

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

PAR **Emmanuel LE TRONG**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : **MÉCANIQUE**

**MISE EN ŒUVRE DE MODÈLES DE RÉSEAUX 3-D POUR L'ÉTUDE DU
TRANSPORT BINAIRE EN MILIEU POREUX**

Soutenue le 16 décembre 2003,

après avis de

MM. **J.-M. Chaix**, Directeur de recherche CNRS..... Rapporteurs
F. Delay, Professeur.....

devant la commission d'examen formée de

MM. **P. Guitton**, Professeur Président
Y. Anguy, Chargé de recherche CNRS..... Rapporteur
H. Bertin, Directeur de recherche CNRS
J. M. Chaix, Directeur de recherche CNRS.....
F. Delay, Professeur.....
B. Noetinger, Directeur de recherche IFP,
M. Quintard, Directeur de recherche CNRS, Invité

Ce travail de thèse a été effectué au LEPT (*Laboratoire Énergétique et Phénomènes de Transferts*), laboratoire rattaché à l'université Bordeaux 1 et à l'École Nationale Supérieure des Arts et Métiers, et par ailleurs Unité Mixte de Recherche 8508 du CNRS. Nous tenons à remercier M. J.-R. Puiggali, directeur du LEPT, de nous y avoir accueilli.

Il a été financé par une allocation de recherche ministérielle.

Nous remercions monsieur P. Guitton qui nous a fait l'honneur de présider notre jury.

Nos remerciements vont aussi à M. H. Bertin sous la direction de qui cette thèse a été menée.

Nous exprimons toute notre gratitude à MM. J.-M. Chaix et F. Delay pour avoir accepté de rapporter nos travaux. Nous tenons par ailleurs à remercier M. J.-M. Chaix pour nous avoir accueilli dans les manifestations de la section française de la Société Internationale de Stéréologie. Nous exprimons nos plus sincères remerciements à MM. M. Quintard et F. Delay pour nous avoir permis de profiter de la dynamique du Programme National de Recherche en Hydrologie, dans le cadre duquel s'est déroulé cette thèse.

Notre sincère reconnaissance à MM. B. Noetinger et M. Quintard qui ont accepté de mettre leur vaste expérience au service de notre jury.

Nous remercions Mme. Ahmadi pour avoir encadré le début de cette thèse, un heureux événement l'ayant empêché d'assister à la fin de ces travaux.

Enfin et surtout, nous souhaitons adresser nos plus chaleureux remerciements à M. Y. Anguy pour avoir, au cours de ces trois années, suivi avec autant de rigueur que de sympathie ce travail et nous avoir formé à tous les aspects du métier de chercheur.

Table des matières

Résumé	v
Préambule	vii
Contexte général	ix
Introduction	xi
1 Caractérisation de la dispersion active en milieu poreux homogène	1
1.1 L’outil : la prise de moyenne volumique locale	1
1.1.1 Description à l’échelle du pore de la dissolution du polluant en zone saturée	2
1.1.2 Forme macroscopique des équations : la dispersion active	4
1.2 Résultats bibliographiques : tenseur de dispersion et coefficient d’échange de masse de milieux poreux ordonnés	9
2 Application des modèles de réseaux à l’étude de la dispersion active	13
2.1 Mise à l’échelle de l’information microstructurale incluse dans un modèle de réseau	15
2.1.1 L’écoulement dans un modèle de réseau	15
2.1.2 Le piégeage de NAPL dans un modèle de réseau	17
2.1.3 Le transport dans un modèle de réseau	20
2.1.4 Les fermetures dans un modèle de réseau	21
2.2 Résultats préliminaires	24
3 Modèles aléatoires de milieux poreux numériques 3-D	29
3.1 Simplification de la microstructure : place et importance d’un modèle aléatoire de milieux poreux numériques	29
3.2 Classe de modèles aléatoires mise en œuvre : principe et bases . .	31
3.3 Réalisme des milieux poreux numériques produits par le modèle	36
3.3.1 Conditions pratiques d’utilisation du modèle aléatoire, implications pour les contraintes du modèle	36
3.3.2 Apport des techniques de « réduction d’erreur » à la quantification de l’information portée par la contrainte du modèle	43

3.3.3	Milieux poreux numériques de contenus variés : intérêt des techniques de recuit simulé	52
3.3.4	Recuit simulé et contrôle de l'information structurale imposée	56
3.3.5	Conclusions	61
4	Obtention de réseaux par morphologie mathématique	67
4.1	Présentation intuitive des techniques d'analyse d'images mises en œuvre	67
4.2	Les outils de la morphologie mathématique	71
4.2.1	Érosion et dilatation	71
4.2.2	Représentation de l'image, connexité et distance digitale.	72
4.2.3	Le squelette et l'axe médian	76
4.2.4	La carte des distances	78
4.2.5	Distance géodésique, opérateurs géodésiques	80
4.3	Extraction du squelette filaire	82
4.3.1	Centrage dans le plan au sens d'un disque maximum	83
4.3.2	Complémentation du centrage	84
4.3.3	Connexité du squelette filaire et distance géodésique pondérée	86
4.3.4	Finesse du squelette filaire (post-traitement)	87
4.3.5	Bilan : le squelette filaire en tant que compromis	89
4.4	Extraction des composantes élémentaires de l'espace poreux comme propriétés du squelette filaire	90
4.4.1	Partition du squelette filaire, mesures topologiques	90
4.4.2	Caractérisation géométriques des composantes élémentaires du modèle de réseau	92
4.5	Modèles de réseaux « quantitatifs » obtenus	99
4.6	Conclusions	99
	Conclusions et perspectives	107
	Bibliographie	112

Résumé

Dans ce travail, nous nous concentrons sur l'étude de la relation entre d'une part la structure sous-jacente d'un milieu poreux à l'échelle du pore et d'autre part le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse α décrivant à l'échelle macroscopique (dans le cas binaire) le devenir d'un polluant peu miscible piégé dans un aquifère saturé. Le choix d'utiliser des modèles de réseaux « réalistes » (pour mettre pratiquement à l'échelle l'information microstructurale dans les équations macroscopiques de dispersion) nous conduit à proposer une stratégie globale, basée sur l'analyse d'images quantitative, dont nous développons plusieurs aspects (modèle stochastique, squelettisation, etc.) dans le but à terme de prendre en compte les effets sur \mathbf{D}^* et α des caractéristiques structurales de milieux poreux réels.

Préambule

Ce travail s'inscrit dans une vaste démarche d'investigation des liens entre les propriétés de transport macroscopique des milieux poreux réels et leur microstructure, qui s'appuie sur une modélisation physique et des outils d'analyse d'images. L'analyse d'images, linéaire et non linéaire, occupe une place prépondérante dans cette thèse, par goût personnel pour cette branche des mathématiques et informatique appliquées, qui est allé grandissant au fur et à mesure de nos contacts avec l'École des Mines de Paris, au travers des diverses manifestations de la section française de la Société Internationale de Stéréologie.

Contexte général

Depuis 1994, le Programme National de Recherche en Hydrologie (PNRH) fédère un réseau d'équipes de recherche dans le but global d'avancer dans la compréhension de la dynamique souterraine du cycle de l'eau. Le programme désormais coordonné par Fred Delay, s'articule autour de trois thèmes formels, interdépendants

Karstogénèse qui s'intéresse aux processus hydrodynamique, chimiques (et mécaniques) contraignant la formation et l'évolution des milieux carbonatés karstiques. Les formations karstiques représentent des réserves en eau importantes mais « fragiles » dans certaines régions du globe.

Transport de polluants partiellement miscibles thème dans lequel s'inscrit cette thèse et qui vise à améliorer la description des processus physico-chimiques complexes au sein d'un aquifère contaminé.

Hydrodynamique des milieux poreux fracturés dont l'objectif est d'avancer dans la compréhension des écoulements en milieux poreux fissurés. Les échelles de description à considérer sont multiples et les phénomènes physiques mis en jeu, fortement hétérogènes.

Concernant plus spécifiquement le point 2, dans lequel s'inscrit ce travail de thèse, la pollution des aquifères par la lente dissolution de composés hydrocarbonés ou organo-chlorés est un danger qui fait de plus en plus parler de lui. Ce type de contamination est susceptible d'avoir un impact important loin de la source de pollution et longtemps après qu'elle ait disparu de la surface. La figure 1 décrit un scénario de pollution d'une nappe phréatique par un polluant partiellement miscible avec l'eau et illustre la multiplicité des phénomènes qui s'y produisent. Le polluant, déversé en surface, migre à travers la zone non saturée, notamment sous l'effet des forces de gravité. Après qu'il ait atteint la zone saturée, des globules de polluant se trouvent piégés au sein de la matrice poreuse, par exemple sous l'effet de forces capillaires. La lente dissolution de ces globules piégés, par des mécanismes de transfert et de transport, dans l'eau en écoulement, en fait une source de pollution insidieuse et à long terme, même en cas de disparition de la source de surface.

Dans ce cadre général, les équipes de recherche du PNRH allient approches théoriques et modélisation, qu'elles confrontent aux expériences, en laboratoire ou sur le terrain.

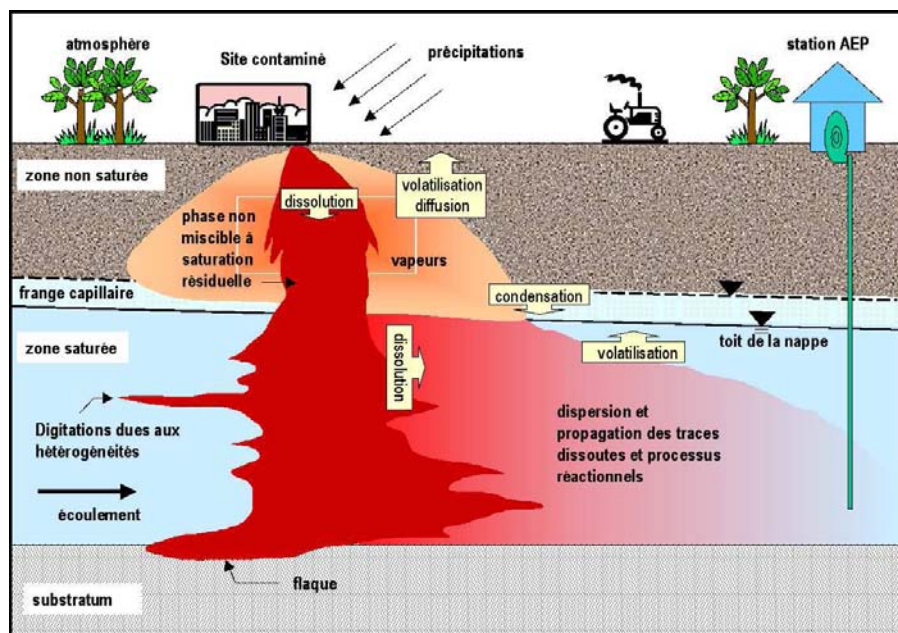


FIG. 1 – Illustration d'un scénario de contamination d'un aquifère par un polluant peu miscible dans l'eau. Image extraite de la demande de financement (acceptée) 2003 (Ingrid Pollet, Fred Delay).

Introduction

Dans le cadre de la contamination accidentelle d'un aquifère par un polluant hydrocarboné (illustrée sur la figure 2), peu miscible dans l'eau, on s'intéresse au devenir de globules de polluant piégés dans la zone non saturée. Nous ne nous pencherons pas sur leur mise en place (i.e. aux écoulements bi- et triphasiques en zone saturée et zone non saturée) mais à la description macroscopique de leur lente dissolution dans l'eau en écoulement. Ce processus, dit de dispersion active, détermine les conditions dans lesquelles l'aquifère sera contaminé au niveau de la zone d'accident et au-delà (auquel cas la dispersion est qualifiée de passive, c'est à dire sans source de polluant piégé). Nous nous plaçons dans le cas binaire : nous sommes en présence d'un polluant unique (la phase non aqueuse ou « *Non Aqueous Phase Liquid* », NAPL en abrégé) qui se dissout dans un solvant, l'eau. Dans ces conditions, des travaux antérieurs [Quintard and Whitaker, 1994a, 1999] ont montré que la description de cette lente dissolution nécessite de connaître deux coefficients macroscopiques : le tenseur de dispersion active \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse entre le NAPL et l'eau, α . La détermination de ces propriétés macroscopiques est souvent basée sur des représentations empiriques, à l'échelle du pore, de la géométrie des interfaces entre les phases en présence (NAPL, eau et matrice solide), qui conduisent à de nombreuses corrélations, sans accord général [Powers et al., 1990, Quintard and Whitaker, 1994a]. C'est cette représentation microscopique de la configuration spatiale des interfaces, que nous appellerons désormais « microstructure », qui est au centre de ce travail de thèse.

En effet dans ce contexte, notre objectif général est

1. de prédire de façon quantitative les coefficients macroscopiques de la dispersion \mathbf{D}^* et α à partir d'une représentation directe, à l'échelle du pore, de sa microstructure,
2. de se donner les moyens de mener une étude complète de la relation entre ces propriétés macroscopique et la microstructure sous-jacente du milieu poreux.

On se limitera aux milieux poreux homogènes (i.e. dont les propriétés macroscopiques ne varient pas d'un échantillon à un échantillon voisin), la prise en compte d'hétérogénéités locales étant une des perspectives de notre contribution.

Ce document de thèse est découpé en quatre chapitres.

Au chapitre 1, nous présentons l'outil mathématique nous permettant de caractériser la dispersion active : la prise de moyenne volumique locale [Quintard and Whitaker, 1993, 1994a,b,c,d,e,f, Whitaker, 1999]. Celle-ci permet, à partir d'une description à l'échelle du pore des phénomènes moteurs de la dispersion et de la microstructure du milieu, d'obtenir

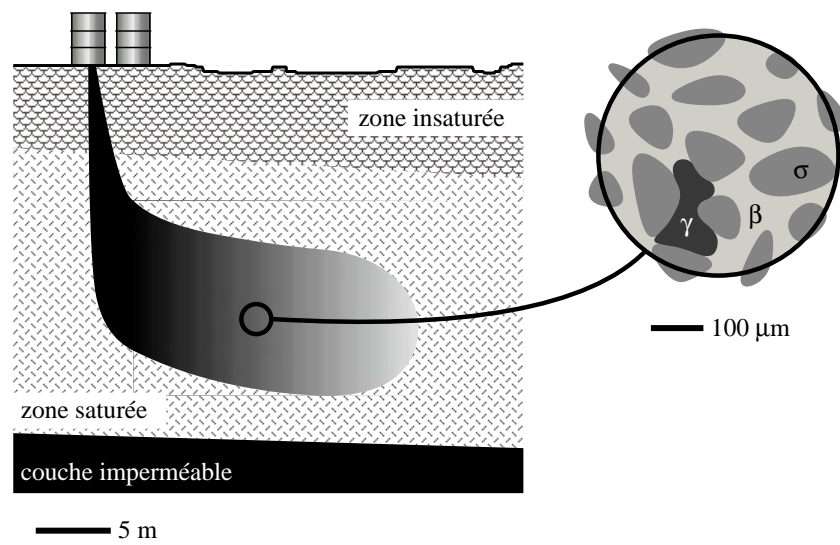


FIG. 2 – Scénario de contamination d’un aquifère. Un polluant peu miscible dans l’eau est rejeté en surface. Il migre au travers de la zone insaturée et atteint l’aquifère. Des globules de polluants (phase γ) sont immobilisés au sein de la matrice poreuse (phase σ) et se dissolvent lentement dans l’eau (phase β), générant un panache d’eau polluée. Ce mécanisme de dispersion active, observé à l’échelle macroscopique (à gauche) est caractérisé, dans le cas binaire, par un tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et un coefficient d’échange de masse α entre les globules de polluant et l’eau. On s’intéresse à la relation entre ces grandeurs macroscopiques et la microstructure du milieu poreux, représentée à droite.

- formellement, une équation macroscopique de dispersion, caractérisée en particulier par les coefficients \mathbf{D}^* et α ,
- des « problèmes de fermeture » qui permettent pratiquement d’inclure dans les coefficients macroscopiques \mathbf{D}^* et α l’influence de tous les paramètres et variables contenus dans la description microscopique du problème.

L’application de la prise de moyenne volumique à la dispersion active est ensuite illustrée au travers de résultats bibliographiques sur des cellules unitaires simples.

