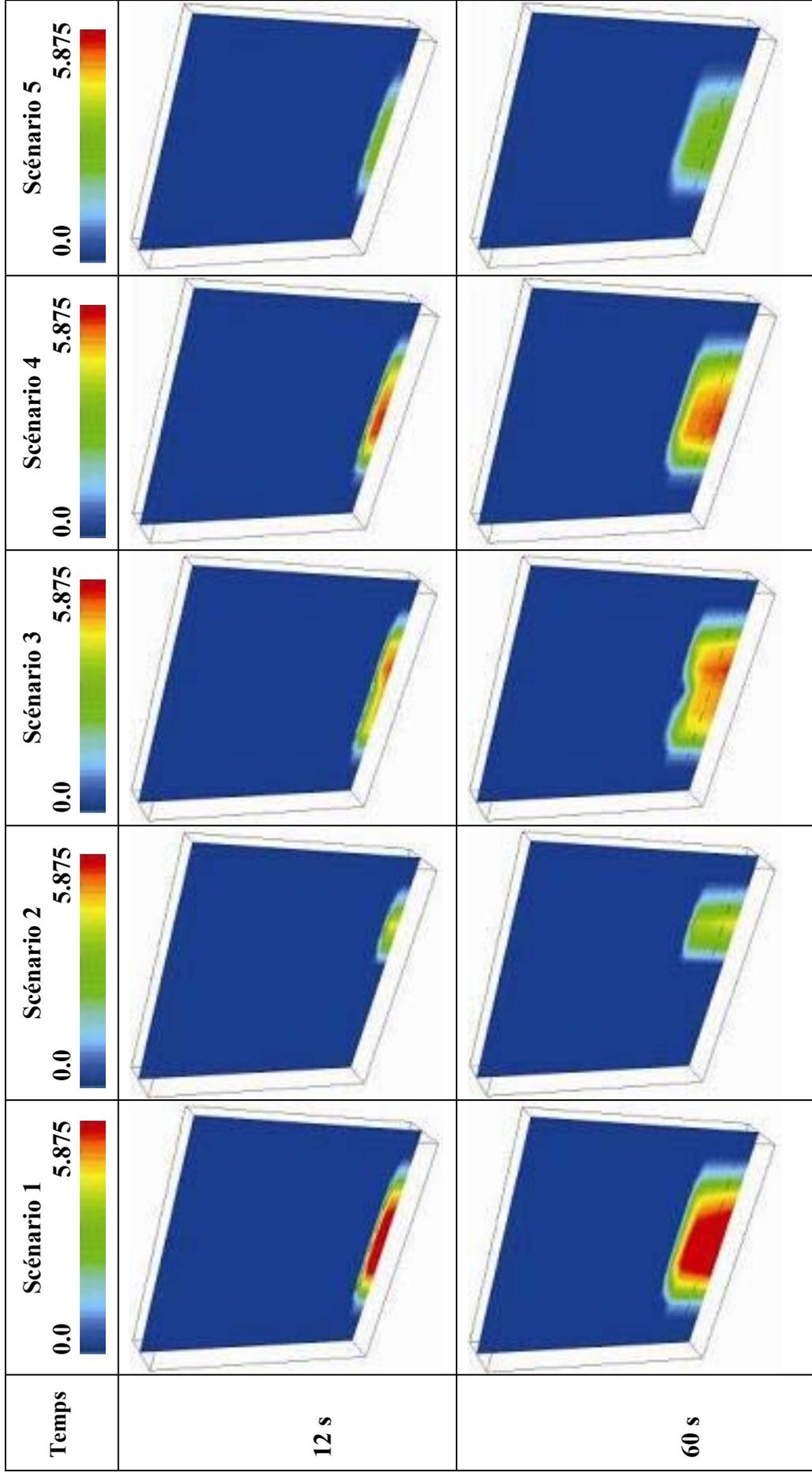
5.4.1 Effet du rayon et du nombre de bulles

On étudie la variation du flux de radon sortant des bulles et la variation de concentration de radon restant dans les bulles en fonction des variations du rayon et du nombre de bulles dans chaque groupe.

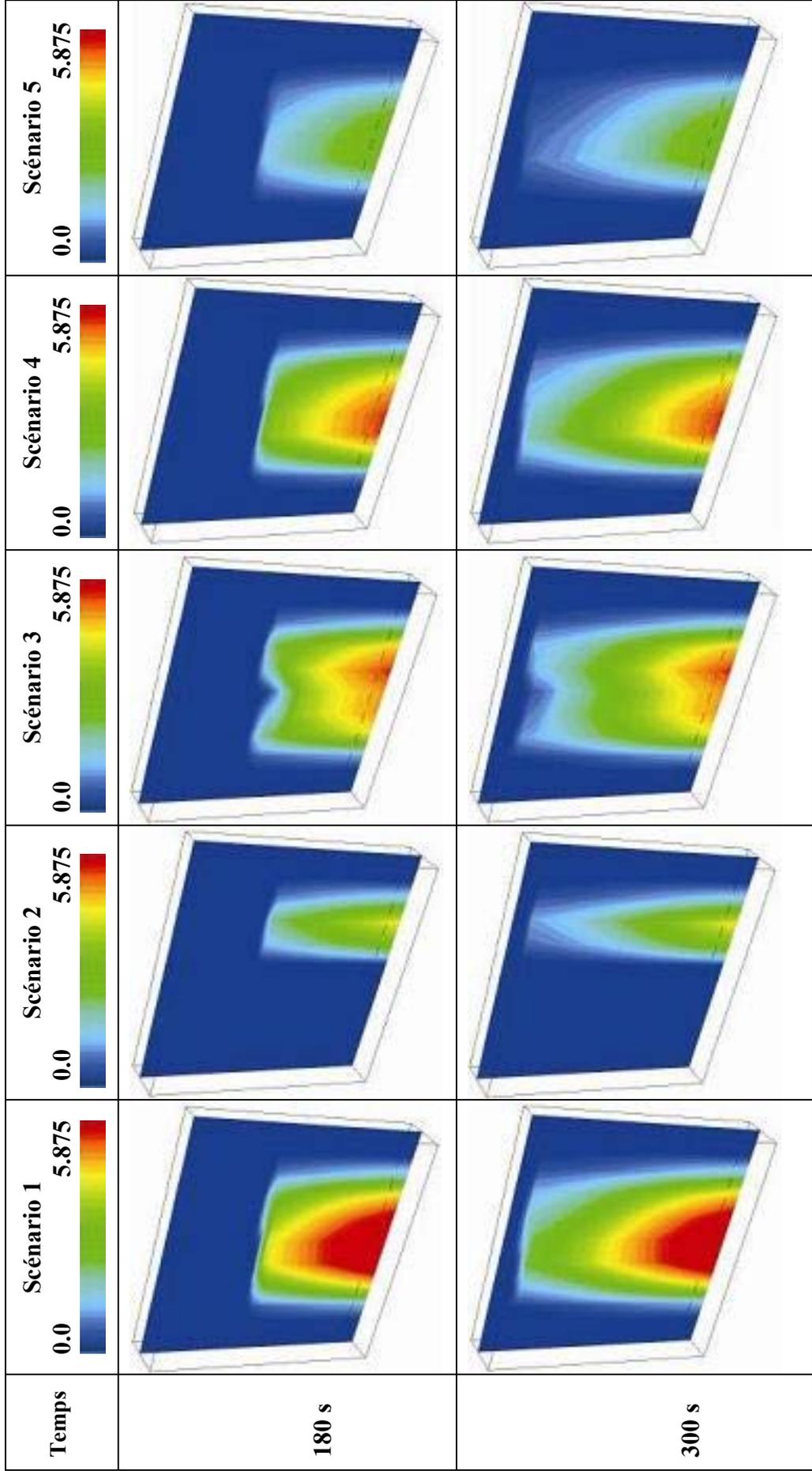
On considère 5 scénarios qui se différencient par des courbes de distributions différentes pour les rayons et les nombres de bulles. Ces scénarios sont décrits ci-dessous.

Pour chaque scénario, on étudie les variations en fonction du temps du flux de radon sortant des bulles

	Rayon des bulles pour chaque groupe E_i	Nombre des bulles dans chaque groupe E_i
Scénario 5		
Scénario 4		
Scénario 3		
Scénario 2		
Scénario 1		



Flux de radon sortant des bulles en fonction du temps.



Flux de radon sortant des bulles en fonction du temps.

Analyse des résultats :

* On constate que le flux du gaz du radon sortant des bulles décroît en fonction du temps pour chaque scénario.

