

**ECOLE POLYTECHNIQUE**

**CENTRE DE MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES**

*UMR CNRS 7641*

---

91128 PALAISEAU CEDEX (FRANCE). Tél: 01 69 33 41 50. Fax: 01 69 33 30 11

<http://www.cmap.polytechnique.fr/>

**Homogénéisation d'un modèle de  
convection-diffusion avec  
chimie/adsorption en milieu  
poreux**

Grégoire Allaire, Anne-Lise Raphael

**R.I. 604**

*Novembre 2006*

# Homogénéisation d'un modèle de convection-diffusion avec chimie/adsorption en milieu poreux

Grégoire ALLAIRE      Anne-Lise RAPHAEL

Novembre 2006

## Résumé

On étudie l'homogénéisation d'un problème de convection-diffusion avec adsorption en milieu poreux. Ce problème nous intéresse particulièrement dans le cadre du contrôle de risques dans l'environnement (stockage des déchets nucléaires, pollution des sols par des particules réactives). Le modèle étudié est celui de la convection-diffusion de particules transportées par l'eau dans le sol poreux (typiquement de l'argile), avec des réactions chimiques sur les bords des pores. On s'intéresse à la concentration de ces particules dans le milieu à des échelles d'espace et de temps très grandes par rapport aux échelles microscopiques des phénomènes mis en jeu. En supposant que les données initiales sont bien préparées, on prouve que la solution du modèle est approximativement le produit d'une fonction propre de Bloch, à oscillation rapide, avec une fonction à variation lente solution d'une équation homogénéisée, prise dans un repère transporté à grande vitesse. Les coefficients homogénéisés dépendent du problème de Bloch et de son problème adjoint (l'opérateur considéré n'étant pas autoadjoint). La vitesse de transport macroscopique peut être très grande sans que ce soit le cas pour la moyenne de la vitesse de convection microscopique. On veut ici mettre en valeur le fait que les différents phénomènes physiques ayant lieu à l'échelle microscopique ont une influence couplée sur les valeurs des coefficients homogénéisés. On effectue enfin des calculs numériques pour évaluer les coefficients homogénéisés afin d'illustrer ces couplages.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Etude théorique</b>	<b>6</b>
2.1	Ondes de Bloch . . . . .	6
2.2	Résultats . . . . .	7
2.3	Cas autoadjoint : décomposition en ondes de Bloch . . . . .	13
2.4	Correction à un ordre plus élevé . . . . .	14
2.5	Calcul des coefficients homogénéisés . . . . .	17
2.6	Cas d'une perturbation macroscopique sur les coefficients . . . . .	21
2.7	Etude à l'aide des problèmes " $\theta$ -exponentiels"-périodiques . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Etude numérique</b>	<b>25</b>
3.1	Objectifs . . . . .	25
3.2	Remarques sur le code utilisé . . . . .	25
3.3	Résultats numériques . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>35</b>

## 1 Introduction

On étudie l'homogénéisation du problème suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial u_\epsilon}{\partial t} - \operatorname{div} \left( A\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \nabla u_\epsilon \right) + \epsilon^{-1} b\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \cdot \nabla u_\epsilon + \epsilon^{-2} c\left(\frac{x}{\epsilon}\right) u_\epsilon = 0 \text{ dans } \Omega_\epsilon \times (0, T), \\ A\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \nabla u_\epsilon \cdot n + \frac{k}{\epsilon} u_\epsilon = 0 \text{ sur } \partial\Omega_\epsilon \times (0, T), \end{cases} \quad (1)$$

où  $\Omega_\epsilon = \mathbb{R}^N \setminus \bigcup_{i \in \mathbb{Z}^N} \tau_i^\epsilon$  est un ouvert troué par une collection périodique de trous identiques  $\tau_i^\epsilon$ , et  $T > 0$  est le temps final. Les trous sont des parties solides, complémentaires des pores occupées par le fluide, et sont définis par

$$\tau_i^\epsilon = \epsilon i + \epsilon \mathbb{S},$$

c'est-à-dire qu'ils sont tous identiques à un obstacle solide unité  $\mathbb{S}$ , mis à l'échelle  $\epsilon$  et translatés par  $\epsilon i$  avec  $i \in \mathbb{Z}^N$ . Dans (1),  $b(y)$  représente le

champ de vitesse de convection microscopique du fluide, et  $A(y)$  le tenseur de diffusion moléculaire. On suppose que les coefficients  $A(y)$ ,  $c(y)$ ,  $b(y)$  sont des fonctions réelles bornées définies sur le tore unité  $\mathbb{T}^N$ . On suppose de plus que  $A(y)$  est uniformément coercive, i.e. qu'il existe une constante  $\nu > 0$  telle que pour tout  $y \in \mathbb{T}^N$ , on ait

$$A(y)\xi.\xi \geq \nu |\xi|^2 \quad \text{pour tout } \xi \in \mathbb{R}^N.$$

On considère donc un problème avec une grande vitesse de convection, de l'ordre de  $\epsilon^{-1}$ , qui n'est pas nécessairement de divergence nulle (incompressible) ni de moyenne nulle.

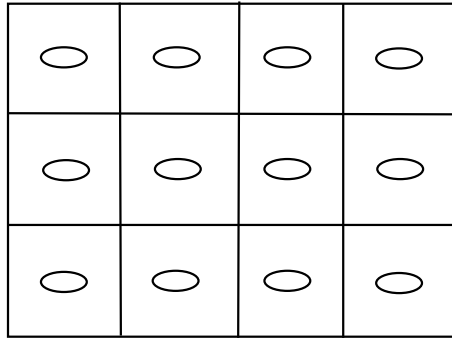


FIG. 1 – Cellules du milieu poreux périodique

Dans le cadre plus particulier du stockage des déchets nucléaires, en cas de détérioration des colis contenant les déchets, les particules radioactives seraient libérées dans le sol et on suppose que le principal vecteur de transport serait alors l'eau.

Ce modèle (et sa mise à l'échelle) s'obtient à partir de plusieurs hypothèses (voir [19]). Tout d'abord, nous supposons que le milieu considéré est périodique. Le petit paramètre  $\epsilon$  est alors le rapport entre la taille de la cellule de périodicité  $l$  et celle du milieu macroscopique  $L$ , sur lequel on effectue les mesures et pour lequel on veut évaluer les coefficients effectifs de convection, diffusion/dispersion. On prend donc un volume macroscopique qui contient un très grand nombre de cellules.

Le milieu périodique est constitué d'un fluide saturé et d'une phase solide. Dans les interstices, les particules de soluté sont transportées par le fluide et

dispersées par diffusion brownienne. Sur la surface des pores, elles font l'objet d'une réaction chimique du premier ordre, comme c'est le cas par exemple si l'on considère des particules de césium sur des grains d'argile. On prendra  $k > 0$ , ce qui signifie que les particules sont adsorbées sur la surface du pore (ou plus généralement consommées par la réaction chimique). On néglige de plus les éventuelles interactions chimiques entre les particules de soluté entre elles. Remarquons que dans le cas de l'argile, on modélise un amas de feuillets d'argile entouré de fluide par une cellule contenant un pore occupé par le fluide, en supposant qu'ainsi, on ne perd rien de la phénoménologie. Cependant, une limitation de cette modélisation réside en ce que la surface réactive ainsi prise en compte est plus petite que celle obtenue avec des feuillets.

Il faut noter que dans les applications physiques, on prendra  $c(y) = 0$ , mais comme l'ajout d'un terme de potentiel ainsi mis à l'échelle n'apporte pas de calculs supplémentaires dans la théorie, nous avons conservé ce terme en toute généralité. De plus, si l'écoulement n'est pas incompressible, ce terme de potentiel contient alors le terme  $\text{div}(b(y))$ .

Revenons sur la mise à l'échelle des termes de l'équation par rapport aux puissances de  $\epsilon$ . Si on considère l'équation de convection-diffusion pour la concentration de soluté  $u(y)$  au niveau microscopique, on a

$$\begin{cases} \frac{\partial u(y)}{\partial \tau} - \text{div}(A(y)\nabla u(y)) + b(y) \cdot \nabla u(y) + c(y)u(y) = 0 & \text{dans le fluide} \\ A(y)\nabla u \cdot n + ku = 0 & \text{sur la surface des pores} \end{cases} \quad (2)$$

Si on veut étudier cette équation sur des temps très longs et à grande échelle, il est naturel de faire le changement de variable  $\tau = \frac{t}{\epsilon^2}$  et  $y = \frac{x}{\epsilon}$ . Si on réécrit l'équation précédente avec ce jeu de variables, on retrouve le problème posé comme en (1).

On peut retrouver cette mise à l'échelle en suivant l'approche de R. Mauri et J. Rubinstein dans [20]. On part de l'équation de convection-diffusion au niveau microscopique (2) et on introduit les temps de diffusion, de convection

et de réaction caractéristiques suivants :

$$\tau_1 = \frac{l}{V_0}, \quad \tau_2 = \frac{l^2}{D},$$

temps caractéristiques de convection et diffusion microscopiques

$$\tau_3 = \frac{L}{V_0}, \quad \tau_4 = \frac{L^2}{D}$$

temps caractéristiques de convection et diffusion macroscopiques

$$\tau_5 = \frac{l}{k_0}, \quad \tau_6 = \frac{L}{k_0}$$

temps caractéristiques de la réaction chimique, respectivement au niveau microscopique et macroscopique. Ici  $V_0$  est une valeur caractéristique du champ de vitesses  $b(y)$ ,  $k_0$  une valeur caractéristique du coefficient de la réaction chimique sur le bord,  $l$  la taille typique de la période de la structure, et  $L$  celle du domaine sur lequel les mesures sont effectuées. On peut alors faire apparaître des nombres adimensionnés évaluant le rapport des phénomènes entre eux. D'une part, les nombres de Péclet microscopique et macroscopique, qui mesurent le rapport entre convection et diffusion :

$$Pe_l = \frac{\tau_2}{\tau_1}, \quad Pe_L = \frac{\tau_4}{\tau_3}$$

et les nombres de Damkohler microscopique et macroscopique, qui mesurent le rapport entre la réaction chimique et la diffusion :

$$Da_l = \frac{lk}{D}, \quad Da_L = \frac{Lk}{D}$$

On se place dans le cas où  $Pe_l = \mathcal{O}(1)$ , et  $Da_l = \mathcal{O}(1)$ . Alors, si on remet à l'échelle en temps par rapport à  $\tau_4$  et en espace par rapport à  $L$ , on trouve :

$$\begin{cases} \frac{\partial u_\epsilon(x)}{\partial t} - \operatorname{div}(\tilde{A}(x)\nabla u_\epsilon(x)) + \frac{1}{\epsilon}\tilde{b}(x) \cdot \nabla u_\epsilon(x) + \frac{1}{\epsilon^2}\tilde{c}(x)u_\epsilon(x) = 0 & \text{dans } \Omega_\epsilon \times (0, T) \\ \tilde{A}(x)\nabla u_\epsilon \cdot n + Da_l \frac{k}{\epsilon}u_\epsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega_\epsilon \times (0, T) \end{cases} \quad (3)$$

avec  $\tilde{A}(x) = \frac{1}{D}A(x)$ ,  $\tilde{b}(x) = Pe_l b/V_0$  et  $\tilde{c}(x) = \tau_4 c(x)$ , ce qui est bien la même mise à l'échelle que pour (1).

Notons que ce modèle a déjà été étudié dans [21] en dimension  $N = 1$  d'espace.