Ces résultats préliminaires appellent à des modèles plus réalistes de la microstructure d’un milieu poreux réel. C’est le sujet du chapitre 2 qui présente les modèles de réseaux de pores [Fatt, 1956a,b,c, Dullien, 1992, Celia and Reeves, 1995, Lowry and Miller, 1995, Bakke and Øren, 1997], mis en œuvre dans le cadre de la dispersion active. Ces modèles se placent dans le cadre général d’une simplification la microstructure de milieux poreux réels, restant réaliste du point de vue des phénomènes physiques considéré. De fait, de nombreuses approches indépendantes tendent à montrer que l’espace poreux de nombreuses classes de milieu est formé de « petits volumes » connectés par des « passages étroits » [Ehrlich et al., 1991a,b, McCreesh et al., 1991, Ferm et al., 1993, Anguy et al., 1999, 2002]. On représente donc le milieu par un réseau d’éléments géométriques simples : des pores sphériques connectés par des tubes capillaire droits. Cette représentation nécessite une formulation spécifique des problèmes de fermeture du chapitre 1 [Aigueperse, 1998, Ahmadi et al., 2001b]. Cette formulation permet une résolution semi-analytique de ces problèmes et autorise ainsi la prise en compte d’un grand nombre de pores. Des résultats préliminaires sur des modèles de réseaux purement qualitatifs illustrent la nécessité d’inclure dans ces modèles une information structurale plus complète, mesurée sur un échantillon réel.

Le chapitre 3 s’insère avant la présentation de notre méthode de mesure de l’information structurale, destinée à la construction de modèles de réseaux réalistes. Il est motivé par la démarche générale consistant à simplifier la microstructure d’un milieu poreux réel afin de mieux comprendre, à terme, la relation entre propriétés effectives de transport et microstructure sous-jacente. Ceci implique de pouvoir quantifier l’impact de telle ou telle composante structurale sur la physique et a donc motivé le développement au laboratoire d’un outil permettant de prendre en compte, ou pas, une telle composante structurale dans les modèles de réseaux. Les modèles aléatoires de milieux poreux numériques 3-D permettent de produire des milieux synthétiques (images digitales 3-D) dans lesquels l’information structurale imposée est contrôlée [Joshy, 1974, Quiblier, 1984]. Ce contrôle nécessite toutefois de s’assurer que les réalisations du modèle sont bien uniquement caractérisées par la contrainte appliquée au modèle et dans ce but, nous avons développé une stratégie basée sur la technique du recuit simulé [Metropolis et al., 1953, Kirkpatrick et al., 1983, Ingber, 1993].

Le chapitre 4 présente notre méthode, basée sur l’analyse d’images non linéaire (ou morphologie mathématique) [Matheron, 1975, Serra, 1982, 1988], nous permettant de mesurer sur une image digitale de l’espace poreux d’un milieu (réel ou issu du modèle aléatoire) l’information structurale nécessaire à la construction de modèles de réseaux quantitativement représentatifs du milieu initial. Elle s’inspire d’une idée originale de Fricout et al. [2002] pour extraire le squelette filaire de l’espace poreux, c’est à dire le graphe support du modèle de réseau. Le squelette filaire nous sert ensuite de support pour la mesure in

situ (dans l'image initiale) des caractéristiques géométriques des éléments des modèles de réseaux [Bakke and Øren, 1997, Liang et al., 2000].

Le document se termine par une conclusion générale et la présentation de quelques perspectives.

Chapitre 1

Caractérisation de la dispersion active en milieu poreux homogène

On s'intéresse ici à la prédiction des grandeurs caractérisant à l'échelle macroscopique la « lente dissolution » de globules de polluant dans l'eau, i.e. le processus macroscopique dit de dispersion active [Eidsath et al., 1983, Corapcioglu and Baehr, 1987, Corapcioglu and Panday, 1991, Mayer and Miller, 1993, Quintard and Whitaker, 1994a]. Dans le cas binaire dans lequel on se place, la dispersion active est caractérisée par le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse entre polluant piégé et eau α . L'objectif est de déterminer ces grandeurs macroscopiques à partir de la représentation à l'échelle microscopique de la distribution des interfaces entre phases en présence (solide, eau et NAPL). Dans la suite de ce document, la répartition spatiale à l'échelle microscopique de ces différentes phases sera appelée microstructure. L'objectif ultime dans lequel s'inscrit ce travail de thèse est l'étude complète et prédictive de la relation entre cette microstructure (et le champ de vitesse microscopique dans la phase aqueuse) et les grandeurs microscopiques décrivant la dispersion active.

1.1 L'outil : la prise de moyenne volumique locale

La prise de moyenne volumique locale est une technique de changement d'échelle permettant un passage de la description microscopique (échelle du pore) à un premier niveau de description macroscopique (échelle locale). Cette technique qui de notre point de vue reste un modèle de physicien bénéficie d'un formalisme mathématique rigoureux, notamment grâce aux travaux de Quintard and Whitaker [1994b,c,d,e,f]. Elle permet

- d'obtenir rigoureusement, à partir de la description microscopique (c'est à dire ici, l'échelle à laquelle s'appliquent les équations classiques de la mécanique des milieux continus) d'un problème physique donné, la forme théorique des équations gouvernant ce processus au niveau de description macroscopique (i.e. l'échelle à laquelle l'expérimentateur observe et mesure

le phénomène).

- de poser à l'échelle macroscopique et sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER), périodique, les « problèmes de fermeture » [Quintard and Whitaker, 1994d, Whitaker, 1999] qui permettent de calculer pratiquement les variables constitutives (propriétés macroscopiques d'écoulement, de transport, etc.) apparaissant dans les équations macroscopiques. Ces coefficients macroscopiques intègrent tous les effets de l'information microscopique, perdue lors du changement d'échelle, et notamment les effets de la microstructure.

Le milieu poreux considéré devant être homogène sur le volume de prise de moyenne, ce premier changement d'échelle (micro–macro) concerne dans la pratique des échantillons dont la taille (de quelques mm³ à quelques cm³) est compatible avec les mesures effectuées en laboratoire (échelle locale). La description des phénomènes aux échelles supérieures est abordée par la prise de moyenne « à grande échelle » qui permet d'intégrer, aux grandes échelles, les hétérogénéités existant à l'échelle locale [Quintard and Whitaker, 1988]. Dans ce travail, nous nous limitons au premier changement d'échelle.

1.1.1 Description à l'échelle du pore de la dissolution du polluant en zone saturée

La figure 1.1 illustre la problématique physique étudiée au niveau microscopique. Elle représente de façon schématique (en 2-D par soucis de lisibilité) un échantillon de milieu poreux. L'espace poreux est saturé par une phase aqueuse β en écoulement (de l'eau contenant du polluant dissout) et une phase non aqueuse γ (*Non Aqueous Phase Liquid* ou NAPL en abrégé) piégée (i.e. immobile). La phase solide est notée σ . Les interfaces sur tout l'échantillon entre les phases β - σ et β - γ , sont notées respectivement $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$ et $\mathcal{A}_{\beta\gamma}$. La surface de contact entre la phase β et l'extérieur de l'échantillon est notée $\mathcal{A}_{\beta e}$. Les normales (sortant de la phase β) à ces interfaces sont notées respectivement $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$, $\mathbf{n}_{\beta\gamma}$ et $\mathbf{n}_{\beta e}$.

Nous sommes en présence d'un système de deux phases fluides, une phase aqueuse β en écoulement et une piégée γ , au sein de l'espace poreux limité par la matrice solide σ . On considère que la phase fluide en écoulement contient deux espèces aqueuses : l'eau (le solvant) et la forme aqueuse du polluant, présent en très faible quantité (dissolution lente). C'est le cas binaire. On considère que la concentration en polluant dans la phase β , notée c_β reste faible, c'est le cas dit du traceur [Baehr and Corapcioglu, 1987, Miller et al., 1990]. La phase β est donc considérée ici comme incompressible [Quintard and Whitaker, 1994a]. Les phases σ et γ sont supposées parfaitement rigides. Dans ces conditions, le champ de vitesse microscopique $\mathbf{v}_\beta(\mathbf{r})$ est donné par les équations de Stokes.

L'échange entre les deux phases fluides est très simple : au contact du NAPL, la phase aqueuse se charge instantanément en polluant, à la concentration maximale soluble, notée C_{eq} [Aigueperse, 1998]. La concentration molaire c_β en polluant dans la phase β est donc régie par une équation de transport advectif et diffusif [Quintard and Whitaker, 1994a, Aigueperse, 1998]

$$\underbrace{\frac{\partial c_\beta}{\partial t}}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\nabla \cdot (c_\beta \mathbf{v}_\beta)}_{\text{advection}} = \underbrace{\nabla \cdot (D \nabla c_\beta)}_{\text{diffusion}} \quad \text{dans la phase } \beta \quad (1.1)$$

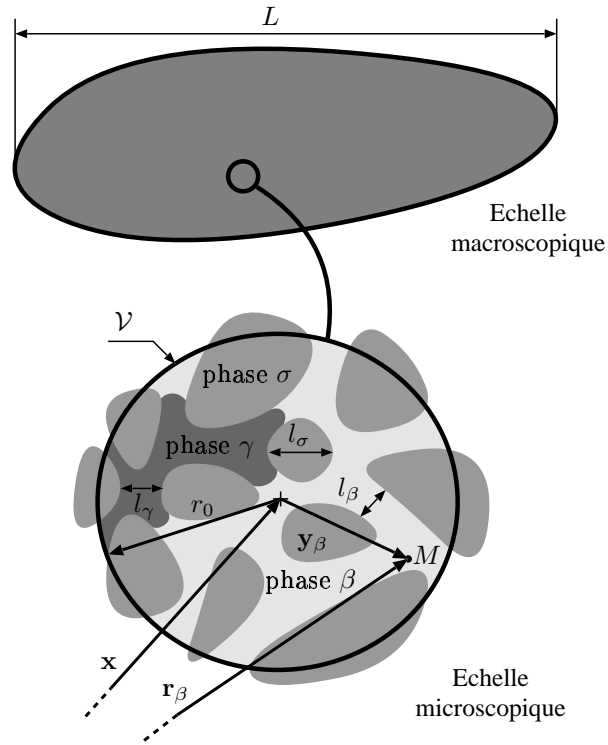


FIG. 1.1 – Illustration en 2-D des niveaux de description *microscopique* et *macroscopique* associés à la prise de moyenne volumique locale. Au sein d'un échantillon de dimension caractéristique L (échelle locale), on considère un volume \mathcal{V} , de dimension caractéristique r_0 (échelle microscopique), centré en \mathbf{x} . Les phases ont les dimensions caractéristiques l_β , l_σ et l_γ . Un point M de la phase β , par exemple, est repéré par son vecteur position \mathbf{r}_β , qui peut s'exprimer par rapport au centre du volume de prise de moyenne : $\mathbf{r}_\beta = \mathbf{x} + \mathbf{y}_\beta$. Il convient de noter la différence fondamentale entre ces vecteurs positions : \mathbf{x} est la position d'un point du continuum fictif représentant la phase β à l'échelle macroscopique, défini sur tout l'échantillon, \mathbf{r}_β repère un point dans la phase β . \mathbf{y}_β est le vecteur position microscopique, à l'intérieur du volume \mathcal{V} qui relie les deux.

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion moléculaire du polluant dans l'eau. Les conditions aux limites sont

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}\nabla c_\beta = 0 \quad \text{sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (1.2)$$

(condition de flux nul sur la surface solide, i.e. pas d'adsorption)

$$c_\beta = C_{eq} \quad \text{sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (1.3)$$

(condition de concentration imposée à l'interface avec le NAPL). Il convient d'ajouter une condition sur $\mathcal{A}_{\beta e}$ (c'est à dire sur l'extérieur de l'échantillon) de type flux imposé ou concentration imposée. Dans la pratique, cette condition est généralement inconnue [Whitaker, 1999].

Le champ de vitesse \mathbf{v}_β qui apparaît dans les équations de transport est donné de façon indépendante par les équations de Stokes

$$-\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \nabla^2 \mathbf{v}_\beta = \mathbf{0} \quad \text{dans la phase } \beta \quad (1.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \quad \text{dans la phase } \beta \quad (1.5)$$

avec la condition aux limites

$$\mathbf{v}_\beta = \mathbf{0} \quad \text{sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \text{ et } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (1.6)$$

et, de même que pour le transport, une condition généralement inconnue sur $\mathcal{A}_{\beta e}$.

Le système d'équations présenté ici et considéré tout au long de la thèse est très simple. Par exemple, dans le cas plus réaliste d'un système multicomposant (et non binaire comme ici), l'équation 1.2 (c_β constante sur $\mathcal{A}_{\beta\gamma}$) ne peut pas être valide. De même, le processus de dissolution des globules de polluant entraîne un mouvement (lent) de l'interface $\mathcal{A}_{\beta\gamma}$ et donc invalide la condition aux limites pour l'écoulement, équation 1.6. La relaxation des hypothèses simplificatrices contenues dans cette description microscopique des phénomènes constitue une perspective naturelle des travaux présentés ici. Notre objectif reste, dans le cadre d'un problème physique simplifié, de proposer une stratégie permettant de calculer les grandeurs macroscopiques décrivant la dispersion active, en prenant en compte les effets de la microstructure (au sens défini précédemment) d'un milieu.

1.1.2 Forme macroscopique des équations : la dispersion active

Le changement d'échelle par prise de moyenne volumique locale est une technique mathématique traitant explicitement les liens entre les différentes échelles (microscopique et macroscopiques) auxquelles un même phénomène physique peut être décrit. La figure 1.1 illustre les niveaux de description microscopiques et macroscopiques associés à la prise de moyenne locale. Dans un échantillon, chaque phase occupe une portion clairement définie du système. A cette échelle locale, la configuration « fine » des interfaces ($\mathcal{A}_{\beta\sigma}$, $\mathcal{A}_{\beta\gamma}$ et $\mathcal{A}_{\gamma\sigma}$) est très complexe et, en pratique, toujours connue de façon partielle, au travers d'une fenêtre d'échantillonnage de taille r_0 , petite devant la taille L du système. Il est donc impossible de résoudre les équations microscopiques (équations 1.1 à 1.6) en chaque

point mathématique du système complet [Bachmat and Bear, 1986, Bear, 1993]. D'un point de vue modèle, on préfère décrire les phénomènes au niveau macroscopique en terme de valeurs moyennes des variables microscopiques, associées à un volume élémentaire glissant (noté \mathcal{V} sur la figure 1.1) [Bachmat and Bear, 1986, Bear, 1993, Quintard and Whitaker, 1994b,c]. Au niveau de description macroscopique, le système réel, composé de trois phases distinctes, est remplacé par un milieu modèle dans lequel chaque phase est présente de façon continue sur tout le système complet. On parle alors de continua superposés [Bachmat and Bear, 1986, Bear, 1993]. En chaque point \mathbf{x} de ces continua, on forme des valeurs moyennes des variables microscopiques (définies dans chaque phase) en considérant un volume élémentaire centré en ce point. Le volume de prise de moyenne est assujéti aux contraintes spatiales de séparation des échelles

$$l_\beta, l_\sigma, l_\gamma \ll r_0 \ll L \quad (1.7)$$

Cette double inégalité est classiquement rencontrée dans la littérature et n'est pas propre à la technique de prise de moyenne volumique [Bear, 1972, Bachmat and Bear, 1986]. La longueur r_0 nous définit un volume \mathcal{V} , dit volume élémentaire représentatif, ou VER, vis-à-vis d'un processus physique considéré. Ce VER est centré en \mathbf{x} , position à laquelle les grandeurs macroscopiques prennent leurs valeurs. Les interfaces entre les phases β - γ et β - σ à l'intérieur de ce VER sont notées respectivement $A_{\beta\gamma}$ et $A_{\beta\sigma}$ dans la suite du document.

La prise de moyenne locale a ainsi pour objet

1. d'obtenir rigoureusement la forme des équations macroscopiques décrivant le phénomène considéré,
2. d'exhiber des problèmes microscopiques, dits « problèmes de fermeture » qui permettent de calculer pratiquement les coefficients d'écoulement (le tenseur de perméabilité \mathbf{K}), de transport (le tenseur de dispersion \mathbf{D}^*) ou de transfert (le coefficient d'échange de masse α) apparaissant dans les équations macroscopiques. Ils intègrent les effets de la microstructure qui n'est plus accessible à cette échelle.

