

Modèle multi-échelle du transport de fluide dans un milieu poreux chargé avec échanges cationiques : application aux tissus osseux

Joanna Kaiser, Thibault Lemaire, Salah Naili *, Vittorio Sansalone

Laboratoire de Mécanique Physique, Université Paris 12 – Val de Marne, 61, avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil, France

Reçu le 13 mai 2009 ; accepté après révision le 15 septembre 2009

Disponible sur Internet le 7 octobre 2009

Présenté par Jean-Baptiste Leblond

Résumé

La compréhension des mécanismes qui régissent le comportement de l'os cortical est un enjeu capital puisqu'associée à la compréhension des pathologies osseuses. Ainsi avons-nous déjà développé des modèles multi-échelles tenant compte des phénomènes multiphysiques à l'œuvre dans le comportement hydraulique *in vivo* des tissus ostéo-articulaires. Toutefois, aucun de ces modèles ne tient compte des possibles échanges ioniques entre la cellule et son environnement. Ces phénomènes agissant directement sur les propriétés physico-chimiques du milieu, et donc sur l'écoulement interstitiel, le but de cette étude est de proposer un moyen de tenir compte des échanges cellulaires et de transposer leurs conséquences au niveau du transport à l'échelle macroscopique. **Pour citer cet article : J. Kaiser et al., C. R. Mecanique 337 (2009).**

© 2009 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Multiscale modelling of fluid flow in charged porous media including cationic exchanges: application to bone tissues. To better understand the bone diseases, many models of porous cortical bone have been developed to simulate its *in vivo* behaviour. Thus we proposed multiscale models including multiphysical phenomena governing the hydraulic response of bone. However, all these models neglected the possible ionic exchanges at the cellular level. Since such chemical reactions directly change the physico-chemical properties of the tissue, the interstitial flow is also modified. The aim of this study is so to include these ionic exchanges in the bone fluid transport description by deriving their consequences at the macroscale. **To cite this article: J. Kaiser et al., C. R. Mecanique 337 (2009).**

© 2009 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Biomécanique ; Modélisation multi-échelle ; Milieux poreux chargés ; Echanges cationiques ; Nernst–Planck

Keywords: Biomechanics; Multiscale modelling; Charged porous media; Cationic exchanges; Nernst–Planck

* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : joanna.kaiser@univ-paris12.fr (J. Kaiser), lemaire@univ-paris12.fr (T. Lemaire), naili@univ-paris12.fr (S. Naili), vittorio.sansalone@univ-paris12.fr (V. Sansalone).

Abridged English version

Introduction

The multiphysical description of saturated porous media can be useful for chemical, geological or biological applications. Such a modelling procedure requires to make multiscale phenomena communicate. For instance, electrokinetics efficiency observed at the macroscale is due to microscopical electro-chemical properties such as the pore surface charge. Similarly, bone remodelling is the result of a communication between deformations at the osteonal scale (10^{-4} m) and microscopical cellular communication within the canalicular porosity (10^{-7} m). Indeed the canalicular pore network contains bone mechanosensitive osteocyte cells. These cells receive the nutrients, evacuate their waste products and communicate with one another thanks to the interstitial fluid movement (see Fig. 1). The aim of this paper is to improve previous descriptions of bone fluid movement [1–3] by taking into account cellular chemical exchanges and their macroscopical implication.

Consequences of chemical exchanges on the surface charge density

The surface of pore walls and cells is negatively charged and may exchange ions with the interstitial fluid. When exchanging a cation, the electrokinetic flux changes since the surface charge of the solid/fluid interface is modified.

Equations at the pore scale

Bone tissue is considered as a negatively charged porous medium saturated by an aqueous dielectric solution of monovalent ions. At the pore scale (microscopic scale), a periodic representative elementary volume may be singled out where the description of the relevant phenomena is provided by: (i) the Poisson–Boltzmann equation (4) which rules the electrical potential distribution; (ii) a Stokes equation (6) governing the fluid flow and the fluid mass conservation; (iii) the cationic transport equation (9) including surface chemical reactions and charge conservation equation (10).

Homogenization

Based on the homogenization procedure of [4], the problem is upscaled at the scale of osteons (macroscopic scale) to generate a Nernst–Planck law for the cationic transport (Eq. (30)) involving a surface exchanges term, Brownian diffusion and electromigration.