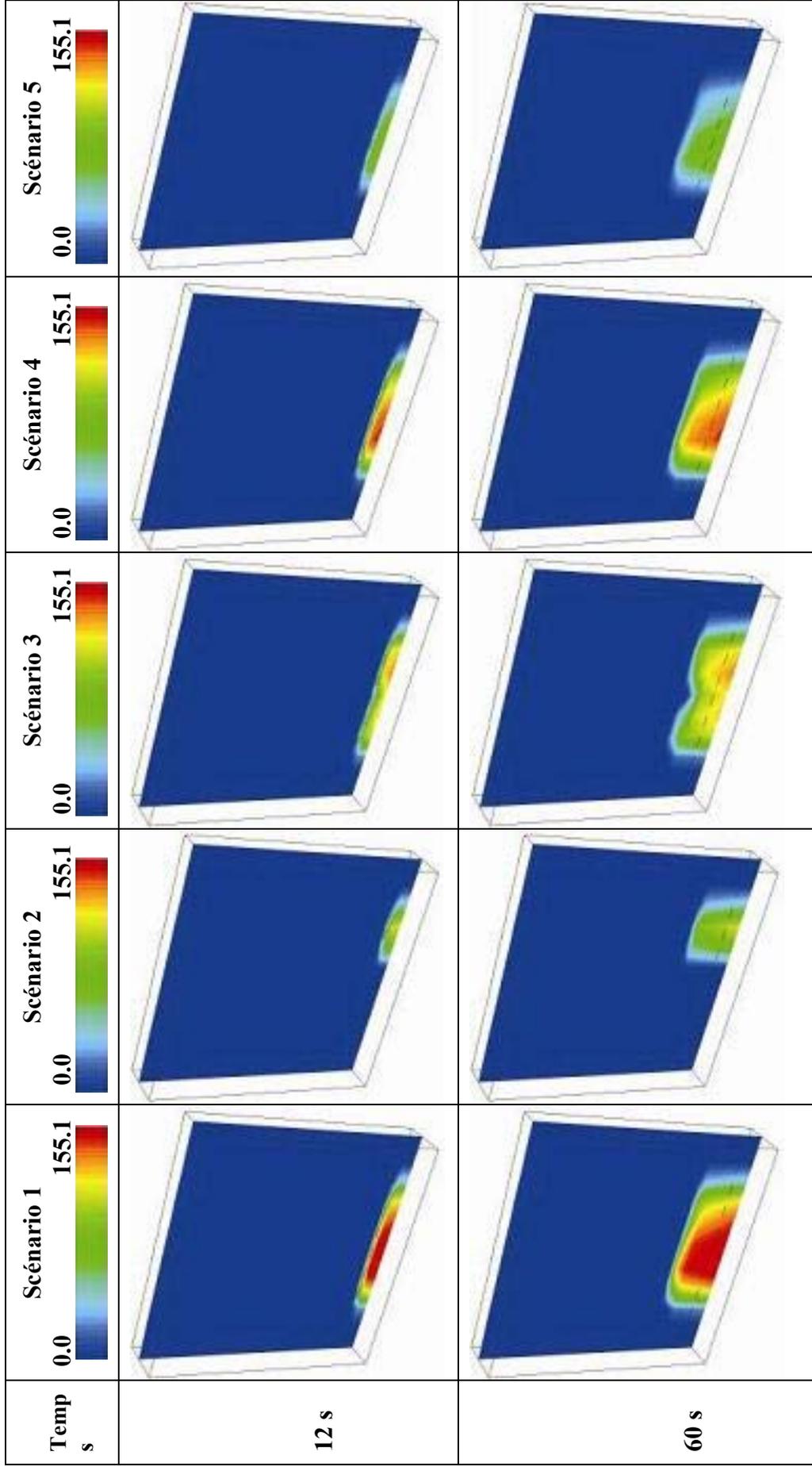
* Lorsque l'on diminue le rayon des bulles pour chaque groupe et pour le même nombre de bulles (scénarios 1, 2, et 3), on constate que le flux de radon sortant diminue de la même façon quelque soit le scénario.

* Ensuite si l'on diminue le nombre de bulles dans chaque groupe en gardant le même rayon pour chaque groupe (scénario 1, 4, et 5), alors le flux de radon sortant diminue.

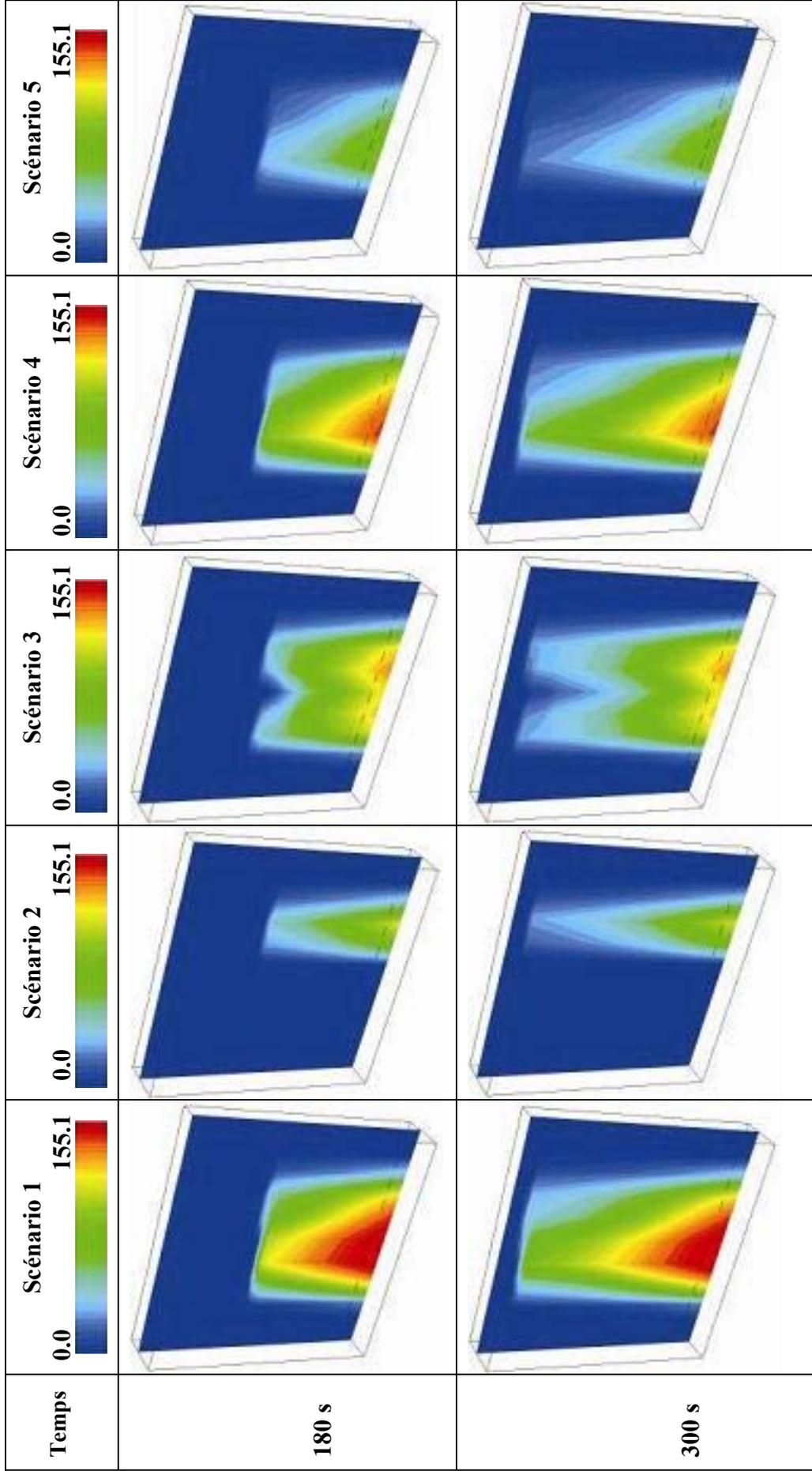
En conclusion, si les rayons des bulles ou le nombre de bulles augmente, le flux de radon sortant devient plus important et l'évolution de la concentration de radon est importante dans le domaine.

Résultats

Pour chaque scénario, on étudie les variations en fonction du temps de la concentration de radon restant dans les bulles



Concentration de radon restant dans les bulles en fonction du temps



Concentration de radon restant dans les bulles en fonction du temps

Analyse des résultats :

* On constate que la concentration de radon restant dans les bulles décroît en fonction du temps pour chaque scénario.

* Lorsque l'on diminue le rayon des bulles pour chaque groupe et pour le même nombre de bulles (scénarios 1, 2, et 3), on constate que la concentration de radon restant dans les bulles diminue de la même façon quelque soit le scénario.

* Ensuite si on diminue le nombre des bulles dans chaque groupe en gardant le même rayon pour chaque groupe (scénario 1, 4, et 5), alors la concentration de radon restant dans les bulles diminue.

En conclusion, si les rayons des bulles ou le nombre de bulles augmentent, la concentration de radon restant dans les bulles devient plus importante et le transport de radon dans l'eau est important dans le domaine.

5.4.2 Effet de la pression extérieure sur les bulles

On étudie dans ce paragraphe l'effet de la pression extérieure sur le déplacement des bulles. Pour cela, on impose des conditions aux limites de type Dirichlet et/ou Neumann sur les faces. Notons que l'on obtient également le champ de vitesses associé à cette pression.

