

LES MILIEUX POREUX OU COMMENT MODÉLISER LES SYSTÈMES MULTI-ÉCHELLES

Par M. Michel Quintard¹

Introduction

Les milieux poreux sont caractérisés par la présence d'un squelette solide (éventuellement déformable) délimitant un espace, appelé espace poral, qui peut être parcouru par une ou plusieurs phases, de compositions chimiques variables. Le tas de sable de nos jeux enfantins illustre à merveille ce que peut signifier la dénomination milieux poreux. On ne réalise généralement pas, cependant, combien les milieux poreux sont présents massivement dans l'univers qui nous entoure, et l'importance qu'ils prennent dans les grands enjeux qui agitent nos sociétés contemporaines dans le domaine de la santé, de l'environnement, ou de l'énergie, par exemple.

Dans la section suivante, de nombreux exemples seront présentés de manière à illustrer l'omniprésence des milieux poreux dans notre univers. Ils seront également mis en perspective avec les grands enjeux sociétaux évoqués plus haut.

Compte-tenu de l'importance de ces enjeux, de nombreux efforts sont entrepris pour développer des modèles mathématiques et numériques permettant de décrire tous les mécanismes physiques se produisant au sein de ces milieux poreux : écoulement d'un fluide, transport d'un polluant, transfert de chaleur, pour ne prendre que quelques exemples. Les prédictions issues de ces modèles permettent, par exemple, d'anticiper l'arrivée d'une pollution dans un puits de pompage, d'optimiser un matériau isolant, de mieux comprendre la croissance d'une tumeur osseuse, *etc.* Le scientifique voulant développer des modèles mathématiques appropriés se heurte immédiatement à une difficulté majeure liée au caractère multi-échelle de l'objet milieu poreux.

On peut comprendre intuitivement ce concept de « multi-échelle » en reprenant l'exemple naïf du tas de sable. L'objet qui intéresse l'enfant est le seau qui va être rempli pour faire son pâté de sable. Il a une dimension environ décimétrique. Le grain de sable constitutif du milieu a , par contre, une dimension caractéristique bien plus petite, en général approximativement millimétrique. Il y a donc environ quelques millions de grains dans le volume du seau ! Si on connaît la physique à l'échelle du grain, de nombreuses questions se posent alors : peut-on résoudre le modèle physique à cette échelle (appelée échelle microscopique), pour répondre aux enjeux cités plus haut ? Si la réponse est positive, le fait que l'on s'intéresse à un milieu poreux ne distingue en

1 Communication présentée à l'Académie des Sciences, Inscriptions et Belles-Lettres de Toulouse à la séance du 23 Juin 2022.

rien notre problème de la physique initialement admise à cette échelle microscopique. Malheureusement, à cause de l'énorme écart entre l'échelle microscopique et l'échelle du seau (appelée échelle macroscopique), ici un facteur mille, il n'est en général pas possible de modéliser directement ce qui se passe dans le seau à partir de l'échelle microscopique. Par exemple, pour décrire à peu près précisément un champ de contrainte dans un grain, il faudrait décrire numériquement le grain avec environ plus d'un millier de mailles. Ceci implique qu'il faudrait de $10^3 \times 10^3$ à $10^6 \times 10^6$ mailles pour décrire le seau ! Ceci est, pour l'instant, et sans doute encore pour longtemps, inaccessible (on est déjà plusieurs ordres de grandeur plus « lourd » qu'un modèle météorologique !). D'autres alternatives de modélisation doivent être trouvées. La dernière section de cette note aborde donc, de manière qualitative, les diverses alternatives proposées.