Conclusion

A new coupled multiscale model of the fluid transport in a porous medium including cationic exchanges has been carried out. In the field of osteo-articular biomechanics, this model would help to better understand the role of fluid-cell interactions in bone remodelling.

1. Introduction

La modélisation des phénomènes multiphysiques qui régissent le comportement des milieux poreux saturés et électriquement chargés intervient dans des domaines aussi variés que la chimie, les géosciences ou la biologie. Les échelles spatiales rencontrées dans une telle entreprise peuvent s'étendre sur plusieurs décades. Ainsi, pour comprendre à l'échelle du mètre le comportement d'une barrière argileuse servant à confiner les déchets radioactifs, il est indispensable de prendre en compte des phénomènes électrochimiques complexes sis à l'échelle submicronique, telle la répulsion électrostatique à l'origine du gonflement observé macroscopiquement [5]. En biomécanique, pour comprendre le phénomène du remodelage osseux, il est nécessaire de relier les *stimuli* générés à l'échelle de l'organe au niveau des cellules osseuses d'une part, puis de retranscrire la réponse cellulaire induite en terme de modifications structurelle et physiologique macroscopiques [6,7]. A titre d'exemple, le tissu osseux cortical est constitué d'ostéons

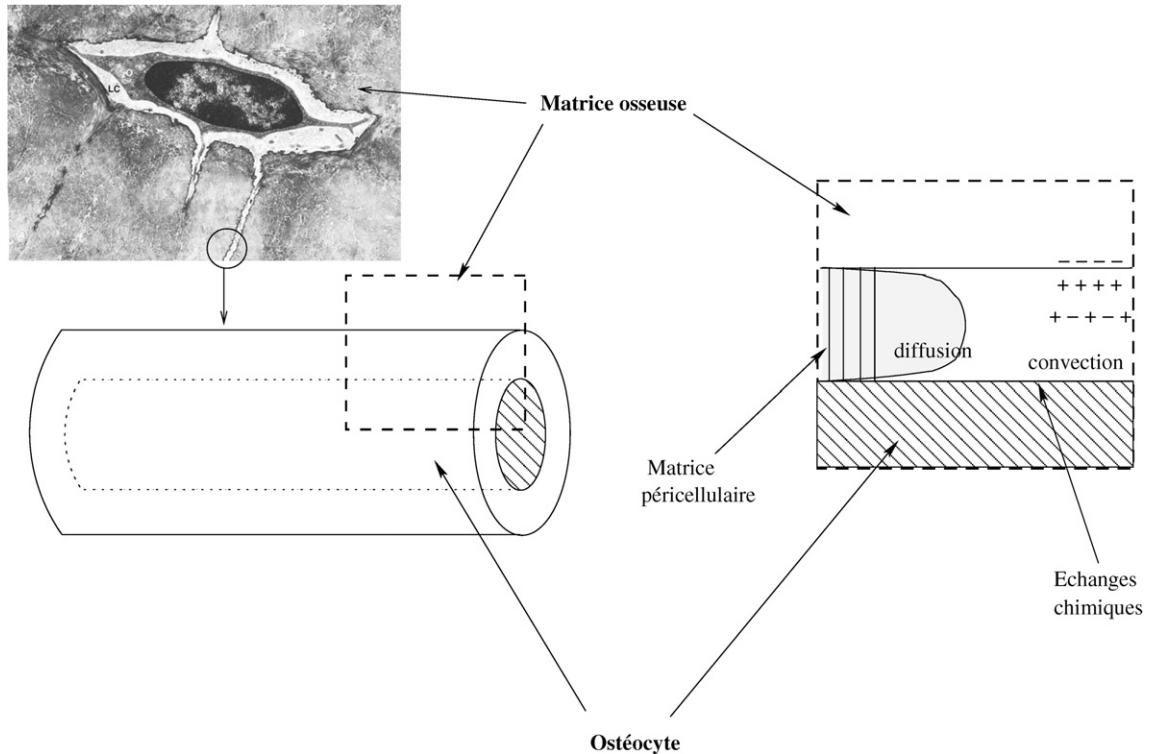


Fig. 1. Ostéocyte et canalicule ; en haut à gauche, micrographie électronique d'un ostéocyte (source : Visual Histology by Moran & Rowley, chap. 6, Bone) ; en bas à gauche, zoom sur un canalicule ; à droite, zoom de l'entrefer du canalicule dans le plan de coupe matérialisé par le rectangle en pointillé.