L'opérateur de prise de moyenne volumique d'une quantité microscopique Ψ_β , définie dans la phase β , sur un Volume Élémentaire (VE) \mathcal{V} centré en \mathbf{x} peut s'écrire sous la forme [Whitaker, 1986, Quintard and Whitaker, 1994a,b]

$$\langle \Psi_\beta \rangle (\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \Psi_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\beta) d\mathcal{V}(\mathbf{y}_\beta) \quad (1.8)$$

On appelle $\langle \Psi_\beta \rangle$ *moyenne superficielle* de la quantité Ψ_β . Par exemple, considérons la fonction indicatrice de la phase β , définie par

$$\chi_\beta(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \text{ est dans la phase } \beta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.9)$$

Sa moyenne superficielle nous donne la fraction volumique de la phase β au point \mathbf{x} , soit en notation simplifiée

$$\langle \chi_\beta \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \chi_\beta d\mathcal{V} = \varepsilon_\beta \quad (1.10)$$

La moyenne superficielle est compatible, par exemple avec le concept de vitesse moyenne de filtration ou vitesse de Darcy. En revanche elle ne rend pas

bien compte de la mesure qui pourrait être faite avec, par exemple, un capteur de pression. Si on imagine que la phase β est à la pression p_0 , la moyenne superficielle de la pression vaut $\langle p_\beta \rangle = \varepsilon_\beta p_0$. On définit donc la *moyenne intrinsèque de phase* [Quintard and Whitaker, 1994a, Whitaker, 1999]

$$\langle \Psi_\beta \rangle^\beta (\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \Psi_\beta (\mathbf{x} + \mathbf{y}_\beta) d\mathcal{V}(\mathbf{y}_\beta) \quad (1.11)$$

Les deux moyennes sont simplement liées par la porosité ε_β

$$\langle \Psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle \Psi_\beta \rangle^\beta \quad (1.12)$$

Nous ne développerons pas ici le détail de la prise de moyenne volumique des équations microscopiques de transport. On trouvera toute l'information notamment dans Quintard and Whitaker [1994a]. Nous ne présentons ici que les principales étapes et les résultats importants.

Application de l'opérateur de prise de moyenne

On montre que l'application de l'opérateur de moyenne volumique (équation 1.8) sur le système microscopique décrivant le transport (équations 1.1 à 1.3) conduit à l'équation suivante [Quintard and Whitaker, 1994a]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_\beta \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta c_\beta \rangle = \\ \nabla \cdot \left[\mathcal{D} \left(\nabla \langle c_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} c_\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} c_\beta dA \right) \right] \\ + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D} \nabla c_\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D} \nabla c_\beta dA \end{aligned} \quad (1.13)$$

Notre objectif est d'obtenir la forme de l'équation macroscopique gouvernant l'évolution de la concentration moyenne $\langle c_\beta \rangle^\beta$ à l'échelle macroscopique. Il est nécessaire d'éliminer la concentration microscopique c_β et la vitesse microscopique \mathbf{v}_β toujours présentes dans l'équation 1.13. Le principe est d'utiliser la décomposition spatiale de Gray [1975] qui consiste à exprimer les quantités microscopiques (c_β et \mathbf{v}_β) en une quantité macroscopique ($\langle c_\beta \rangle^\beta$ et $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$) et une déviation spatiale microscopique (\tilde{c}_β et $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$). De manière générale, la déviation (ou fluctuation) représente la différence entre des quantités observées à des échelles différentes.

$$\mathbf{v}_\beta = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \quad (1.14)$$

$$c_\beta = \langle c_\beta \rangle^\beta + \tilde{c}_\beta \quad (1.15)$$

En se livrant à une série de simplifications basées sur les contraintes spatiales associées au concept de séparation des échelles (équation 1.7), l'équation 1.13

s'écrit [Quintard and Whitaker, 1994a]

$$\begin{aligned}
\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle c_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta + \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{c}_\beta \rangle = & \quad (1.16) \\
- \nabla \cdot \left[\mathcal{D} \left(\varepsilon_\beta \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \tilde{c}_\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_\beta dA \right) \right] \\
- \nabla \varepsilon_\beta \cdot \mathcal{D} \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D} \nabla \tilde{c}_\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D} \nabla \tilde{c}_\beta dA
\end{aligned}$$

La fermeture

Cette équation n'est toutefois pas encore macroscopique, puisqu'elle contient notamment la fluctuation microscopique \tilde{c}_β . L'idée est alors d'exprimer les fluctuations microscopiques en fonction des grandeurs macroscopiques. Connaissant la loi de comportement des variables microscopiques (1.1) et l'équation 1.16 sur les variables macroscopiques, par soustraction on obtient le problème aux limites régissant les fluctuations microscopiques. L'établissement rigoureux de ce problème aux limites permet d'identifier les termes sources générateurs du champ \tilde{c}_β . Ces sources suggèrent la forme suivante pour la perturbation \tilde{c}_β [Quintard and Whitaker, 1994a]

$$\tilde{c}_\beta = \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta - s_\beta \left(\langle c_\beta \rangle^\beta - C_{eq} \right) \quad (1.17)$$

où \mathbf{b}_β et s_β sont appelées *variables de fermeture*.

Les variables de fermeture

En suivant l'argumentation de Quintard and Whitaker [1993, 1994a, 1999], de Chella et al. [1998] et en s'appuyant sur la séparation des échelles (équation 1.7), on montre alors que les variables de fermeture \mathbf{b}_β et s_β sont solution des *problèmes de fermeture*, définis sur le VER et donnés ci dessous. À la manière de Quintard and Whitaker [1994d], on pose tout d'abord

$$\mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_0 + \psi^{\mathbf{b}} \mathbf{u}_\beta \quad (1.18)$$

$$s_\beta = 1 + \alpha \psi^s \quad (1.19)$$

définitions dans lesquelles on a [Quintard and Whitaker, 1994d, Aigueperse, 1998]

$$\mathbf{u}_\beta = - \frac{\langle \mathbf{d}_\beta \rangle}{\langle \psi^{\mathbf{b}} \rangle} \quad (1.20)$$

et

$$\alpha_\beta = - \frac{\varepsilon_\beta}{\langle \psi^s \rangle} \quad (1.21)$$

Les variable de fermeture \mathbf{b}_0 , $\psi^{\mathbf{b}}$ et ψ^s sont solution des problèmes de fermeture suivants

Problème Ia

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_0 + \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \mathbf{b}_0) \quad (1.22)$$

avec les conditions aux limites

$$\mathbf{b}_0 = \mathbf{0} \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (1.23)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_0 = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (1.24)$$

et la condition de périodicité

$$\mathbf{b}_0(\mathbf{r} + \ell_i \mathbf{e}_i) = \mathbf{b}_0(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (1.25)$$

Problème Ib

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \psi^{\mathbf{b}} = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \psi^{\mathbf{b}}) - \frac{1}{\varepsilon_\beta} \quad (1.26)$$

avec les conditions aux limites

$$\psi^{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (1.27)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \psi^{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (1.28)$$

la périodicité

$$\psi^{\mathbf{b}}(\mathbf{r} + \ell_i \mathbf{e}_i) = \psi^{\mathbf{b}}(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (1.29)$$

Problème II

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \psi^s = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \psi^s) - \frac{1}{\varepsilon_\beta} \quad (1.30)$$

avec les conditions aux limites

$$\psi^s = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (1.31)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \psi^s = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (1.32)$$

la périodicité

$$\psi^s(\mathbf{r} + \ell_i \mathbf{e}_i) = \psi^s(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (1.33)$$

Dans ces problèmes, ℓ_i représente la taille de la cellule unitaire dans la direction i et \mathbf{e}_i le vecteur unitaire de la base cartésienne dans cette direction.

Fermeture effective de l'équation macroscopique

Injectée dans l'équation macroscopique précédemment obtenue (équation 1.16), l'expression de la fluctuations (équation 1.17) nous donne l'équation macroscopique fermée recherchée

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta \frac{\partial \langle c_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \cdot \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta &= \nabla \cdot (\mathbf{D}_\beta^* \cdot \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta) \\ &\quad - \alpha_\beta \left(\langle c_\beta \rangle^\beta - C_{eq} \right) \\ &\quad - \nabla \cdot \left(\mathbf{d}_\beta \left(\langle c_\beta \rangle^\beta - C_{eq} \right) \right) \\ &\quad - \mathbf{u}_\beta^* \cdot \nabla \langle c_\beta \rangle^\beta \end{aligned} \quad (1.34)$$

Dans cette équation, le tenseur de dispersion macroscopique s'écrit

$$\mathbf{D}_\beta^* = \mathcal{D} \left(\varepsilon_\beta \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{b}_\beta d\mathcal{A} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta d\mathcal{A} \right) - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \quad (1.35)$$

le coefficient d'échange de masse entre les phases β et γ s'écrit

$$\alpha = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D}\nabla s_{\beta} d\mathcal{A} \quad (1.36)$$

le terme de vitesse \mathbf{u}_{β}^* s'écrit

$$\mathbf{u}_{\beta}^* = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D}\nabla \mathbf{b}_{\beta} d\mathcal{A} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}\nabla \mathbf{b}_{\beta} d\mathcal{A} \quad (1.37)$$

et enfin le terme de vitesse additionnel \mathbf{d}_{β} s'écrit

$$\mathbf{d}_{\beta} = \mathcal{D} \left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} s_{\beta} d\mathcal{A} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_{\beta} d\mathcal{A} \right) - \langle \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} s_{\beta} \rangle \quad (1.38)$$

Cette équation régissant le champ macroscopique (c'est à dire mesurable) de concentration en polluant dans la phase aqueuse découle rigoureusement de la description microscopique de mécanismes physiques classiques, clairement identifiés. Elle comporte des termes non classiques, contrôlés par les coefficients macroscopiques \mathbf{d}_{β} et \mathbf{u}_{β}^* , qui n'apparaissent que dans le cas actif [Quintard and Whitaker, 1994a].

La forme des problèmes aux limites que vérifient les champs de fermeture \mathbf{b}_0 , ψ^b et ψ^s (équations 1.22 à 1.33), dont la détermination fournit finalement le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* (equation 1.35) et le coefficient d'échange de masse α (equation 1.36) démontre que ces coefficients macroscopiques incluent les effets de la totalité des variables et paramètres contenus dans la description microscopique. Notamment, les effets de la microstructure sont pris en compte via les conditions aux limites apparaissant dans les problèmes de fermeture. La prise de moyenne volumique locale fournit donc une approche rigoureuse dans laquelle \mathbf{D}^* et α sont calculés comme des fonctions implicites de la microstructure incluse dans une cellule unitaire représentative du milieu poreux homogène étudié. L'objet des chapitres 3 et 4 est de construire des cellules unitaires incluant les caractéristiques structurales de milieux poreux réels.

1.2 Résultats bibliographiques : tenseur de dispersion et coefficient d'échange de masse de milieux poreux ordonnés

Les problèmes de fermeture (équations 1.22 à 1.33) ont été résolus sur des cellules unitaires (périodiques) discrètes (de N^2 *pixels* ou N^3 *voxels*) de milieux poreux simples, dit ordonnés [Quintard and Whitaker, 1994a, Ahmadi et al., 2001a], illustrées sur la figure 1.2. Le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse entre phase aqueuse et non aqueuse (NAPL) étant obtenus à partir des solutions de ces problèmes, ils intègrent à ce titre (1) les effets de l'information structurale (répartition des interfaces microscopiques entre phases en présence) incluse dans la cellule unitaire et (2) les effets du champ de vitesse microscopique \mathbf{v}_{β} (obtenu indépendamment).

Les coefficients macroscopiques \mathbf{D}^* et α sont classiquement présentés en fonction du nombre de Péclet Pe qui compare les effets advectifs aux effets

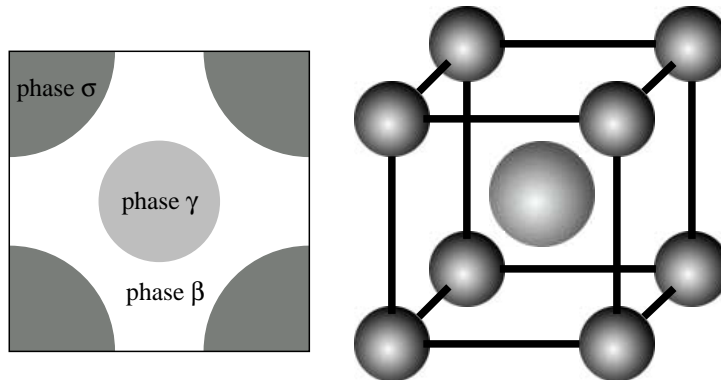


FIG. 1.2 – Exemples de cellules discrètes périodique simples sur lesquelles sont résolus les problèmes de fermeture, notamment par Quintard and Whitaker [1994a] et Ahmadi et al. [2001a].

diffusifs et dont l'expression est

$$Pe = \frac{\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\| l_C}{\mathcal{D}} \quad (1.39)$$

où l_C est ici la taille caractéristique de la cellule unitaire. Les coefficients sont aussi généralement présentés sous forme adimensionnelle, afin de permettre les comparaisons avec des systèmes binaires différents (i.e. des diffusivités moléculaires différentes).

Les figures 1.3, 1.4 et 1.5, extraites de Ahmadi et al. [2001a], montrent les résultats obtenus pour des cellules de la figure 1.2, pour différentes valeurs de saturation en NAPL (ε_γ). L'écoulement macroscopique est ici dirigé selon l'axe x .

Ces courbes présentent des comportements classiquement observés [Gunn and Pryce, 1969, Powers et al., 1992]. À faible Péclet, les effets diffusifs sont prédominants. Les composantes longitudinales et transversales du coefficient de dispersion \mathbf{D}^* , (c'est à dire les composantes mesurant la dispersion de NAPL, respectivement, dans la direction de l'écoulement, et dans une direction perpendiculaire), sont toutes deux sensiblement égales à la diffusivité effective dans le milieu. A fort nombre de Péclet, les effets de l'advection (c'est à dire du transport hydrodynamique) se font sentir, le tenseur de dispersion présente une dépendance à la vitesse moyenne dans la cellule. La dispersion est plus importante dans la direction de l'écoulement (figure 1.3) que dans une direction perpendiculaire (figure 1.4) [Fried and Combarous, 1971, Dullien, 1992]. Le coefficient d'échange de masse présente lui aussi ces deux régimes : à faible Péclet, l'échange est principalement diffusif ; à fort Péclet, les effets du transport advectif se font sentir.

Néanmoins, ces résultats montrent clairement la très forte influence de la microstructure sur les coefficients macroscopiques \mathbf{D}^* et α : la saturation en NAPL ε_γ a un impact important sur leurs valeurs. L'influence de ε_γ sur \mathbf{D}^* et α ne peut manifestement pas être décrite par des corrélations simples.

Plusieurs auteurs [Amaral Souto and Moyne, 1997, Ahmadi et al., 2001a] suggèrent que l'utilisation de cellules unitaires incluant une information mi-

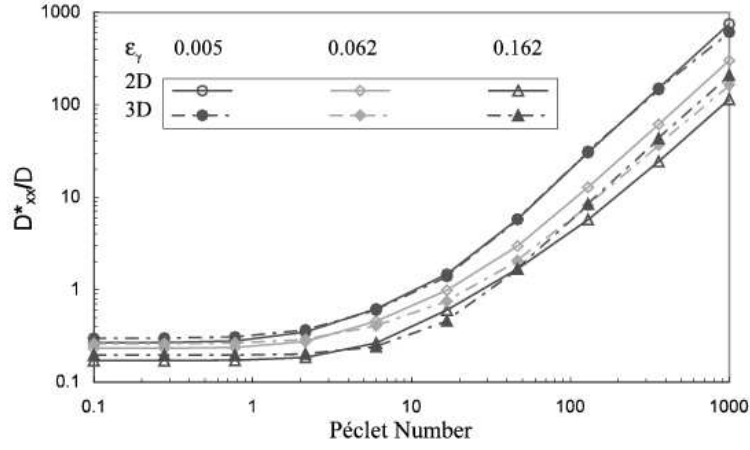


FIG. 1.3 – Composante longitudinale du coefficient de dispersion adimensionné $\frac{D_{xx}^*}{D}$, en fonction du nombre de Péclet Pe , obtenue sur des cellules unitaires 2-D et 3-D illustrées sur la figure 1.2 (extrait de Ahmadi et al. [2001a]).