Notations

Afin de bien préciser les notations pour les conditions aux limites qui sont posées sur les faces S_1 , S_2 et S_3 , on présente à la figure 4.4.1 la position respective de ces faces :

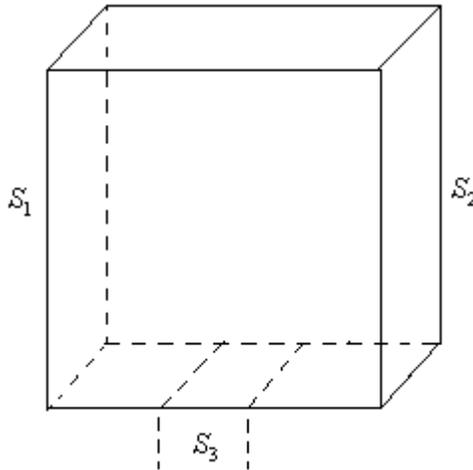


Figure 4.4.1 : Notations pour les frontières du domaine

Premier cas : on impose

Sur la face S_1 : une condition de Dirichlet sur la pression du fluide

$$P = 10^5 \text{ Pa}$$

une condition de Neumann sur le flux de fluide est

$$F = 1.0 \times 10^{-02} \text{ m/s}$$

Sur la face S_2 : une condition de Dirichlet sur la pression du fluide

$$P = 99 \text{ Pa}$$

une condition de Neumann sur le flux de fluide est

$$F = 0.999 \times 10^{-01} \text{ m/s}$$

Sur la face S_3 : pas de condition aux limites

La résolution du problème associé à ces conditions aux limites conduit à déterminer la solution en pression comme le montre la figure suivante :

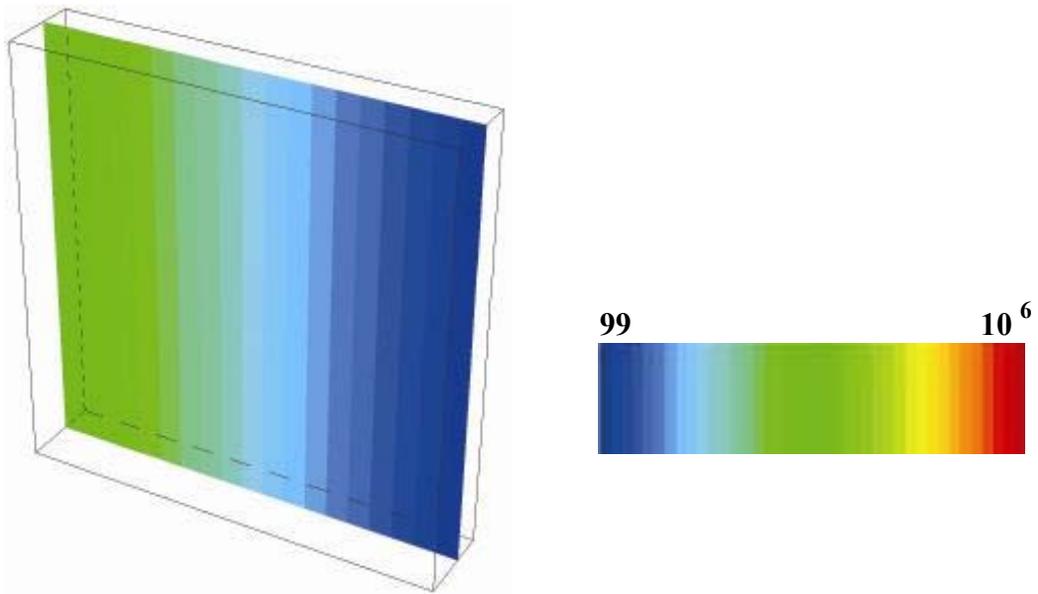


Figure 4.4.2 : Pression dans le plan X=8

On obtient également le champ de vitesses

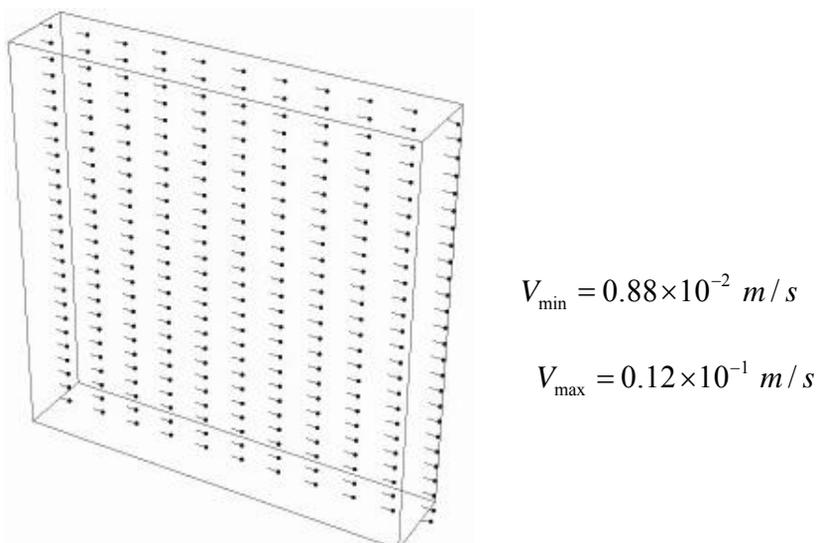


Figure 4.4.3 : Champ de vitesse dans le plan X=8

Comme nous montre la figure ci-dessus, en appliquant les conditions aux limites sur les faces considérées, on obtient un champ de vitesses dans le domaine, avec une vitesse minimale d'une valeur de $0.88 \times 10^{-2} \text{ m/s}$ et une vitesse maximale de la valeur de $0.12 \times 10^{-1} \text{ m/s}$.

Deuxième cas : on impose

Sur la face S_1 : une condition de Dirichlet sur la pression du fluide

$$P = 10^6 \text{ Pa}$$

une condition de Neumann sur le flux de fluide est

$$F = 1.0 \times 10^{-02} \text{ m/s}$$

Sur la face S_2 : une condition de Dirichlet sur la pression du fluide

$$P = 99 \text{ Pa}$$

une condition de Neumann sur le flux de fluide est

$$F = 0.999 \times 10^{-01} \text{ m/s}$$

Sur la face S_3 : pas de condition aux limites

La résolution du problème associé à ces conditions aux limites conduit à déterminer la solution en pression comme le montre la figure suivante :

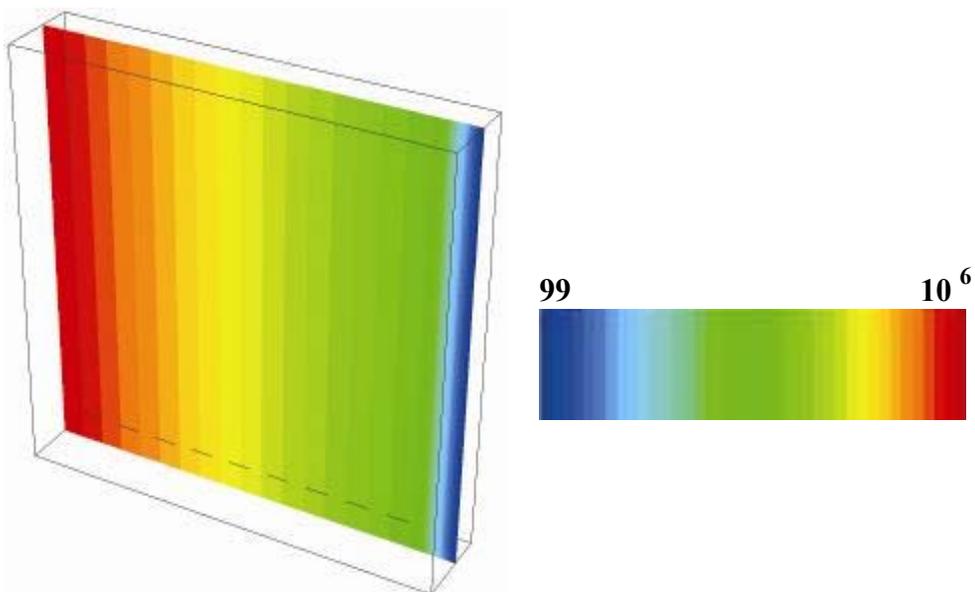


Figure 4.4.4 : Pression dans le plan X=8

En comparant les résultats obtenus dans la première application (Figure 4.4.3) par rapport à la deuxième application (Figure 4.4.4), on constate que les résultats de cette dernière sont plus significatifs.

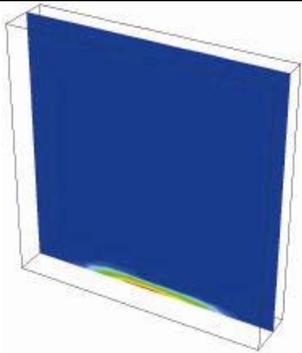
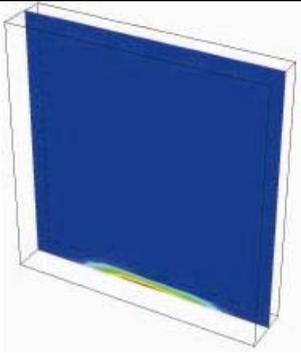
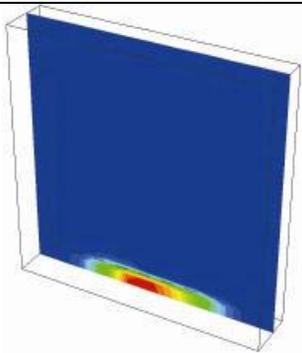
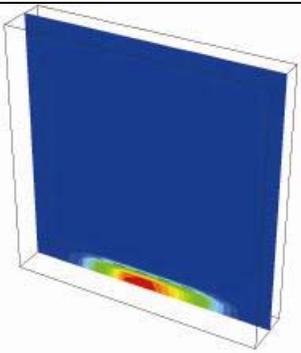
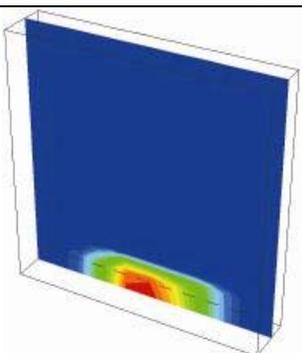
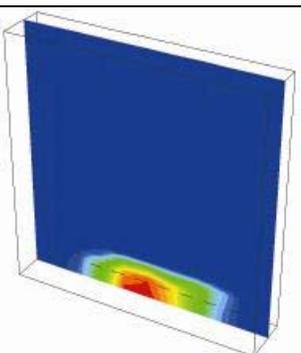
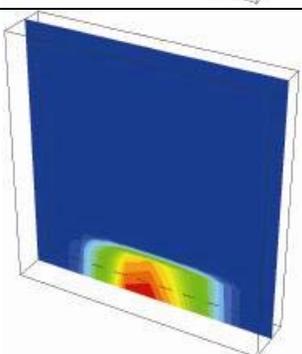
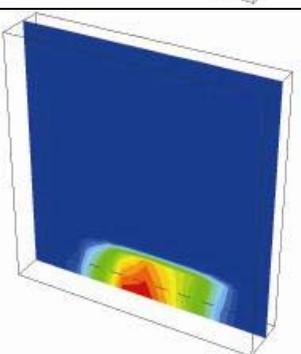
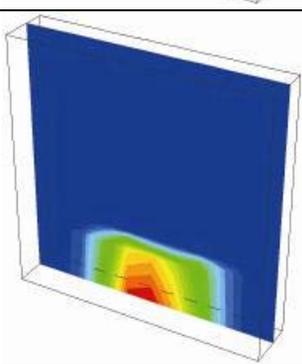
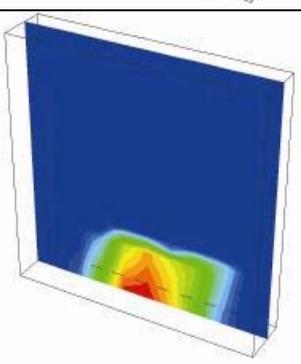
En appliquant les conditions aux limites sur les faces considérées, on obtient un champ de vitesses, avec une vitesse minimale de la valeur de $0.88 \times 10^{-1} \text{ m/s}$ et une vitesse maximale de la valeur de 0.12 m/s .