Fig. 1. Osteocyte and canalculus; top left, electronic micrography of an osteocyte (source: Visual Histology by Moran & Rowley, Chap. 6, Bone); bottom left, zoom on a canalculus; right, zoom of canalicular interspace (dashed box in the bottom left picture).

(cylindres de rayon $\sim 10^{-4}$ m) alignés longitudinalement. Un ostéon est lui-même formé par une matrice de collagène-apatite comprenant, outre les canaux sanguins, des lacunes occupées par des cellules mécanosensibles (ostéocytes). Les ostéocytes sont reliés entre eux par des excroissances dendritiques qui se déploient dans des micropores appelés canalicules (rayon $\sim 10^{-7}$ m), formant ainsi un espace annulaire pour l'écoulement dont les parois externe et interne sont constituées respectivement par la matrice solide et la dendrite cellulaire. *In vivo*, ces microcanaux sont aussi partiellement occupés par des fibres péricellulaires. C'est par ces micropores que la cellule se nourrit, évacue ses déchets et produit des signaux paracrines (voir Fig. 1).

Depuis quelques années déjà, nous cherchons à utiliser des modèles à échelles multiples afin de capter les phénomènes multiphysiques régissant *in vivo* les interactions entre le fluide interstitiel, la matrice solide et les cellules formant les tissus ostéo-articulaires [1–3]. Ces modèles prennent en compte les effets moteurs hydrauliques (écoulements induits par la déformation de la matrice solide), chimiques (osmose) et électriques (potentiels d'écoulements). La technique de changement d'échelle mise en œuvre dans ces travaux est l'homogénéisation périodique, qui s'appuie sur une représentation du milieu macroscopique comme la superposition de cellules élémentaires représentatives périodiques. Si jusqu'à présent nos modèles ont quelque peu occulté le rôle actif de la cellule, préférant se focaliser sur la sensibilité aux phénomènes électro-visqueux dont elle fait l'objet lors des activités quotidiennes, il nous apparaît désormais essentiel de prendre en compte son activité biochimique, c'est-à-dire de prendre en compte de possibles échanges chimiques avec le fluide qui l'entoure. De tels phénomènes agissant directement sur les propriétés physico-chimiques du milieu, l'écoulement interstitiel en sera modifié. Après avoir décrit les conséquences de ces échanges chimiques quant à la densité surfacique de charge électrique présente au niveau des parois du pore, nous présentons le modèle, construit à l'aide de l'homogénéisation périodique, visant à propager à l'échelle macroscopique de l'ostéon les conséquences des échanges chimiques microscopiques au niveau du pore. Ainsi, dans une première partie, nous nous focalisons sur les conséquences de ces échanges chimiques sur les propriétés du milieu. Puis nous

introduisons les différentes équations régissant le comportement du fluide à l'échelle du pore. Ensuite, le changement d'échelle par homogénéisation asymptotique [4] est établi afin d'obtenir un modèle à l'échelle macroscopique utile à la compréhension du comportement hydraulique de l'os.

2. Conséquences des échanges chimiques sur la densité de charge surfacique

Au niveau du réseau canaliculaire, la présence de charges négatives à l'interface solide/fluide du milieu poreux, qui est au cœur même des couplages électrocinétiques [1], va provoquer l'adsorption de cations compensateurs (couche de Stern) et la naissance d'une couche diffuse cationique [8]. Par souci de simplicité, nous travaillons avec des ions monovalents. Si nous considérons un site réactif chargé négativement de l'interface, il pourra capter ou non un cation suivant la réaction $X_{(s)}^- + N_{(aq)}^+ \rightleftharpoons XN_{(s)}$. Cette équation de bilan exprime l'adsorption d'un cation $N_{(aq)}^+$ par une charge élémentaire négative de surface $X_{(s)}^-$ afin d'en provoquer la neutralisation $XN_{(s)}$. La constante de réaction K^+ caractérise cette réaction. En outre, pour des milieux poreux chargés négativement (cas des os), les échanges cationiques sont plus fréquents que les échanges anioniques, et ces derniers sont négligés. La densité surfacique de charge totale σ va donc varier avec la concentration cationique n^+ suivant une loi analogue à celle proposée dans [9] :

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_{\max} \frac{K_+ n^+}{1 + K_+ n^+} \tag{1}$$

où σ_0 est la densité surfacique structurelle de charge de la phase solide et σ_{\max} la quantité maximale de charge surfacique échangeable.