Finissons cette introduction en mentionnant que ce type de modélisation est très similaire à ce que l'on trouve dans l'étude des "flashing ratchet" ou des moteurs moléculaires [9], [11].

## 2 Etude théorique

### 2.1 Ondes de Bloch

Les ondes de Bloch sont une généralisation de l'analyse de Fourier adaptée aux équations aux dérivées partielles avec des coefficients périodiques. C'est un outil très utile et bien connu en mécanique quantique, et plus particulièrement en physique du solide [16], [23]. Il est aussi utilisé pour des problèmes d'homogénéisation dans d'autres domaines d'application : mécanique [2], [10], ou neutronique [1].

Si  $\mathbb{T}^N$  est la cellule unité de périodicité et  $\mathbb{S}$  la partie solide dans cette cellule, on introduit le problème de cellule de Bloch suivant :

$$\begin{cases} -(\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta)(A(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_m) \\ \quad + b(y) \cdot (\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_m + c(y)\Psi_m = \lambda_m(\theta)\Psi_m & \text{dans } \mathbb{T}^N \setminus \mathbb{S} \\ A(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_m \cdot n + k\Psi_m = 0 & \text{sur } \partial\mathbb{S} \end{cases} \quad (4)$$

ainsi que son problème adjoint associé :

$$\begin{cases} -(\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta)(A^T(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_m^*) \\ \quad -(\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta)(b(y)\Psi_m^*) + c(y)\Psi_m^* = \lambda_m(\theta)\Psi_m^* & \text{dans } \mathbb{T}^N \setminus \mathbb{S} \\ A^T(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_m^* \cdot n + b(y) \cdot n\Psi_m^* + k\Psi_m^* = 0 & \text{sur } \partial\mathbb{S} \end{cases} \quad (5)$$

Dans ces deux problèmes,  $\theta \in \mathbb{T}^N$  est un paramètre, appelé "fréquence de Bloch" et  $(\lambda_m(\theta), \Psi_m(y, \theta))$  est le  $m$ -ème couple valeur propre/vecteur propre. La notation  $A^T$  représente la transposée de la matrice  $A$ .

Pour  $\theta = 0$ , le théorème de Krein-Rutman s'applique à (4) et (5) car l'opérateur est positif et d'inverse compact. Il garantit l'existence d'une plus petite valeur propre  $\lambda_1(0)$ , qui est simple et réelle. De plus, le vecteur propre associé  $\Psi_1(y, 0)$  est positif,  $\Psi_1(y, 0) > 0$  sur  $\mathbb{T}^N$ .

Pour  $\theta \neq 0$ , le théorème de Krein-Rutman ne s'applique pas, mais si  $|\theta| \ll 1$ , un résultat classique de perturbation en théorie des opérateurs [15], [3] nous donne que  $\lambda_1(\theta)$  est simple.

Notre principale hypothèse est que les données sont "bien préparées", au sens où elles sont de la forme :

$$u_\epsilon(x)(t = 0) = \epsilon^{-N} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_1\left(\frac{\theta}{\epsilon}\right) \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \theta\right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\theta$$

avec  $\alpha_1(\eta)$  une fonction continue à support compact dans  $\mathbb{R}^N$ , et  $\eta = \frac{\theta}{\epsilon}$ .

**Remarque 1** *Si on effectue un développement limité à l'ordre 1 en  $\theta$  dans la donnée initiale, on obtient*

$$u_\epsilon(x)(t = 0) = \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) v^0(x) + \mathcal{O}(\epsilon)$$

où

$$v^0(x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta.$$

*Cela signifie donc que la condition initiale est approximativement le produit de la 1-ère fonction propre du problème de Bloch associée au paramètre  $\theta = 0$  par la transformée de Fourier inverse de  $\alpha_1(\eta)$ . De plus, l'hypothèse  $\alpha_1(\eta)$  à support compact revient à ne s'intéresser qu'aux valeurs de  $\theta$  de l'ordre de  $\epsilon$ .*

*Si l'on choisit une fonction  $v^0$  positive, alors, on voit qu'à  $\epsilon$  près, la donnée initiale est bien positive (puisque le vecteur propre  $\Psi_1(y, 0)$  est positif). Elle peut donc bien représenter une concentration en soluté.*

## 2.2 Résultats

**Théorème 1** *Soit  $\alpha_1(\eta)$  une fonction de  $L^2(\mathbb{R}^N)$ , à support compact. Supposons que la condition initiale soit de la forme*

$$u_\epsilon(x)(t = 0) = \epsilon^{-N} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_1\left(\frac{\theta}{\epsilon}\right) \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \theta\right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\theta.$$



Alors la solution de (1) vérifie

$$u_\epsilon(t, x) = e^{-\frac{\lambda_1(0)}{\epsilon^2}t} \left( \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right)v(t, x - \frac{U^*}{\epsilon}t) + \mathcal{O}(\epsilon) \right)$$

où  $v(t, x)$  est la solution du problème de diffusion homogénéisé suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} - \operatorname{div}(A^* \nabla v) = 0 \\ v(x, t = 0) = v^0(x) \end{cases}$$

avec les coefficients homogénéisés donnés par

$$U^* = \frac{1}{2i\pi} \nabla_\theta \lambda_1(0) \quad A^* = \frac{1}{8\pi^2} \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0).$$

**Remarque 2** Le  $\mathcal{O}(\epsilon)$  se réfère ici à la norme  $L^\infty([0, T], L^\infty(\Omega_\epsilon))$ .

**Remarque 3** L'équation homogénéisée n'est pas forcément bien posée au sens classique des équations paraboliques, car on ne sait pas si la Hessienne de la valeur propre  $\lambda_1(0)$  est définie positive. Néanmoins, on peut toujours calculer sa solution par transformée de Fourier puisqu'on a supposé que la fonction  $\alpha_1(\theta)$  était à support compact.

**Remarque 4** On obtient une vitesse de convection homogénéisée  $U^*$  qui ne dépend que très indirectement de la vitesse de convection du problème initial  $b(y)$ . En particulier, la valeur propre  $\lambda_1(0)$  peut être vue comme le taux d'équilibre entre la convection et la diffusion, et la vitesse  $U^*$  mesure donc la sensibilité de cette valeur propre au paramètre de Bloch  $\theta$ . On peut voir cette vitesse  $U^*$  comme une vitesse de groupe pour les ondes de Bloch associées au paramètre  $\theta$ .

**Remarque 5** Il faut remarquer que les coefficients homogénéisés  $U^*$  et  $A^*$  sont bien réels, ce que l'on montrera lors du calcul de ces coefficients.

### Preuve du théorème

Pour  $\eta = \frac{\theta}{\epsilon}$ , on pose :

$$w_\epsilon(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\frac{\lambda_1(\epsilon\eta)t}{\epsilon^2}} \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \epsilon\eta\right) e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta.$$

Nous allons montrer que  $w_\epsilon$  est solution explicite de l'équation (1) pour les conditions initiales du théorème.

Si  $\Psi_1(y, \theta)$  est solution de (4), alors  $\Phi_1(y) = \Psi_1(y, \theta) e^{2i\pi\theta \cdot y}$  est solution de

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y(A(y)\nabla_y\Phi_1) + b(y) \cdot \nabla_y\Phi_1 + c(y)\Phi_1 = \lambda_1(\theta)\Phi_1 & \text{dans } \mathbb{R}^N \setminus \mathbb{S}, \\ A(y)\nabla_y\Phi_1 \cdot n + k\Phi_1 = 0 & \text{sur } \partial\mathbb{S}. \end{cases} \quad (6)$$

Si on prend la formulation variationnelle de (6), remise à l'échelle  $\epsilon$  pour que  $\Phi_1^\epsilon(x) = \Phi_1\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$  en soit solution, contre une fonction test  $\chi(t, x) \in C_c^\infty(]0, T[, C_c^\infty(\mathbb{R}^N))$  indépendante de  $\theta$ , on obtient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\epsilon} A\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \nabla\Phi_1^\epsilon(x) \cdot \nabla\chi(t, x)dx + \epsilon^{-1} \int_{\Omega_\epsilon} \chi(t, x)b\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \cdot \nabla\Phi_1^\epsilon(x)dx \\ & + \epsilon^{-2} \int_{\Omega_\epsilon} c\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \Phi_1^\epsilon(x)\chi(t, x)dx + \epsilon^{-1} \int_{\partial\Omega_\epsilon} k\Phi_1^\epsilon(x)\chi(t, x)ds \\ & - \frac{\lambda_1(\theta)}{\epsilon^2} \int_{\Omega_\epsilon} \Phi_1^\epsilon(x)\chi(t, x)dx = 0. \end{aligned}$$

On peut multiplier de chaque côté par  $\alpha_1(\eta)e^{-\frac{\lambda_1(\epsilon\eta)}{\epsilon^2}t}$  qui est une constante par rapport à l'intégrande, puis intégrer par rapport à  $\eta$  sur  $\mathbb{R}^N$ . Le théorème de Fubini permet d'échanger les deux intégrales en  $x$  et  $\eta$  et on reconnaît donc la fonction  $w_\epsilon(t, x)$  et ses dérivées en espace :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\epsilon} A\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \nabla w_\epsilon(t, x) \cdot \nabla\chi(t, x)dx + \epsilon^{-1} \int_{\Omega_\epsilon} \chi(t, x)b\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \cdot \nabla w_\epsilon(t, x)dx \\ & + \epsilon^{-2} \int_{\Omega_\epsilon} c\left(\frac{x}{\epsilon}\right) w_\epsilon(t, x)\chi(t, x)dx + \epsilon^{-1} \int_{\partial\Omega_\epsilon} kw_\epsilon(t, x)\chi(t, x)ds \\ & - \int_{\Omega_\epsilon} \chi(t, x) \left( \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\lambda_1(\epsilon\eta)}{\epsilon^2} \alpha_1(\eta) e^{-\frac{\lambda_1(\epsilon\eta)}{\epsilon^2}t} \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \epsilon\eta\right) e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta \right) dx = 0. \end{aligned}$$

On reconnaît alors dans le dernier terme la dérivée en temps de  $w_\epsilon(t, x)$ . On intègre alors par parties en temps sur  $[0, T]$  et on obtient finalement :

$$\int_0^T \int_{\Omega_\epsilon} A\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \nabla w_\epsilon(t, x) \cdot \nabla\chi(t, x)dxdt + \epsilon^{-1} \int_0^T \int_{\Omega_\epsilon} \chi(t, x)b\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \cdot \nabla w_\epsilon(t, x)dxdt$$

$$\begin{aligned}
& + \epsilon^{-2} \int_0^T \int_{\Omega_\epsilon} c\left(\frac{x}{\epsilon}\right) w_\epsilon(t, x) \chi(t, x) dx dt + \epsilon^{-1} \int_0^T \int_{\partial\Omega_\epsilon} k w_\epsilon(t, x) \chi(t, x) ds dt \\
& - \int_0^T \int_{\Omega_\epsilon} w_\epsilon(t, x) \frac{\partial \chi}{\partial t}(t, x) dx dt = 0,
\end{aligned}$$

qui est la formulation variationnelle de (1). De plus,  $w_\epsilon(t, x) \in C([0, T], L^2(\Omega_\epsilon))$  et  $w_\epsilon(0, x) = u_\epsilon(0, x)$ , donc, par unicité de la solution [4], on obtient que  $w_\epsilon(t, x)$  est bien la solution.