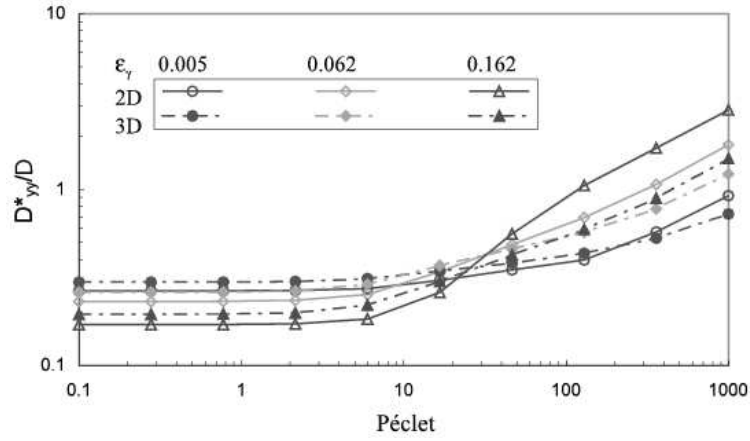


FIG. 1.4 – Composante transverse du coefficient de dispersion adimensionné $\frac{D_{yy}^*}{D}$, en fonction du nombre de Péclet Pe , obtenue sur des cellules unitaires 2-D et 3-D illustrées sur la figure 1.2 (extrait de Ahmadi et al. [2001a]).

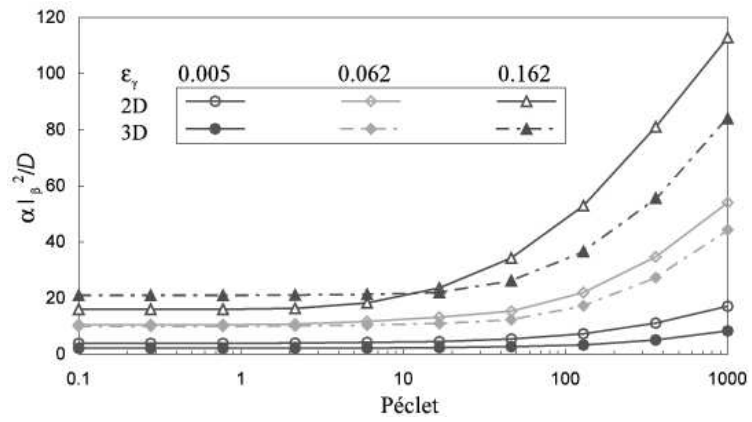


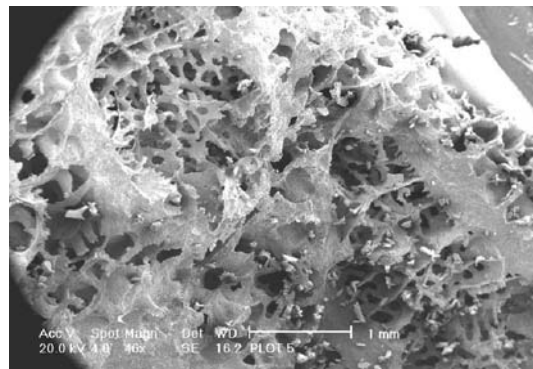
FIG. 1.5 – Coefficient d'échange de masse entre phases adimensionné $\frac{\alpha l_\beta^2}{D}$, en fonction du nombre de Péclet Pe , obtenue sur des cellules unitaires 2-D et 3-D illustrées sur la figure 1.2 (extrait de Ahmadi et al. [2001a]).

crostructurale plus complexe tend à « lisser » cette dépendance de \mathbf{D}^* et α aux détails de la microstructure. Nous verrons au chapitre 2 si cette tendance se confirme avec le modèle microstructural plus complexe adopté dans cette thèse.

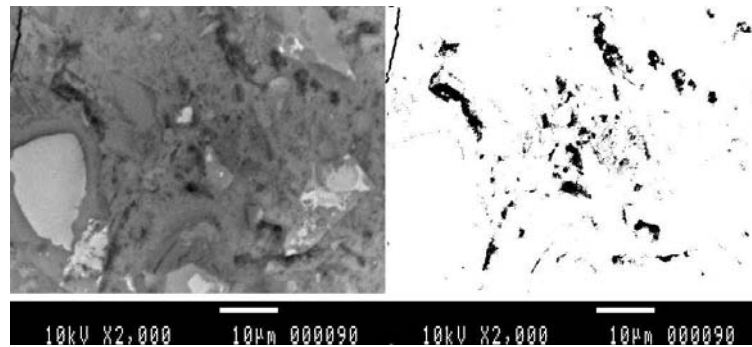
Chapitre 2

Application des modèles de réseaux à l'étude de la dispersion active

Dans le chapitre 1, nous avons vu que la prise de moyenne volumique locale permet de calculer rigoureusement les grandeurs macroscopiques associées à la dispersion active (\mathbf{D}^* et α) en incluant les effets de l'ensemble des caractéristiques microstructurales (i.e. la répartition spatiale des frontières entre phases en présence) incluses sans une cellule unitaire représentative du milieu poreux homogène considéré. Les illustrations, tirées de la littérature, sur des cellules unitaires pourtant très simples montrent cependant la complexité du lien entre les propriétés effectives de dispersion et la microstructure sous-jacente. Plusieurs auteurs [Amaral Souto and Moyne, 1997, Ahmadi et al., 2001a] se sont attachés à considérer des cellules unitaires « plus réalistes », prenant en compte un plus grand nombre de pores. L'idée est de vérifier si les tendances tirées de cellules unitaires simples (ordonnées) se maintiennent avec des cellules plus complexes (désordonnées). En effet, la figure 2.1 illustre bien que les cellules simples utilisées dans la section 1.2 sont peu représentatives de milieux poreux réels. Elles n'en ont pas l'aspect « désordonné » et ne prennent en compte qu'un pore. Néanmoins, l'étude complète et prédictive de la relation entre \mathbf{D}^* (ou α) et la microstructure d'un milieu réel ne peut a priori se mener sur la base d'une description structurale aussi complète et fine que celle illustrée par la figure 2.1. En effet, dans ce contexte, comment interpréter l'influence de millions de voxels fluides ou solides sur \mathbf{D}^* et α ? D'un point de vue technique, il est de plus entendu que la résolution numérique (par volumes finis ou éléments finis) des problèmes de fermeture présentés dans la section 1.1.2 devient en soi une difficulté étant donné les coûts informatiques (mémoire et processeur) nécessaires. Dans cette thèse, nous nous proposons de simplifier la microstructure des milieux poreux réels afin de faciliter l'étude de la relation entre \mathbf{D}^* (ou α) et cette microstructure. Nous avons ainsi choisi de représenter l'espace poreux sous la forme de modèles de réseaux de pores. Ce choix est motivé par le fait que de nombreuses approches indépendantes sous-tendent qu'à l'échelle microscopique, l'espace poreux de nombreuses classes de milieux est formé de petits volumes ou « pores », connectés par des « étranglements » [Ehrlich et al., 1991a,b, Mc-



(a)



(b)

FIG. 2.1 – Illustration de la complexité de la microstructure de milieux poreux réels. En (a) un échantillon de calcaire corallien. En (b) une image en niveau de gris d'une pâte de ciment à gauche, binarisée de façon ad hoc à droite.

Creesh et al., 1991, Anguy et al., 1999, 2002]. Il est donc classique de représenter l'espace poreux par un modèle de réseau [Fatt, 1956a,b,c], i.e. un graphe de sites volumiques 3-D (ou « pores ») connectés par des liens (ou « étranglements ») géométriquement plus simples que le milieu d'origine [Jerauld and Salter, 1990, Dullien, 1992, Lowry and Miller, 1995, Celia and Reeves, 1995]. La figure 2.2 illustre de façon qualitative le concept de réseau. Les informations importantes (vis-à-vis des processus physiques qui nous intéressent) portée par un modèle de réseau sont les règles contrôlant l'affectation de rayons d'accès (les rayons des capillaires sur la figure 2.2) aux pores adjacents; en d'autres termes, les règles contrôlant le transport et l'écoulement, comme le suggèrent de nombreux travaux [Etris et al., 1988, Ehrlich et al., 1991a,b, McCreesh et al., 1991, Ferm et al., 1993]. Sur l'illustration de la figure 2.2, ces règles sont ad hoc (arbitraires), la mesure de ces règles sur un échantillon réel observé est traitée au chapitre 4. De ce point de vue, l'intérêt du modèle de réseau de la figure 2.2 est de prendre en compte un grand nombre de pores.

L'objectif de ce chapitre est donc simplement d'illustrer la notion de réseau de pores, dont l'utilisation va nous amener à aménager le formalisme de la prise de moyenne volumique et de vérifier si les tendances observées dans la section 1.2 se maintiennent lorsqu'on considère des cellules désordonnées comprenant un grand nombre de pores. Concernant l'aménagement de la prise de moyenne volumique, nous allons voir que la géométrie simplifiée de ces éléments constitutifs autorise une résolution semi-analytique des équations, qui allège les calculs (et permet donc de prendre en compte un plus grand nombre de pores).

2.1 Mise à l'échelle de l'information microstructurale incluse dans un modèle de réseau

La mise à l'échelle dans les équations macroscopiques de dispersion de l'information microstructurale incluse dans un modèle de réseau du type illustré sur la figure 2.2 nécessite de formuler de façon spécifique le modèle de la prise de moyenne volumique présenté dans la section 1.1. Cette formulation spécifique est basée sur les travaux de Aigueperse [1998] et Ahmadi et al. [2001b]. Notre apport a été de généraliser les outils existants (limités aux cas de réseaux cubiques réguliers) aux réseaux plus généraux (dits irréguliers) tels qu'illustrés sur la figure 2.2. Cette généralisation implique de développer des solutions adéquates pour prendre en compte l'orientation quelconque des étranglements et la périodicité du réseau dans les trois directions de l'espace.

2.1.1 L'écoulement dans un modèle de réseau

De façon cohérente avec la simplification de la géométrie, nous allons poser un certain nombre de d'hypothèses simplificatrices sur les phénomènes physiques se déroulant dans le réseau. Ces simplifications, justifiées par des validations numériques [Koplik, 1982] permettent de traiter l'écoulement dans le réseau de façon analogue à la circulation d'un courant électrique dans un réseau de résistances [Dullien, 1992, Celia and Reeves, 1995, Ahmadi et al., 2001b], la pression étant assimilée au potentiel et la vitesse à l'intensité.

On considère un écoulement de Poiseuille dans les capillaires et une pression constante dans les pores (ceci revient à y négliger l'écoulement) [Ahmadi et al.,

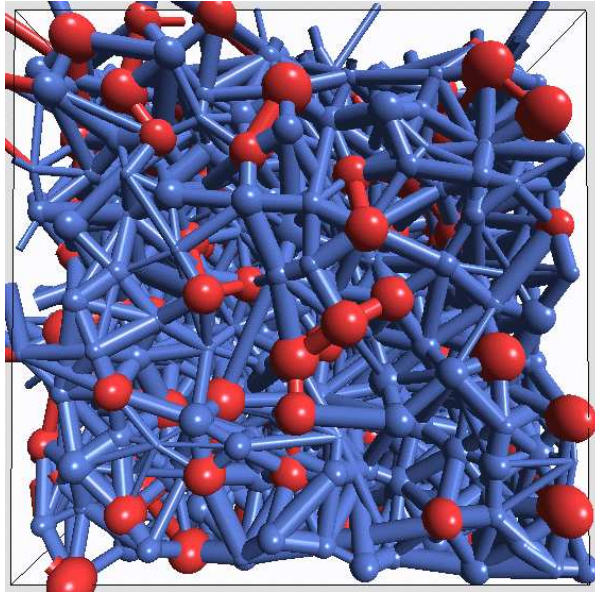


FIG. 2.2 – Illustration du concept de modèle de réseau. Le réseau présenté ici est constitué de « pores » sphériques connectés par des « étranglements » représentés sous la forme de capillaires droits. Les éléments du réseau en rouge contiennent du NAPL piégé après simulation d'un cycle de drainage-imbibition sur le réseau. Ce modèle de réseau est purement qualitatif, il est basé sur des distributions de tailles de pores et d'étranglements, tirées d'expériences de drainage-imbibition au mercure. Les distributions des tailles de pores et d'étranglements déduites selon cette stratégie sont en effet qualitatives puisque basées sur des modèles géométriques globaux non réalistes topologiquement. De plus, les corrélations entre taille de pores et taille d'étranglements imposées ici sont totalement arbitraires. Ceci étant dit, l'avantage d'un tel réseau est qu'il permet de prendre en compte un plus grand nombre de pores pour le calcul des propriétés effectives de transport [Quintard and Whitaker, 1994a, Ahmadi et al., 2001b]. L'objet des chapitres 3 et 4 est justement de proposer une approche plus quantitative, basée sur l'analyse d'images, pour la construction de modèles de réseaux.

2001b]. La vitesse moyenne v_{ij} dans un capillaire reliant les pores i et j est donnée par [Aigueperse, 1998, Ahmadi et al., 2001b]

$$v_{ij} = -\frac{r_{ij}^2}{8\mu} \left(\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{e}_{ij} + \frac{\tilde{p}_j - \tilde{p}_i}{l_{ij}} \right) \quad (2.1)$$

où r_{ij} est le rayon du capillaire et \mathbf{e}_{ij} le vecteur unitaire donnant son orientation. Le gradient de pression est décomposé ici en sa composante macroscopique projetée selon l'axe du tube ($\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{e}_{ij}$), qui est une donnée du problème, et sa déviation microscopique ($\frac{\tilde{p}_j - \tilde{p}_i}{l_{ij}}$) dans laquelle \tilde{p}_k est la fluctuation de pression dans le pore k et l_{ij} est la longueur du capillaire. Un bilan de masse dans chaque pore nous donne une « loi des noeuds » qui nous permet d'écrire pour chaque pore i [Aigueperse, 1998, Ahmadi et al., 2001b]

$$\sum_k r_{ik}^4 \left(\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \frac{\tilde{p}_k - \tilde{p}_i}{l_{ik}} \right) = 0 \quad (2.2)$$

où la sommation est menée pour chaque pore k connecté au pore i .

L'ensemble des équations 2.2 (une pour chaque pore) forme un système linéaire. Le réseau de pores étant périodique (afin de pouvoir y résoudre les problèmes de fermeture), le système linéaire ainsi construit est singulier. On utilise la condition classique [Whitaker, 1986]

$$\langle \tilde{p}_\beta \rangle^\beta = 0 \quad (2.3)$$

pour en déduire l'équation supplémentaire

$$\sum_i \mathcal{V}_i \tilde{p}_i = 0 \quad (2.4)$$

où \mathcal{V}_i est le volume d'un pore. La sommation porte sur tous les pores i du réseau. Ce système est résolu par la méthode du gradient biconjugué [Saad, 2000]. Il nous fournit la déviation de pression dans chaque pore, à partir de laquelle on calcule les vitesses moyennes dans chaque lien (equation 2.1). Le champ de vitesse microscopique dans la cellule nous permet de calculer le tenseur de perméabilité \mathbf{K} [Whitaker, 1986].

2.1.2 Le piégeage de NAPL dans un modèle de réseau

Les interfaces entre NAPL (γ) et phase aqueuse (β) font partie intégrante de l'information microstructurale mise à l'échelle dans les coefficients macroscopiques de dispersion. À ce titre, la mise en place réaliste de ces interfaces est une étape importante de notre démarche.