3. Équations à l'échelle du pore

On considère le tissu osseux des ostéons (échelle macroscopique) comme un milieu poreux chargé négativement que l'on peut représenter périodiquement par une cellule (volume élémentaire représentatif, échelle microscopique). Il est saturé par un électrolyte monovalent et les effets d'hydratation et stériques sont négligeables vu l'échelle à laquelle nous travaillons. Les équations à l'échelle microscopique modélisant le transport du fluide dans le tissu osseux sont l'équation de Poisson–Boltzmann gouvernant la distribution du potentiel électrique, l'équation de conservation de la quantité de mouvement et les équations de Nernst–Planck régissant le transport des ions. Afin de séparer les variables « lentes », qui n'interviennent qu'au niveau macroscopique, des variables « rapides », qui varient à l'échelle microscopique, les équations sont présentées en termes de variables de *bulk* (ou variables virtuelles) indicées par b . Le *bulk* virtuel vérifie l'électroneutralité et est à l'équilibre thermodynamique avec la solution réelle, ce qui amène à l'expression des variables virtuelles à partir des variables réelles *via* le changement de variables donné dans [1] :

$$\phi = \psi_b + \varphi, \quad n^\pm = n_b \exp(\mp \bar{\varphi}) \tag{2}$$

$$p_b = p - 2RT n_b (\cosh \bar{\varphi} - 1), \quad K_{b+} = K_+^{(i)} = K_+ \exp(-\bar{\varphi}_{int}) \tag{3}$$

où ψ_b est un potentiel d'écoulement, ϕ est le potentiel électrique du liquide interstitiel et φ celui de la solution fictive. De plus, n_b représente la concentration du *bulk* virtuel, et p_b , qui est l'écart entre les pressions hydraulique p et de Donnan, est la pression du *bulk* virtuel. Par ailleurs, la constante d'équilibre K_{b+} de la réaction d'échange exprimée en terme de variables fictives coïncide avec la constante d'équilibre intrinsèque de cette réaction $K_+^{(i)}$, et enfin, φ_{int} étant le potentiel électrique de l'interface fluide–solide. Notons enfin que la réduction du potentiel électrique $\bar{\varphi} = F\varphi/RT$ est obtenue à l'aide de la constante de Faraday F , de la température absolue T et de la constante des gaz parfaits R . Cette réduction des potentiels électriques sera adoptée systématiquement par la suite.

3.1. Distribution du potentiel électrique

Les effets magnétiques étant négligés, le potentiel électrique du fluide est, d'après [8], régi par l'équation de Poisson–Boltzmann :

$$\nabla \cdot \nabla (\bar{\psi}_b + \bar{\varphi}) = \frac{1}{L_D^2} \sinh \bar{\varphi} \tag{4}$$

où la longueur de Debye $L_D = \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 RT/(2F^2 n_b)}$ caractérise l'épaisseur de la double couche électrique, ε_0 est la permittivité du vide et ε est la constante diélectrique du milieu. En outre, $\nabla \cdot$ et ∇ désignent respectivement les opérateurs divergence et gradient. L'identification du flux électrique à la paroi chargée donne la condition à la limite de Neumann :

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0} \quad (5)$$

où \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal sortant au domaine occupé par le fluide.

3.2. Écoulement du liquide

La présence de la matrice péricellulaire dans l'espace canaliculaire nous conduit à utiliser une équation de Stokes avec un terme de Darcy afin de modéliser l'écoulement du liquide interstitiel [2,3] :

$$\mu_f \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} - \frac{\mu_f}{K_f} \mathbf{v} - \nabla p_b - 2RT(\cosh \bar{\varphi} - 1) \nabla n_b + 2RT n_b \sinh \bar{\varphi} \nabla \bar{\psi}_b = \mathbf{0} \quad (6)$$

où μ_f est la viscosité dynamique du fluide, \mathbf{v} sa vitesse et K_f un paramètre de perméabilité intrinsèque quantifiant les effets des fibres péricellulaires. Dans cette équation, les termes dus à la gravité et à l'inertie ont été négligés. À l'équation de l'écoulement du liquide (6), il convient d'ajouter l'équation de conservation de la masse qui est celle d'un fluide incompressible $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Ces équations sont complétées par des conditions de périodicité et d'interfaces. Aux interfaces, on a des conditions d'adhérence $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.