Faisons maintenant un développement de Taylor dans cette formule explicite de la solution. On effectue le changement de variable  $\eta = \frac{\theta}{\epsilon}$  dans l'intégrale pour obtenir

$$u_\epsilon(t, x) = w_\epsilon(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\frac{\lambda_1(\epsilon\eta)t}{\epsilon^2}} \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \epsilon\eta\right) e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta.$$

D'autre part, le théorème de Krein-Rutman nous permet de dire que  $\lambda_1(\theta)$  est simple et régulière dans un voisinage de 0, et de même pour  $\Psi_1(y, \theta)$ . On peut donc effectuer un développement de Taylor en  $\theta$  au voisinage de  $\theta = 0$  :

$$\begin{aligned}
\lambda_1(\epsilon\eta) &= \lambda_1(0) + \epsilon\eta \cdot \nabla_\theta \lambda_1(0) + \frac{\epsilon^2}{2} \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0) \eta \cdot \eta + \mathcal{O}(\epsilon^3) \\
\Psi_1(y, \epsilon\eta) &= \Psi_1(y, 0) + \mathcal{O}(\epsilon)
\end{aligned}$$

Ici le développement limité de  $\Psi_1$  est valable dans les normes  $L^2(\mathbb{T}^N)$ ,  $L^\infty(\mathbb{T}^N)$ , ou  $H^1(\mathbb{T}^N)$ .

On s'intéresse maintenant à l'inconnue  $\tilde{u}_\epsilon(t, x) = u_\epsilon(t, x) e^{\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}}$ . On injecte les deux développements limités dans l'expression de  $u_\epsilon(t, x)$  et on obtient :

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_\epsilon(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\left(\frac{\eta}{\epsilon} \nabla \lambda_1(0) t + \frac{1}{2} \eta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0) t + \mathcal{O}(\epsilon)\right)} \left(\Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) + \mathcal{O}(\epsilon)\right) e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta \\
&= \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\left(\frac{\eta}{\epsilon} \nabla \lambda_1(0) t + \frac{1}{2} \eta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0) t\right)} e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta + \mathcal{O}(\epsilon).
\end{aligned}$$

Ici, la norme utilisée pour le  $\mathcal{O}(\epsilon)$  est la norme  $L_{loc}^\infty(\mathbb{R}^+, L^\infty(\mathbb{R}^N))$ . Alors, si on pose :

$$v(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\frac{1}{2} \eta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0) t} e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta.$$

On vérifie aisément que  $v$  est solution de l'équation homogénéisée :

$$\frac{\partial v}{\partial t} - \operatorname{div}(A^* \nabla v) = 0$$

avec la matrice de diffusion homogénéisée donnée par :

$$A^* = \frac{1}{8\pi^2} \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0).$$

Or, d'après le lemme 2, on sait que  $\nabla_\theta \lambda_1(0)$  est imaginaire pur. Ainsi, en Fourier, la multiplication par  $e^{-\frac{2}{\epsilon} \nabla_\theta \lambda_1(0)t}$  équivaut à une translation dans l'espace des  $x$  par  $-\frac{U^*}{\epsilon} t$  avec le champ de convection homogénéisé :

$$U^* = \frac{1}{2i\pi} \nabla_\theta \lambda_1(0).$$

On peut donc enfin réécrire  $\tilde{u}_\epsilon(t, x)$  sous la forme :

$$\tilde{u}_\epsilon(t, x) = \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) v\left(t, x - \frac{U^*}{\epsilon} t\right) + \mathcal{O}(\epsilon),$$

ce qui donne le résultat voulu pour  $u_\epsilon(x, t)$ .  $\square$

**Remarque 6 (Retour sur la préparation des données initiales)** *On pourrait choisir de partir d'une autre condition initiale centrée sur un paramètre  $\theta_0$  non nul :*

$$u_\epsilon(x)(t=0) = \epsilon^{-N} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_1\left(\frac{\theta - \theta_0}{\epsilon}\right) \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \theta_0\right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\theta$$

*avec toujours la condition  $\alpha_1(\eta)$  à support compact. Mais il faudrait alors faire des hypothèses supplémentaires, car pour  $\theta_0$  non nul, on ne dispose plus du théorème de Krein-Rutman.*

*On doit faire l'hypothèse supplémentaire que pour cette valeur de  $\theta_0$ , il existe une plus petite valeur propre  $\lambda_1(\theta_0)$ , que cette valeur propre est simple. On peut alors faire les calculs de la même manière et trouver un théorème équivalent centré autour du vecteur propre  $\Psi_1(\frac{x}{\epsilon}, \theta_0)$ . Cependant, il faut remarquer que ce vecteur propre est a priori oscillant (il n'a pas de signe constant et il est même complexe en général), ce qui donne une condition initiale avec peu de sens physique. L'intérêt de choisir le paramètre  $\theta = 0$  est donc aussi d'avoir une donnée initiale bien posée physiquement.*

**Remarque 7** *Le théorème 1 était déjà connu, et possède une preuve plus simple, dans le cas particulier suivant [6], [7], [8]. On fait le changement d'inconnue (appelé principe de factorisation)*

$$v_\epsilon(t, x) = e^{\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}} \frac{u_\epsilon(t, x)}{\Psi_1(\frac{x}{\epsilon}, 0)},$$

*et on multiplie l'équation (1) par  $\Psi_1^*(\frac{x}{\epsilon}, 0)$ . Après quelques simplifications algébriques on obtient que  $v_\epsilon$  est solution de*

$$\begin{cases} \frac{\partial v_\epsilon}{\partial t} - \operatorname{div} \left( \tilde{A}(\frac{x}{\epsilon}) \nabla v_\epsilon \right) + \epsilon^{-1} \tilde{b}(\frac{x}{\epsilon}) \cdot \nabla v_\epsilon = 0 \text{ dans } \Omega_\epsilon \times (0, T), \\ \tilde{A}(\frac{x}{\epsilon}) \nabla v_\epsilon \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\Omega_\epsilon \times (0, T), \end{cases} \quad (7)$$

*avec  $\tilde{A}(y) = \Psi_1(y) \Psi_1^*(y) A(y)$  et*

$$\tilde{b}(y) = \Psi_1(y) \Psi_1^*(y) b(y) + A(y) (\Psi_1(y) \nabla \Psi_1^*(y) - \Psi_1^*(y) \nabla \Psi_1(y)).$$

*On vérifie aisément que le champ de vitesse  $\tilde{b}$  est incompressible,  $\operatorname{div}_y \tilde{b} = 0$ . Si, de plus, il est de moyenne nulle, i.e.*

$$\int_{\mathbb{T}^N} \tilde{b}(y) dy = 0, \quad (8)$$

*alors l'homogénéisation de (7) est facile et classique par des arguments standards (sans ondes de Bloch, voir [17], [18]). Par contre, si la condition (8) n'est pas satisfaite, alors la méthode d'homogénéisation classique, comme dans [17], [18], est inopérante. On peut vérifier [8] que la condition (8) est équivalente à  $\nabla_\theta \lambda_1(0) = 0$ . En fait, plus généralement on a*

$$\frac{1}{2i\pi} \nabla_\theta \lambda_1(0) = \int_{\mathbb{T}^N} \tilde{b}(y) dy.$$

*Par conséquent, le théorème 1 est nouveau lorsque la condition (8) n'est pas satisfaite, c'est-à-dire lorsqu'il apparaît une vitesse homogénéisée non nulle  $U^* \neq 0$ .*

### 2.3 Cas autoadjoint : décomposition en ondes de Bloch

Dans le cas où  $b(y) = 0, \forall y \in \mathbb{T}^N$ , et  $A(y) = A^*(y)$ , l'opérateur  $\mathbb{A}(\theta)$  est autoadjoint. Cela simplifie le problème, car on dispose alors pour cet opérateur autoadjoint complexe d'une base de vecteurs propres orthonormés  $\Psi_n(y)$  de  $L^2(\mathbb{T}^N)$  associés aux valeurs propres réelles croissantes  $\lambda_n(\theta)$ . On rappelle que l'on a alors pour cet opérateur la décomposition en ondes de Bloch suivante [2] :

**Lemme 1** *Soit  $u(y) \in L^2(\mathbb{R}^N)$ . Si on pose*

$$\alpha_n(\theta) = \int_{\mathbb{R}^N} u(y) \bar{\Psi}_n(y, \theta) e^{-2i\pi\theta \cdot y} dy$$

*On a alors la décomposition suivante :*

$$u(y) = \sum_{n \geq 1} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_n(\theta) \Psi_n(y, \theta) e^{2i\pi\theta \cdot y} d\theta$$

*De plus, si  $v(y) = \sum_{n \geq 1} \int_{\mathbb{T}^N} \beta_n(\theta) \Psi_n(y, \theta) e^{2i\pi\theta \cdot y} d\theta$  dans  $L^2(\mathbb{R}^N)$ , alors on a :*

$$\int_{\mathbb{R}^N} u(y) \cdot \bar{v}(y) dy = \sum_{n \geq 1} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_n(\theta) \bar{\beta}_n(\theta) d\theta.$$

On a donc une isométrie de  $L^2(\mathbb{R}^N)$  dans  $l^2(\mathbb{N}; L^2(\mathbb{T}^N))$ .

Cette décomposition est habituellement utilisée dans le cadre de la mécanique quantique des matériaux. Dans ce cadre,  $\theta$  représente la quasi-impulsion et  $\lambda_n(\theta)$  le niveau d'énergie des électrons du matériau, et  $\Psi_n$  la fonction d'onde associée décrivant les états quantiques.

Dans le cadre auto-adjoint, la décomposition en ondes de Bloch permet d'obtenir des estimations a priori de la solution du problème parabolique qui évite d'avoir à considérer des données initiales bien préparées [1].

Cela permet de mieux comprendre le sens de la préparation des données initiales dans le cas non autoadjoint. On projette sur la fonction propre  $\Psi_1(y, \theta)$  pour des valeurs de  $\theta$  de l'ordre de  $\epsilon$ . Cela permet d'utiliser la régularité du couple propre en  $\theta = 0$ . Dans le cas non autoadjoint en effet, on ne dispose que du théorème de Krein-Rutman pour le paramètre  $\theta = 0$ .

Enfin, dans ce cas auto-adjoint, on sait déjà [7] que l'on a alors une vitesse de convection homogénéisée  $U^* = 0$  car dans ce cas, le paramètre  $\theta = 0$  correspond à un minimum pour la valeur propre  $\lambda_1(\theta)$  donc on a  $\nabla_\theta \lambda_1(0) = 0$ .

## 2.4 Correction à un ordre plus élevé

**Correction à l'ordre 2** On peut aller plus loin dans le développement asymptotique pour obtenir des résultats plus précis. On doit ajouter des termes correctifs dans l'équation homogénéisée pour obtenir une correction à un ordre plus élevé.