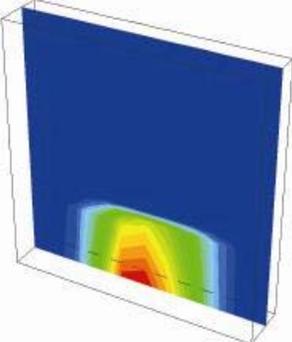
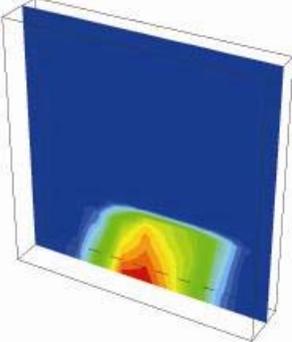
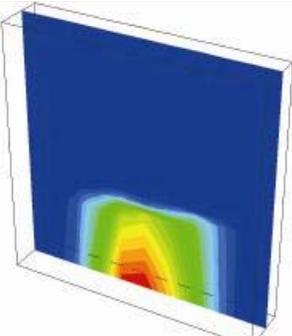
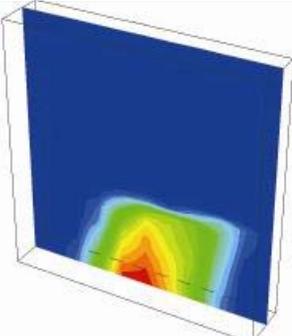
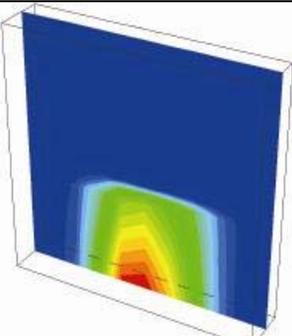
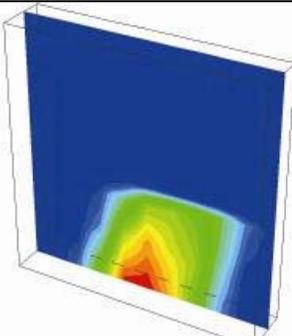
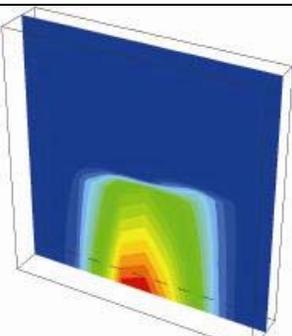
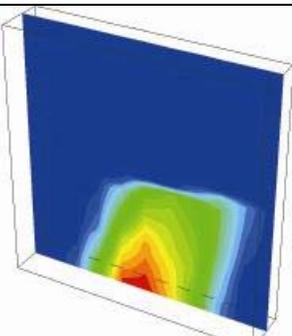
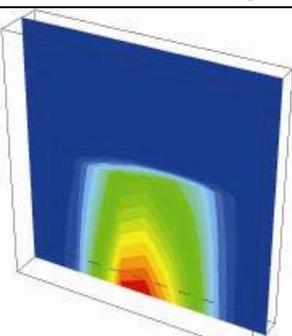
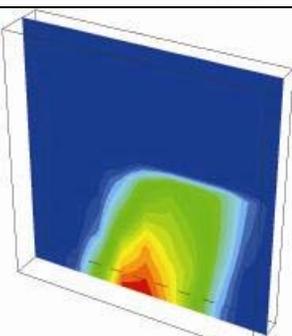
En comparant les valeurs de champ de vitesses obtenus dans la première application par rapport à la deuxième application, on constate que les valeurs de cette dernière est plus significatifs (à l'ordre de 10^{-1}).

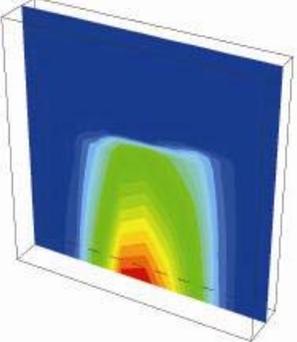
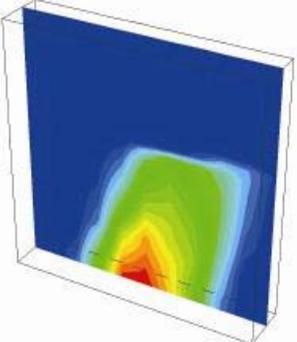
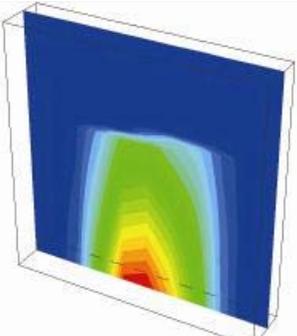
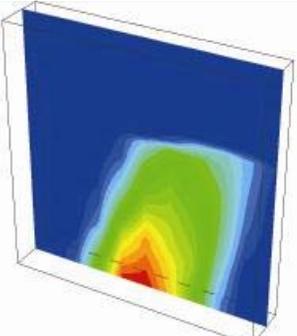
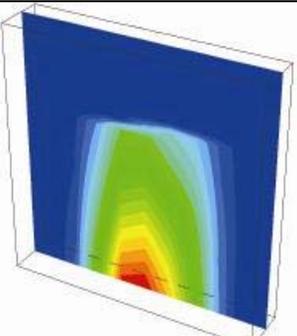
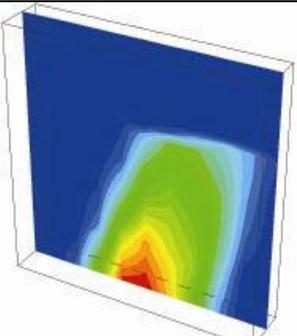
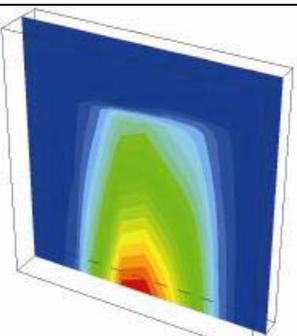
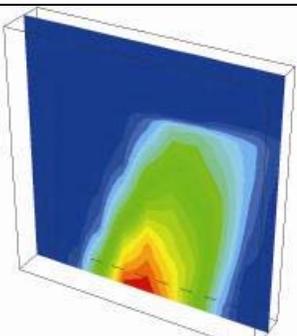
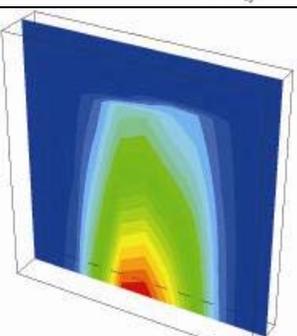
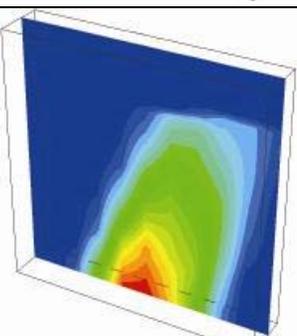
Résultats

