

Modélisation du transport couplé de fluide dans les milieux poreux : application aux os

Thibault Lemaire & Salah Naïli

Laboratoire de Biomécanique et Biomatériaux Ostéo-Articulaires (B2OA), UMR CNRS 7052
Faculté des Sciences et Technologie, Université Paris 12-Val de Marne
61, Avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil Cédex, France
lemaire@univ-paris12.fr

Résumé :

Un modèle continu à deux échelles est développé afin de décrire le comportement chimio-electro-hydraulique du fluide interstitiel saturant un milieu poreux. Pour cela, le modèle couplé de Moyne et Murad est modifié afin de tenir compte d'effets visqueux localisés à une échelle inférieure à la microéchelle. Le modèle à la microéchelle associe donc à une loi de Brinkman modifiée les équations de transport chimique et le bilan électrostatique. Après un changement de variables approprié, une procédure d'homogénéisation périodique est mise en œuvre pour dériver une description macroscopique. L'obtention d'une loi de Darcy couplée utilisable pour exprimer l'écoulement interstitiel dans des milieux à pores à géométrie cylindrique comme les os est finalement établie.

Abstract :

A continuous two-scales modelling is developed to describe the electro-chemo-hydraulic behaviour of the interstitial fluid saturating a porous medium. The coupled modelling of Moyne and Murad is modified to take into account viscous effect localised at a lower scale than the microscopic one. Thus a modified Brinkman equation supplemented by ionic transport laws and electrostatics is considered at the microscale. Using a suitable change of variables and carrying out a periodic homogenization procedure, the macroscopic description of the phenomena is derived. For materials presenting a cylindrical geometry like bones, a coupled Darcy law is finally obtained

Mots-clefs :

Modélisation multi-échelle ; Phénomènes couplés ; Loi de Brinkman modifiée

1 Introduction

Les problèmes de modélisation des phénomènes multiphysiques qui régissent le comportement des milieux poreux saturés électriquement chargés trouvent des applications dans des domaines aussi variés que la chimie, les géosciences ou la biologie. Christian Moyne et Marcio Murad ont proposé un modèle permettant de décrire les phénomènes couplés régissant le comportement des milieux argileux (Moyne et Murad (2002)). Cette modélisation à échelles multiples est basée sur une description physique des phénomènes au niveau des pores étendue à l'échelle du milieu au moyen d'une procédure d'homogénéisation.

Nous pensons qu'une telle approche par changement d'échelle est intéressante pour essayer de comprendre certains phénomènes biologiques encore mal compris. En effet, les essais expérimentaux étant difficiles à mettre en œuvre *in vivo*, le modèle apparaît comme un outil efficace pour valider ou non des hypothèses biologiques. Ainsi, le rôle des couplages dans la transmission des *stimuli* mécaniques macroscopiques aux cellules osseuses peut être jaugé (Lemaire *et al.* (2007b)). Nous proposons par conséquent de modifier le modèle couplé de Moyne-Murad afin de pouvoir décrire le transport du fluide interstitiel dans les tissus osseux. L'os cortical est un milieu typiquement multi-échelle. Les phénomènes qui en régissent le comportement se manifestent de l'échelle atomique à celle de l'organe. Dans notre étude, nous nous proposons de

travailler avec les outils de la physique des milieux continus. Notre microéchelle restera donc assez grande afin de ne pas rentrer dans le domaine de la physique moléculaire. Nos micropores seront typiquement les microcanaux cylindriques entourant les dendrites cellulaires, appelés canalicules, d'une taille de l'ordre de 10^{-8} m. Ces canalicules connectent un réseau de lacunes contenant les cellules osseuses chargées du remodelage osseux (ostéocytes). La macroéchelle sera celle de l'ostéon, structure unitaire de l'os de forme cylindrique et de $160 \mu\text{m}$ de rayon. Enfin, il existe une échelle nanométrique, puisque la zone annulaire entre les dendrites cellulaires et les parois des canalicules où se développent les microécoulements est obstruée par des filaments formant une matrice péricellulaire.