Ubiquité des milieux poreux

La connaissance intuitive des milieux poreux introduite ci-dessus s'est appuyée sur l'exemple du sable. De nombreux autres *milieux naturels géologiques* peuvent être classés dans les milieux poreux. On a, par exemple, également les graviers, les sols, pour rester sur des milieux « granulaires ». Ce qui différencie ces milieux est, au premier ordre, la taille caractéristique des grains qui les composent : micrométrique à millimétrique pour beaucoup de sols limoneux, millimétrique pour les sables, millimétrique à centimétrique pour les graviers. On verra dans la partie consacrée à la modélisation que cette taille de l'échelle microscopique joue un rôle crucial sur les modèles utilisables. Pour rester dans les formations géologiques, de nombreux milieux poreux sont issus de la consolidation des milieux granulaires par diagenèse minérale. C'est le cas, par exemple, des grès issus de milieux du type sable. Les processus de consolidation conduisent en général à une diminution de la taille des pores. Ainsi, l'on peut observer des grès avec des pores de dimension micrométrique. Si certaines roches ne sont pas initialement poreuses, ce qui est souvent le cas lorsqu'on observe certains calcaires à une échelle millimétrique, la formation elle-même peut être affectée de fractures à une échelle plus grande (1 dm, 1 m, ou plus) permettant l'écoulement de fluides. A cette échelle-là, la formation se classe donc dans les milieux poreux ! C'est le cas des systèmes karstiques, qui jouent, dans de nombreux pays dont la France, un rôle très important par rapport à la gestion des ressources en eau. Il est intéressant de lister, sans être exhaustif, les nombreux problèmes d'écoulement dans les milieux poreux géologiques qui concernent des applications ô combien importantes pour nos sociétés :

- Génie pétrolier : les réservoirs de pétrole sont tous à classer dans le domaine des milieux poreux. Ils sont très divers, cependant : sables bitumineux, grès, schistes...
- Stockages géologiques : la séquestration de CO₂, le stockage de gaz ou d'hydrogène, le stockage de déchets (comme le projet Cigéo pour les déchets nucléaires), sont autant d'exemples impliquant des milieux poreux.
- Aquifères, sols : ressources en eau, transport de polluants, ou de nutriments (par exemple pour l'agriculture) sont autant de domaines où les milieux poreux sont omniprésents.

D'autres *milieux naturels* impliquent également des milieux poreux. On peut citer les tissus végétaux, le bois. Là encore, de nombreux problèmes qui doivent être abordés par la physique des milieux poreux, concernent d'importantes problématiques contemporaines : agriculture, sylviculture. Bien que l'on puisse aussi développer

le concept dans d'autres domaines, on va s'appuyer sur l'exemple des problèmes de modélisation à l'échelle d'une forêt pour montrer que les systèmes multi-échelles peuvent ne pas impliquer seulement deux échelles distinctes (microscopique et macroscopique) comme cela a été le cas dans l'introduction. Considérons donc une forêt. Si on regarde un morceau de bois, ou une feuille, à l'échelle micrométrique, on se convaincra de la nature poreuse des milieux considérés. Mais, bien entendu, l'organisation des troncs dans la forêt et l'espace entre ces troncs offrent, à l'évidence, une image qui correspond bien à la définition du milieu poreux donnée dans l'introduction. Dans cet exemple, les échelles de description sont multiples, et parfois imbriquées : du micromètre à l'échelle des tissus végétaux, au millimètre et centimètre dans le feuillage, jusqu'à des dimensions métriques lorsqu'il s'agit de décrire la répartition des troncs. On pourrait développer la même idée pour la canopée, un champ de blé, une vigne...

Les milieux poreux sont aussi omniprésents dans l'*industrie*. On ne citera que quelques exemples :

- Les matériaux : matériaux de construction comme le béton, les granulats, etc., matériaux composites, matériaux isolants (laine de verre, aérogels...), tissus.
- Les matériaux remplissant les colonnes de réacteur de génie chimique (billes catalytiques, etc.).
- Les constituants des réacteurs nucléaires : soit les assemblages de crayons sains, soit les milieux créés lors d'accident graves (lits de débris).
- Les piles à combustibles, les accumulateurs, font intervenir à de nombreux niveaux des constituants poreux (électrodes, couche séparatrice...).

Encore une fois, on retrouve à travers ces exemples d'énormes enjeux environnementaux, énergétiques, industriels ou économiques.

Dans le domaine de la *biologie* (on a déjà évoqué plus haut l'exemple d'une forêt), les milieux poreux sont également omniprésents. La plupart des modèles décrivant les écoulements ou le transport d'espèces chimiques dans les tissus biologiques sont des modèles directement issus de l'approche milieux poreux : biofilms bactériens, os, système vasculaire cérébral... Là encore, les enjeux de modélisation touchent à des domaines très sensibles, comme la santé !

Cette présentation ne se voulait pas exhaustive, mais elle aura certainement convaincu le lecteur que la physique des milieux poreux n'est pas anecdotique et joue un rôle majeur dans la plupart des enjeux qui affectent nos sociétés.