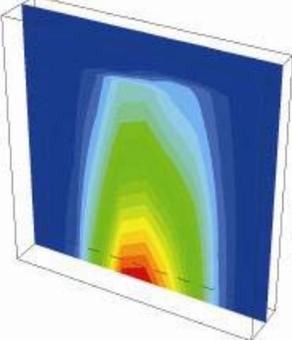
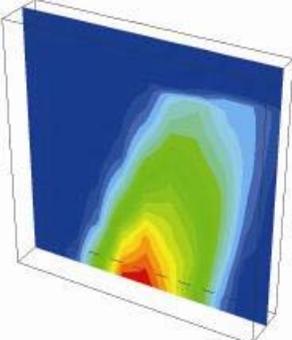
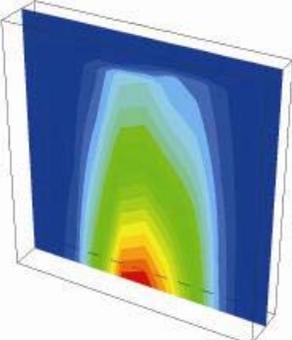
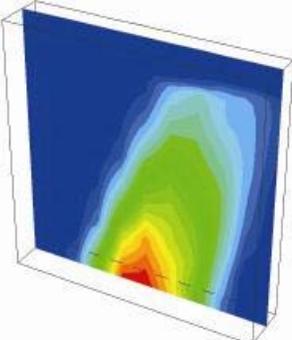
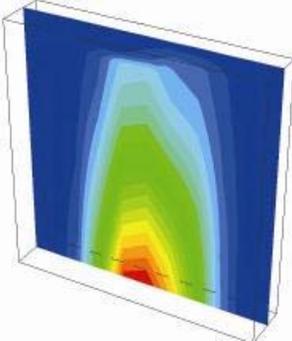
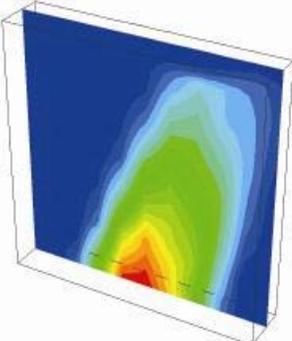
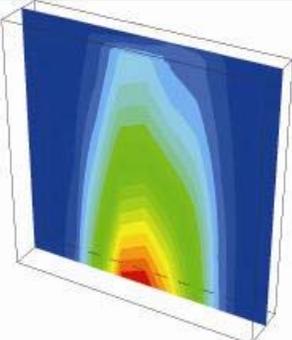
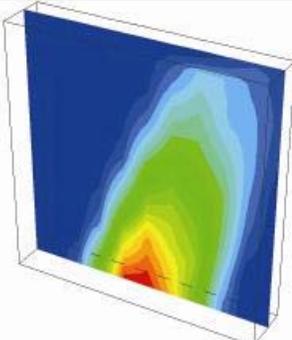
On présente les résultats des déplacements des bulles pour les deux cas ci-dessus

Il est intéressant de comparer, pour les deux cas ci-dessus, les déplacements des bulles dans le domaine considéré.

Temps	Premier cas	Deuxième cas
12 s		
36 s		
72 s		
108 s		
144 s		

Temps	Premier cas	Deuxième cas
180 s		
216 s		
252 s		
288 s		
324 s		

Temps	Premier cas	Deuxième cas
360 s		
396 s		
432 s		
468 s		
504 s		

Temps	Premier cas	Deuxième cas
540 s		
576 s		
612 s		
648 s		

Analyse des résultats :

On constate que les conditions aux limites donnent naissance à un écoulement horizontal qui influence l'orientation du "panache" prise pour le second cas :

- dans le premier cas on a un fort déplacement vertical et un faible déplacement horizontal dû à une faible pression extérieure.
- dans le deuxième cas on a le même déplacement vertical avec une influence plus forte de la pression extérieure ce qui se traduit par une inclinaison du panache.

5.4.3 Comparaison du transport de radon selon les deux modélisations

Ce paragraphe est consacré à l'étude comparative du mode de dissolution du radon.

On va étudier deux cas,

Premier cas : le radon est immédiatement dissout dans l'eau [5]

On utilise les conditions aux limites sur les faces S_1 , S_2 et S_3 suivantes :

Sur la face S_1 : une condition de Dirichlet sur le flux de fluide est

$$F = 2.0 \times 10^{-2} \text{ m/s}$$

Sur la face S_2 : une condition de Dirichlet sur le flux de fluide est

$$F = 2.0 \times 10^{-2} \text{ m/s}$$

Sur la face S_3 : une condition de Dirichlet sur la pression du fluide

$$P = 5 \text{ Pa}$$

une condition de Neumann sur le flux de fluide est

$$F = 1.0 \times 10^{-02} \text{ m/s}$$

Deuxième cas : le radon n'apparaît que sous forme de bulles puis est progressivement dissous (modélisation actuelle)

L'étude consiste à étudier un ensemble des bulles sans le terme source de radon, avec un volume de bulles bien déterminé (valeur initiale égale à 5501,1265 litres)

On utilise les mêmes conditions aux limites que dans le premier cas

Cet ensemble de bulles est partagé en plusieurs petits groupes (axe y). Le nombre de bulles contenues dans chaque groupe est représenté sur le graphe :

Pour les simulations numériques, on a supposé le même terme source de radon $Q_c = 5Bq/m^3$ sur la face S_3 .

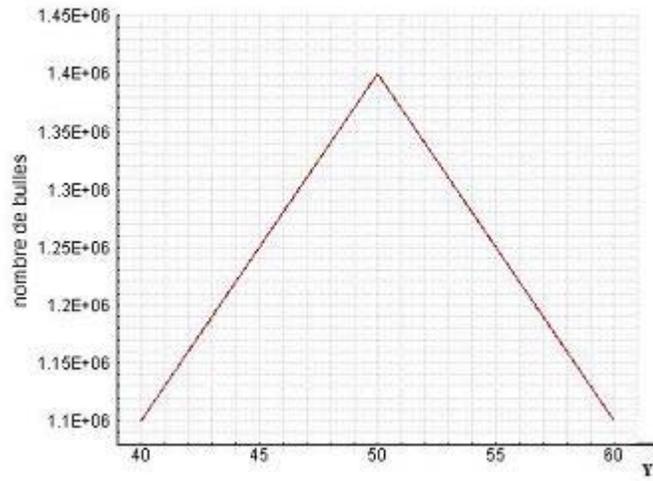


Figure 4.4.5 : Nombres de bulles à l'état initial

De même, pour les rayons :

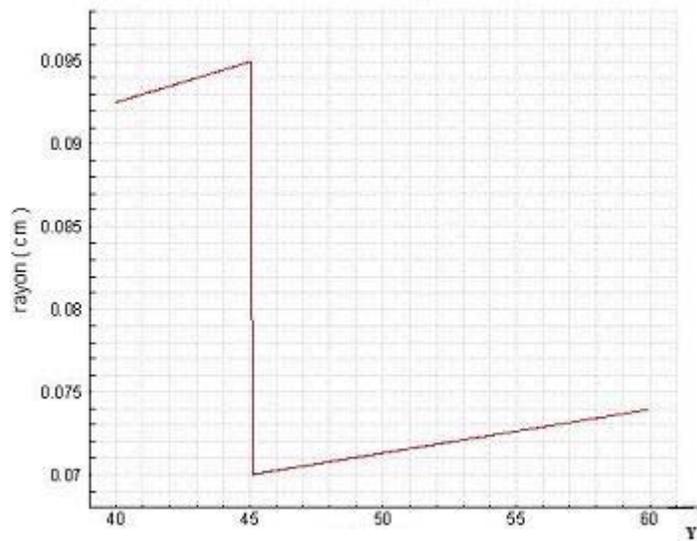


Figure 4.4.6 : Rayons des bulles à l'état initial

On étudie le transport de radon en présence d'une pression comme le montre le graphe suivant :