**Théorème 2** Soit  $\alpha_1(\eta)$  une fonction de  $L^2(\mathbb{R}^N)$ , à support compact. Supposons que la condition initiale soit de la forme :

$$u_\epsilon(x)(t=0) = \epsilon^{-N} \int_{\mathbb{T}^N} \alpha_1\left(\frac{\theta}{\epsilon}\right) \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, \theta\right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\theta.$$

Alors la solution de (1) vérifie :

$$u_\epsilon(t, x) = e^{-\frac{\lambda_1(0)}{\epsilon^2}t} \left( \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) v_\epsilon\left(t, x - \frac{U^*}{\epsilon}t\right) + \frac{\epsilon}{2i\pi} \nabla_\theta \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) \cdot \nabla v_\epsilon\left(t, x - \frac{U^*}{\epsilon}t\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right)$$

où  $U^* = \frac{1}{2i\pi} \nabla_\theta \lambda_1(0)$  et  $v_\epsilon(t, x)$  est la solution du problème homogénéisé suivant :

$$\frac{\partial v_\epsilon}{\partial t} - \operatorname{div}(A^* \nabla v_\epsilon) + \epsilon B^* \nabla \nabla \nabla v_\epsilon = 0$$

avec les coefficients homogénéisés donnés par :

$$A^* = \frac{1}{8\pi^2} \nabla_{\theta\theta} \lambda_1(0)$$

$$B^* = \frac{i}{48\pi^3} \nabla^3 \lambda_1(0)$$

### Preuve du théorème

On revient sur le résultat de développement asymptotique de la solution en

poussant le développement à un ordre supérieur.

$$\begin{aligned}\lambda_1(\epsilon\eta) &= \lambda_1(0) + \epsilon\eta \cdot \nabla_\theta \lambda_1(0) + \frac{\epsilon^2}{2} \eta\eta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0)t + \frac{\epsilon^3}{6} \eta\eta\eta \nabla_\theta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0)t + \mathcal{O}(\epsilon^4) \\ \Psi_1(y, \epsilon\eta) &= \Psi_1(y, 0) + \epsilon\eta \cdot \nabla_\theta \Psi_1(y, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^2)\end{aligned}$$

Ici ces développements limités sont valables dans les normes  $L^2(\mathbb{R}^N), L^\infty(\mathbb{R}^N)$ , ou  $H^1(\mathbb{R}^N)$ . On s'intéresse maintenant à l'inconnue  $\tilde{u}_\epsilon(t, x) = u_\epsilon(t, x)e^{\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}}$ . On injecte les deux développements limités dans l'expression de  $u_\epsilon(t, x)$  et on obtient :

$$\begin{aligned}\tilde{u}_\epsilon(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\left(\frac{2}{\epsilon} \nabla \lambda_1(0)t + \frac{1}{2} \eta\eta \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0)t + \frac{\epsilon}{6} \eta\eta\eta \nabla_\theta^3 \lambda_1(0)t + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right)} \\ &\quad \left(\Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) + \epsilon\eta \cdot \nabla_\theta \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\eta\end{aligned}$$

Ici, la norme utilisée pour le  $\mathcal{O}(\epsilon^2)$  est la norme  $L^2(\mathbb{R}^N)$ , ou  $L^\infty(\mathbb{R}^N)$ . Alors, si  $U^* = \frac{1}{2i\pi} \nabla_\theta \lambda_1(0)$ , et si on pose :

$$v_\epsilon(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\frac{1}{2} \eta\eta \nabla \nabla \lambda_1(0)t - \frac{\epsilon}{6} \eta\eta\eta \nabla \nabla \nabla \lambda_1(0)t} e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta$$

On voit que  $v_\epsilon$  vérifie l'équation homogénéisée :

$$\frac{\partial v_\epsilon}{\partial t} - \operatorname{div}(A^* \nabla v_\epsilon) + \epsilon B^* \nabla \nabla \nabla v_\epsilon = 0$$

avec les coefficients homogénéisés donnés par :

$$\begin{aligned}A^* &= \frac{1}{8\pi^2} \nabla_{\theta\theta} \lambda_1(0) \\ B^* &= \frac{i}{48\pi^3} \nabla^3 \lambda_1(0)\end{aligned}$$

et on peut réécrire  $\tilde{u}_\epsilon(t, x)$  sous la forme :

$$\tilde{u}_\epsilon(t, x) = \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) v_\epsilon\left(t, x - \frac{U^*}{\epsilon} t\right) + \frac{\epsilon}{2i\pi} \nabla_\theta \Psi_1\left(\frac{x}{\epsilon}, 0\right) \cdot \nabla v_\epsilon\left(t, x - \frac{U^*}{\epsilon} t\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Ce qui donne le résultat voulu pour  $u_\epsilon(x, t)$ .  $\square$

**Remarque 8** On montrera lors de son calcul que le tenseur  $B^*$  est réel.

**Remarque 9** L'équation donnée pour  $v_\epsilon$  contient un terme en  $\epsilon$ , qui est un terme correctif, mais les coefficients sont, eux, homogénéisés, et c'est en ce sens qu'on parle d'"équation homogénéisée".



**Correction à l'ordre N** On veut faire remarquer ici que la correction peut s'effectuer en fait à l'ordre N. On s'est restreint à l'ordre 1 dans un premier temps parce que le calcul des coefficients homogénéisés devient ensuite très lourd.

Si on veut aller jusqu'à l'ordre N, il suffit de pousser le développement de Taylor de  $\lambda_1(0)$  et celui de  $\Psi_1(y, 0)$  :

$$\lambda_1(\epsilon\eta) = \sum_{k=0}^{N+2} \frac{\epsilon^k}{k!} \eta^k \nabla_{\theta}^k \lambda_1(0) + \mathcal{O}(\epsilon^{N+3})$$

$$\Psi_1(y, \epsilon\eta) = \sum_{l=0}^N \frac{\epsilon^l}{l!} \eta^l \nabla_{\theta}^l \Psi_1(y, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^{N+1})$$

On injecte ce développement dans l'expression de la solution  $u_{\epsilon}$  :

$$u_{\epsilon}(t, x) = e^{-\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}} \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-\left(\frac{2}{\epsilon} \nabla \lambda_1(0)t\right)} e^{-t \left( \sum_{k=0}^N \frac{\epsilon^k}{(k+2)!} \eta^{k+2} \nabla_{\theta}^{k+2} \lambda_1(0) + \mathcal{O}(\epsilon^{N+1}) \right)} \\ \left( \sum_{l=0}^N \frac{\epsilon^l}{l!} \eta^l \nabla_{\theta}^l \Psi_1(y, 0) + \mathcal{O}(\epsilon^{N+1}) \right) e^{2i\pi\theta \cdot \frac{x}{\epsilon}} d\eta$$

On introduit alors :

$$v_{\epsilon}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^N} \alpha_1(\eta) e^{-t \left( \sum_{k=0}^N \frac{\epsilon^k}{(k+2)!} \eta^{k+2} \nabla_{\theta}^{k+2} \lambda_1(0) \right)} e^{2i\pi\eta \cdot x} d\eta$$

On remarque que  $v_{\epsilon}$  est solution d'une équation homogénéisée, toujours au sens où ses coefficients le sont, même si les corrections sont en puissance de  $\epsilon$  :

$$\frac{\partial v_{\epsilon}}{\partial t} + \sum_{k=0}^N \frac{\epsilon^k}{(2i\pi)^{k+2} (k+2)!} \nabla_{\theta}^{k+2} \lambda_1(0) \nabla^{k+2} v_{\epsilon} = 0.$$

D'autre part on peut réécrire la solution  $u_{\epsilon}$  comme :

$$u_{\epsilon}(t, x) = e^{-\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}} \left[ \sum_{k=0}^N \frac{\epsilon^k}{(2i\pi)^k k!} \nabla_{\theta}^k \Psi_1(y, 0) \cdot \nabla^k v_{\epsilon}(t, x - \frac{U^* t}{\epsilon}) + \mathcal{O}(\epsilon^{N+1}) \right].$$

## 2.5 Calcul des coefficients homogénéisés

Pour pouvoir calculer les coefficients homogénéisés donnés par le théorème, il faut pouvoir donner une expression explicite de ses coefficients, à partir des solutions  $\Psi_1(y, 0)$  et  $\Psi_1^*(y, 0)$  des problèmes de Bloch. On veut évaluer les dérivées de la valeur propre  $\lambda_1(0)$  par rapport au paramètre de Bloch  $\theta$ . On ne veut pas à avoir à calculer de dérivées des valeurs propres par rapport à  $\theta$  numériquement car cela serait trop sensible aux erreurs numériques. Pour contourner ce problème, on dérive le problème de Bloch par rapport à  $\theta_k$ , ce qui est licite car  $\lambda_1(0)$  est simple, et un argument classique de perturbation donne que ceci reste valable au voisinage de  $\theta = 0$  d'après [24]. Cela implique que le couple  $(\lambda_1(0), \Psi_1(0))$  est régulier au voisinage de  $\theta = 0$ .

On note  $\mathbb{A}(\theta)$  l'opérateur non borné sur  $L^2(\mathbb{T}^N)$  défini par :

$$\mathbb{A}(\theta)\Psi = -(\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta)(A(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi) + b(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi + c(y)\Psi - \lambda_1(\theta)\Psi.$$

On note  $(e_k)_{1 \leq k \leq N}$  la base canonique de  $\mathbb{R}^N$ , alors la première dérivée de l'opérateur satisfait l'équation

$$\begin{aligned} \mathbb{A}(\theta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} &= 2i\pi e_k A(y)(\nabla_y + 2i\pi\theta)\Psi_1 + (\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta)(A(y)2i\pi e_k \Psi_1) \\ &\quad - 2i\pi b(y)e_k \Psi_1 + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k} \Psi_1. \end{aligned} \tag{9}$$

Soit, en  $\theta = 0$ ,

$$\mathbb{A}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} = 2i\pi e_k A(y) \nabla_y \Psi_1 + \operatorname{div}_y (A(y) 2i\pi e_k \Psi_1) - 2i\pi b(y) e_k \Psi_1 + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k} \Psi_1. \tag{10}$$

L'alternative de Fredholm nous dit alors que l'existence de  $\frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k}(0)$  assure que la condition de compatibilité est assurée, donc que le membre de droite de (10) appartient à l'orthogonal du noyau de  $A^*(0)$  qui est engendré par le vecteur propre  $\Psi_1^*(0)$  puisque la valeur propre  $\lambda_1(0)$  est simple. Cela nous permet d'obtenir l'expression de  $\nabla_\theta \lambda_1(0)$  qui ne fait pas intervenir de dérivées

par rapport au paramètre  $\theta$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k} &= -2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) \nabla_y \Psi_1 dy - 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y (A(y) e_k \Psi_1) dy \\ &\quad + 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_k \Psi_1 dy. \end{aligned} \quad (11)$$

**Lemme 2** *On a  $\nabla_\theta \lambda_1(0) \in i\mathbb{R}^N$ , ce qui donne pour la vitesse  $U^*$  une valeur réelle :*

$$(U^*)_k = - \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) \nabla_y \Psi_1 dy - \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y (A(y) e_k \Psi_1) dy + \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_k \Psi_1 dy. \quad (12)$$

On utilise la même technique pour calculer le coefficient de diffusion homogénéisé. On peut dériver (9) par rapport à  $\theta_l$ , et on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{A}(\theta) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} &= 2i\pi e_k A(y) (\nabla_y + 2i\pi\theta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} + (\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta) \left( A(y) 2i\pi e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \right) \\ &\quad + 2i\pi e_l A(y) (\nabla_y + 2i\pi\theta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} + (\operatorname{div}_y + 2i\pi\theta) \left( A(y) 2i\pi e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \right) \\ &\quad - 2i\pi e_l b(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} - 2i\pi e_k b(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \\ &\quad + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k}(\theta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_l}(\theta) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \\ &\quad - 4\pi^2 e_k A(y) e_l \Psi_1 - 4\pi^2 e_l A(y) e_k \Psi_1 + \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l}(\theta) \Psi_1. \end{aligned} \quad (13)$$