Le déplacement de fluides peu ou pas miscibles en milieu poreux est un problème encore théoriquement non résolu à l'heure actuelle [Blunt and King, 1991, Øren and Pinczewski, 1995, Lowry and Miller, 1995], principalement parce qu'on ne comprend pas encore parfaitement la nature du contact entre deux fluides non miscibles en mouvement [Blunt and King, 1991]. Les modèles actuels font donc appel à des lois microscopiques empiriques, basées sur l'identification des mécanismes élémentaires de déplacement des interfaces, grâce à des expériences sur des micro-modèles [Chatzis et al., 1983, Dawe et al., 1987, Touboul et al.,

1987, Mohanty et al., 1987, Lenormand and Zarccone, 1988]. Ces mécanismes sont ensuite simulés sur des modèles de microstructures tels que les modèles de réseaux [Jerauld and Salter, 1990, Blunt and King, 1991, Ferrand and Celia, 1992, Lowry and Miller, 1995, Øren and Pinczewski, 1995].

Lors d'un écoulement diphasique suffisamment lent, les effets capillaires (i.e. les effets des forces interfaciales) jouent un rôle prédominant [Dawe et al., 1987]. En effet, l'existence dans un tube de rayon r_{ij} d'une interface (ou ménisque) au repos est conditionnée par la relation de Young-Laplace [Greenkorn, 1983, Dullien, 1992]

$$p^c = \frac{2\sigma_{\beta\gamma} \cos \theta}{r_{ij}} \quad (2.5)$$

dans laquelle p^c est la pression capillaire, c'est à dire la différence de pression entre le NAPL et la phase aqueuse, $\sigma_{\beta\gamma}$ est la tension interfaciale, θ l'angle de contact entre l'interface et la surface solide et r_{ij} le rayon du tube. Lorsque ce critère n'est plus vérifié, c'est à dire si la la pression capillaire est modifiée par les conditions d'écoulement loin de l'interface, le ménisque est en mouvement rapide, appelés sauts de Haines [Haines, 1930] vers une autre position d'équilibre où l'équation 2.5 est vérifiée. Ces mouvements sont illustrés sur la figure 2.3 lorsque le NAPL chasse l'eau (phénomène de drainage) et lorsque l'eau chasse le NAPL (phénomène d'imbibition).

L'hypothèse généralement admise dans le cas d'un écoulement eau-NAPL est que la matrice solide est préférentiellement mouillable à l'eau (i.e. elle possède une affinité plus grande pour l'eau que pour le NAPL). L'angle de contact θ est donc classiquement fixé à zéro [Jerauld and Salter, 1990, Blunt and King, 1991, Ferrand and Celia, 1992] et l'existence d'un film d'eau couvrant toute la surface solide est supposée [Mohanty et al., 1987, Lowry and Miller, 1995]. Ce film, qui assure à tout moment la continuité de la phase aqueuse, conduit, sous l'effet des forces capillaires, à des mécanismes de rupture d'interfaces, dit « snapp-off » ou au contraire de coalescence, illustrés sur la figure 2.3.

Le phénomène de piégeage (isolation de globules de polluants par rupture des interfaces et immobilisation sous l'effet des forces capillaires) découle de cycle de drainages-imbitions que subit le milieu poreux. Les déplacements d'interfaces sont initiés par l'écoulement imposé mais se déroulent sous le contrôle de la capillarité et de la géométrie [Mohanty et al., 1987]. Ainsi, la seule simulation des mécanismes « élémentaires » présentés précédemment au sein d'un modèle de réseau de pores conduit à des configurations spatiales de NAPL piégé comparables à des résultats expérimentaux sur des milieux simples [Lowry and Miller, 1995, Mayer and Miller, 1993]. Dans ce type de modèle, l'écoulement n'est pas résolu et la pression capillaire est un simple paramètre contrôlant l'invasion du réseau de pores par l'une ou l'autre des phases.

Nous simulons donc les processus de drainage et d'imbibition dans les modèles de réseaux de la manière proposée par Lowry and Miller [1995] et illustrée sur la figure 2.4.

La réseau est supposé initialement saturé en phase aqueuse (phase β). La périodicité du réseau de pores (nécessaire pour la résolution des problèmes de fermeture) est ignorée pour deux faces opposées, qui sont considérées comme les faces d'entrée et de sortie des fluides. A partir de la face d'entrée, l'étranglement accessible ayant le plus grand rayon nous fournit la valeur de la pression capillaire au début du drainage (par le biais de l'équation 2.5). Cet étranglement

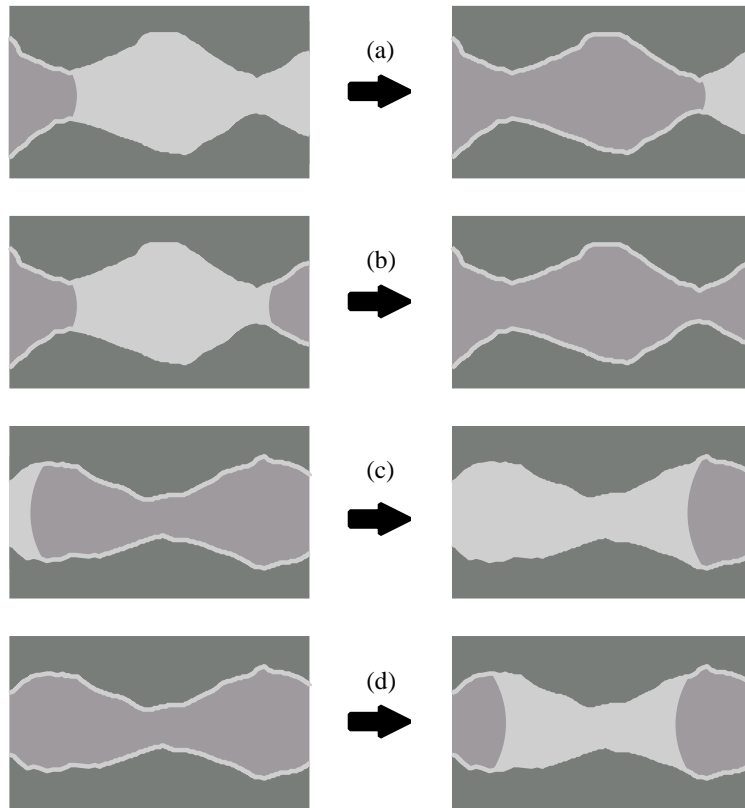


FIG. 2.3 – Illustration des mécanismes d'imbibition et de drainage (d'après Lowry and Miller [1995]). En (a) et (b) lors d'un drainage, en (c) et (d) lors d'une imbibition. En (a) et (c) déplacement de type piston, en (b) et (d) déplacement par film. La phase mouillante est en gris clair, la phase non mouillante en gris moyen et la phase solide en gris foncé. Lorsque la phase non mouillante chasse la phase mouillante (drainage) la pression capillaire augmente. (a) Le NAPL envahit d'abord les pores les plus gros, les interfaces « sautent » vers les étranglements plus étroits. (b) Lorsque deux ménisques se rencontrent, l'eau a la possibilité de s'écouler dans les films qui tapissent la surface solide, c'est la coalescence. (c) Lors de l'imbibition, la pression capillaire diminue et la phase aqueuse a tendance à envahir d'abord les pores les plus étroits. (d) Au niveau des étranglements les plus étroits, du fait de la présence du film d'eau, l'interface devient instable et se rompt en deux ménisques.

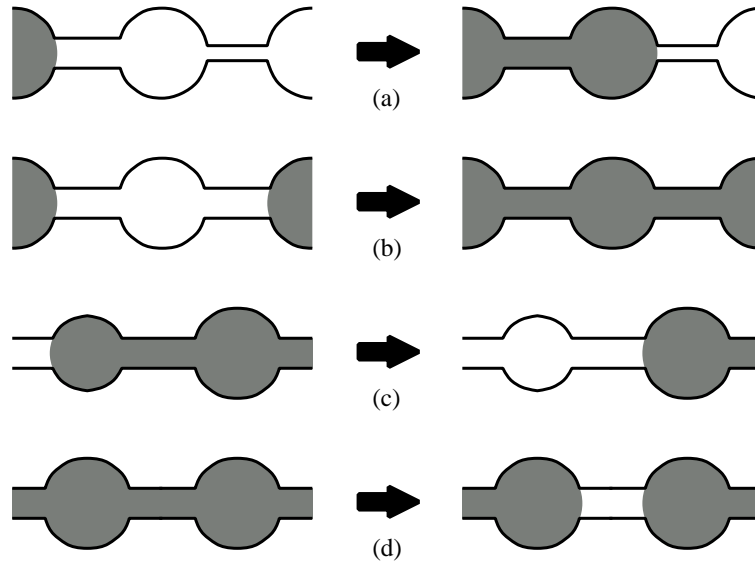


FIG. 2.4 – Illustration des mécanismes de drainage et imbibition simulés dans un le réseau de pores. Cette figure est le pendant de la figure 2.3.

est envahi, ainsi que tout élément auquel il est connecté dont le rayon autorise le passage d'un ménisque, toujours selon l'équation de Young-Laplace (equation 2.5). A partir de cette zone envahie, on itère le processus, en remplissant successivement les plus gros éléments du réseau accessibles, en mettant à jour la pression capillaire à chaque itération.

Le processus d'imbibition suit exactement le même schéma, à ceci près que

1. la phase aqueuse (β) envahit préférentiellement les pores et étranglements les plus petits,
2. on tente d'envahir tous les étranglements du réseau, même ceux qui ne sont pas directement connecté à la phase β , afin de prendre en compte l'écoulement par film,
3. on contrôle à chaque étape la continuité du NAPL (phase γ). Les zones déconnectées d'une face de sortie sont considérées comme piégées et ne peuvent plus être délogées.

Le résultat d'une telle simulation est illustré sur la figure 2.2.

2.1.3 Le transport dans un modèle de réseau

La détermination des propriétés effectives de dispersion qui nous intéressent, D_{β}^* et α_{β} nécessite la résolution des problèmes de fermeture Ia, Ib et II sur le réseau. Comme pour l'écoulement, des hypothèses qui seront faites sur les variables de fermeture confèrent à cette résolution un formalisme de type « réseau de résistances électriques ».

Nous faisons tout d'abord l'hypothèse que le champ de concentration est constant dans les pores. Cette hypothèse faite par Aigueperse [1998] et Ahmadi

et al. [2001b] reste un hypothèse forte (la diffusion dans les pores peut être génératrice de gradients) et devrait faire l'objet d'investigations futures, comme le précise Ahmadi et al. [2001b].

Le pendant de l'équation de transport vue en section 1.1.1 est ici une équation de dispersion de type Taylor-Aris [Taylor, 1953, Aris, 1956] (equation 2.6) qui gouverne ici l'évolution de la concentration c_{ij} moyennée sur une section du tube capillaire.

$$\frac{\partial c_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial (c_{ij} v_{ij})}{\partial u_{ij}} = \left(\mathcal{D} + \frac{r_{ij}^2 v_{ij}^2}{48\mathcal{D}} \right) \frac{\partial^2 c_{ij}}{\partial u_{ij}^2} \quad (2.6)$$

où u_{ij} est l'abscisse le long de l'axe du tube et v_{ij} la vitesse moyenne sur une section (equation 2.1). On note que l'équation 2.6 utilisée ici peut être obtenue par une première prise de moyenne [Carbonell and Whitaker, 1983]. Cette équation peut aussi s'écrire

$$\frac{\partial c_{ij}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{ij} \mathbf{v}_{ij}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_T \cdot \nabla c_{ij}) \quad (2.7)$$

où $\mathbf{v}_{ij} = v_{ij} \mathbf{e}_{ij}$ est le vecteur vitesse moyenne dans chaque section du tube et où on définit un tenseur de dispersion dans un capillaire

$$\mathbf{D}_{ij}^T = \mathcal{D} \mathbf{I} + \frac{r_{ij}^2 \mathbf{v}_{ij}^2}{48\mathcal{D}} \mathbf{e}_{ij} \otimes \mathbf{e}_{ij} \quad (2.8)$$

et le coefficient de dispersion

$$D_{ij}^T = \mathcal{D} + \frac{r_{ij}^2 \mathbf{v}_{ij}^2}{48\mathcal{D}} \quad (2.9)$$

L'équation monodimensionnelle 2.6 intègre déjà les effets des interfaces microscopiques $A_{\beta\sigma}$ et la condition aux limites à considérer concerne uniquement l'interface $A_{\beta\gamma}$

$$c_{ij} = C_{eq} \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.10)$$

2.1.4 Les fermetures dans un modèle de réseau

En suivant la démarche de Quintard and Whitaker [1994a] et Ahmadi et al. [2001b], on applique alors aux variables c_{ij} et \mathbf{v}_{ij} , apparaissant dans l'équation 2.6 une décomposition de type Gray [1975]

$$\mathbf{v}_{ij} = \langle \mathbf{v}_{ij} \rangle^\beta + \tilde{\mathbf{v}}_{ij} \quad (2.11)$$

$$c_{ij} = \langle c_{ij} \rangle^\beta + \tilde{c}_{ij} \quad (2.12)$$

On montre alors rigoureusement que l'équation gouvernant l'évolution de la concentration macroscopique $\langle c_{ij} \rangle^\beta$ s'écrit [Ahmadi et al., 2001b]

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta \frac{\partial \langle c_{ij} \rangle^\beta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \langle v_{ij} \rangle^\beta \cdot \nabla \langle c_{ij} \rangle^\beta + \nabla \cdot \left(\mathbf{d}_\beta \left(\langle c_{ij} \rangle^\beta - C_{eq} \right) \right) \\ & = \varepsilon_\beta \nabla \cdot \left(\mathbf{D}^* \cdot \nabla \langle c_{ij} \rangle^\beta \right) + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla \langle c_{ij} \rangle^\beta - \alpha \left(\langle c_{ij} \rangle^\beta - C_{eq} \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Les variables \mathbf{d}_β , \mathbf{u}_β , \mathbf{D}^* et α se calculent à partir de la connaissance des variables de fermeture, intervenant dans l'expression de la perturbation de concentration \tilde{c}_{ij} (equation 2.12) suggérée par la forme du problème aux limites

gouvernant \tilde{c}_{ij}

$$\tilde{c}_{ij} = \mathbf{b} \cdot \nabla \langle c_{ij} \rangle^\beta - s \left(\langle c_{ij} \rangle^\beta - C_{eq} \right) \quad (2.14)$$

En notant, comme dans la section 1.1.2

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_0 + \psi^{\mathbf{b}} \mathbf{u}_\beta \quad (2.15)$$

$$s_\beta = 1 + \alpha \psi^s \quad (2.16)$$

il vient [Ahmadi et al., 2001b]

$$\mathbf{D}_\beta^* = \langle \mathbf{D}_{ij}^T \rangle^\beta - \langle \tilde{\mathbf{v}}_{ij} \otimes \mathbf{b} \rangle^\beta + \langle \mathbf{D}_{ij}^T \cdot \nabla \mathbf{b} \rangle^\beta \quad (2.17)$$

$$\alpha = -\frac{1}{\langle \psi^s \rangle^\beta} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{u}_\beta = -\frac{\langle \mathbf{b}_0 \rangle^\beta}{\langle \psi^{\mathbf{b}} \rangle^\beta} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{d}_\beta = \varepsilon_\beta \langle \mathbf{D}_{ij}^T \cdot \nabla s \rangle^\beta - \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_{ij} s \rangle^\beta \quad (2.20)$$

où les variables de fermeture sont solutions des problèmes de fermeture suivants, définis sur le modèle de réseau utilisé comme cellule unitaire représentative

Problème Ia

$$\mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla \mathbf{b}_0 + \tilde{\mathbf{v}}_{ij} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{ij}^T \cdot \nabla \mathbf{b}_0) \quad (2.21)$$

$$\mathbf{b}_0 = \mathbf{0} \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{b}_0(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_0(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (2.23)$$

Problème Ib

$$\mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla \psi^{\mathbf{b}} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{ij}^T \cdot \nabla \psi^{\mathbf{b}}) - \frac{1}{\varepsilon_\beta} \quad (2.24)$$

$$\psi^{\mathbf{b}} = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.25)$$

$$\psi^{\mathbf{b}}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \psi^{\mathbf{b}}(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (2.26)$$

Problème II

$$\mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla \psi^s = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{ij}^T \cdot \nabla \psi^s) - \frac{1}{\varepsilon_\beta} \quad (2.27)$$

$$\psi^s = 0 \quad \text{sur } A_{\beta\gamma} \quad (2.28)$$

$$\psi^s(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \psi^s(\mathbf{r}) \quad \forall i = 1, 2, 3 \quad (2.29)$$

La résolution analytique des problèmes Ia et Ib (les problèmes Ib et II sont rigoureusement identiques) sur un capillaire courant (indiqué ij) conduit aux expressions suivantes des variables de fermeture

$$\mathbf{b}_0 = \begin{cases} \frac{e^{H_{ij}u} - 1}{e^{H_{ij}l_{ij}} - 1} \left(\mathbf{b}_0^j - \mathbf{b}_0^i + \frac{\mathbf{h}_{ij}}{H_{ij}} l_{ij} \right) - \frac{\mathbf{h}_{ij}}{H_{ij}} u + \mathbf{b}_0^i, & \text{si } \mathbf{v}_{ij} \neq \mathbf{0} \\ -\frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{2\mathcal{D}} u^2 + \left(\frac{1}{l_{ij}} \left(\mathbf{b}_0^j - \mathbf{b}_0^i \right) + \frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{2\mathcal{D}} l_{ij} \right) u + \mathbf{b}_0^i, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.30)$$

où

$$H_{ij} = \frac{v_{ij}}{D_{ij}^T} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{h}_{ij} = \frac{\mathbf{v}_{ij} - \langle \mathbf{v} \rangle}{D_{ij}^T} \quad (2.32)$$

La solution \mathbf{b}_0 du problème Ia est donc notamment exprimée comme une fonction de ses valeurs \mathbf{b}_0^i et \mathbf{b}_0^j dans les deux pores adjacents au tube.