3.3. Transport des ions

La convection, la diffusion et l'électromigration conduisent à un transport des ions régi par les équations de Nernst–Planck :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_b \exp(\mp \bar{\varphi})) + \nabla \cdot (n_b \exp(\mp \bar{\varphi}) \mathbf{v}) = \nabla \cdot (D_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}) (\nabla n_b \pm n_b \nabla \bar{\psi}_b)) \quad (7)$$

où t est le temps, D_+ et D_- sont respectivement les coefficients de diffusion des cations et des anions. Contrairement à nos études antérieures [1–3], les interfaces du pore ne sont plus considérées comme imperméables, du fait des échanges chimiques entre les différentes phases du milieu. Les conditions aux limites sont donc du type :

$$-D_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}) (\nabla n_b \pm n_b \nabla \bar{\psi}_b) \cdot \mathbf{n} = \alpha^{\pm} \frac{\partial n_b}{\partial t} \quad (8)$$

où α^+ est un coefficient caractérisant les échanges cationiques et α^- est nul par hypothèse. Une manipulation des équations de Nernst–Planck et de l'équation de la conservation de la masse nous permet de représenter le transport ionique à l'aide d'une équation du transport cationique et d'une équation de conservation de la charge :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_b \exp(-\bar{\varphi})) + \nabla \cdot (n_b \exp(-\bar{\varphi}) \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_+ = 0, \quad \text{avec } \mathbf{J}_+ = -D_+ \exp(-\bar{\varphi}) (\nabla n_b + n_b \nabla \bar{\psi}_b) \quad (9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{I}_f = 0, \quad \text{avec } \mathbf{I}_f = F (n_b \sinh(\bar{\varphi}) \mathbf{v} + A \nabla n_b + B \nabla \bar{\psi}_b) \quad (10)$$

où \mathbf{J}_+ et \mathbf{I}_f représentent respectivement le flux cationique et la densité de courant électrique. Les quantités A et B sont données par $A = \frac{1}{2}(D_+ \exp(-\bar{\varphi}) - D_- \exp(+\bar{\varphi}))$ et $B = \frac{1}{2} n_b (D_+ \exp(-\bar{\varphi}) + D_- \exp(+\bar{\varphi}))$. Les conditions aux limites quant à elles deviennent :

$$\mathbf{J}_+ \cdot \mathbf{n} = \alpha^+ \frac{\partial n_b}{\partial t} \quad \text{et} \quad \mathbf{I}_f \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (11)$$

4. Homogénéisation

Le but de cette section est de passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Pour ce faire, nous utilisons l'homogénéisation périodique [4]. Le milieu à l'échelle macroscopique (de longueur caractéristique L) est vu comme la répétition périodique d'un motif représentatif microscopique (de longueur caractéristique ℓ). Notons que le rapport $\eta = \frac{\ell}{L}$ doit être petit devant 1 afin d'assurer la condition d'indépendance des échelles.

4.1. Écritures adimensionnelles

La première étape de cette procédure d’homogénéisation est d’écrire les équations à l’échelle microscopique sous forme adimensionnelle en réduisant les quantités par des valeurs de référence indicées « r ». Les quantités adimensionnelles seront notées « prime ». Ainsi, en choisissant $L_r \equiv L$ comme longueur de référence, l’opérateur de dérivation spatiale devient $\nabla = \frac{1}{L} \nabla'$. En notant ∇_x et ∇_X les opérateurs différentiels associés respectivement aux coordonnées microscopique x et macroscopique X , l’opérateur de dérivation spatiale sans dimension est changé en $\nabla' = \eta^{-1} \nabla'_x + \nabla'_X$. Par ailleurs, nous faisons apparaître des nombres caractérisant les phénomènes en jeu. Il est alors nécessaire de donner leur ordre de grandeur. Ces lois d’échelles sont inhérentes à la physique et la géométrie du problème. Ici, nous les spécifierons au cas de l’os cortical ; pour d’autres milieux, ces lois pourront être différentes, modifiant la propagation des effets microscopiques à l’échelle macroscopique.

Équations de Poisson–Boltzmann et de Stokes. Le traitement de ces équations étant identique à celui proposé par [3], nous ne le présentons pas ici.