La condition de compatibilité pour l'existence de  $\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l}(0)$  donne alors l'expression de la Hessienne de  $\lambda_1(0)$  et donc de la matrice  $A^*$  de l'équation homogénéisée (on prend la valeur en  $\theta = 0$ ) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} &= - \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} dy - \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_l}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} dy \\ &\quad - 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) \nabla \left( \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \right) dy - 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_l A(y) \nabla \left( \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \right) dy \\ &\quad - 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( e_l A(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \right) dy - 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( e_k A(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \right) dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +4\pi^2 \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \Psi_1 e_l A(y) e_k dy + 4\pi^2 \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \Psi_1 e_k A(y) e_l dy \\
& +2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} dy + 2i\pi \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} dy
\end{aligned}$$

Cette expression est réelle. En effet,  $\nabla_\theta \Psi_1$  est imaginaire pur, comme solution d'un problème linéaire avec un second membre imaginaire pur, et  $\nabla_\theta \lambda_1(0)$  est aussi imaginaire pure d'après le lemme 2. Donc la matrice de diffusion-dispersion de l'équation homogénéisée  $A^*$  est bien réelle, et vaut :

$$\begin{aligned}
(A^*)_{k,l} &= -\frac{1}{8\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} dy - \frac{1}{8\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_l}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} dy \\
& -\frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) \nabla \left( \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \right) dy - \frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_l A(y) \nabla \left( \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \right) dy \\
& -\frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( e_l A(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \right) dy - \frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( e_k A(y) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \right) dy \\
& +\frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \Psi_1 e_l A(y) e_k dy + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \Psi_1 e_k A(y) e_l dy \\
& +\frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} dy + \frac{i}{4\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} dy
\end{aligned}$$

Enfin, pour calculer le tenseur  $B^*$ , on dérive (13) par rapport à  $\theta_\mu$  et on obtient, en  $\theta = 0$  :

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}(\theta) \frac{\partial^3 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l \partial \theta_\mu} &= 2i\pi e_\mu A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \right) + 2i\pi e_k A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} \right) \\
& +2i\pi e_l A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} \right) \\
& +2i\pi \operatorname{div}_y \left( A(y) e_\mu \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \right) + 2i\pi \operatorname{div}_y \left( A(y) e_k \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} \right) \\
& +2i\pi \operatorname{div}_y \left( A(y) e_l \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} \right) \\
& -2i\pi b(y) e_\mu \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} - 2i\pi b(y) e_l \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} - 2i\pi b(y) e_k \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_l} \\
& -4\pi^2 e_k A(y) e_\mu \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} - 4\pi^2 e_\mu A(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} - 4\pi^2 e_l A(y) e_\mu \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -4\pi^2 e_\mu A(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} - 4\pi^2 e_k A(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} - 4\pi^2 e_l A(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} \\
& + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_l}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} + \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_\mu}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \\
& + \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} + \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_k}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} + \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_l}(0) \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \\
& + \frac{\partial^3 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l \partial \theta_\mu}(0) \Psi_1
\end{aligned}$$

La condition de compatibilité de l'alternative de Fredholm donne alors l'expression de  $\nabla \nabla \nabla \lambda_1(0)$ , puis de  $B^*$  :

$$\begin{aligned}
(B^*)_{k,l,\mu} &= \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_\mu A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \right) + \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} \right) \\
&+ \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_l A(y) \nabla \left( \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} \right) \\
&+ \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( A(y) e_\mu \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \right) + \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( A(y) e_k \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} \right) \\
&+ \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \operatorname{div}_y \left( A(y) e_l \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} \right) \\
&- \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_\mu \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} - \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_l \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} \\
&- \frac{1}{24\pi^2} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* b(y) e_k \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_l} \\
&+ \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) e_\mu \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} + \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_\mu A(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \\
&+ \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_l A(y) e_\mu \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \\
&+ \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_\mu A(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} + \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_k A(y) e_l \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} \\
&+ \frac{i}{12\pi} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* e_l A(y) e_k \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} - \frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_k}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_l \partial \theta_\mu} \\
&- \frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_l}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_\mu} - \frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta_\mu}(0) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l} \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_\mu} - \frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_k} \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_l} \\
& -\frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta_\mu \partial \theta_l} \frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k} \\
& -\frac{i}{48\pi^3} \int_{\mathbb{T}^N} \bar{\Psi}_1^* \frac{\partial^3 \lambda_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l \partial \theta_\mu} \Psi_1
\end{aligned}$$

On remarque encore que  $B^*$  est réel.

## 2.6 Cas d'une perturbation macroscopique sur les coefficients

On se place dans le cas où on s'autorise une perturbation macroscopique des coefficients, de type :

$$\tilde{A}^\epsilon \left( x, \frac{x}{\epsilon} \right) = A \left( \frac{x}{\epsilon} \right) + \epsilon^2 A^1 \left( x, \frac{x}{\epsilon} \right).$$

Cela relâche un peu la contrainte des coefficients purement périodiques, mais la perturbation autorisée est de l'ordre de  $\epsilon^2$ . Cela peut par exemple être intéressant si les propriétés du fluide considéré varient un peu avec l'échelle macroscopique. On fait ici un développement asymptotique formel, sans faire de preuve rigoureuse. En effet, cela nécessiterait de faire des estimations a priori, rendues difficiles par le caractère non autoadjoint de l'opérateur.

On effectue le développement asymptotique suivant :

$$u_\epsilon(t, x) = e^{-\frac{\lambda_1(0)t}{\epsilon^2}} \left( u_0(t, \frac{x}{\epsilon}, x - \frac{U^*t}{\epsilon}) + \epsilon u_1(t, \frac{x}{\epsilon}, x - \frac{U^*t}{\epsilon}) + \epsilon^2 u_2(t, \frac{x}{\epsilon}, x - \frac{U^*t}{\epsilon}) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \right)$$

On garde les mêmes problèmes de cellule, pour  $\Psi_n(\theta)$  et  $\Psi_n^*(\theta)$  donnés par (4) et (5). On injecte le développement asymptotique dans (1) et on obtient :

-pour les termes en  $\epsilon^{-2}$  :

$$-\lambda_1(0)u_0(t, y, x') - \operatorname{div}_y(A(y)\nabla_y u_0(t, y, x')) + b\nabla_y u_0(t, y, x') = 0$$

avec

$$x' = x - \frac{U^*t}{\epsilon}$$

Donc  $u_0$  vérifie la même équation que le vecteur propre  $\Psi_1(y, 0)$ . Or la valeur propre associée est simple donc ceci implique que :

$$u_0(t, y, x') = \Psi_1(y, 0)v(t, x')$$

-pour les termes en  $\epsilon^{-1}$  :

$$\mathbb{A}(0)u_1 = 2i\pi\nabla_\theta\lambda_1(0).\nabla v - b\nabla v.\Psi_1 + \nabla v A\nabla\Psi_1 + \operatorname{div}(A\nabla v\Psi_1)$$

Mais si on multiplie l'équation (10) par  $\frac{\partial v}{\partial x_k}$  et que l'on somme sur les composantes  $1 \geq k \geq N$ , on obtient la même équation à une constante près (égale à  $\frac{1}{2i\pi}$ ) pour  $\nabla_\theta\Psi_1 \cdot \nabla v$ , si on pose

$$U^* = \frac{1}{2i\pi}\nabla_\theta\lambda_1(0).$$

Or la simplicité de  $\lambda_1(0)$  et la condition de compatibilité de Fredholm nous donne que la solution de cette équation est unique donc :

$$u_1(t, y, x') = \frac{1}{2i\pi}\nabla_\theta\Psi_1(y) \cdot \nabla v(t, x')$$

-pour les termes en  $\epsilon^0$

On obtient ici :

$$\begin{aligned} \mathbb{A}(0)u_2 &= -\Psi_1(y)\frac{\partial v}{\partial t}(t, x) + \frac{1}{2i\pi}\sum_{k,l}\frac{\partial^2 v}{\partial x_k\partial x_l}\frac{\partial\Psi_1}{\partial\theta_k}\frac{\partial\lambda_1(0)}{\partial\theta_l} \\ &\quad - \sum_{k,l}\frac{\partial^2 v}{\partial x_k\partial x_l}\frac{\partial\Psi_1}{\partial\theta_k}b(y)e_l + \operatorname{div}_y\left(A(y)\sum_{k,l}\frac{\partial^2 v}{\partial x_k\partial x_l}\frac{\partial\Psi_1}{\partial\theta_k}e_l\right) \\ &\quad + \operatorname{div}_x(A(y)\Psi_1(y)\nabla(t, x)) + \operatorname{div}_x\left(A(y)\sum_k\frac{\partial v}{\partial x_k}\nabla\left(\frac{\partial\Psi_1}{\partial\theta_k}\right)\right) \\ &\quad + v(t, x)\operatorname{div}_y(A^1(y, x)\nabla\Psi_1) \end{aligned}$$

L'alternative de Fredholm nous donne que le membre de droite doit être orthogonal à  $\Psi_1^*$  pour que la solution existe (et elle est alors unique, à l'addition d'un multiple de  $\Psi_1$  près). On écrit cette condition et on reconnaît l'expression de la hessienne  $\nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0)$ , d'où :

$$0 = -\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{8\pi^2} \sum_{k,l} \frac{\partial^2 v}{\partial x_k \partial x_l} \frac{\partial^2 \lambda_1(0)}{\partial \theta_k \partial \theta_l} - v \int_{\mathbb{T}^N} \nabla \Psi_1 A^1 \nabla \Psi_1^* dy.$$

On a alors

$$u_2(t, y, x) = C \sum_{k,l=1}^N \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \theta_k \partial \theta_l}(y) \frac{\partial^2 v}{\partial x_k \partial x_l}(t, x)$$

et l'équation homogénéisée suivante pour  $v$  :

$$\frac{\partial v}{\partial t} - \operatorname{div}(A^* \nabla v) + A_\star^1(x)v = 0$$

avec les coefficients homogénéisés donnés par :

$$A^* = \frac{1}{8\pi^2} \nabla_\theta \nabla_\theta \lambda_1(0)$$

$$A_\star^1 = \int_{\mathbb{T}^N} \nabla \Psi_1(y) A^1(y, x) \nabla \Psi_1^*(y) dy$$

On voit donc que le terme de perturbation macroscopique n'intervient qu'au niveau du problème homogénéisé. Ceci n'est qu'un développement formel et ne constitue pas une démonstration, mais cela permet de donner une idée de l'influence de perturbations macroscopiques si les coefficients de la matrice ne sont pas strictement périodiques. Cela changera l'équation vérifiée par la fonction  $v$  qui donne le comportement macroscopique de la solution, mais n'interviendra pas au niveau des problèmes de cellule, ce qui est dû à la mise à l'échelle de la perturbation à  $\epsilon^2$ .

## 2.7 Etude à l'aide des problèmes " $\theta$ -exponentiels"-périodiques

Le problème d'évolution non autoadjoint peut aussi être traité à l'aide de l'introduction de problèmes " $\theta$ -exponentiels"-périodiques, comme cela a été fait dans [6]. Nous rappelons ici la méthode et expliquons pourquoi elle ne nous satisfait pas dans notre cadre.