Pour les deux variables scalaires, notées ψ de façon générique, on a

$$\psi = \begin{cases} \frac{e^{H_{ij}u} - 1}{e^{H_{ij}l_{ij}} - 1} \left(\psi^j - \psi^i + \frac{G_{ij}}{H_{ij}} l_{ij} \right) - \frac{G_{ij}}{H_{ij}} u + \psi^i & \text{si } \mathbf{v}_{ij} \neq \mathbf{0} \\ \frac{G_{ij}}{2} u^2 + \left(\frac{1}{l_{ij}} (\psi^j - \psi^i) + \frac{G_{ij}}{2} l_{ij} \right) u + \psi^i & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.33)$$

De même que pour la variable de fermeture vectorielle \mathbf{b}_0 , la solution des problèmes de fermeture Ib et II s'exprime en fonction de ses valeurs dans les pores i et j , notées de façon générique ψ^i et ψ^j .

En appliquant les équations de conservation dans chaque pore (c'est à dire en intégrant les équations 2.21, 2.24 et 2.27 sur le volume \mathcal{V}_i du pore i) on forme des bilans fournissant les systèmes linéaires dont sont solutions les variables de fermeture dans chaque pore. Ci-dessous sont donnés ces systèmes en notation matricielle. L'indice i désigne un pore courant, l'indice j désigne un pore relié au pore i par un tube capillaire contenant de la phase β . Pour la variable vectorielle, on obtient

$$[a_{ij}^{\mathbf{b}_0}] \cdot [\mathbf{b}_0^j] = [\mathbf{q}_i^{\mathbf{b}_0}] \quad (2.34)$$

avec si $i \neq j$

$$a_{ij, i \neq j}^{\mathbf{b}_0} = \begin{cases} -\frac{\pi r_{ij}^2 D_{ij}^T}{l_{ij}} C_{ij} & \text{si } v_{ij} \neq 0 \\ -\frac{\pi r_{ij}^2 D_{ij}^T}{l_{ij}} & \text{si } v_{ij} = 0 \end{cases} \quad (2.35)$$

et les termes diagonaux

$$a_{ii}^{\mathbf{b}_0} = \sum_j a_{ij}^{\mathbf{b}_0} \quad (2.36)$$

Le second membre est donné par

$$\mathbf{q}_i^{\mathbf{b}_0} = \mathcal{V}_i \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \sum_j \pi r_{ij}^2 D_{ij}^T \begin{cases} \frac{\mathbf{h}_{ij}}{H_{ij}} (C_{ij} - 1) & \text{si } v_{ij} \neq 0 \\ \frac{\langle \mathbf{v} \rangle^\beta l_{ij}}{2D} & \text{si } v_{ij} = 0 \end{cases} \quad (2.37)$$

où

$$C_{ij} = \frac{H_{ij} l_{ij}}{e^{H_{ij} l_{ij}} - 1} \quad (2.38)$$

Pour le problème scalaire, on obtient

$$[a_{ij}^\psi] \cdot [\psi^j] = [q_i^\psi] \quad (2.39)$$

avec

$$a_{ij}^\psi = a_{ij}^{\mathbf{b}_0} \quad (2.40)$$

et

$$q_i^\psi = \frac{\mathcal{V}_i}{\varepsilon_\beta} + \sum_j \pi r_{ij}^2 D_{ij}^T G_{ij} \begin{cases} \frac{1}{H_{ij}} (C_{ij} - 1) & \text{si } v_{ij} \neq 0 \\ \left(-\frac{l_{ij}}{2} \right) & \text{si } v_{ij} = 0 \end{cases} \quad (2.41)$$

Lors de la résolution de ces deux systèmes linéaires, les conditions aux limites des équations 2.22, 2.25 et 2.28 (valeur nulle aux interfaces β - γ) sont prises en compte en annulant les inconnues \mathbf{b}_0^i et ψ^i dans chaque pore au contact du NAPL (i.e. qui en contient ou qui jouxte un lien en contenant).

De même que pour l'écoulement, on résout ces systèmes par la méthode du gradient biconjugué [Saad, 2000]. Les solutions nous permettent de calculer notamment les grandeurs macroscopiques caractérisant la dispersion active : le coefficient d'échange de masse entre les phases β et γ (equation 2.18) et le tenseur de dispersion (equation 2.17).

Dans cette section nous avons présenté, brièvement, la forme spécifique de la prise de moyenne volumique, pour le problème considéré, sur un modèle de réseau, en suivant le formalisme de Ahmadi et al. [2001b]. Nous avons implémenté cette formulation pour le cas des réseaux irréguliers (c'est à dire dont les capillaires ont une orientation quelconque), du type illustré sur la figure 2.2. Cet outil permet donc de prendre en compte dans le calcul des propriétés effectives de dispersion \mathbf{D}^* et α l'information microstructurale contenue dans une cellule unitaire périodique de ce type. Les effets des interfaces β - σ sont pris en compte via un premier changement d'échelle conduisant à la formulation de Taylor-Aris (equation 2.6), les effets des interfaces β - γ sont pris en compte dans les problèmes de fermetures exhibés (équations 2.21 à 2.29). La géométrie du réseau implique un modèle physique simplifié. Les hypothèses sur l'état des variables dans les pores (vitesse nulle, pression et concentration constantes) impliquent qu'aucun processus physique ne peut s'y dérouler et relèguent ces éléments au rang de simples « réservoirs de porosité ». L'objectif est clair : aller vers l'analogie avec un réseau de résistances électriques, dans lequel les branches contraignent les flux et les noeuds sont de simples redistributeurs. C'est ensuite la morphologie du réseau qui fait de cet assemblage d'éléments simples un modèle représentatif d'un milieu poreux.

2.2 Résultats préliminaires

La résolution des problèmes de fermeture est donc faite dans un premier temps sur des réseaux « irréguliers », du type illustré sur la figure 2.2. Dans la pratique, ces réseaux sont générés à partir de distributions de tailles d'étranglements (rayons des capillaires droits) et de pores (rayons des sphères) [Jerauld and Salter, 1990, Lowry and Miller, 1995]. Ces distributions sont généralement issues d'expériences de drainage-imbibition au mercure, interprétées par le biais de modèles géométriques globaux peu réalistes, comme le faisceau de tubes capillaires. Les modèles de réseaux résultants sont donc qualitatifs puisque les distributions de rayons d'accès et de pores le sont elles-mêmes. Cette nature est d'autant plus vraie que les corrélations entre rayons d'accès et rayons de pores sont généralement ad hoc. Les modèles de réseaux présentés dans cette section sont qualifiés d'« aléatoires », ceci afin de bien les différencier des réseaux qui seront présentés au chapitre 4 qui seront dits « quantitatifs ». Les modèles de réseaux du chapitre 4 s'inscrivent complètement dans la stratégie de simplification de la microstructure de milieux poreux réels, simplification qui consiste à ne conserver d'un milieu poreux réel observé, que les règles contrôlant l'affectation des rayons d'accès aux pores adjacents. Dans la section courante, ces règles ne sont pas imposées (elles résultent du processus aléatoire de construc-

tion du réseau), les modèles de réseaux présentés ne sont à ce titre, pas des simplifications de la microstructure d'un milieu poreux réel. L'idée est ici tout d'abord (1) d'illustrer l'utilisation d'un modèle de réseau dans le cadre de la prise de moyenne volumique et (2) de prendre en compte un plus grand nombre de pores que les cellules discrètes présentées dans la section 1.2, afin de confirmer ou d'infirmer les tendances mise en évidence par exemple par Amaral Souto and Moyne [1997]. Au titre du point (2) et à ce titre seulement, les modèles de réseaux présentés ici peuvent être considérés comme plus « réalistes » que les cellules discrètes de la section 1.2.

Les résultats présentés ici ont été obtenus sur des modèles de réseaux de 1000 pores dont les distributions de tailles de pores et d'étranglements sont issues de Lowry and Miller [1995].

La figure 2.5 présente le résultat d'une résolution des problèmes de fermeture sur un tel réseau, en dispersion passive (c'est à dire en l'absence de NAPL piégé). La dispersion passive peut être vue comme le phénomène décrivant (au niveau macroscopique) l'évolution du panache d'eau polluée (illustré sur la figure 2) en aval de la zone d'accident (i.e. là où il n'y a pas de globules de polluant piégés). Ce résultat est comparé à des résultats expérimentaux [Gunn and Pryce, 1969] sur des empilements aléatoires de billes, à des calculs sur des cellules discrètes [Eidsath et al., 1983, Edwards et al., 1991] et à des calculs sur des réseaux « réguliers » (i.e. dont les pores sont placés aux noeuds d'une grille cubique) [Ahmadi et al., 2001b]. Le graphique représente l'évolution de la composante longitudinale du tenseur de dispersion adimensionné, en fonction du nombre de Péclet. Les remarques sur le comportement général des courbes faites dans la section 1.2 (figure 1.3) s'appliquent ici aussi (comportement diffusif à faible Péclet, advectif à fort Péclet). L'accord qualitatif entre nos résultats et les résultats expérimentaux de Gunn and Pryce [1969] sur des empilements peu structurés est le premier élément en faveur de l'idée que la prise en compte d'un plus grand nombre de pores « lisse » le comportement de $\mathbf{D}^* = \mathbf{f}(Pe)$, vis-à-vis de la microstructure. Nos résultats suivent mieux la tendance des résultats expérimentaux à fort Péclet que les résultats obtenus sur cellules discrètes simples ou sur réseau régulier. Ceci peut s'expliquer par le fait que les réseaux « aléatoires » prennent mieux en compte la nature tortueuse de l'espace poreux d'un empilement de billes que les cellules illustrées sur la figure 1.2 ou les réseaux réguliers, qui ont donc tendance à surestimer la dispersion dans le sens de l'écoulement. Davantage de résultats sont bien entendu nécessaires pour confirmer cette interprétation.

La figure 2.6 présente la composante longitudinale du tenseur de dispersion adimensionné dans le cas actif, pour quatre modèles de réseaux de mêmes propriétés statistiques (c'est à dire contraints par les mêmes distributions de tailles de pores et d'étranglements). Les mécanismes de piégeage simulés dans ces réseaux ont toujours conduit à la même saturation résiduelle en NAPL piégé (ε_β), soit environ 17 %. Les écarts entre les différentes courbes, même à fort Péclet restent très inférieurs aux écarts rapportés dans la littérature pour des cellules simples (prenant en compte un seul pore) dont on fait faiblement varier un paramètre structural ou l'orientation du vecteur vitesse macroscopique [Amaral Souto and Moyne, 1997, Ahmadi et al., 2001a]. Là encore, la prise en compte d'un plus grand nombre de pores et d'une microstructure moins « ordonnée » semble bien « lisser » la relation \mathbf{D}^* -microstructure.

La figure 2.7 présente l'évolution du coefficient d'échange de masse α adimen-

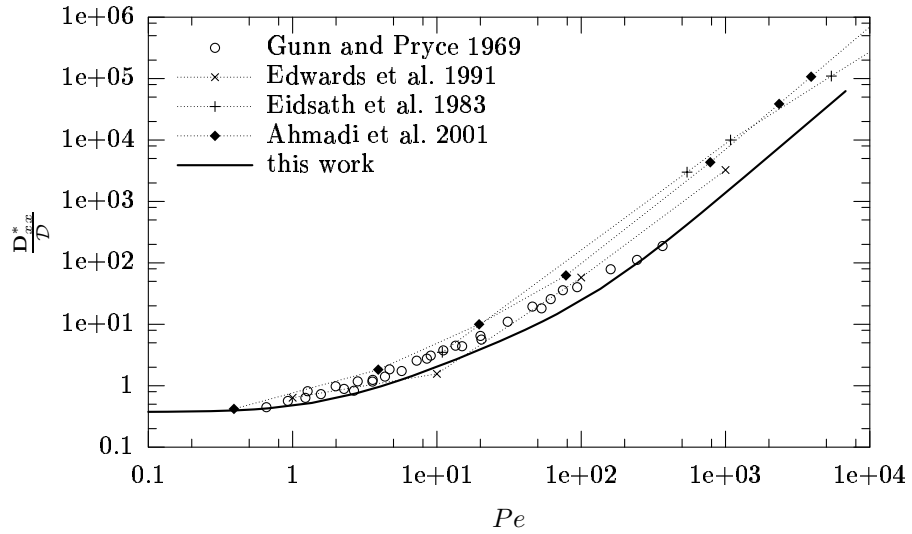


FIG. 2.5 – Évolution de la composante longitudinale du tenseur de dispersion adimensionné en fonction du nombre de Péclet. Comparaison entre des résultats d’expériences, de calculs sur cellules discrètes, de calculs sur des réseaux réguliers et de calculs sur des réseaux aléatoires.

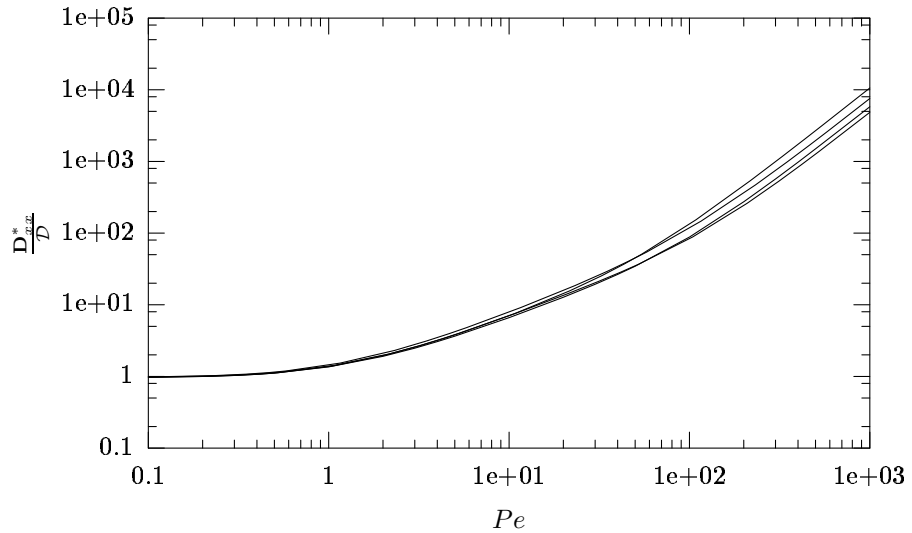


FIG. 2.6 – Évolution de la composante longitudinale du tenseur de dispersion adimensionné en fonction du nombre de Péclet, dans le cas actif ($\varepsilon_\gamma = 0, 17$). Les 4 courbes sont issues de quatre calculs sur quatre réseaux statistiquement équivalents (i.e. générés à partir des mêmes contraintes statistiques en terme de rayons de pores et d’étranglements).