Pour terminer sur ce point, il est parfois contre-intuitif que la modélisation de tel ou tel système corresponde en fait à une problématique de type milieu poreux. Par exemple, l'écoulement atmosphérique au travers d'une grande cité et de ses « canyons urbains » est en pratique un problème de modélisation qui peut être abordé avec les outils de la « science » des milieux poreux. La vision d'une foule se déplaçant dans un contexte urbain est aussi un autre exemple. Doit-on modéliser le déplacement de la foule en décrivant le déplacement de tous les individus (les grains) ? Peut-on n'avoir qu'une vision macroscopique (*i.e.* le déplacement moyen des individus) ? Une vision purement macroscopique semble ignorer a priori l'effet potentiel du libre-arbitre de chaque individu. Est-ce légitime, ou ne faut-il pas envisager une modélisation hybride, pour reprendre un terme qui sera proposé dans la section suivante, laissant une part à l'interaction foule/individu ? Ces questions sont abordées dans la section suivante. Les outils de cette partie de la science des milieux poreux qui est consacrée à la modélisation des systèmes multi-échelles, fait appel à des méthodes mathématiques qui ne peuvent pas être abordées

dans ce texte. On se bornera à illustrer, sans les supports mathématiques adéquats, la « philosophie » employée pour mettre en place ces modèles.

Comment modéliser des systèmes multi-échelles ?

La figure 1 représente de manière schématique un problème typique de modélisation d'un écoulement dans un milieu poreux. Le volume caractérisé par la dimension L serait le tas de sable imaginé dans l'introduction, ou n'importe quel objet macroscopique d'intérêt décrit dans la section précédente (colonne de génie chimique, réservoir pétrolier, etc.). Si on zoome à l'intérieur de ce volume, on peut discriminer la structure microscopique du milieu caractérisée par des longueurs caractéristiques notées ℓ . À cette échelle, le déplacement d'un fluide ferait appel à une description du type milieu continu. La vitesse ou la pression sont des grandeurs décrivant le comportement d'une « particule » fluide, qui en réalité correspond à un petit volume contenant une très grande quantité de molécules. On est déjà en présence d'un problème de modélisation multi-échelle qui est traité de manière classique en physique comme suit. La vitesse des molécules, v_p , obéit aux lois de la mécanique. La vitesse de la particule fluide, v_f , représente une vitesse moyenne que l'on peut calculer à partir des vitesses de chaque particule, et que l'on pourrait qualifier de macroscopique par rapport à la description à l'échelle des molécules. Les équations au sens de la mécanique des milieux continus (les équations de Navier-Stokes par exemple) relient le champ de vitesse v_f à une autre grandeur macroscopique, la pression p_f . Cette dernière peut être reliée à la dynamique à l'échelle moléculaire de manière plus subtile, puisqu'il n'y a pas de notion de pression associée à chaque molécule prise individuellement. On ne détaille pas cette question, mais il faut retenir que le point de départ de la modélisation à l'échelle du pore, ℓ , fait déjà appel à un changement d'échelle (mécanique des milieux continus, thermodynamique...). C'est une situation classique en physique : on a en tête ici la séquence souvent présentée qui associe des modèles de mécanique quantique, puis de mécanique classique en fonction de l'échelle d'observation. On verra plus loin, et en s'appuyant sur la problématique milieu poreux, que cette vision séquentielle de la pertinence des modèles peut être mise en défaut, et que les méthodes développées pour la physique des milieux poreux peuvent en retour fournir un éclairage intéressant sur ces questions récurrentes de la physique !

On est donc dans la position suivante : on dispose d'équations à l'échelle du pore et issues de la physique « habituelle » qui permettent en principe de modéliser l'écoulement, *i.e.* d'estimer partout v_f et p_f dans le cas du problème d'écoulement d'un

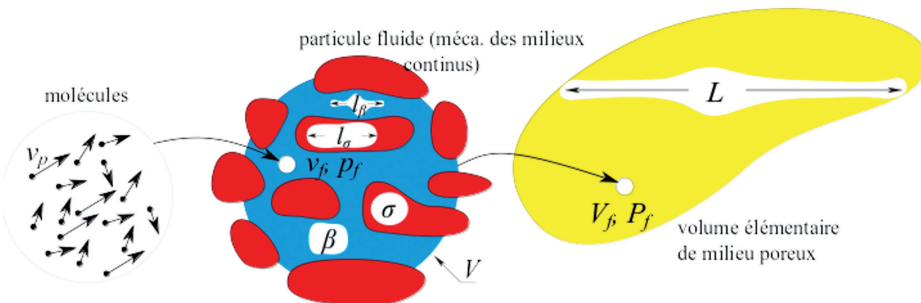


Fig. 1. Représentation schématique de l'aspect multi-échelle d'un milieu poreux.