Il s'agit d'introduire, au lieu des problèmes de Bloch de cellule, les problèmes  $\theta$ -exponentiels-périodiques suivants :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y(A(y)\nabla_y\Psi_\theta) + b(y) \cdot \nabla_y\Psi_\theta + c(y)\Psi_\theta = \lambda(\theta)\Psi_\theta & \mathbb{T}^N \setminus \mathbb{S} \\ A(y)\nabla_y\Psi_\theta \cdot n + k\Psi_\theta = 0 \text{ sur } \partial\mathbb{S} \\ y \rightarrow \Psi_\theta(y)e^{-\theta \cdot y} & \mathbb{T}^N\text{-périodique} \end{cases}$$

Et son problème adjoint associé :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y(A^*(y)\nabla_y\Psi_\theta^*) - \operatorname{div}_y(b(y)\Psi_\theta^*) + c(y)\Psi_\theta^* = \lambda(\theta)\Psi_\theta^* \text{ dans } \mathbb{T}^N \setminus \mathbb{S} \\ A^*(y)\nabla_y\Psi_\theta^* \cdot n + b(y)\Psi_\theta^* \cdot n + k\Psi_\theta^* = 0 \text{ sur } \partial\mathbb{S} \\ y \rightarrow \Psi_\theta^*(y)e^{-\theta \cdot y} & \mathbb{T}^N\text{-périodique} \end{cases}$$

On peut alors généraliser le résultat de [7]. Ici on peut appliquer le théorème de Krein-Rutman pour tout  $\theta$ , d'où l'existence d'un ensemble de plus petite valeur propre  $\lambda_1(\theta)$ . On montre alors que cet ensemble  $\{\lambda_1(\theta), \theta \in \mathbb{R}^N\}$  admet un maximum  $\lambda_\infty$  obtenu pour une valeur unique  $\theta = \theta_\infty$ , pour laquelle on peut choisir les vecteurs propres correspondants  $\Psi_\infty$  et  $\Psi_\infty^*$  positifs.

On peut factoriser la solution de la manière suivante, pour changer l'inconnue  $u_\epsilon(t, x)$  en l'inconnue  $v_\epsilon(t, x)$  :

$$u_\epsilon(t, x) = e^{\theta_\infty \cdot \frac{x}{\epsilon}} \Psi_\infty\left(\frac{x}{\epsilon}\right) v_\epsilon(t, x) e^{-\frac{\lambda(\theta_\infty)t}{\epsilon^2}}$$

La fonction  $v_\epsilon(t, x)$  converge faiblement vers la solution d'un problème homogénéisé donné par une équation d'évolution de diffusion, avec des coefficients homogénéisés dépendant des vecteurs propres des problèmes " $\theta$ -exponentiels".

Cette factorisation contraint la condition initiale à être de la forme :

$$u_\epsilon(0, x) = e^{\theta_\infty \cdot \frac{x}{\epsilon}} \Psi_\infty\left(\frac{x}{\epsilon}\right) v_0(x).$$

Cette approche ne nous convient pas car la contrainte sur la donnée initiale impose une distribution physique trop particulière (à croissance exponentielle). De plus, le problème homogénéisé alors obtenu ne "voit" pas la dérive. Nous nous plaçons dans le référentiel en mouvement avec la dérive, à

l'échelle macroscopique (le phénomène de dérive a lieu à l'échelle macroscopique, seulement au niveau de la variable "lente").

Néanmoins, dans le cas bien connu [7] où  $c(y) = 0$ ,  $k = 0$ ,  $\text{div}(b(y)) = 0$ , et  $\int_{\mathbb{T}^N} b(y) = 0$ , cette approche est satisfaisante. Dans ce cas en effet,  $\theta_\infty = 0$ ,  $\Psi_\infty(y) = \Psi_\infty^* = 1$  et il n'y a plus la contrainte de distribution exponentielle sur la condition initiale. Mais si  $\theta_\infty = 0$ , alors la vitesse  $U^*$  est nulle, ce qui n'est pas le cadre dans lequel nous voulons travailler.

## 3 Etude numérique

### 3.1 Objectifs

Le but de cette section est de calculer numériquement les valeurs des coefficients homogénéisés  $A^*$  et  $U^*$  et de faire une étude de la sensibilité de ces coefficients en fonction de certaines données, à savoir le champ de vitesse de convection  $b(y)$ , et le coefficient de chimie  $k$ .

Notre but est ici de faire apparaître les couplages qui sont visibles au niveau du calcul des coefficients homogénéisés, le fait par exemple que le terme de chimie influe sur la vitesse de convection homogénéisée, et de faire apparaître les régimes dispersifs pour les grandes vitesses de convection microscopique.

### 3.2 Remarques sur le code utilisé

On utilise le logiciel FREEFEM++ [12] pour réaliser les calculs, avec une méthode d'éléments finis P1. Pour effectuer le calcul des coefficients homogénéisés, on doit résoudre le problème aux valeurs propres de cellule (ce qui est réalisé grâce à la librairie "Arpack++"), et le problème adjoint associé.

**Décentrement de l'opérateur de convection discret** L'opérateur de convection nécessite de décentrer le calcul lors de la discrétisation, sinon on ne respecte pas le principe du maximum discret, et le théorème de Krein-Rutman ne s'applique plus au niveau discrétisé. On utilise donc un schéma de

"*streamline diffusion*" qui permet de décentrer les éléments finis en remontant les lignes de courant données par le champ de convection. Ce schéma a été proposé par Hughes [13] et étudié par Johnson et al. [14], et nous avons utilisé la description faite par O. Pironneau [22]. L'idée est que la méthode des éléments finis conduit naturellement à des schémas aux différences finies centrés car les fonctions tests utilisées sont symétriques par rapport aux sommets. On va donc remplacer, dans la formulation variationnelle pour la partie convective, la fonction test  $v$  par une fonction qui a plus de poids en amont qu'en aval. On utilise ici la fonction test  $(v + hb \cdot \nabla v)$ , avec  $h$  donné par la taille de la triangulation pour le maillage. Cette nouvelle fonction test est appelée fonction de "Petrov-Galerkin" de Hughes. On peut aussi interpréter cette nouvelle fonction test par l'introduction dans la formulation forte d'un terme de viscosité numérique dans la direction de l'écoulement.

**Résolution des problèmes auxiliaires (10)** Une fois les problèmes aux valeurs propres de cellule résolus, on doit résoudre le problème (10) pour calculer  $\frac{\partial \Psi_1}{\partial \theta_k}$ . Ceci pose un problème car l'opérateur  $\mathbb{A}(0)$  possède un noyau. Mais on sait d'autre part que celui-ci est engendré par  $\Psi_1$ , puisque la valeur propre associée  $\lambda_1$  est simple. On va donc chercher la solution d'un problème perturbé en changeant  $\mathbb{A}(0)$  en  $(\mathbb{A}(0) + \epsilon Id)$  qui est un opérateur inversible, avec  $\epsilon$  un petit paramètre. On soustrait ensuite à la solution obtenue sa projection sur le noyau de  $\mathbb{A}(0)$ , et on obtient ainsi une solution dans l'orthogonal de ce noyau.

On peut alors calculer les coefficients homogénéisés en appliquant les formules intégrales.

### 3.3 Résultats numériques

**Convergence en maillage** On veut vérifier la convergence en maillage du code utilisé. On va observer le comportement de la valeur propre  $\lambda_1$  calculée par le code en fonction du raffinement du maillage. On prend comme maillage initial un maillage comportant 20 noeuds sur chaque segment horizontal et vertical (voir la figure 2). On raffine ensuite en multipliant le nombre de noeuds sur chaque segment par un coefficient (porté en abscisse dans la courbe

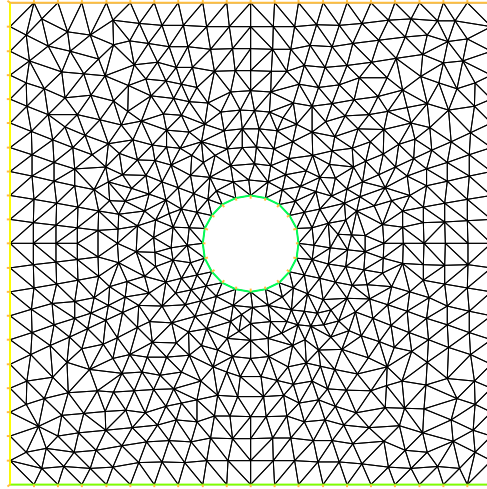


FIG. 2 – Maillage de la cellule

de la figure 3). Comme on ne connaît pas la "vraie" valeur de  $\lambda_1$ , on n'a pas

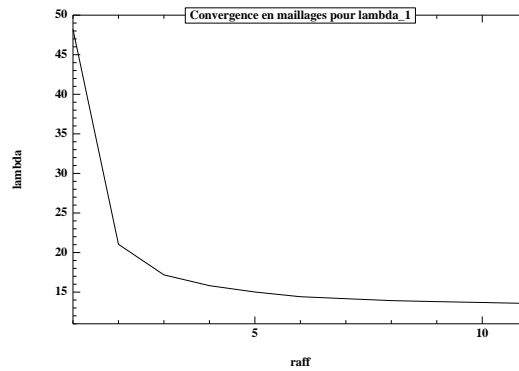


FIG. 3 – Convergence en maillage

fait une étude d'erreur très précise. Cependant, on a pris dans les simulations un coefficient de raffinement égal à 10, ce qui nous donne des résultats stables par raffinement pour tous les calculs effectués, à la précision voulue (avec une précision d'environ 10% sur les coefficients homogénéisés).

On prendra comme valeur pour toutes les simulations  $c(y) = 0$ , et  $A(y) = Id$ . On utilise un champ de convection microscopique  $b(y)$  donné par la résolu-

tion de l'équation de Navier-Stokes dans la cellule, avec condition aux limites de périodicité et condition de Dirichlet sur la surface du pore. Pour toutes les simulations, on prend un champ de convection microscopique orienté selon l'axe  $e_x$ , c'est-à-dire que la composante suivant  $e_y$  est nulle,  $b_y(y) = 0$ . On choisit enfin un rayon de pore  $\rho$  valant  $\rho = 0.1$ . On prend des cellules microscopiques de taille 1.

**Influence du nombre de Péclet microscopique** On fait varier la norme du champ de convection microscopique  $b_x(y)$  pour étudier la sensibilité des coefficients homogénéisés au nombre de Péclet microscopique.

On s'appuie sur des calculs réalisés sur une cellule comparable de 1981 à 1994 [25] (voir la figure 4). Ces calculs visent à étudier le comportement du coefficient homogénéisé de dispersion-diffusion longitudinal en fonction du nombre de Péclet microscopique.

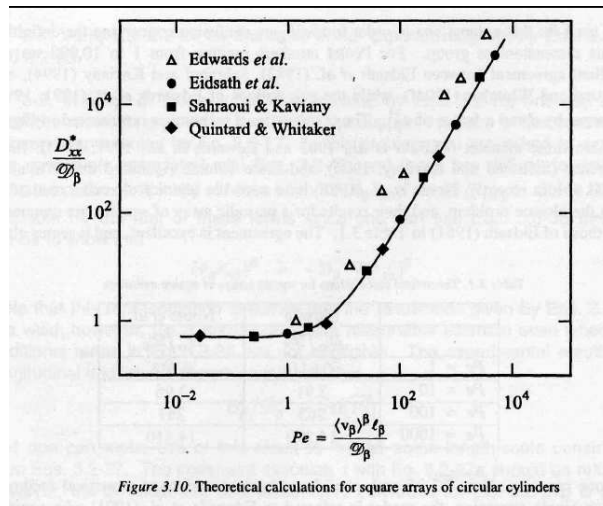


FIG. 4 – Variation du coefficient effectif de dispersion-diffusion longitudinal en fonction du nombre de Péclet microscopique (en échelle log-log), d'après [25].