Équations de Nernst–Planck. Si nous prenons pour temps de référence $t_r = L^2/D_{\pm}$, les Éqs. (9) et (10) deviennent respectivement :

$$\frac{\partial}{\partial t'} (n'_b \exp(-\bar{\varphi}')) + P_e \nabla' \cdot (n'_b \exp(-\bar{\varphi}') \mathbf{v}') + J_d \nabla' \cdot \mathbf{J}'_+ = 0, \quad J_d \nabla' \cdot \mathbf{I}'_f = 0 \tag{12}$$

Ici apparaît le nombre de Péclet $P_e = v_r L/D_{\pm}$ (v_r étant une vitesse de référence) qui compare diffusion et convection. En effet, si $P_e \equiv O(\eta)$, respectivement $P_e \equiv O(\eta^{-1})$, la diffusion, respectivement la convection, est le mécanisme prédominant. Si ces deux phénomènes sont comparables, on a $P_e \equiv O(\eta^0)$. Par ailleurs, le nombre sans dimension $J_d = I_r L/FD_{\pm} n_r$ compare les effets électrique et diffusif, I_r étant une intensité de courant de référence. Puisque la diffusion des espèces chargées est à l’origine du courant électrique, on a $J_d \equiv O(\eta^0)$. Les conditions aux limites (11) deviennent quant à elles :

$$J_d \mathbf{J}'_+ \cdot \mathbf{n} = D_a \alpha'^+, \quad J_d \mathbf{I}'_f \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{13}$$

où $D_a = \frac{\alpha_r L}{t_r D_{\pm}}$ est un nombre de Damköhler qui quantifie les conditions opérationnelles d’une réaction (α_r étant un coefficient d’échange de référence). En utilisant le temps de référence t_r , il vient $D_a = \frac{\alpha_r}{L}$. Par ailleurs, d’après l’étude numérique de [10], le nombre de Damköhler est de l’ordre de $D_a = O(\eta)$ pour des valeurs de concentration chimique usuelles.

4.2. Développement asymptotique

La seconde partie de cette procédure d’homogénéisation va permettre de séparer les variables lentes X des variables rapides x . Ainsi, les différentes quantités q sont écrites sous la forme de développements asymptotiques : $q(x, X) = \sum_i \eta^i q_{[i]}(x, X)$. Pour cela, pour de petits pores tels les canalicules de l’os, nous avons $P_e \equiv O(\eta)$, la diffusion étant plus importante que la convection. Enfin, pour linéariser les termes exponentiels apparaissant dans les équations du transport ionique, nous utilisons des développements de Taylor. A nouveau les problèmes de Poisson–Boltzmann et de Stokes sont traités comme dans [3] où nous avons montré que les trois variables du bulk p_b, n_b et ψ_b ne variaient pas à l’échelle du pore. Le développement asymptotique des équations modélisant les réactions chimiques nous permet par ailleurs de collecter les termes selon les puissances du paramètre η :

$$\nabla'_x \cdot \mathbf{J}'_{+[0]} = 0 \tag{14}$$

$$\nabla'_x \cdot \mathbf{I}'_{f[0]} = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t'} (n'_{b[0]} \exp(-\bar{\varphi}'_{[0]})) + \nabla'_x \cdot (n'_{b[0]} \exp(-\bar{\varphi}'_{[0]}) \mathbf{v}'_{[0]}) + \nabla'_X \cdot \mathbf{J}'_{+[0]} + \nabla'_x \cdot \mathbf{J}'_{+[1]} = 0 \tag{16}$$

$$\nabla'_X \cdot \mathbf{I}'_{f[0]} + \nabla'_x \cdot \mathbf{I}'_{f[1]} = 0 \tag{17}$$

$$\mathbf{J}'_{+[0]} = -D'_+ \exp(-\bar{\varphi}'_{[0]}) [(\nabla'_x n'_{b[1]} + \nabla'_X n'_{b[0]}) + n'_{b[0]} (\nabla'_x \bar{\psi}'_{b[1]} + \nabla'_X \bar{\psi}'_{b[0]})] \tag{18}$$

$$\mathbf{I}'_{f[0]} = A'_{[0]}(\nabla'_x n'_{b[1]} + \nabla'_x n'_{b[0]}) + B'_{[0]}(\nabla'_x \bar{\psi}'_{b[1]} + \nabla'_x \bar{\psi}'_{b[0]}) \quad (19)$$

$$\mathbf{J}'_{+[0]} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (20)$$

$$\mathbf{I}'_{f[0]} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (21)$$

$$\mathbf{J}'_{+[1]} \cdot \mathbf{n} = \alpha'_{[0]} \frac{\partial n'_{b[0]}}{\partial t'} \quad (22)$$

$$\mathbf{I}'_{f[1]} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (23)$$

4.3. Problèmes de fermeture

Pour expliciter les termes fluctuants à la manière de [11], nous utilisons le changement de variable : $n'_{f^{\pm}} = n'_b \exp(\pm \bar{\psi}'_b)$. Après quelques calculs algébriques, nous avons :

$$n'_{f[0]^{\pm}} = n'_{b[0]} \exp(\pm \bar{\psi}'_{b[0]}) \quad (24)$$

$$n'_{f[1]^{\pm}} = \exp(\pm \bar{\psi}'_{b[0]})(n'_{b[1]} \pm n'_{b[0]} \bar{\psi}'_{b[1]}) \quad (25)$$