fluide dans l'espace poral qui sert de fil directeur à cette présentation de la problématique multi-échelle. En général, la résolution directe n'est pas possible compte-tenu du grand nombre de mailles qu'il faudrait inclure dans le modèle numérique (un point discuté plus haut). Est-il possible de reproduire le schéma déjà exposé pour le passage de l'échelle moléculaire à l'échelle du milieu continu ? C'est-à-dire : peut-on définir des grandeurs macroscopiques, comme la vitesse moyenne sur un certain volume représentatif de milieux poreux, que nous noterons V_p ou une pression macroscopique, notée P_f ? Et peut-on proposer des équations macroscopiques qui permettent de déterminer ces champs V_f et P_f sans passer par le calcul de v_f et p_f ? Si cela est possible, alors une modélisation du problème à l'échelle L procède comme suit :

1. Les équations macroscopiques sont résolues avec des maillages à l'échelle L et non ℓ , ce qui représente des nombres de mailles bien plus petits, et donc des calculs plus accessibles que la simulation directe à l'échelle ℓ .
2. Les équations macroscopiques font intervenir des propriétés macroscopiques dites « effectives » qu'il faut déterminer. Cette question est cruciale pour la mise en œuvre et sera discutée plus loin. On ne développe pas dans cette note cette question des propriétés effectives. On se bornera à évoquer deux exemples. À la description microscopique de l'espace poral on associera la notion macroscopique de porosité (égale au rapport du volume de pore sur le volume total, occupé par les pores et la phase solide). Quant à la perte de charge pour un écoulement traversant le milieu poreux, elle sera déterminée par la connaissance de la perméabilité qui intervient dans une loi macroscopique appelée loi de Darcy (du nom du chercheur français qui a travaillé sur l'alimentation en eau de la ville de Dijon (Darcy, 1856)) qui relie la vitesse V_f au gradient de la pression P_f .

Il est à noter que, dans cette approche, on se retrouve dans la situation où le modèle macroscopique est utilisé de manière indépendante du modèle à l'échelle inférieure, reproduisant ainsi le schéma déjà utilisé : modélisation à l'échelle moléculaire si on regarde à l'échelle d'une molécule, et modélisation au sens de la mécanique des milieux continus si on regarde à l'échelle ℓ . Quand une telle modélisation en cascade de modèle « indépendants » est-elle possible ? Ce point a fait l'objet de nombreuses études détaillées pour les milieux poreux, à partir de diverses méthodes mathématiques de changement d'échelle (Bensoussan et al., 1978 ; Matheron, 1967 ; Whitaker, 1999 ; Davit et al., 2013). Si le milieu poreux considéré satisfait à une hypothèse de *séparation des échelles* qui stipule que $\ell \ll L$ c'est-à-dire que l'échelle du pore est beaucoup plus petite que l'échelle de l'objet macroscopique d'intérêt, on a alors les propriétés suivantes :

1. On peut déterminer la structure des équations macroscopiques à partir des équations connues à l'échelle plus petite. Les équations macroscopiques obtenues peuvent alors être utilisées sans revenir à la description microscopique, mais elles font intervenir des propriétés nouvelles, appelées propriétés effectives, qu'il faut déterminer. On peut les déterminer par une approche expérimentale purement macroscopique, mais aussi en s'appuyant sur la méthode de changement d'échelle utilisée : voir point suivant.
2. Les propriétés effectives peuvent en effet être calculées en résolvant certains problèmes fournis par la méthode de changement d'échelle sur un volume représentatif du milieu poreux à l'échelle ℓ .

Cette dernière possibilité, connue depuis plusieurs décennies, prend aujourd'hui une importance particulière, due à la conjonction de trois avancées déterminantes dans les domaines de la science et de la technologie : (1) le développement des méthodes de changement d'échelle, (2) les possibilités de caractérisation précises de la structure poreuse à l'échelle ℓ par les diverses techniques de micro-tomographies, nano-tomographies, (3) l'existence de machines de calcul à haute performance. Dans le passé, la détermination des propriétés effectives nécessitait de réaliser des expériences macroscopiques et de les interpréter. Bien que cette approche expérimentale ne soit pas du tout obsolète, il est aussi possible, aujourd'hui, de calculer ces propriétés à partir des images tomographiques. Les calculs restent en général très lourds, mais sont accessibles en particulier avec les machines des grands centres de calcul.