On prend un coefficient de chimie  $k = 0$  pour pouvoir comparer avec les simulations de la figure 4. On effectue des simulations pour un nombre de Péclet variant entre  $10^{-1}$  et  $10^{3.5}$  et on représente la courbe en échelle

log-log. On obtient la courbe de la figure 5. On voit donc que la dispersion

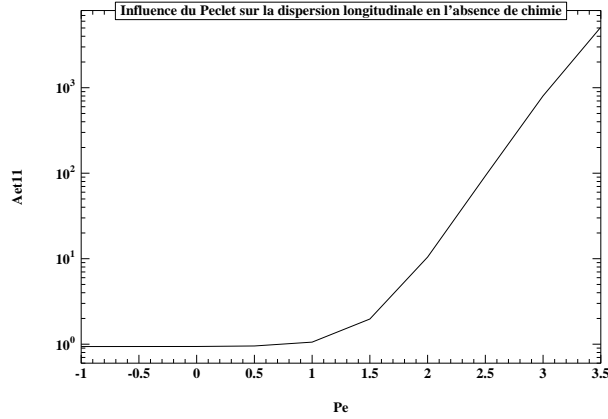


FIG. 5 – Variation du coefficient homogénéisé de dispersion-diffusion longitudinal  $A_{11}^*$  en fonction du nombre de Péclet microscopique (en échelle log-log).

augmente avec le nombre de Péclet en l'absence de chimie, avec une transition de régime qui se situe au voisinage de  $Pe = 100$ . Cette courbe est proche de celle attendue par les calculs déjà connus, ce qui permet de valider la méthode. On distingue un régime tortueux où la valeur du coefficient de dispersion-diffusion est légèrement inférieure à 1 à cause de la tortuosité, et un régime où la dispersion augmente avec le Péclet, de manière surlinéaire (ici, on trouve approximativement un comportement en  $Pe^{1.6}$  comme prévu).

On prend maintenant un coefficient de chimie  $k = 500$  puis  $k = 1000$ . On observe l'influence du Peclet microscopique sur le coefficient de diffusion-dispersion longitudinal pour différentes valeurs de la chimie,  $k = 0, 500, 1000$ , sur la figure 6. Les courbes  $k = 500$  et  $k = 1000$  sont confondues sur cette figure (en rouge). On remarque un changement de comportement : pour les petites valeurs de  $Pe$ , la chimie tend à augmenter la diffusion, et inversement pour les grandes valeurs de  $Pe$ .

Pour  $k = 0$  on observe maintenant l'influence du Peclet microscopique sur le coefficient de diffusion-dispersion latéral (voir la figure 7) et sur le coefficient extradiagonal (voir la figure 8). Remarquons que les valeurs du coefficient extradiagonal  $A_{12}^*$  sont très faibles et donc pas très représentatives.

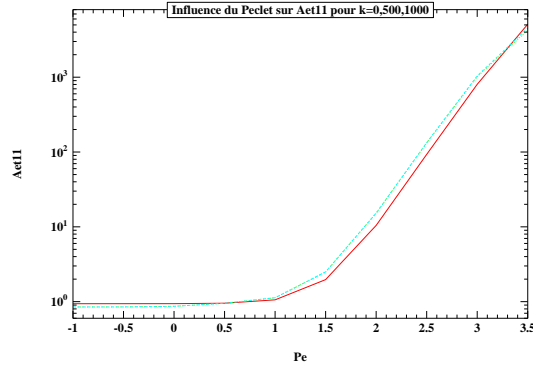


FIG. 6 – Evolution de  $A_{11}^*$  en fonction du nombre de Péclet microscopique pour  $k=0/500/1000$

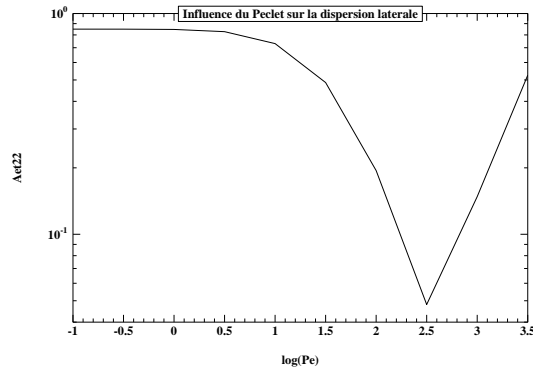


FIG. 7 – Evolution de  $A_{22}^*$  en fonction du nombre de Péclet microscopique

**Influence du terme de chimie** On veut maintenant étudier l'influence du terme de chimie sur les coefficients homogénéisés. On prend un Péclet fixé  $Pe = 500$  et on étudie l'influence du coefficient de chimie sur  $U_x^*$  (voir la figure 9). On observe que la chimie ralentit globalement l'écoulement. Cela se traduira donc par un retard du flux de concentration. Il y a une saturation lorsque  $k$  grandit. En effet, lorsque  $k$  tends vers l'infini, la condition aux limites sur le bord des pores devient une condition aux limites de Dirichlet (concentration nulle). On peut expliquer ce phénomène de la façon suivante : pour un Péclet élevé, comme le champ de vitesse s'annule sur la surface du pore, la chimie est, pour un  $k$  élevé, plus limitée par le temps de diffusion

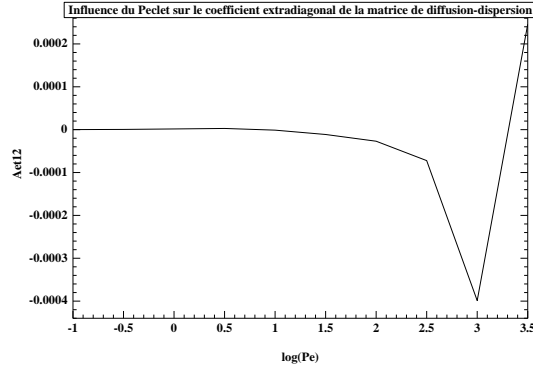


FIG. 8 – Evolution de  $A_{12}^*$  en fonction du nombre de Péclet microscopique

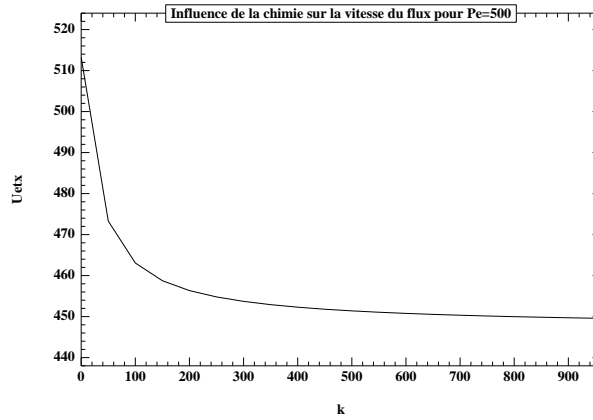


FIG. 9 – Evolution de  $U_x^*$  en fonction de  $k$

des particules à travers une épaisseur au voisinage de la surface du pore que par le coefficient de chimie  $k$  lui-même. Tout se passe comme si la surface du pore ne "voyait" pas la concentration réelle en espèce chimique dans le milieu, mais une concentration effective.

Ceci se voit aussi si on étudie l'influence de  $k$  sur la valeur propre  $\lambda_1(0)$ , qui détermine en particulier la décroissance en temps de la solution.

Pour  $Pe = 500$  on regarde l'influence de  $k$  sur la valeur propre  $\lambda_1$ , pour la décroissance de la solution (voir la figure 10). La valeur propre est donc fortement corrélée à l'adsorption sur la surface du pore.

Toujours pour un Péclet fixé  $Pe = 500$ , on regarde à présent l'influence



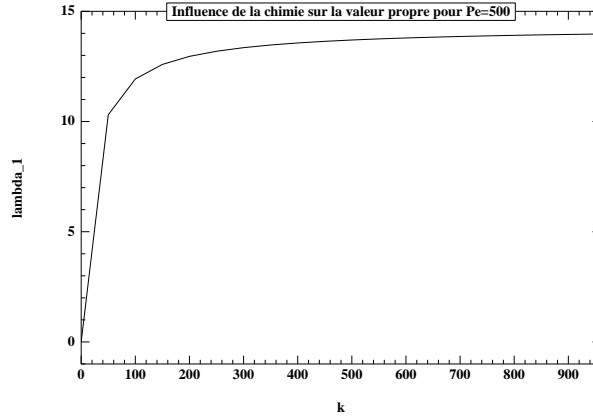


FIG. 10 – Evolution de  $\lambda_1$  en fonction de  $k$

de  $k$  sur le coefficient de dispersion latérale (voir la figure 11). On observe

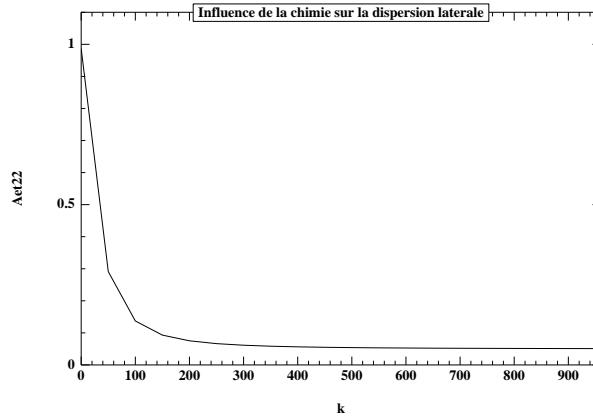


FIG. 11 – Evolution de  $A_{22}^*$  en fonction de  $k$

que ce coefficient diminue jusqu'à saturation avec le coefficient de chimie. On peut penser que lorsque la chimie augmente, les particules sorbées sur la surface du pore participent moins à la dispersion latérale.

Sur la figure 12 on regarde l'influence de  $k$  sur la dispersion longitudinale pour  $Pe = 500$ . On constate que la chimie diminue le coefficient de dispersion longitudinal, ce qui est cohérent avec le fait que pour  $Pe = 500$ , on se trouve dans la zone de comportement dispersif (pour les Peclet plus petits, on avait vu que la chimie augmentait ce coefficient).

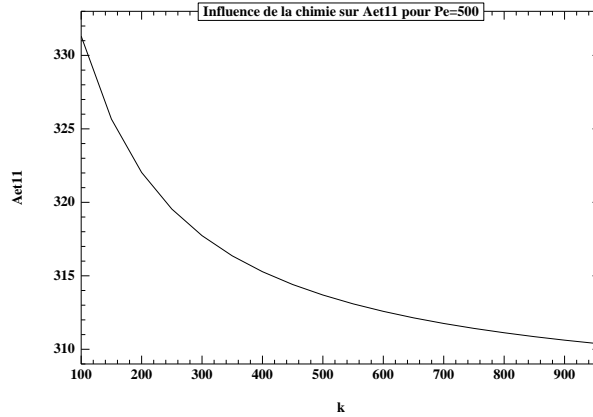


FIG. 12 – Evolution de  $A_{11}^*$  en fonction de  $k$

**Influence de la géométrie de la cellule** On veut mieux modéliser le fait que les feuillets d’argile offrent une plus grande surface spécifique de réaction que celle permise par notre géométrie. Pour cela, on va, en conservant la porosité (rapport de la surface de fluide dans la cellule sur celle de la cellule), observer le comportement des coefficients homogénéisés pour deux géométries différentes : une avec une phase solide circulaire comme précédemment, et une avec deux composantes solides rectangulaires (voir la figure 13).