Le principe de la modélisation par changement d'échelle réside dans la propagation à l'échelle supérieure des phénomènes décrits à la petite échelle. Dans notre cas, la description microscopique du mouvement du fluide devra tenir compte des interactions moléculaires ayant lieu au niveau des filaments péricellulaires. Ainsi, si nous suivons le modèle de Moyne-Murad pour décrire les phénomènes électrocinétiques par une équation de Poisson-Boltzmann et des équations de transports des espèces chimiques, notre loi de Darcy modifiée sera obtenue non à partir d'une description stokesienne, mais brinkmanienne, afin de prendre en compte les frottements supplémentaires générés par les nanofilaments.

2 Description de la phase fluide à la microéchelle

Considérons des micropores à géométrie annulaire contenant une matrice fibreuse et saturés par une solution aqueuse constituée d'eau et d'un sel monovalent entièrement dissocié. En outre, l'échelle est suffisamment grande pour que les effets stériques et d'hydratation soient négligés et que la phase liquide se comporte comme une solution d'électrolyte diélectrique dont les ions sont assimilés à des charges ponctuelles.

2.1 Bilan électrostatique

Si nous négligeons les effets magnétiques, le potentiel électrique ϕ dans la phase fluide est décrit par l'équation de Maxwell :

$$\nabla \cdot \nabla \phi = -\frac{F}{\varepsilon \varepsilon_0} (n^+ - n^-) \quad (1)$$

où ε_0 est la permittivité du vide, ε la constante diélectrique du milieu, F la constante de Faraday, n^+ et n^- les concentrations molaires locales des cations et des anions ; l'opérateur nabla est désigné par ∇ . Les conditions aux limites associées s'obtiennent en se donnant la continuité du flux électrique aux parois du micropore, de vecteur normal unitaire sortant \mathbf{n} . En notant σ la densité surfacique de charge des parois du pore, on a $\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = \sigma / (\varepsilon \varepsilon_0)$.

2.2 Transport des ions

Notons t le temps, D_+ et D_- respectivement les coefficients de diffusion aqueuse des cations et anions, et enfin, \mathbf{v} la vitesse du fluide. Les équations de Nernst-Planck gouvernent le transport ionique :

$$\frac{\partial n^\pm}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\pm \mathbf{v}) = \nabla \cdot [D_\pm \exp(\mp \bar{\phi}) \nabla (n^\pm \exp(\pm \bar{\phi}))]. \quad (2)$$

Le potentiel électrique réduit $\bar{\phi} = F\phi/RT$ est ici introduit à l'aide de la température T et de la constante des gaz parfaits R . Par la suite seront introduits d'autres potentiels électriques qui

seront réduits par le même rapport. Les conditions aux limites sont des conditions d'imperméabilité aux parois : $-D_{\pm}(\nabla n^{\pm} \pm n^{\pm} \nabla \bar{\phi}) \cdot \mathbf{n} = 0$.

2.3 Mouvement de la solution d'électrolyte

Si la solution d'électrolyte se comporte comme un fluide newtonien incompressible, elle est soumise à l'action des forces électriques de Coulomb $q\mathbf{E}$, où $q = F(n^+ - n^-)$ est la densité locale volumique de charge et \mathbf{E} le champ électrique ambiant. Ce dernier génère l'électromigration des ions qui, par effet d'entraînement visqueux, participe au mouvement du fluide. Par ailleurs, l'effet de frottement visqueux généré par la matrice fibreuse occupant l'espace annulaire des canalicules doit être pris en compte afin de rendre compte du ralentissement de l'écoulement qu'il génère. Ce frottement supplémentaire va être prise en compte en s'inspirant des arguments de Brinkman (1947) :

$$-\nabla p + \mu_f \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} - \frac{\mu_f}{k_f} \mathbf{v} = F(n^+ - n^-) \nabla \phi, \quad (3)$$

où p est la pression hydraulique, μ_f la viscosité dynamique du fluide et k_f une perméabilité intrinsèque représentant l'effet de frottement dû à la matrice fibreuse péricellulaire. Dans cette équation, les termes dus à la gravité et à l'inertie ont été négligés. Au niveau des interfaces sont imposées des conditions d'adhérence.