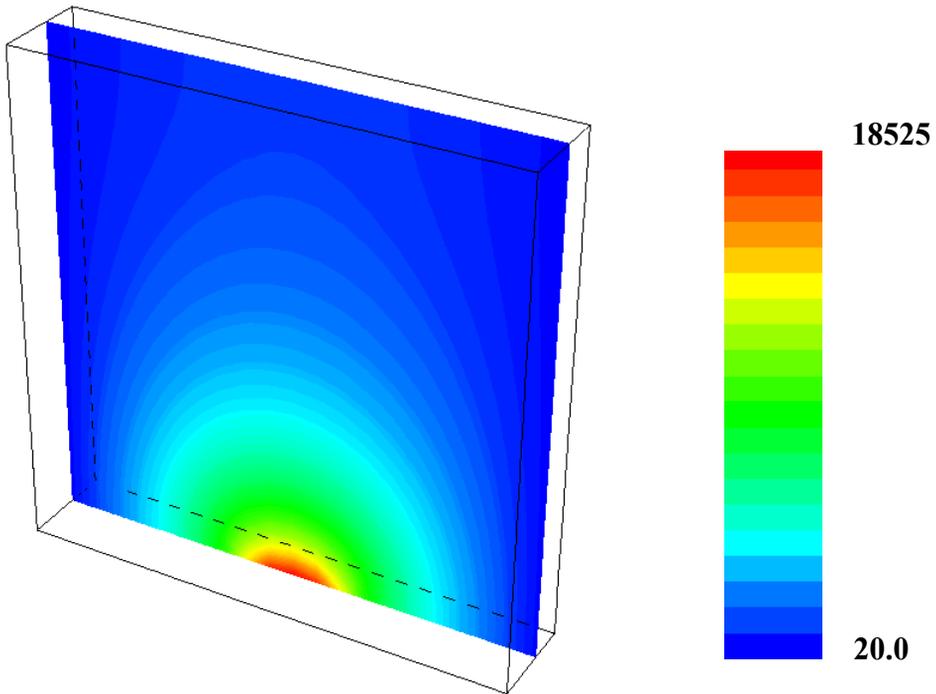
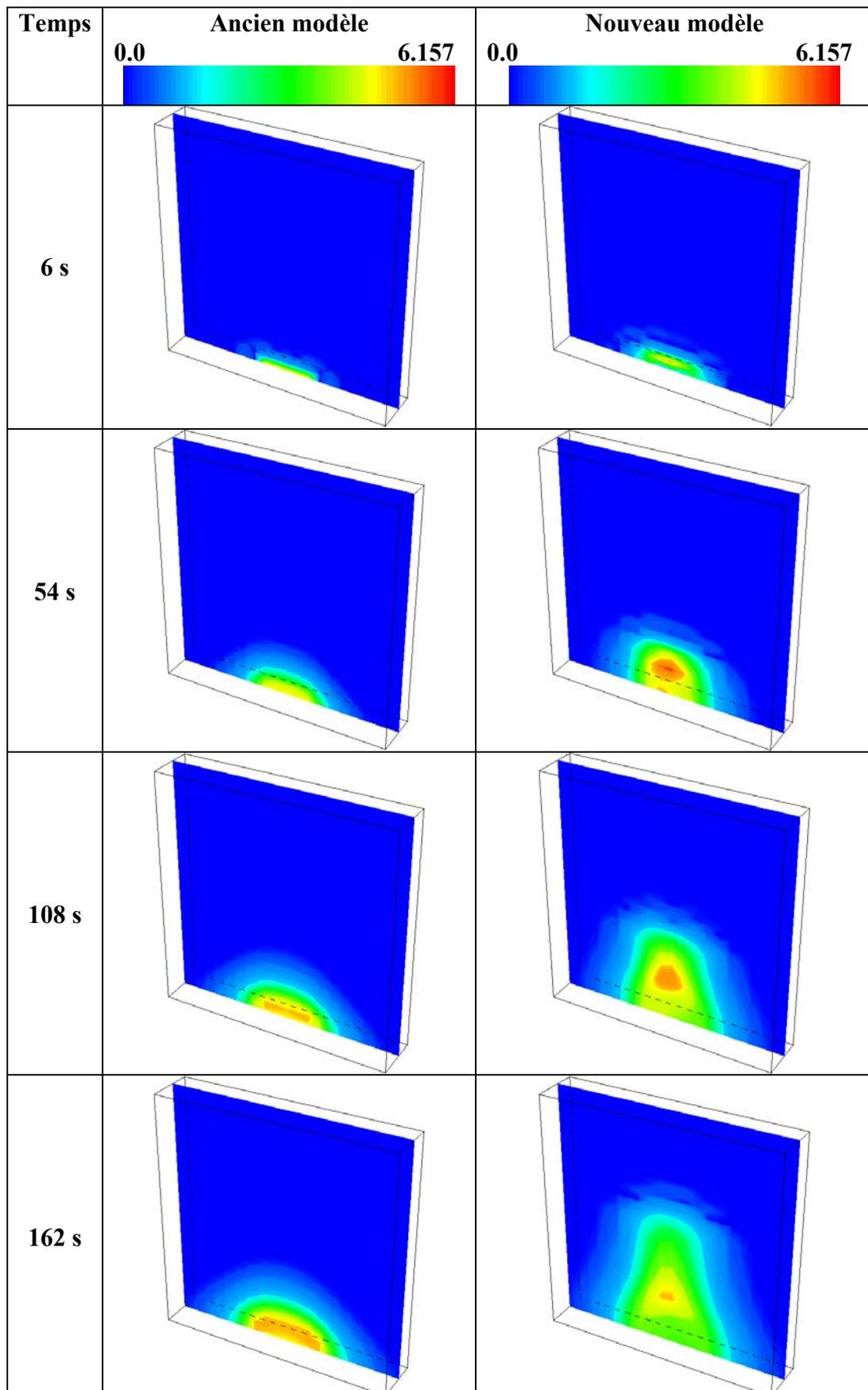
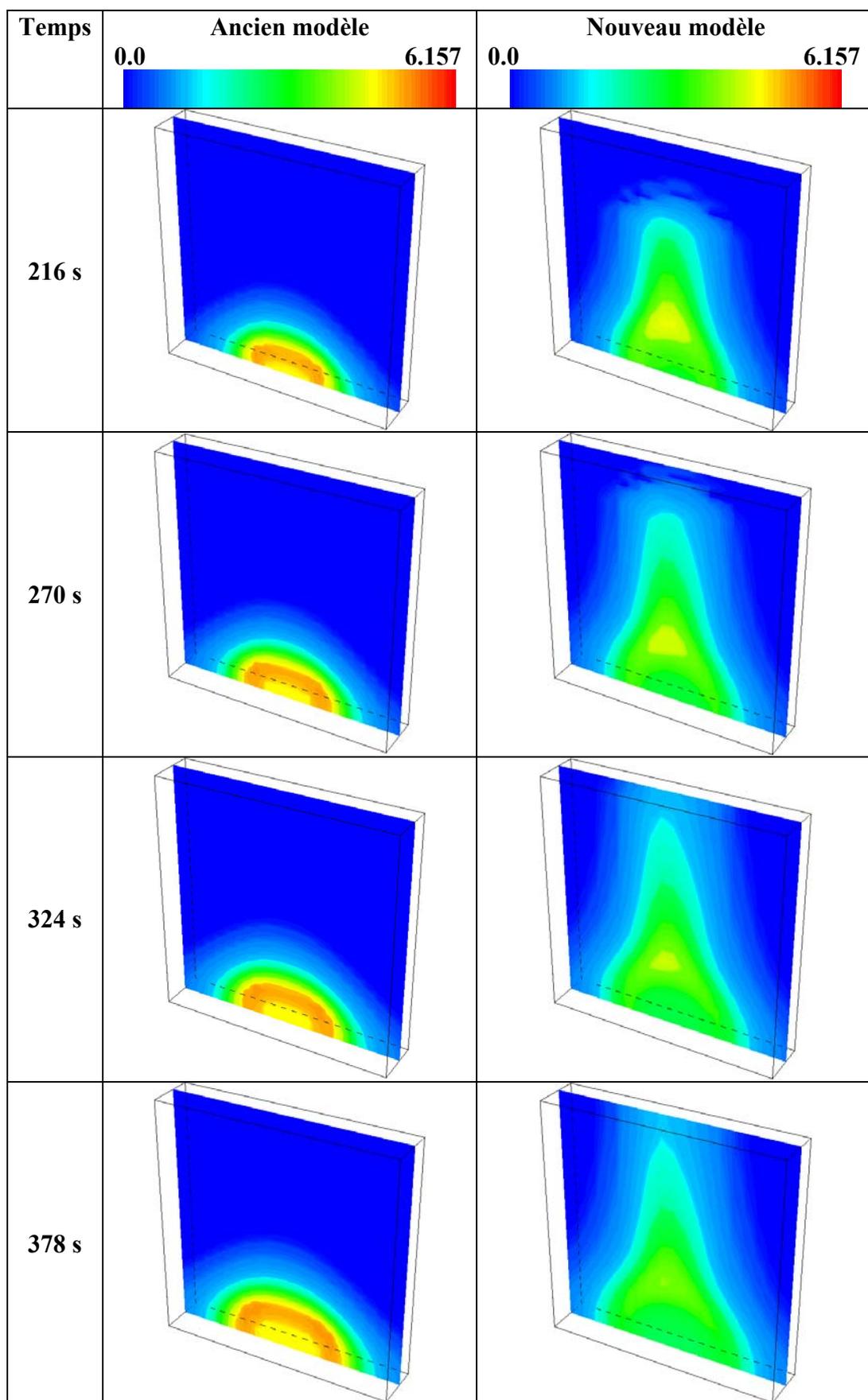


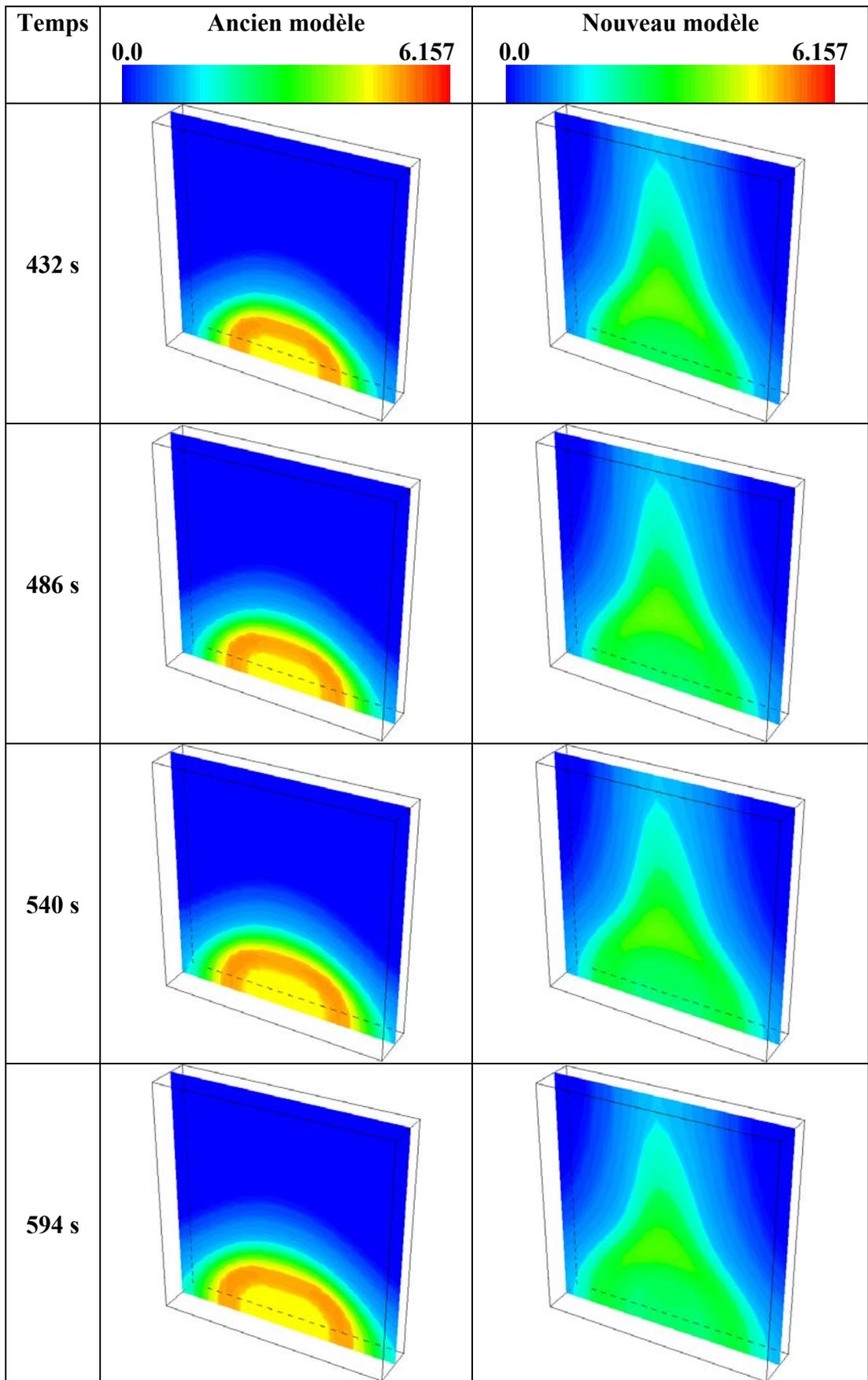
Figure 4.4.7 : Pression dans le plan X=8