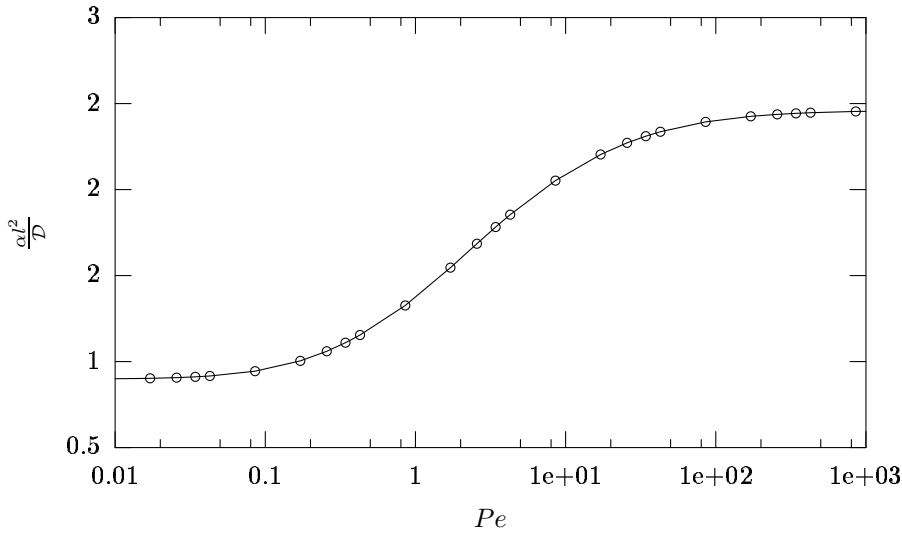


FIG. 2.7 – Évolution du coefficient d'échange de masse adimensionné en fonction du nombre de Péclet ($\varepsilon_\gamma = 0, 17$).

sionné, en fonction du nombre de Péclet. Le comportement diffusif à faible Péclet est analogue à celui observé sur les cellules discrètes simples de la section 1.2. En revanche, le comportement asymptotique limite n'a, à notre connaissance, été rapporté que par Ahmadi et al. [2001b] dans le cas des modèles de réseaux de pores « réguliers ». La réalité physique de ce comportement doit faire l'objet d'une étude approfondie, notamment à la lumière des travaux de Zhou et al. [2000] qui semblent montrer qu'à fort Péclet, l'échange entre phases est contrôlé par la diffusion dans le film aqueux couvrant la surface solide, mécanisme qui n'est pas pris en compte dans nos réseaux.

La généralisation de l'implémentation de la prise de moyenne volumique locale sur des réseaux « irréguliers » nous a permis de nous rapprocher (par rapport aux réseaux « réguliers ») des résultats expérimentaux de Gunn and Pryce [1969], souvent utilisés pour valider (d'un point de vue qualitatif) les tendances obtenues pour les courbes $\mathbf{D}^* = \mathbf{f}(Pe)$. D'un certain point de vue, cette remarque est positive. D'un autre côté, cet accord relatif est peut-être la conséquence du caractère peu structuré, commun à nos modèles de réseaux « aléatoire » et aux empilements utilisés par Gunn and Pryce [1969]. Nos résultats restent donc somme toute qualitatifs, voire à confirmer si l'on considère la tendance asymptotique de la courbe de la figure 2.7.

- D'une manière générale, la nature qualitative des résultats obtenus peut avoir
- une origine physique liée aux simplifications admises pour décrire le processus de dissolution lente d'un polluant en zone saturée (section 1.1.1) et aux simplifications nécessaires à l'implémentation de la prise de moyenne volumique sur un modèle de réseau (section 2.1).
 - une origine structurale liée au fait que les modèles de réseaux aléatoires considérés ici ne sont pas quantitativement équivalents à un milieu poreux réel observé.

Dans le cadre de cette thèse, ce sont les aspects structuraux que nous avons choisi

de privilégier dans l'idée de disposer à terme de modèles de réseaux quantitatifs. La suite de la thèse (chapitres 3 et 4) relève donc de l'analyse d'images, qui est l'outil retenu ici pour rechercher ces modèles de réseaux quantitatifs. Cette partie a représenté l'essentiel du travail fourni.

Chapitre 3

Modèles aléatoires de milieux poreux numériques 3-D

Les images digitales d'échantillons de glace présentées dans les chapitres 3 et 4 nous ont été gracieusement fournies par Jean Bruno Brzoska du Centre d'Étude de la Neige (Météo France) que nous tenons à remercier.

3.1 Simplification de la microstructure : place et importance d'un modèle aléatoire de milieux poreux numériques

Dans le chapitre 2 nous avons mis en œuvre le modèle mathématique nous permettant de mettre à l'échelle l'information microstructurale contenue dans un modèle de réseau de pores, dans les coefficients macroscopiques caractérisant la dispersion. Le recours à un modèle de réseau a été introduit à l'issue du chapitre 1 dans le contexte général d'une simplification de la microstructure des milieux poreux réels.

L'idée est ici que l'étude complète et prédictive pour des milieux poreux réels de la relation entre propriété macroscopique d'intérêt (ici \mathbf{D}^* et α) et microstructure sous-jacente devient largement facilitée si l'on dispose de milieux poreux modèles qui sont

1. plus simples que les milieux poreux réels, tout en restant physiquement réalistes, et
2. où l'information structurale conservée est parfaitement contrôlée et quantifiée (ce dernier point est notamment capital pour une étude se voulant à terme prédictive [Anguy et al., 1996]).

De nombreuses approches indépendantes, souvent initiées ou développées dans le domaine des géosciences montrent que nombre de propriétés macroscopiques de transport, d'écoulement ou de transfert sont essentiellement déterminées par les

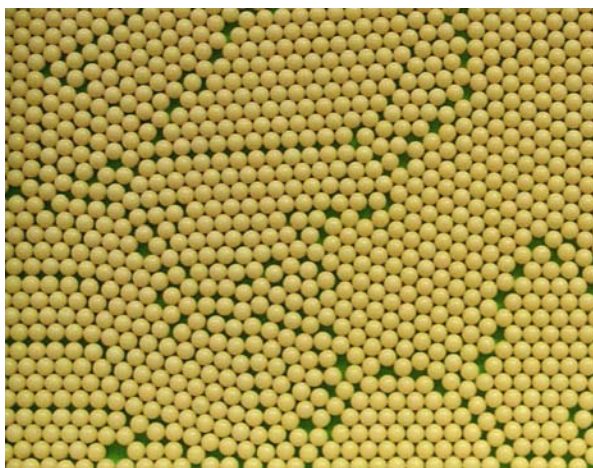


FIG. 3.1 – Illustration schématique et expérimentale du modèle général des roches sédimentaires granulaires, tirée de Anguy et al. [2002]

règles contrôlant les tailles des rayons d'accès (étranglements) aux pores adjacents. A tous égards, un modèle de réseau tel que celui illustré sur la figure 2.2 (au chapitre précédent) est une image explicite de ces règles réputées pertinentes pour la physique. On rappelle que, lorsqu'il s'agit d'étudier des milieux poreux réels, les modèles de réseaux présentés au chapitre 2 sont qualitatifs : les règles qui y sont produites ne sont pas (dans un cas général) représentatives d'un milieu réel. Nous détaillerons ainsi au chapitre 4 une approche relevant de l'analyse d'images non linéaire quantitative qui vise à reproduire plus fidèlement ces règles pour un échantillon réel observé. D'un certain point de vue, les chapitres 2 et 4 auraient pu ainsi former un « ensemble suffisant » pour étudier, par prise de moyenne volumique, la relation entre propriété macroscopique de transport et microstructure sous-jacente du milieu poreux. Le choix adopté dans le cadre de cette thèse est différent. Nous avons choisi de contribuer à la mise en œuvre, en amont de la phase de calcul de \mathbf{D}^* et α , d'une démarche de simplification plus complète. Cette stratégie de simplification brièvement présentée dans l'introduction motive ce troisième chapitre, qui précède le développement de modèles de réseaux dits « quantitatifs ». Il n'existe pas de manière unique de présenter cette stratégie globale, traitée dans les chapitres 3 et 4.

La figure 3.1 va nous aider à introduire la manière que nous avons choisi pour justifier notre démarche et son intérêt. Il est classiquement admis que les milieux granulaires sédimentaires, formés par l'agrégation simultanée de multiples particules, ne peuvent prétendre à une organisation optimale globale de leurs grains [Graton and Fraser, 1935, Ehrlich et al., 1991a,b, McCreesh et al., 1991, Prince et al., 1995]. Leur structure à l'échelle du pore se compose de zones locales d'empilements compacts, séparés par des « défauts d'empilements » où l'assemblage imparfait est associé à des pores plus gros (d'extension spatiale plus importante). La figure 3.1, illustrant en 2-D et schématiquement le modèle structural général des roches sédimentaires granulaires détritiques (au moment de leur dépôt) montre, pour une classe de milieux particulière l'existence d'une

hiérarchie de composantes structurales. On y trouve, par longueur caractéristique croissante [Anguy et al., 2001]

1. au niveau élémentaire, les sections de pores élémentaires ; notamment des pores de grande taille (associés à des défauts d'empilement) et des pores de plus petite taille (associés à un empilement plus compact),
2. à plus grande échelle, les hétérogénéités structurales de deuxième ordre consistent en des zones de défauts d'empilements qui coalescent en circuits continus au travers d'une matrice d'agrégats locaux de grains empilés de manière optimale,
3. à des échelles toujours plus croissantes, les structures de troisième ordre concernent les modes variés selon lesquels les circuits de défauts d'empilements se distribuent dans l'espace.

Quelque soit la classe de milieux poreux réels considérée, la présence d'une telle hiérarchie de composantes structurales est la règle (étant entendu que la nature des hétérogénéités structurales impliquées varie d'une classe de milieux à une autre).

Dans le contexte d'une étude visant à étudier de façon complète la relation propriété de transport–microstructure, il est à priori important de disposer d'un outil permettant d'évaluer l'impact sur la physique de telle ou telle composante structurale en l'imposant ou pas dans un milieu poreux numérique reconstruit (i.e. dans une image digitale 3-D artificielle). Cet outil, qui est l'objet de cette troisième partie, relève d'une des branches de l'analyse d'images : la modélisation aléatoire (ou stochastique) d'images.

La présentation de notre démarche de façon linéaire (modèle stochastique au chapitre 3 puis modèles de réseaux quantitatifs au chapitre 4) permet de renforcer l'idée de simplification de la microstructure qui est la notre : le recours à un modèle aléatoire pour ne conserver dans un milieu poreux numérique que certaines composantes structurales d'un échantillon réel observé est une première simplification. Le recours à l'analyse d'images non linéaire pour représenter sous la forme d'un modèle de réseau peut être vu comme une deuxième simplification.

La démarche d'analyse d'images présentée ci-dessus est ambitieuse, a fortiori lorsqu'on y inclut la mise en œuvre du changement d'échelle vu dans les chapitres précédents. De fait, les nombreux aspects relevant de l'analyse d'images et sous-tendant la démarche générale n'ont pas tous été traités dans le cadre de cette thèse, qui s'appuie sur des travaux antérieurs réalisés au laboratoire. Dans la suite de ce chapitre, nous insistons donc sur les aspects de cette démarche que nous avons développés dans le but, à terme, de prendre en compte les effets sur D^* et α des caractéristiques structurales de milieux poreux réels.

3.2 Classe de modèles aléatoires mise en œuvre : principe et bases

La nature aléatoire (hautes irrégularités, variations imprévisibles d'un point à un autre, etc.) et structurée (reflet des caractéristiques structurales d'un processus régionalisé) d'un milieu poreux observé [Matheron, 1965, 1970] nous conduit naturellement à le modéliser par un processus aléatoire stationnaire. Le caractère stationnaire [Matheron, 1965, 1970, Ventsel, 1973] est lié ici à l'idée

(intuitive) qu'à partir d'une certaine échelle d'observation, le milieu poreux peut être considéré comme statistiquement homogène; ses propriétés deviennent indépendantes du point d'observation. Le milieu poreux (homogène) est décrit par une *fonction aléatoire stationnaire* (ou *processus aléatoire stationnaire*). Chaque image extraite de ce milieu est une *réalisation*, parmi une infinité possible, de cette fonction aléatoire [Matheron, 1967]. De ce point de vue, un échantillon réel, observé est interprété d'un point de vue probabiliste comme une réalisation, parmi une infinité possibles, de la fonction aléatoire [Matheron, 1965, 1970, Joshy, 1974]. Une fonction aléatoire est une fonction (dans notre cas, une fonction de l'espace tridimensionnel, prenant en chaque point (i, j, k) une valeur f_{ijk} égale à 0 ou 1) dont les valeurs en chaque point sont déterminées, du point de vue formel, par ses lois de répartitions [Ventsel, 1973]. Plus intuitivement, le fonction aléatoire ne prend de réalité palpable qu'au travers de ses réalisations. La totalité (infinie) des réalisations d'une fonction aléatoire la caractérise également complètement.

Soit une fonction aléatoire Z , i.e. un ensemble de variables aléatoires z_{ijk} ; chaque variable aléatoire z_{ijk} est associée à un point \mathbf{x}_{ijk} , de coordonnées (i, j, k) , d'une partie de l'espace \mathbb{R}^3 . Dans chaque réalisation de la fonction aléatoire, une variable aléatoire z_{ijk} prendra la valeur 1 si \mathbf{x}_{ijk} est dans l'espace poreux et la valeur 0 si \mathbf{x}_{ijk} est dans la matrice solide. Cette fonction aléatoire est complètement définie par ses lois de répartitions

$$\mathcal{Z}_n(z_{111}, \dots, z_{nnn}, \mathbf{x}_{111}, \dots, \mathbf{x}_{nnn}) \quad (3.1)$$

(étant entendu que l'hypothèse de stationnarité implique que seule la configuration relative des \mathbf{x}_{ijk} importe). On ne peut en fait donner qu'une forme symbolique aux lois de répartition \mathcal{Z}_n et leur utilisation est généralement impossible dans la pratique [Ventsel, 1973]. Néanmoins, avec l'hypothèse de stationnarité, on peut montrer qu'un processus aléatoire (stationnaire donc) peut être décrit de manière adéquate par des moments d'ordre plus faibles (moyenne, autocorrélation) et la densité de probabilité associée [Ventsel, 1973, Joshy, 1974].

Les milieux poreux numériques sont donc produits ici en tant que réalisations d'une fonction aléatoire stationnaire et binaire, caractérisée par sa fonction de densité de probabilité $p_Z(z)$ et sa fonction d'autocorrélation, ou de covariance $C_Z(r, s, t)$.

On rappelle que la fonction de densité de probabilité de la fonction aléatoire Z à valeur binaire se résume à la porosité

$$p_Z(z = 0) = 1 - \varepsilon \quad \text{et} \quad p_Z(z = 1) = \varepsilon \quad (3.2)$$

La fonction d'autocorrélation (ou fonction de covariance) $C_Z(r, s, t)$ de la fonction aléatoire est donnée par

$$C_z(r, s, t) = \langle \dot{z}_{ijk} \dot{z}_{i+r, j+s, k+t} \rangle \quad (3.3)$$

l'opérateur $\langle \rangle$ désigne ici la moyenne d'ensemble et (r, s, t) est la distance séparant les deux variables aléatoires centrées \dot{z}_{ijk} et $\dot{z}_{i+r, j+s, k+t}$. La variable aléatoire centrée \dot{z}_{ijk} est définie par

$$\dot{z}_{ijk} = z_{ijk} - \langle z_{ijk} \rangle \quad (3.4)$$

La fonction d'autocorrélation $C_z(r, s, t)$ caractérise la dépendance des deux variables aléatoires (et également leur dispersion) et est souvent interprétée comme

proportionnelle à la probabilité que deux variables aléatoires séparées par une distance (r, s, t) aient la même valeur (i.e. que les points séparés par une distance (r, s, t) soient dans la même phase). C_Z est donc de ce point de vue un paramètre structural.

Ce modèle est une généralisation, principalement par Joshy [1974] et Quiblier [1984] respectivement aux cas 2-D et 3-D binaires de modèles probabilistes destinés à simuler des signaux 1-D de densité de probabilité et de fonction d'autocorrélation souhaitées [Barrett and Coales, 1955, Barrett and Lampard, 1955, Gujar and Lampard, 1968, Holiday, 1969, Broste, 1969]. Il repose sur un filtre linéaire et un filtre non-linéaire pour transformer des champs aléatoires gaussiens en des images binaires dont les moyennes (ou porosité) et les fonctions d'autocorrélations sont les mêmes et sont des données d'entrée du modèle.