3 Changement de variables dans la phase fluide et changement d'échelle

Une des originalités de ce travail consiste à utiliser un changement de variables par le biais d'une solution fictive d'électrolyte à l'équilibre thermodynamique (dont les caractéristiques sont indexées par "b") vérifiant l'électroneutralité, comme cela a pu l'être dans certaines études de milieux argileux (Dormieux *et al.* (1995); Moyne et Murad (2002); Lemaire *et al.* (2007a)). Ainsi, en écrivant l'équilibre thermodynamique *via* les potentiels électrochimiques des ions $\mu_b^{\pm} = \mu^{\pm} = \pm F\phi + RT \ln(n^{\pm}) = \pm F\psi_b + RT \ln(n_b^{\pm})$ d'une part et du solvant d'autre part, ainsi que l'électroneutralité du bulk virtuel $n_b^+ = n_b^- = n_b$, les relations liant variables réelles et virtuelles sont :

$$\phi = \psi_b + \varphi, \quad n^{\pm} = n_b \exp(\mp \bar{\varphi}), \quad p_b = p - \pi = p - 2RTn_b(\cosh \bar{\varphi} - 1). \quad (4)$$

Dans ces équations apparaissent la concentration du bulk virtuel n_b , la pression du bulk virtuel $p_b = p - \pi$, différence entre les pressions hydraulique et de Donnan, le potentiel du bulk virtuel ψ_b qui s'interprète comme un potentiel d'écoulement et l'écart électrique entre le fluide interstitiel et la solution fictive $\varphi = \phi - \psi_b$, s'interprétant comme un potentiel de double couche.

Nous reformulons les équations du modèle microscopique et leurs conditions aux limites en terme de variables du bulk. Les équations (1) et (2) sont transformées comme chez Lemaire *et al.* (2006). L'équation (3) est quant à elle transformée en :

$$\mu_f \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} - \frac{\mu_f}{k_f} \mathbf{v} - \nabla p_b - 2RT(\cosh \bar{\varphi} - 1) \nabla n_b + 2RTn_b \sinh \bar{\varphi} \nabla \bar{\psi}_b = \mathbf{0}. \quad (5)$$

4 Procédure d'homogénéisation

En s'inspirant de l'approche proposée par Auriault (1991), nous considérons que le milieu poreux à l'échelle macroscopique (de longueur L) périodique peut être représenté par un motif microscopique (de longueur ℓ). Le paramètre $\eta = \ell/L$ doit être petit devant l'unité pour assurer la condition d'indépendance des échelles.

4.1 Écriture du modèle microscopique adimensionnel

La première étape de cette procédure de changement d'échelle consiste à écrire le modèle sous une forme adimensionnelle en divisant toutes les quantités par des valeurs de références indicées "r". Les quantités sans dimension seront signalées par un "prime". Par exemple, l'opérateur de dérivation spatiale est réduit par la longueur de référence $L_r \equiv L$ et nous avons $\nabla = \frac{1}{L} \nabla'$.

En notant x et X les coordonnées associées respectivement au motif microscopique et au milieu macroscopique et en choisissant comme longueurs de références associées $x_r = \ell$ et $X_r = L$, l'opérateur de dérivation spatiale est transformé en $\nabla' = \eta^{-1} \nabla'_x + \nabla'_X$.