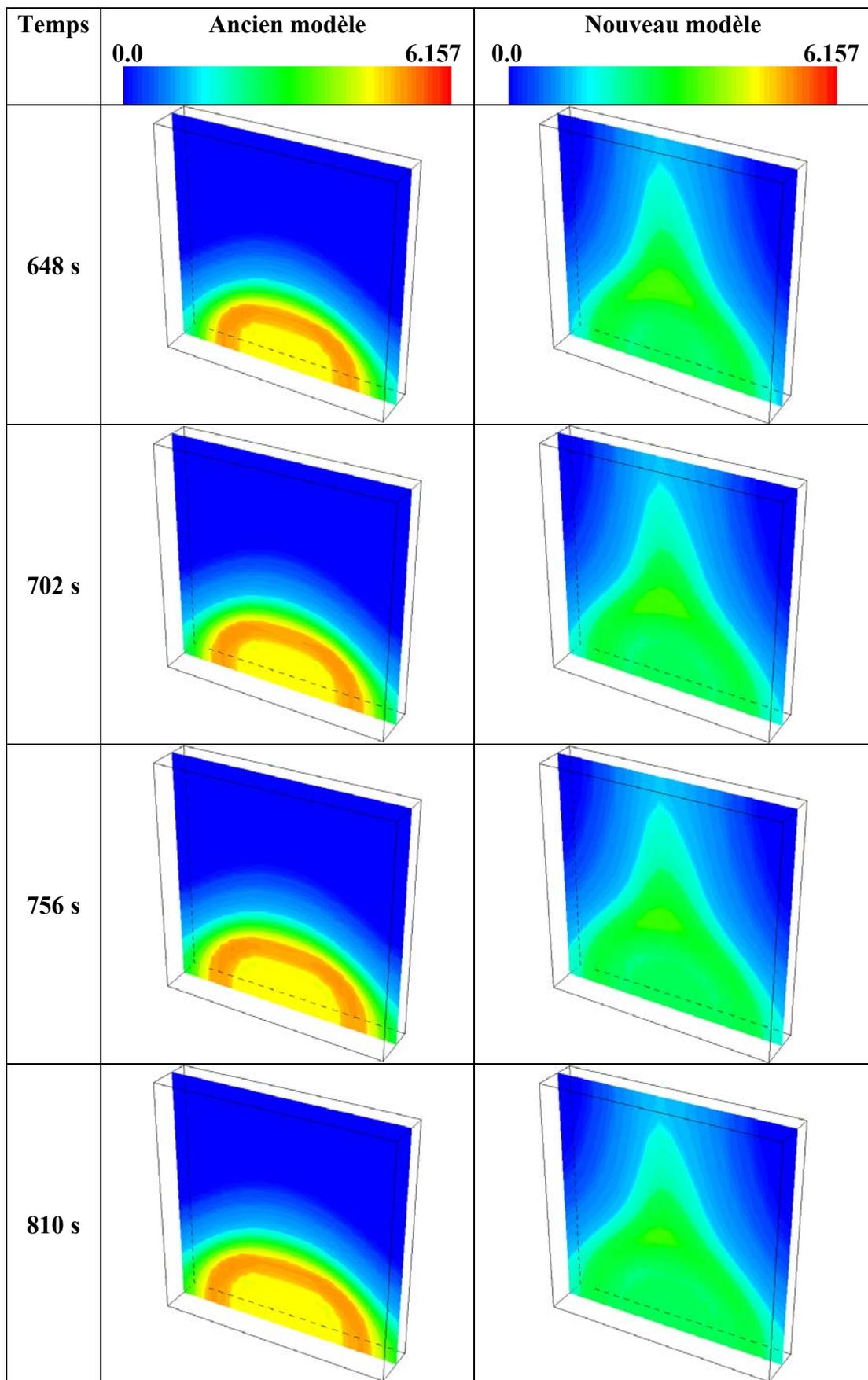
Résultats

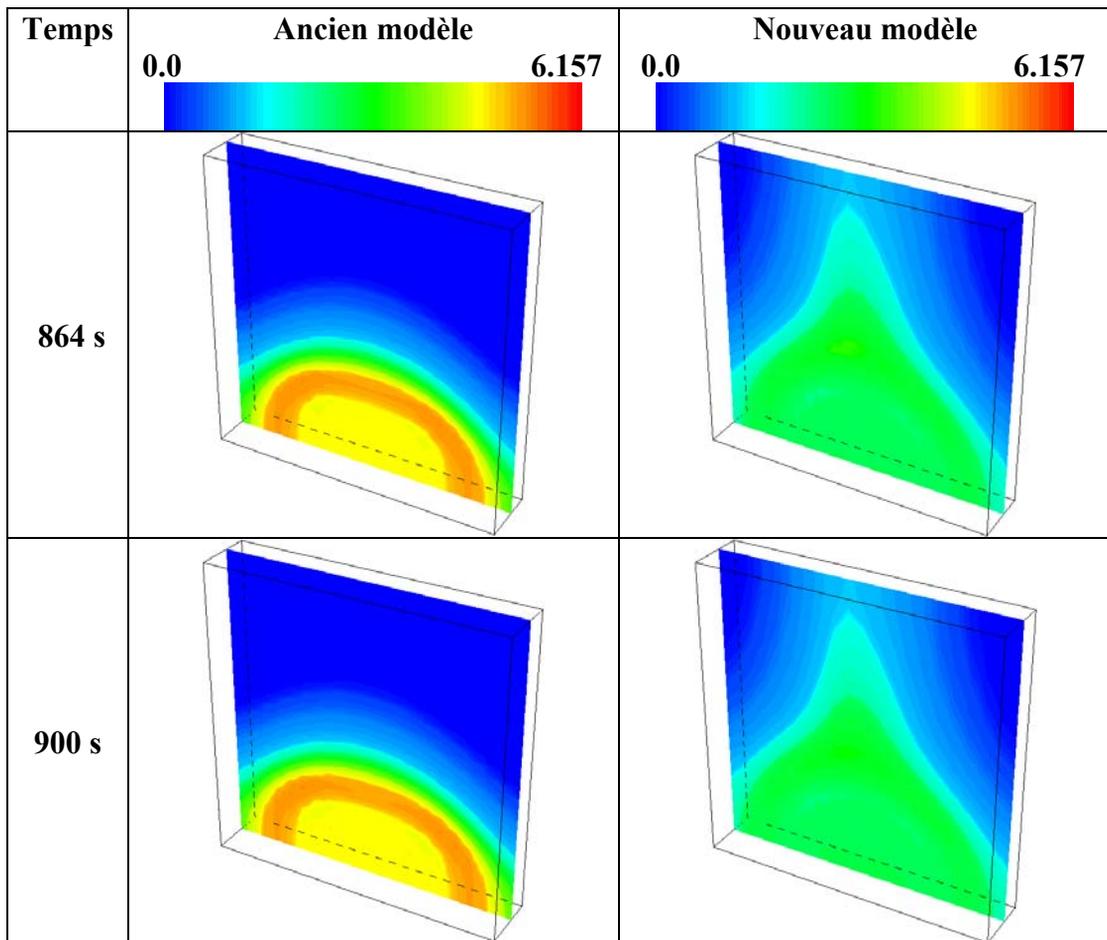
On présente les résultats du transport de radon dissout pour les deux cas ci-dessus











Analyse

Les deux modèles concernent l'évolution de la concentration de radon dans le domaine saturé en fonction du temps. Il apparaît clairement une baisse de la concentration du radon dans le nouveau modèle par rapport à l'ancien modèle.

Par contre la vitesse de transport du radon simulée dans le domaine avec le nouveau modèle est plus rapide qu'avec l'ancien modèle.

En conclusion il serait judicieux d'utiliser cette modélisation de la phase gazeuse dans le suivi du radon comme précurseur de séismes.

Conclusions

Ce travail présente une modélisation du transport du radon à la fois sous forme gazeuse et sous forme dissoute dans un domaine saturé.

Un algorithme itératif a été développé pour étudier le transport d'une bulle dans un fluide. On a aussi étudié l'échange d'un gaz à travers la paroi d'une bulle et le comportement d'un grand nombre de bulles.

On a simulé plusieurs scénarios pour suivre l'évolution de la concentration de radon sous forme gazeuse dans un domaine saturé au cours du temps. On a analysé l'effet du changement du rayon des bulles, ce qui modifie le changement du flux de radon de manière proportionnelle, puis on a étudié l'effet du nombre de bulles on obtient des résultats similaires.

Une analyse comparative entre les résultats obtenus par l'ancien modèle [5] et ceux obtenus avec le nouveau modèle, nous fait constater que ce dernier semble mieux adapté pour des simulations numériques du comportement du radon dans le cadre d'activités sismiques.