Comme on l'a vu, cette séquence simple de modélisations indépendantes à chaque échelle s'appuie sur une *hypothèse de séparation d'échelle*. Beaucoup de milieux réels ne satisfont pas pleinement à ce critère. Il existe un grand nombre d'échelles, souvent imbriquées. Quelles sont les possibilités de modélisation dans ces cas ? Ce problème est abordé ci-dessous dans le cas d'un milieu poreux un peu particulier, dit système à double milieu. Un tel système est représenté schématiquement dans la figure ci-dessous.

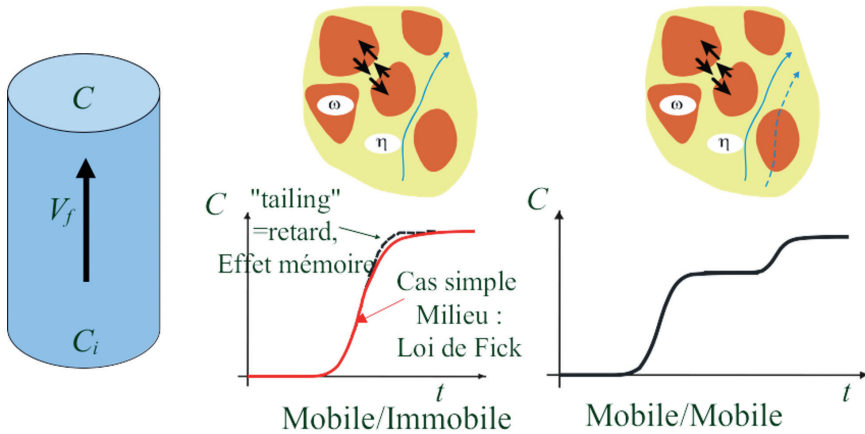


Fig. 2. Système à double milieu.

Une colonne poreuse (à gauche) est remplie par deux types de milieux poreux répartis en un domaine continu (repéré par η), et des nodules (repérés par ω). Si un fluide entre dans la colonne avec une certaine concentration C_i , la concentration à la sortie, C , en fonction du temps présente les caractéristiques suivantes :

1. Pour un milieu simple (un seul des milieux ω ou η), on a ce que l'on appelle une courbe de dilution classique (fickienne), solution d'un problème classique de diffusion/convection,
2. Pour un double milieu avec des nodules beaucoup moins perméables que le milieu continu (système appelé mobile/immobile), on constate un effet de retard ou de mémoire lié à la vitesse plus lente de pénétration dans les nodules du constituant chimique observé.
3. Pour une perméabilité des nodules moins petite que dans le cas précédent (système appelé mobile/mobile), on peut observer une arrivée en deux temps du front de concentration. Cette courbe d'élution, $C(t)$, est également très différente du cas Fickien !

Ces nombreuses situations, qualifiées de transport anormal par opposition au cas Fickien, ont fait et font encore l'objet de nombreuses études, et constituent un domaine extrêmement ouvert de la physique des milieux poreux. On se bornera ici à évoquer la typologie des divers modèles que l'on tente d'utiliser. On s'appuiera pour cela sur la représentation schématique proposée ci-dessous :

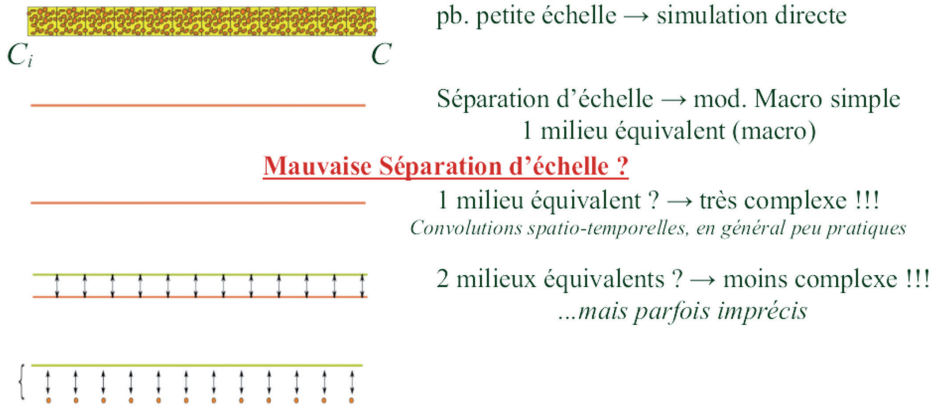


Fig. 3. Représentation schématique de divers modèles possibles pour un système à deux milieux.