Problèmes électrostatique et de Nernst-Planck L'écriture sous forme adimensionnelle de ces deux équations est identique à celle proposée par Moyne et Murad (2002) et ne sera pas détaillée ici, contrairement à l'équation (5). Toutefois, nous rappelons les lois d'échelle prises en compte. Comme potentiel électrique de référence est choisi celui à la surface des pores (typiquement de l'ordre du millivolt). En conséquence, le potentiel électrique de référence $Q = F\phi_r/RT$ est un $O(\eta^0)$. Ce nombre Q peut être interprété comme le rapport entre les énergies électrique et thermique. Par ailleurs, la longueur de Debye définie par $L_D = \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 RT/(2F^2 n_b)}$ apparaissant dans le bilan électrostatique caractérise l'épaisseur des double-couches ioniques qui est donc de l'ordre de ℓ . Remarquons que la donnée de cette longueur nous donne une concentration de référence $n_r \equiv \varepsilon\varepsilon_0 \phi_r / F\ell^2$. Enfin la continuité du flux électrique à la paroi nous donne $\sigma \equiv \varepsilon\varepsilon_0 \phi_r / \ell$.

D'autre part, nous choisissons comme temps de référence $t_r = L^2/D_{\pm}$. L'écriture des équations de Nernst-Planck fait apparaître le nombre de Péclet $Pe = v_r L/D_{\pm}$ où v_r est une vitesse de référence. Selon que le mécanisme de transport prépondérant soit la diffusion ou la convection, nous choisirons l'ordre de grandeur du nombre de Péclet.

Équation de Brinkman modifiée En introduisant une pression de référence p_r , l'écriture adimensionnelle de l'équation (5) fait apparaître deux nombres caractéristiques : les nombres de Reynolds $Re = p_r L / \mu_f v_r$ et de Derjaguin $De = RT n_r / p_r$. Ce dernier mesure l'importance des effets électriques en comparaison aux effets de pression. En ce qui concerne la réduction du paramètre de perméabilité représentant l'interaction avec les nanofibres, Lemaire *et al.* (2007b) ont suggéré que la valeur de ce paramètre était typiquement un $O(\ell^2)$. Nous avons donc l'équation de Brinkman adimensionnelle :

$$\frac{1}{Re} \mu'_f \nabla' \cdot \nabla' \mathbf{v}' - \frac{1}{\eta^2 Re} \frac{\mu'_f}{k'_f} \mathbf{v}' = \nabla' p'_b + De R' T' (\cosh \bar{\varphi}' - 1) \nabla' n'_b - De R' T' n'_b \sinh \bar{\varphi}' \nabla' \bar{\psi}'_b. \quad (6)$$

4.2 Propagation asymptotique

Les différentes quantités q sont cherchées sous la forme d'une série du petit paramètre η : $q(x, X) = \sum_i \eta^i q_{[i]}(x, X)$. Des développements de Taylor sont utilisés pour évaluer les termes de Boltzmann en $\exp(\mp \bar{\varphi}') = \exp(\mp \bar{\varphi}'_{[0]}) (1 \mp \bar{\varphi}'_{[1]} \eta + (\frac{\bar{\varphi}'_{[1]}^2}{2} \mp \bar{\varphi}'_{[2]}) \eta^2) + o(\eta^2)$. Nous utilisons ces résultats et collectons pour chacun des problèmes précédents les termes du même ordre. Nous ne nous attarderons pas ici sur les problèmes électrostatique et de Nernst-Planck qui sont à traiter exactement comme chez Moyne et Murad (2002), et nous apesantirons sur l'équation de Brinkman modifiée non traitée par ces auteurs. Retenons toutefois que dans le cas où la

diffusion est le mécanisme principal de transport des ions, les trois variables du bulk (pression p_b , concentration n_b et potentiel électrique ψ_b) sont des variables dites “lentes” qui ne varient pas à l’échelle du pore.