Un travail sur les équations (14) et (18) d'une part, (15) et (19) d'autre part, et sur les conditions aux interfaces (20) et (21) amène à :

$$\nabla'_x \cdot [D'_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}'_{[0]}) (\nabla'_x n'_{f[0]^{\pm}} + \nabla'_x n'_{f[1]^{\pm}})] = 0 \quad (26)$$

$$-D'_{\pm} [\exp(\mp \bar{\varphi}'_{[0]}) (\nabla'_x n'_{f[0]^{\pm}} + \nabla'_x n'_{f[1]^{\pm}})] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (27)$$

La propriété de linéarité de ce système nous permet d'avoir les termes fluctuants $n'_{f[1]^{\pm}}$ sous la forme $n'_{f[1]^{\pm}} = \theta^{\pm}(x, X, t) \cdot \nabla'_x n'_{f[0]^{\pm}} + N'_{f^{\pm}}(X, t)$, où $N'_{f^{\pm}}(X, t)$ sont des fonctions scalaires indépendantes de la coordonnée microscopique et $\theta^{\pm}(x, X, t)$ sont des fonctions vectorielles périodiques, de période égale à la taille de la cellule représentative, satisfaisant au problème sur le volume élémentaire représentatif :

$$\nabla'_x \cdot [D'_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}'_{[0]}) (\nabla'_x \theta^{\pm}(x, X, t) + \mathbf{I})] = \mathbf{0} \quad (28)$$

$$D'_{\pm} \exp(\mp \bar{\varphi}'_{[0]}) (\nabla'_x \theta^{\pm}(x, X, t) + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (29)$$

où \mathbf{I} est le tenseur identité.

4.4. Équation à l'échelle macroscopique pour le transport des cations

Nous allons à présent dégager l'équation à l'échelle macroscopique du transport cationique. Pour ce faire, nous introduisons différents opérateurs de prise de moyenne : $\langle \star \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y \star dV$ est la moyenne de \star sur la cellule représentative Y ; $\langle \star \rangle_f = \frac{1}{|Y_f|} \int_{Y_f} \star dV$ est la moyenne de \star sur le sous-domaine fluide Y_f ; $\langle \star \rangle_{int} = \frac{1}{|Y|} \int_{\partial Y_{int}} \star dS$ est la moyenne de \star à l'interface fluide–solide ∂Y_{int} . Finalement, après prise de moyenne de l'équation (16) et utilisation du théorème de la divergence, il vient, en se souvenant des conditions d'adhérence aux parois, des définitions des concentrations fictives :

$$\frac{\partial}{\partial t'} [n'_{b[0]} \epsilon \langle \exp(-\bar{\varphi}'_{[0]}) \rangle_f] + \langle \alpha'_{[0]} \rangle_{int} \frac{\partial n'_{b[0]}}{\partial t} - \nabla'_x \cdot [\mathbf{D}'_{+*} (\nabla'_x n'_{b[0]} + n'_{b[0]} \nabla'_x \bar{\psi}'_{b[0]})] = 0 \quad (30)$$

où ϵ est la porosité. Dans cette équation à l'échelle macroscopique apparaissent : i/ le terme temporel composé par une partie classique d'accumulation pondérée par le potentiel de double-couche moyenné d'une part, et par un terme lié aux échanges surfaciques cationiques d'autre part ; ii/ un terme de diffusion brownienne en réponse au gradient macroscopique de concentration ; iii/ un terme d'électromigration en réponse au gradient macroscopique du potentiel d'écoulement. Ce dernier terme est caractérisé par un tenseur (du second ordre) effectif de diffusion des cations $\mathbf{D}'_{+*} = \epsilon D'_{+} \langle \exp(-\bar{\varphi}'_{[0]}) (\nabla'_x \theta^{+} + \mathbf{I}) \rangle_f$.