On considère un écoulement dans la colonne poreuse qui est, en moyenne, monodimensionnel. La simulation directe, première possibilité, n'est pas le plus souvent une option praticable, pour les raisons évoquées précédemment. Dans le cas de séparation des échelles, le modèle macroscopique correspondant consisterait à résoudre l'équation macroscopique dans un cas monodimensionnel, à condition de connaître les propriétés effectives (voir discussion précédente). La résolution monodimensionnelle est très légère en termes de ressources informatiques comparée à la résolution 3D directe. La plupart des simulations utilisées en pratique aujourd'hui (génie pétrolier, génie chimique, génie civil, etc.) correspondent à ce type de modèle. Comme cela a été illustré sur la figure 2, ces modèles simples ne donnent pas toujours satisfaction.

Dans le cas de transport anormal, plusieurs possibilités s'offrent alors :

1. Modélisation 1D par une seule équation. À cause des effets d'anormalité qu'il doit incorporer, un tel modèle a une structure mathématique très complexe comparée au modèle simple du cas avec séparation des échelles (par exemple présence de convolutions spatio-temporelles). De tels modèles sont souvent difficiles à construire, et, aussi, difficiles à résoudre numériquement.
2. Modélisation 1D à plusieurs équations : le modèle le plus simple correspond à une équation pour le milieu effectif ω et une autre pour le milieu η , les deux milieux échangeant de l'information pour traduire le passage de la matière d'un milieu à l'autre. De tels modèles permettent d'approcher, le plus souvent sans convolutions spatio-temporelles, une partie des effets de mémoire et de retard évoqués plus haut.
3. Modèles hybrides ou mixtes : de tels modèles couplent une représentation macroscopique pour le milieu continu η , à une représentation à plus petite échelle pour les nodules.

Si on se réfère à l'image de la modélisation de la foule, le modèle hybride ou mixte propose un modèle de foule couplé/influencé par le comportement de chaque individu. Un tel modèle est plus lourd que le modèle n^2 , puisque subsistent des simulations à petite échelle, mais il permet dans de nombreux cas de modéliser certains effets de mémoire de manière plus précise que des modèles à deux équations.

Conclusion

On a, dans cette courte note, montré l'importance qu'avait la « science » des milieux poreux dans de nombreux problèmes scientifiques et techniques contemporains. On a par ailleurs montré, de manière qualitative et non-mathématique, que divers types de modèles pouvaient être mis en place pour ces systèmes multi-échelles.

Ce dernier aspect a une portée plus générale. On a déjà vu que la physique classique (hors milieu poreux) exhibait des problématiques de changement d'échelle. Par exemple en considérant la question de l'émergence de modèles continus à partir du comportement de systèmes de molécules. L'intérêt méthodologique des travaux effectués sur les milieux poreux est d'offrir (parce que les méthodes de changement d'échelle peuvent être poussées très loin) une perspective sur d'autres problèmes de la physique. Par exemple, les modèles à deux équations évoqués ci-dessus rappellent les modèles à plusieurs températures introduits pour décrire le comportement de certains plasmas, ou bien le modèle à « deux fluides » utilisé pour modéliser les écoulements de superfluide. Dans cette optique, l'approche hybride suggérée par les physiciens des milieux poreux pourrait inspirer d'autres disciplines !

Le choix des modèles ou leurs développements représentent une grande difficulté technique, ce qui explique que de nombreux problèmes n'ont pas trouvé à ce jour de solutions satisfaisantes.

Bibliographie

Bensoussan, J., L. Lions, G. Papanicolaou *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, Amsterdam, North-Holland, 1978.

Darcy, H., *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Paris, Dalmont, 1856.

Davit, Y. et al., « Homogenization via formal multiscale asymptotics and volume averaging : How do the two techniques compare? », *Advances in Water Resources*, 2013 206–178 ,62.

Matheron, G., *Éléments Pour une Théorie des Milieux Poreux*, Paris, Masson, 1967.

Whitaker, S., *The Method of Volume Averaging*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1999.