Il est nécessaire pour traiter le problème de Brinkman de donner l’ordre de grandeur des nombres de Reynolds et Derjaguin. Le nombre de Reynolds qui compare les effets inertiels et visqueux est évalué selon l’analyse d’Auriault (1991) $Re \equiv O(\eta^{-2})$. Par ailleurs, Derjaguin *et al.* (1987) indiquent que les contraintes de nature électrique contrebalancent les effets de pression osmotique. Ainsi, si effets électriques et de pression sont comparables, nous aurons $De \equiv O(1)$. L’utilisation de ces règles d’échelle dans l’équation modifiée de Brinkman nous donne donc à l’ordre zéro, en tenant compte des variables lentes :

$$\begin{aligned} \mu'_f \nabla'_x \cdot \nabla'_x \mathbf{v}'_{[0]} - \frac{\mu'_f}{k'_f} \mathbf{v}'_{[0]} &= \nabla'_X p'_{b[0]} + \nabla'_x p'_{b[1]} + R'T'(\cosh \bar{\varphi}'_{[0]} - 1)(\nabla'_X n'_{b[0]} + \nabla'_x n'_{b[1]}) \\ &\quad - R'T' n'_{b[0]} \sinh \bar{\varphi}'_{[0]} (\nabla'_X \bar{\psi}'_{b[0]} + \nabla'_x \bar{\psi}'_{b[1]}). \end{aligned} \quad (7)$$

5 Obtention d’une loi de Darcy couplée dans le cas d’une géométrie cylindrique

Si nous cherchons à transformer cette équation de Brinkman en vue d’obtenir une loi d’écoulement dans l’os cortical, nous nous plaçons dans une géométrie particulière. En effet, l’écoulement interstitiel s’opère dans les pores annulaires des canalicules. La symétrie de révolution nous indique que les phénomènes ne dépendent pas de la coordonnée angulaire. Par ailleurs, la coordonnée radiale est typiquement de l’ordre du rayon du canalicule (soit de la microéchelle ℓ) tandis que la coordonnée longitudinale est typiquement de l’ordre de la longueur du canalicule qui elle-même est de l’ordre du rayon de l’ostéon (soit de la macroéchelle L). Ainsi, la coordonnée microscopique coïncide avec la coordonnée radiale r et la coordonnée macroscopique avec la coordonnée longitudinale z . Considérons en outre que la vitesse s’établit dans la direction longitudinale \mathbf{e}_z et ne dépend que de la coordonnée radiale : $\mathbf{v} = u(r)\mathbf{e}_z$. En projetant l’équation (7) dans la direction \mathbf{e}_z , les termes de fluctuations de pression $p'_{b[1]}$, concentration $n'_{b[1]}$ et potentiel $\bar{\psi}'_{b[1]}$ du bulk étant liés à des gradients microscopiques et donc colinéaires à la direction radiale ne sont pas à prendre en compte. Le potentiel de double-couche étant par ailleurs établi à l’échelle du pore grâce à l’équation de Poisson-Boltzmann (Lemaire *et al.* (2006)), nous obtenons compte tenu de la linéarité du problème et pour un z donné :

$$\mu_f \left(\frac{d^2 u_\alpha}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_\alpha}{dr} \right) - \frac{\mu_f}{k_f} u_\alpha = G_\alpha F_\alpha(r), \quad (8)$$

où l’indice $\alpha = P, C$ ou E rend compte des cas de Poiseuille, chimique et électro-osmotique. Les fonctions G_α et F_α sont exprimées respectivement par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} G_P = \frac{dp_b}{dz}, & F_P(r) = 1, \\ G_C = \frac{dn_b}{dz}, & F_C(r) = 2RT(\cosh \bar{\varphi} - 1), \\ G_E = \frac{d\psi_b}{dz}, & F_E(r) = -2RT n_b \sinh \bar{\varphi}. \end{array} \right. \quad (9)$$

$$\quad (10)$$

$$\quad (11)$$

Ces trois problèmes sont résolus en utilisant des conditions d’adhérence aux parois de manière à faire apparaître la perméabilité à l’échelle du pore $\kappa_\alpha(r)$:

$$u_\alpha(r) = -\kappa_\alpha(r) G_\alpha, \quad \text{pour } \alpha = P, C, E. \quad (12)$$