5. Récapitulation du modèle à l'échelle macroscopique

Le modèle à l'échelle macroscopique pour un transport de fluide dans un milieu poreux chargé avec réactions chimiques nous est donné par la réunion de toutes les équations à l'échelle macroscopique obtenues :

Distribution du potentiel électrique. L'équation de Poisson–Boltzmann (4) disparaît à la macroéchelle et permet de calculer le potentiel de double-couche $\bar{\varphi}'_{[0]}$ purement microscopique [1].

Écoulement du liquide interstitiel. Détaillée dans [3], cette loi exprime la vitesse de Darcy comme la réponse à des gradients hydraulique, chimique et électro-osmotique :

$$\langle \mathbf{v}'_{[0]} \rangle = \langle \mathbf{v}'_{P[0]} \rangle + \langle \mathbf{v}'_{C[0]} \rangle + \langle \mathbf{v}'_{E[0]} \rangle = -\mathbf{K}'_P \nabla'_X p'_{b[0]} - \mathbf{K}'_C \nabla'_X n'_{b[0]} - \mathbf{K}'_E \nabla'_X \bar{\psi}'_{b[0]} \quad (31)$$

où les tenseurs (du second ordre) de perméabilités \mathbf{K}'_i pour $i = P, C,$ et E sont déterminés au cours du processus d'homogénéisation.

Transport des ions. Le transport macroscopique des cations est régi par l'équation (30). Enfin, l'équation moyennée de la loi de conservation de la charge reste analogue à celle obtenue dans [12].

6. Conclusion

Cette étude vient enrichir nos précédents travaux sur la modélisation des écoulements couplés pour les tissus ostéo-articulaires. La nouveauté consiste en la prise en compte des échanges cationiques dus à l'activité cellulaire au niveau des interfaces fluide/solide à l'échelle microscopique du milieu poreux. Nous avons ainsi explicité le coefficient de diffusion des cations et montré comment sont transposés les phénomènes d'échange à l'échelle macroscopique, ouvrant ainsi une nouvelle voie d'exploration du rôle des interactions cellule–fluide dans le remodelage osseux.

Références

- [1] T. Lemaire, S. Naili, A. Rémond, Multi-scale analysis of the coupled effects governing the movement of interstitial fluid in cortical bone, *Biomechan. Model. Mechanobiol.* 5 (2006) 39–52.
- [2] T. Lemaire, S. Naili, A. Rémond, Study of the influence of fibrous pericellular matrix in the cortical interstitial fluid movement, *J. Biomech. Eng.* 130 (2008) 11001–11011.
- [3] T. Lemaire, V. Sansalone, S. Naili, Multiphysical modelling of fluid transport through osteo-articular media, *Annals of the Brazilian Academy of Sciences* (2009), in press.
- [4] J.L. Auriault, Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible? *Int. J. Eng. Sci.* 29 (1991) 785–795.
- [5] D.A. Laird, Influence of layer charge on swelling of smectites, *Applied Clay Science* 34 (2006) 74–87.
- [6] M.L. Knothe Tate, “Whither flows the fluid in bone” ? An osteocyte’s perspective, *J. Biomech.* 36 (10) (2003) 1409–1424.
- [7] T. Lemaire, S. Naili, Stimuli physiques du remodelage osseux, in: *Reconstruction osseuse et cutanée : Biomécanique et Techniques de l'Ingénieur*, Sauramps Medical, 2008, pp. 57–71.
- [8] B.V. Derjaguin, N. Churaev, V. Muller, *Surface Forces*, Plenum Press, 1987.
- [9] T. Lemaire, C. Moyne, D. Stemmelen, Modelling of electro-osmosis in clayey materials including ph effects, *Phys. Chem. Earth* 32 (2007) 441–452.
- [10] S.A. Lima, Modelagem Multiescala do Acoplamento Eletro-Químico em um Meio Poroso Argiloso com Dependência do pH, PhD thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petropolis, Brasil, 2007.
- [11] C. Moyne, M.A. Murad, Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from a micro/macro-homogenization procedure, *Int. J. Sol. Struct.* 39 (25) (2002) 6159–6190.
- [12] T. Lemaire, C. Moyne, D. Stemmelen, M.A. Murad, Modèles à deux et trois échelles pour l'étude des phénomènes électro-chimio-mécaniques dans les milieux poreux gonflants, in: *Microstructure et propriétés des matériaux*, presses de l'ENPC, 2005, pp. 195–202.