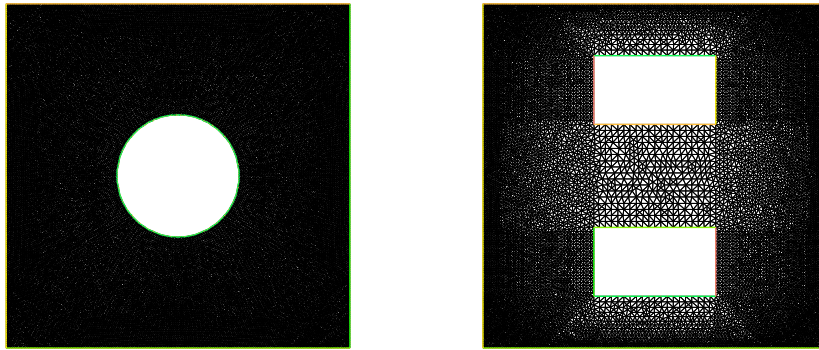


FIG. 13 – Deux géométries ayant même porosité.

On regarde maintenant l’influence du nombre de Péclet microscopique sur la vitesse du flux de concentration moyenne  $U_x^*$ , pour ces deux géométries,

et on trace sur la même figure 14 la valeur de la moyenne du champ de convection microscopique  $b(y)$ .

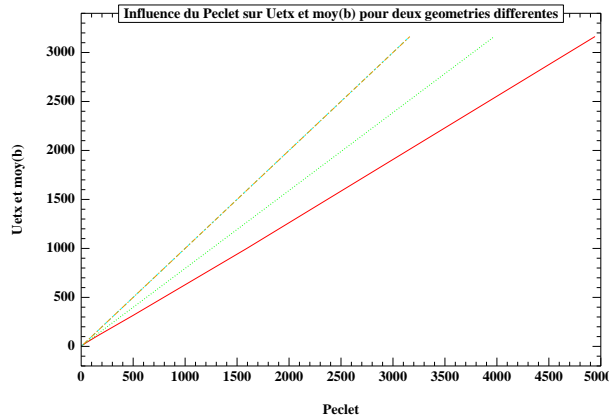


FIG. 14 – Evolution de  $U_x^*$  en fonction du nombre de Péclet microscopique pour les deux géométries de la figure 13.

On remarque que pour la géométrie avec une phase solide rectangulaire (courbe rouge), la vitesse moyenne  $U_x^*$  s'éloigne plus de la moyenne du champ de convection microscopique que par rapport au cas de la phase solide circulaire (courbe verte). Cela signifie que plus la surface spécifique de réaction est grande, plus l'on fait une erreur en approximant la vitesse effective du flux de concentration du soluté par la vitesse moyenne du champ de convection microscopique.

**Influence de la porosité** On fait maintenant varier la porosité pour un même type de géométrie (voir la figure 15). On fixe les valeurs suivantes :  $Pe = 500$  et  $k = 500$ . On observe la dispersion longitudinale en fonction de la porosité sur la figure 16. On rappelle ici que lorsque la taille de la phase solide augmente, cela diminue la porosité. On observe donc ici que la dispersion longitudinale augmente quand la porosité diminue. Cela peut s'expliquer par le fait que le champ de convection a alors plus d'hétérogénéité.

Puis on observe l'influence de la porosité sur la vitesse moyenne du flux de concentration à la figure 17. Ici on voit que le flux moyen de concentration augmente quand la porosité diminue. Lorsque la taille de la phase solide aug-

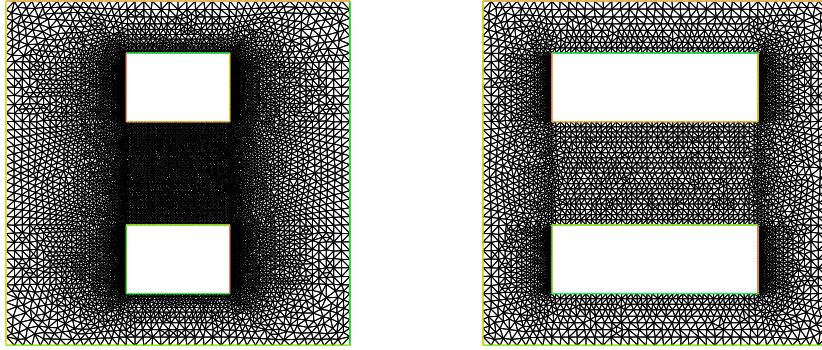


FIG. 15 – Deux porosités différentes pour le même type de géométrie.

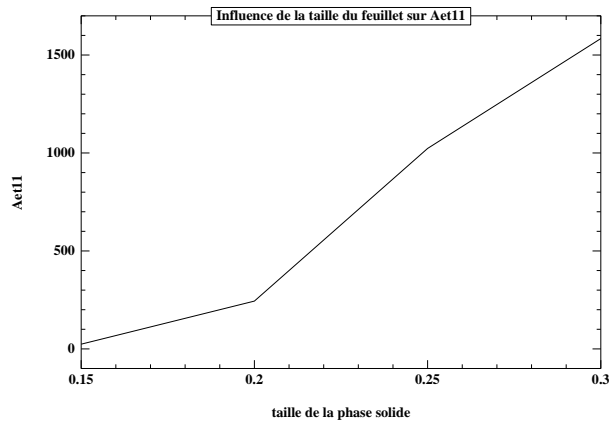


FIG. 16 – Variation de la dispersion longitudinale en fonction de la porosité.

mente, le flux microscopique est très grand entre les deux rectangles solides, et cet effet microscopique semble se répercuter sur la vitesse moyenne.

## 4 Conclusion

Ce travail a permis de mettre en oeuvre la technique d'homogénéisation pour obtenir des paramètres effectifs macroscopiques qui tiennent compte des couplages microscopiques. En particulier, il illustre le fait que l'on ne peut pas négliger la chimie pour étudier le comportement à grande échelle

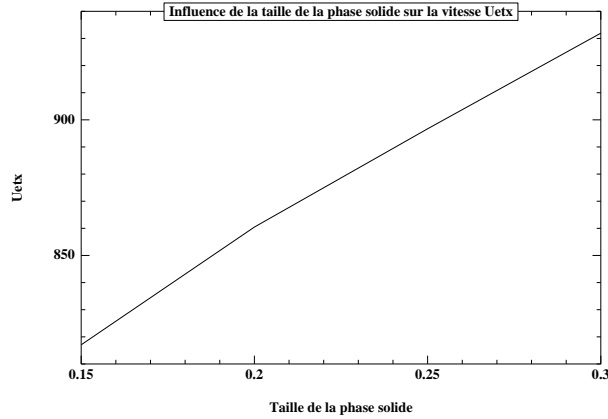


FIG. 17 – Variation de la vitesse effective en fonction de la porosité.

des concentrations en polluant, et que celle-ci ne se manifeste pas seulement par un retard du flux de concentration, mais intervient aussi dans le calcul de la valeur du coefficient de dispersion-diffusion homogénéisé.

Une comparaison avec les méthodes de moyennisation sur un volume élémentaire représentatif est certainement à faire (voir, par exemple, [5]).

On pourrait envisager comme perspective de complexifier le système en introduisant une modélisation plus complexe de la chimie du problème, et en trouvant une géométrie de cellule permettant de mieux rendre compte de la taille réelle de la surface réactive.

**Remerciements :** Ce travail a été effectué dans le cadre du GdR MoMaS CNRS-2439 soutenu par l'ANDRA, le BRGM, le CEA, l'EDF et l'IRSN, que l'on remercie pour leur soutien. Les auteurs remercient Andro Mikelic pour leur avoir suggéré ce problème. Anne-Lise Raphael remercie aussi le DM2S/SFME au CEA Saclay qui l'a accueilli pour son stage de Master M2, ainsi qu'Alain Cartalade et Sébastien Cadalen pour leur aide dans la compréhension de la modélisation du problème, et Gilles Bernard Michel pour ses conseils sur la partie numérique.

## Références

- [1] G. Allaire, Y. Capdeboscq, A. Piatnitski, V. Siess, M. Vanninathan, *Homogenization of periodic systems with large potentials*, Arch. Rat. Mech. Anal. 174, 179–220 (2004).
- [2] G. Allaire, C. Conca, M. Vanninathan *The Bloch transform and applications*, ESAIM :PROC., Vol.3, 1998, 65-84.
- [3] P.H. Anselone, *Collectively compact operator approximation theory and applications to integral equations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
- [4] H. Brezis, *Analyse fonctionnelle*, Masson, Paris, 1993.
- [5] S. Cadalen, M. Quintard, A. Cartalade, *Micro-pore model for cesium transport in clayed porous medium*, preprint.
- [6] Y. Capdeboscq, *Homogenization of a neutronic multigroup evolution model*, Asymptot. Anal. 24 (2000), no 2, 143-165.
- [7] Y. Capdeboscq, *Homogenization of a diffusion with drift*, C.R.Acad.Sci.Paris, t.327, Série I, p.807-812, 1998.
- [8] Y. Capdeboscq, *Homogenization of a neutronic critical diffusion problem with drift*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 132 (2002), no. 3, 567–594.
- [9] M. Chipot, S. Hastings, D. Kinderlehrer, *Transport in a molecular motor system*, M2AN Math. Model. Numer. Anal. 38 (2004), no. 6, 1011–1034.
- [10] C. Conca, J. Planchard, M. Vanninathan, *Fluids and periodic structures*, RMA 38, J. Wiley & Masson, Paris (1995).
- [11] J. Dolbeault, D. Kinderlehrer, M. Kowalczyk, *Remarks about the flashing ratchet*, Partial differential equations and inverse problems, 167–175, Contemp. Math., 362, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2004.
- [12] F. Hecht, O. Pironneau, A. Le Hyaric, K. Ohtsuka, Freefem++, Version 2.0-0, <http://www.freefem.org//ff++>, Laboratoire Jacques Louis Lions, Université Pierre et Marie Curie, Paris.
- [13] T.J.R Hughes, M. Mallet, *A new finite element formulation for computational fluid dynamics*, Computer Meth. in Appl. and Eng. 54, 341-355, 1986.

- [14] C. Jonhson *Numerical Solution of PDE by the finite element method*, Cambridge University press, 1987.
- [15] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer-Verlag, Berlin (1966).
- [16] Ch. Kittel, *Introduction to solid state physics*, John Wiley, New York (1996).
- [17] D. McLaughlin, G. Papanicolaou, O. Pironneau, *Convection of micro-structure and related problems*, SIAM J. Appl. Math. 45 (1985), no. 5, 780–797.
- [18] A. Majda, P. Kramer, *Simplified models for turbulent diffusion : theory, numerical modelling, and physical phenomena*, Phys. Rep. 314 (1999), no. 4-5, 237–574.
- [19] R. Mauri, *Dispersion, convection, and reaction in porous media*, Phys.Fluids A3(5), May 1991.
- [20] R. Mauri, J. Rubinstein, *Dispersion and convection in periodic porous media*, SIAM J.APPL.MATH.,Vol.46,No.6, December 1986.
- [21] A. Mikelic, V. Devigne, C.J. van Duijn, *Rigorous upscaling of the reactive flow through a pore, under dominant Peclet and Damkohler numbers*, preprint.
- [22] O. Pironneau *Méthodes des Elements Finis pour les fluides*, Masson, Coll. Recherche en Mathématiques Appliquées, 1988.
- [23] M. Reed, B. Simon, *Methods of modern mathematical physics*, Academic Press, New York (1978).
- [24] F. Rellich, *Perturbation Theory of Eigenvalues problems*, Gordon and Breach Science Publishers, New York-London-Paris (1969).
- [25] S. Whitaker, *The Method of Volume Averaging, Theory Applications of Transport in Pourous Media*, Kluwer Academic Publishers, Vol.13 (1999).