En moyennant ce résultat sur la section annulaire du pore, chaque vitesse moyenne due à l'effet α est exprimée, et en notant $K_\alpha = \langle \kappa_\alpha \rangle$ la perméabilité relative à l'effet moteur α , nous obtenons finalement la loi de Darcy décrivant le mouvement du fluide à l'échelle de l'ostéon :

$$\langle u \rangle = \langle u_P \rangle + \langle u_C \rangle + \langle u_E \rangle = -K_P \frac{dp_b}{dz} - K_C \frac{dn_b}{dz} - K_E \frac{d\bar{\psi}_b}{dz}. \quad (13)$$

L'expression de ces perméabilités microscopiques et macroscopiques sont présentées dans le cas d'une étude de l'os cortical par Lemaire *et al.* (2007b). Une utilisation de ce modèle théorique pour étudier les tissus osseux est d'ailleurs présentée dans une autre communication afin de mettre en évidence le rôle des effets de couplage dans la mécanotransduction du remodelage osseux (Lemaire et Naili (2007)).

6 Conclusion

Ce travail qui s'attache à proposer un modèle couplé à deux échelles s'inspirant des travaux de Moyne et Murad, permet de décrire les effets couplés qui régissent le comportement de milieux poreux. Ce modèle est de plus capable de rendre compte des effets submicroscopiques générés par des éléments structuraux nanométriques. En particulier, pour un milieu à géométrie cylindrique comme l'os, une loi de Darcy généralisée a été dérivée. Celle-ci montre que l'écoulement au sein du tissu poreux résulte de trois gradients moteurs de nature hydraulique, osmotique et électro-osmotique. Des paramètres de perméabilité quantifiant ces trois effets ont été établis. Ils dépendent des caractéristiques géométriques, des propriétés électriques du milieu poreux et de la perméabilité k_f rendant compte des effets nanométriques. L'utilisation de cette loi de Darcy modifiée permet alors de mieux comprendre le rôle des couplages pour décrire les microécoulements dans les os.

Références

- Auriault, J. L. 1991 Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible? *Int. J. Eng. Sci.* **29** 785-795
- Brinkman, H. C. 1947 A calculation of the viscous forces exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles *Appl. Sci. Res.* **A1** 27-34
- Derjaguin, B. V., Churaev, N. and Muller, V. 1987 Surface Forces Plenum Press, New York
- Dormieux, L., Barboux, P., Coussy, O. and Dangla, P. 1995 A macroscopic model of the swelling phenomenon of a saturated clay *European J. Mech. - A/Solids* **14** 981-1004
- Lemaire, T., Moyne, C. and Stemmelen, D. 2007a Modelling of electro-osmosis in clayey materials including pH effects *J. Phys. Chem. Earth.* **32** 441-452
- Lemaire, T. et Naili, S. 2007 Approche multi-échelle des phénomènes couplés intervenant dans la mécanotransduction du remodelage osseux *In actes du 18e CFM, Grenoble.*
- Lemaire, T., Naili, S. and Rémond, A. 2006 Multi-scale analysis of the coupled effects governing the movement of interstitial fluid in cortical bone *Biomechan. Model. Mechanobiol.* **5** 39-52
- Lemaire, T., Naili, S. and Rémond, A. 2007b Study of the influence of fibrous pericellular matrix in the cortical interstitial fluid movement with hydro-electro-chemical effects *J. Biomec. Eng.* in press
- Moyne, C. and Murad, M. A. 2002 Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from a micro/macro-homogenization procedure *Int. J. Solids and Structures* **39** 6159-6190