Bibliographie II

- [1] Andrews J.N., Hussain N., Batchelor, A.S., Kwakwa, K., 1986. ^{222}Rn solution by the circulating fluids in a hot dry rock geothermal reservoir. *Appl. Geochem.* 1, 647–657.
- [2] Bear J., 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, NY.
- [3] Brown, A., 2000. Evaluation of possible gas microseepage mechanisms. *AAPG Bull.* 84, 1775–1789.
- [4] Clift, R., Grace, J.R., Weber, M.E., 1978. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York., pp. 380.
- [5] D. Calugaru, modélisation et simulation numérique du transport de radon dans un milieu poreux fissure ou fracture. Problème direct et problèmes inverse comme outils d'aide à la prédiction sismique, Thèse à l'université de Franche-Comté, 2002.
- [6] Duineveld, P.C., 1995. The rise velocity and shape of bubbles in pure water at high Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* 292, 325–332.
- [7] Etiopie, G., Lombardi, S., 1996. Laboratory simulation of geogas microbubble flow. *Environ. Geol.* 27, 226– 232.
- [8] G. Etiopie, G. Martinelli / *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 129 (2002) 185–204
- [9] Gascoyne, M., Wuschke, D.M., 1992. Gas flow in saturated fractured rock: results of a field test and comparison with model predictions. In: *Gas Generation and Release from Rad. Waste Rep., Proceedings of the NEA Workshop—Aix en Provence, 23–26 September, 2001*.
- [10] Geneste, P., 1992. Gas Pressure Build-up in Radioactive Waste Disposal : Hydraulic and Mechanical Effects. CEC Progress Report Contract No. FI2W-0093, July–December 1991.
- [11] Kim, I., Perlstein, A.J., 1990. Stability of the flow past a sphere. *Journal of Fluid Mechanics* 211, 73–93.
- [12] Leifer, I.S., Patro, R.K., Bowyer, P., 2000a. A study on the temperature variation of rise velocity for large clean bubbles. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology* 17 (10), 1392–1402.
- [13] Lerman, A., 1979. *Geochemical Processes, Water and Sediment Environments*. Wiley/Interscience, New York.
- [14] Levich, V.G. 1962. *Physico-Chemical Hydrodynamics*. Prentice Hall Inc., New York/NY, 390 pp.
- [15] Masliyah, J.H., Epstein, N., 1972. Numerical solution of heat and mass transfer from spheroids in steady axisymmetric flow. *Progress in Heat Mass Transfer* 6, 613–632.
- [16] Muskat M., 1946. *The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media*. J.W. Edwards Inc., Ann Arbor, Michigan.
- [17] Porstendorfer, J., 1993. Properties and behavior of radon and thoron and their decay products in the air. In: Lowder, et al. (Eds.), *Proceedings of the Fifth International Symposium on Natural Radiation Environment CEC, EuR 14411EN*.

- [18] Rolf Sander. *Compilation of Henry's Law Constants for Inorganic and Organic Species of Potential Importance in Environmental Chemistry, Version 3* (April 8, 1999)
- [19] Schrauf, T.W., Evans, D.D., 1986. Laboratory studies of gas flow through a single natural fracture. *Water Resources Res.* 22, 1038–1050.
- [20] Tikuisis, P., Ward, C.A., 1992. Rate of gas absorption by liquids and “surface resistance”. In: Chhabra, R.P., Kee, D.D. (Eds.), *Transport Processes in Bubbles, Drops, and Particles*. Emisphere Pub. Corp., New York, pp. 114–132.
- [21] Thorstenson, D.C., Pollock, D.W., 1989. Gas transport in unsaturated porous media: the adequacy of Fick' law. *Rev. Geophys.* 27, 61–78.
- [22] Varhegyi, A., Baranyi, I., Somogyi, G., 1986. A model for the vertical subsurface radon transport in geogas microbubbles. *Geophys. Trans.* 32 (3), 235–253.
- [23] Volckaert G., Put, M., Ortiz, L., De Canniere, P., Horseman Harrington, J., Fioravante, V., Impey, M., Worgan, K., 1993. Megas Modelling and experiments on gas migration in repository host rocks. In: *Proceedings of the Meeting of Koln on PEGASUS Project*. CEC EUR Series, 3–4 June 1993.
- [24] Wilhelm, E., R. Battino, and R. J. Wilcock. Low-pressure solubility of gases in liquid water. *Chem. Rev.*, 77, 219–262, 1977.
- [25] Wilkening, M.H., 1980. radon transport mechanism below the Earth's surface. In: *The Natural Radiation Environment III*. Technical Information Center, US Department of Environment, Springfield, pp. 90–104.
- [26] Y. Yasuoka, T. Ishii, S. Tokonami, T. Ishikawa, Y. Narazaki and M. Shinogi. Radon anomaly related to the 1995 Kobe earthquake in Japan *International Congress Series, Volume 1276, February 2005, Pages 426-427.*

Conclusion générale

Ce mémoire relatif à la modélisation et à la simulation numérique de certains phénomènes comporte deux parties distinctes.

La première partie est relative à l'introduction de phénomènes piézoélectriques dans l'étude de la structure osseuse menée dans l'équipe de calcul scientifique du laboratoire de mathématiques. On a mis au point et implémenté un algorithme de résolution permettant de calculer les caractéristiques homogénéisées pour une structure fibreuse. Les simulations numériques menées jusqu'à un niveau macroscopique ont montré que les résultats obtenus ne sont pas conformes aux observations expérimentales. Cela signifie que la modélisation n'est pas satisfaisante.

La deuxième partie traite le problème du transport du radon sous forme gazeuse lors d'une activité sismique avant d'être dissous dans le liquide environnant. On a réalisé une modélisation du transport de radon dans une bulle, puis dans un ensemble de bulles, ce qui a permis de construire un module (BUL_1) qui gère l'évolution d'un groupe de bulles. Ce dernier a été couplé avec le code de simulation SETMP (Simulation de l'Écoulement et du transport en Milieux Poreux). Plusieurs simulations numériques ont été effectuées. Une analyse comparative, a mis en évidence une différence significative avec le cas implémenté antérieurement dans notre équipe.

Résumé

La première partie de la thèse est relative à l'étude théorique et la résolution numérique d'un problème piézoélectrique posé dans un milieu fortement hétérogène périodique. Un problème périodique à deux composants dont seul l'un d'eux est piézoélectrique a été étudié, dans le cadre de la théorie mathématique de l'homogénéisation, d'abord dans son formalisme puis sous l'aspect résolution numérique.

Le cas d'une structure fibreuse a été examiné. Ensuite un nouvel élément fini, de type piézoélectrique, permettant la résolution des problèmes auxiliaires précédemment écrits a été conçu et implémenté. Enfin, la résolution de ce problème dans un cadre à deux échelles a été programmée. Dans le cadre des travaux de modélisation réalisés sur l'os cortical humain au sein de l'équipe de calcul scientifique du laboratoire de mathématique, ces développements ont été appliqués à cette structure osseuse.

Un second sujet concernant le transport de radon dans un aquifère simultanément sous forme gazeuse et sous forme dissoute, a été abordé. La deuxième partie de la thèse est donc relative à une modélisation et la simulation numérique du transport du radon à la fois sous forme gazeuse et sous forme dissoute dans le seul cadre d'un domaine saturé.

Lorsqu'une activité sismique a lieu dans la partie inférieure d'un aquifère de surface, elle y génère une production de radon. Divers phénomènes physiques interviennent alors pour transporter cet élément chimique vers la surface où la mesure des concentrations s'avère être pertinente pour le suivi de cette activité sismique. Un précédent travail (réalisé par D. Calugaru) a supposé que le radon était immédiatement dissous et a consisté à simuler le transport de cet élément.

Dans le processus réel, le radon est d'abord créé sous forme gazeuse et est associé à d'autres gaz. Le problème a donc été repris en introduisant la présence de gaz à la partie inférieure de l'aquifère.

Mots clés : piézoélectrique, milieu fortement hétérogène périodique, homogénéisation, os cortical humain, activité sismique, transport de radon dans un aquifère, domaine saturé, Simulation (Radon sous forme gazeuse, ou dissoute), milieu poreux.

Abstract

The first part of this PhD is devoted to the theoretical study and the numerical resolution of a piezoelectric problem formulated in a strongly heterogeneous periodical environment. Within a homogenization mathematical theory framework, the formalism and the numerical resolution of a periodic problem with two components, of which only one is piezoelectric, have been investigated.

First, the case of a fibrous structure has been studied; then a new finite element, of piezoelectric type, has been designed and studied, allowing the resolution of auxiliary problems previously written. Finally the resolution of these problems has been programmed within a framework on two scales. These developments have been applied to the work of modelization of the human cortical bone.

A second subject dealing with the modelization and the numerical simulation of transport of radon in an aquifer simultaneously in gas form and dissolved form has been studied.

Then the second part of the thesis concerns the modelization of the transport of radon at the same time in gas form and dissolved form in a saturated field. When a seismic activity reaches the lower part of a surface aquifer, it generates a production of radon. Various physical phenomena occur to transport this chemical element to the surface where measurement of the concentrations proves to be relevant for the follow-up of this seismic activity. A previous work (carried out by D. Calugaru) proposed that radon was immediately dissolved and consisted in simulating the transport of this element.

In the real process, radon is initially created in gas form and other gases have been associated. Therefore, the same problem is solved, introducing the presence of gas to the lower part of the aquifer.

Keywords: Piezoelectric, strongly heterogeneous periodical environment, homogenization, human cortical bone, seismic activity, transport of radon in an aquifer, saturated field, simulation (radon in gas form, or dissolved), porous media.

AMS Subject Classification (2000) : 35B27, 35B10, 37M05, 76S05, 76F25, 81T80