Avant d'aborder les aspects plus techniques du modèle, on trouvera sur la figure 3.2 une illustration de la version 3-D du modèle qui a été implémentée durant cette thèse. Cette illustration sera commentée plus en détails dans la suite du chapitre.

Voici le détail des étapes de la génération de milieux poreux numériques 3-D. Il s'agit d'obtenir une série de champs 3-D aléatoires binaires de porosité ε_Z et de fonction d'autocorrélation C_Z souhaitées. Le modèle comprend 3 étapes.

1. Un champ 3-D X de $L_x \times L_y \times L_z$ nombres aléatoires indépendants est tout d'abord produit selon une distribution normale de moyenne nulle et variance unité. Dans la suite et pour alléger les notations, on posera $L_x = L_y = L_z = L$. La population $X = \{x_{ijk}\}$, $i, j, k = 1, \dots, L$, stationnaire ergodique, vérifie les propriétés suivantes
 - moyenne nulle : $\varepsilon_X = 0$
 - variance unitaire : $\sigma_X^2 = 1$
 - densité de probabilité : $p(x_{ijk}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x_{ijk}^2}{2}}$
 - fonction d'autocorrélation : $C_X(r, s, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } r = s = t = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$
2. Cet ensemble X est passé au travers d'un filtre linéaire à mémoire de taille $L_c + 1 \times L_c + 1 \times L_c + 1$ et défini par ses coefficients a_{rst} , $r, s, t = 0, \dots, L_c$. Il résulte une population $Y = \{y_{ijk}\}$, $i, j, k = 1, \dots, L$ telle que

$$y_{ijk} = \sum_{r=0}^{L_c} \sum_{s=0}^{L_c} \sum_{t=0}^{L_c} a_{rst} x_{i+r, j+s, k+t} \quad (3.5)$$

Si les coefficients (ou gains) du filtre vérifient

$$\sum_{r=0}^{L_c} \sum_{s=0}^{L_c} \sum_{t=0}^{L_c} a_{rst}^2 = 1 \quad (3.6)$$

alors on montre que le processus Y est toujours gaussien, de moyenne nulle et de variance unité [Joshy, 1974]. La population Y vérifie donc les propriétés

- moyenne nulle : $\varepsilon_Y = 0$
- variance unitaire : $\sigma_Y^2 = 1$
- densité de probabilité : $p(y_{ijk}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_{ijk}^2}{2}}$

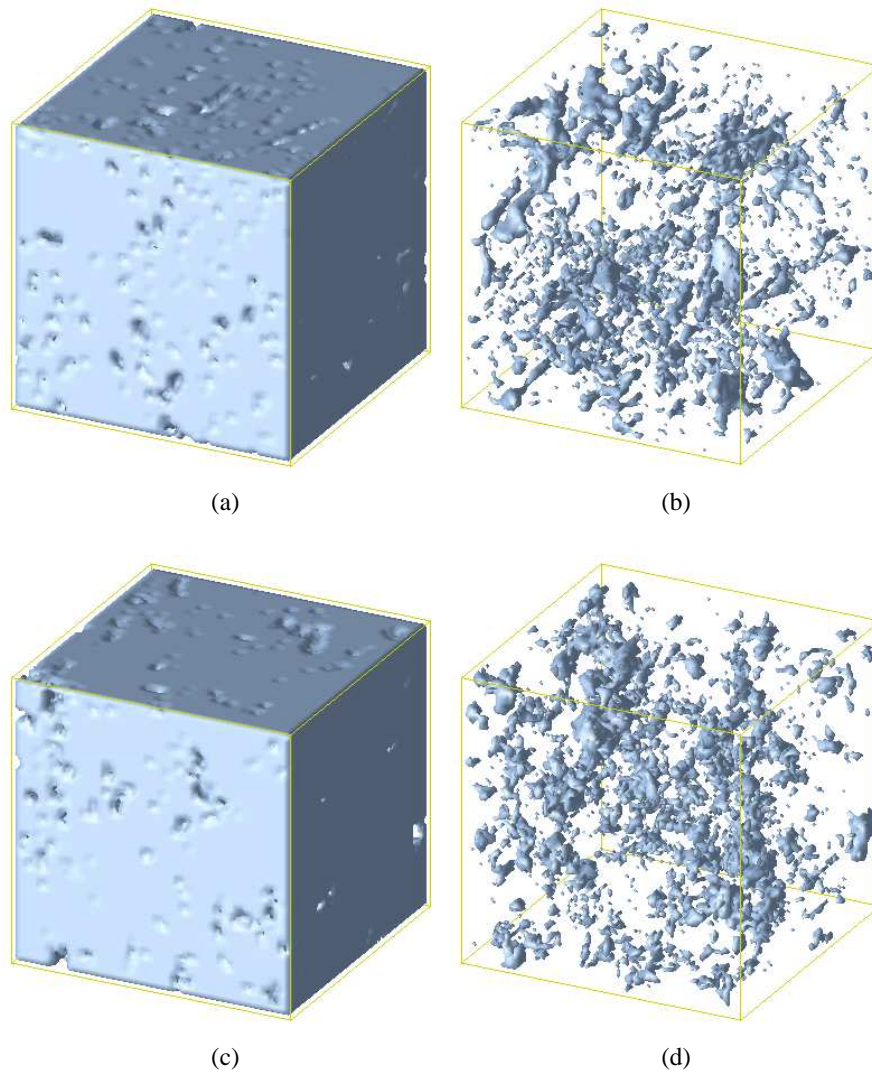


FIG. 3.2 – Illustration du modèle aléatoire de milieux poreux numériques 3-D. En haut : images digitales de la matrice (a) et de l'espace poreux (b) d'un échantillon unique réel de glace poreuse, acquise par tomographie X (gracieusement mis à notre disposition par le Centre d'Étude de la Neige, Météo France, S^t Martin d'Hères). En bas : une réalisation de notre modèle aléatoire, matrice en (c), porosité en (d).

– fonction d'autocorrélation :

$$C_Y(r, s, t) = \sum_{u=0}^{L_c} \sum_{v=0}^{L_c} \sum_{w=0}^{L_c} a_{uvw} a_{u+r, v+s, w+t} \quad (3.7)$$

Comme justifié plus loin, les gains a_{rst} sont déterminés au préalable de manière à ce que la population Y en sortie du filtre linéaire ait la fonction d'autocorrélation $C_Y(r, s, t)$ souhaitée. De même, l'autocorrélation $C_Y(r, s, t)$ est déterminée au préalable de façon à donner la fonction d'autocorrélation $C_Z(r, s, t)$ souhaitée à la population Z en sortie de modèle.

3. La troisième étape est donc un filtrage non-linéaire qui a pour objectif de binariser, de telle manière que la population Z en sortie de modèle ait la porosité souhaitée. Pour ce faire, on associe à chaque valeurs y_{ijk} une nouvelle variable, $P_Y(y_{ijk})$, uniformément répartie entre 0 et 1 et qui pour un champ gaussien s'écrit

$$y_{ijk} \rightarrow P_Y(y_{ijk}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y_{ijk}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy \quad (3.8)$$

$P_Y(y_{ijk})$ est la fonction de probabilité cumulée de la population Y . La variable intermédiaire $P_Y(y_{ijk})$ est alors passée au travers d'un filtre non linéaire donné par l'équation 3.9 de manière à imposer la porosité désirée à la sortie binaire $Z = \{z_{ijk}\}$, $i, j, k = 1, \dots, L$ du modèle (méthode de la probabilité inverse [Joshy, 1974])

$$z_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } P_Y(y_{ijk}) \leq \varepsilon_Z \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.9)$$

Nous avons vu que la fonction d'autocorrélation $C_Y(r, s, t)$ qui donnera en sortie de filtre non linéaire la fonction d'autocorrélation spécifiée $C_Z(r, s, t)$ doit être déterminée avant d'effectuer les étapes 1 à 3. Ceci peut être fait en s'appuyant sur les contributions de Barrett and Coales [1955] et Barrett and Lampard [1955] qui ont montré que la fonction d'autocorrélation normée $\frac{C_Z(r, s, t)}{\sigma_Z^2}$ en sortie du filtre non linéaire s'exprime comme une série de la fonction d'autocorrélation $C_Y(r, s, t)$ à l'entrée du filtre non linéaire

$$\frac{C_Z(r, s, t)}{\sigma_Z^2}(r, s, t) = \sum_{p=0}^{\infty} C_p^2(C_Y(r, s, t))^p \quad (3.10)$$

Les coefficients C_p s'écrivent

$$C_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi p!}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{u^2}{2}} H_p(u) f(u) du \quad (3.11)$$

où H_p est le polynôme de Hermite d'ordre p et f est une caractéristique non linéaire définie par

$$f(u) = \begin{cases} \frac{\varepsilon-1}{\sqrt{\varepsilon(1-\varepsilon)}} & \text{si } P_Y(u) \leq \varepsilon \\ \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon(1-\varepsilon)}} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.12)$$

Les équations 3.10, 3.11 et 3.12 permettent, à partir de la porosité ε et de la fonction d'autocorrélation C_Z données, de calculer la fonction d'autocorrélation C_Y de la population Y . Concernant l'implémentation du modèle, l'intégrale de l'équation 3.11 est estimée entre les bornes -10 et $+10$, la série de l'équation 3.11 est tronquée à l'ordre 11 et est inversée par une méthode de Newton. Une fois l'autocorrélation $C_Y(r, s, t)$ connue, la relation 3.7 est exprimée sous la forme d'un système d'équations algébriques non linéaires dont la solution fournit les $(L_c + 1) \times (L_c + 1) \times (L_c + 1)$ gains a_{rst} du filtre linéaire qui donneront en sortie la fonction d'autocorrélation souhaitée C_Y à la population Y . Du point de vue numérique, c'est la principale difficulté technique du modèle, comme nous le verrons plus loin.

3.3 Réalisme des milieux poreux numériques produits par le modèle

Bien que le modèle décrit dans la section 3.2 soit très répandu dans la communauté des milieux poreux [Adler et al., 1990, 1992, Ioannidis et al., 1997, Ionnidis et al., 1997, Kwiecien, 1994, Anguy et al., 1996, 2001, Le Trong et al., 2001], il n'existe pas de notre point de vue d'accord général sur la question suivante : les réalisations du modèle sont-elles de véritables analogues d'un échantillon réel observé ou lui ressemblent elles seulement visuellement ? En d'autres termes, une réalisation comme celle obtenue sur la figure 3.2 est-elle quantitative ou bien qualitative ?

Bien que le modèle aléatoire 3-D existe, par soucis de commodité nous allons illustrer notre propos en 2-D.

3.3.1 Conditions pratiques d'utilisation du modèle aléatoire, implications pour les contraintes du modèle

Il s'agit ici de proposer une réponse à la question posée ci-dessus lorsque le milieu n'est connu qu'au travers d'un échantillon unique de taille finie (puisque c'est la situation pratique dans laquelle nous nous trouvons systématiquement).

La figure 3.3 représente un exemple d'échantillon 2-D disponible sous la forme d'une section pétrographique conventionnelle (binarisée de manière ad hoc). La figure 3.4 représente la fonction d'autocorrélation normée mesurée sur l'image (complète, i.e. de 1024×1024 pixels) de la figure 3.3.

De façon cohérente avec la section 3.2, on notera z_{ij} l'indicatrice de phase du milieu. L'image binaire 2-D du milieu poreux représenté sur la figure 3.3, définie sur la grille discrète \mathbb{Z}^2 par un ensemble de $L \times L$ pixels

$$Z = \{z_{ij}\}, i, j = 1, \dots, L \quad (3.13)$$

qui prennent la valeur 1 si ils représentent l'espace poreux ou la valeur 0 si ils représentent la phase solide (matrice)

$$z_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } (i, j) \text{ est dans la phase fluide} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.14)$$

Le choix d'une image carrée ($L_x = L_y = L$) est ici uniquement motivé par le souci d'alléger les notations, tous les résultats donnés ici sont valides pour une

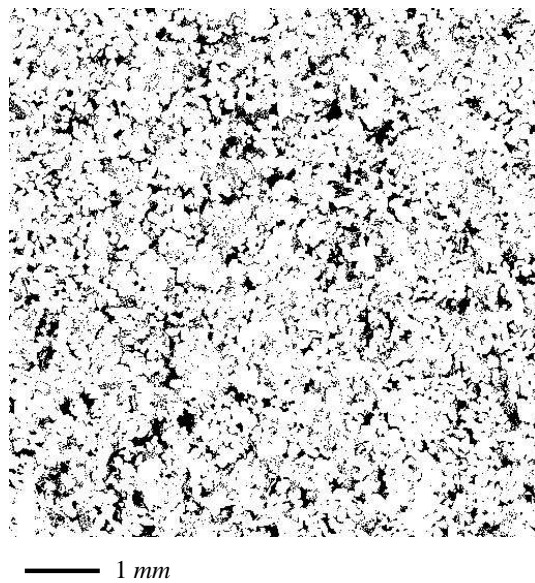


FIG. 3.3 – Image binaire de 512×512 pixels d'un grès. L'image mesure $6,9 \times 6,9$ mm ; taille d'un pixel : $13,57 \mu m$. La porosité est en noir, la matrice en blanc. La porosité vaut $\varepsilon = 0,15$. Pour des raisons de lisibilité, l'image présentée ici a été extraite d'une image plus grande, de 1024×1024 pixels ($13,9 \times 13,9$ mm) sur laquelle a été mesurée la fonction d'autocorrélation (figure 3.4).

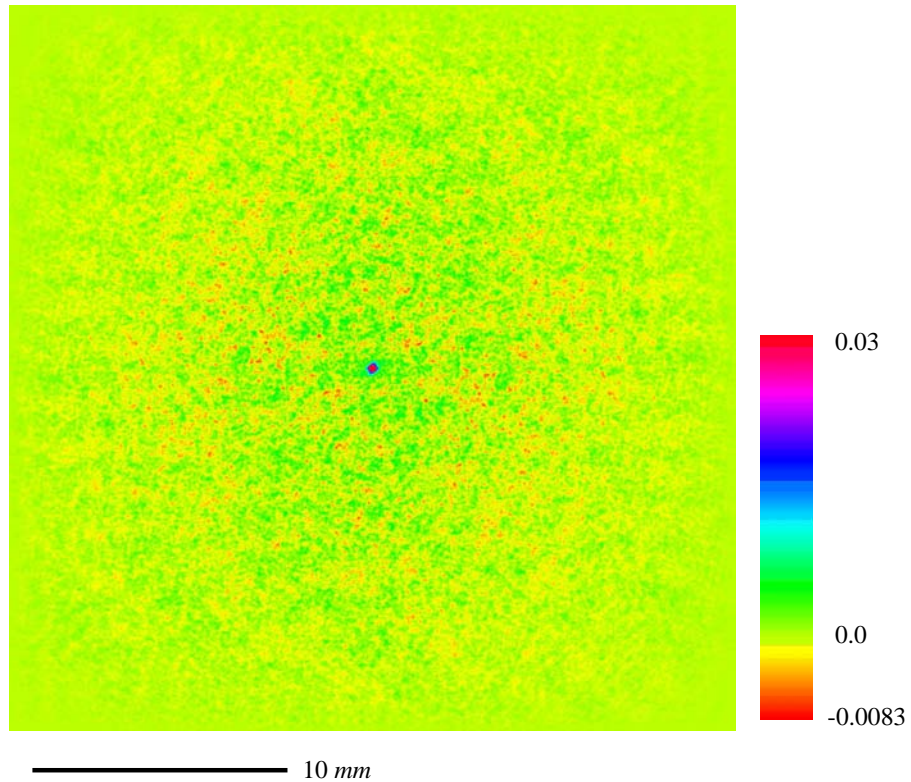


FIG. 3.4 – Fonction d'autocorrélation normée $\rho(r, s)$ mesurée sur une image binaire de 1024×1024 pixels ($13,9 \times 13,9 \text{ mm}$) dont a été extraite l'image de la figure 3.3. La fonction d'autocorrélation représentée est centrée et normalisée par la variance σ^2 . Les distances r et s sont exprimées en unités de taille $13,57 \mu\text{m}$ (i.e. un pixel) et s'étendent de -1024 à $+1024$ ($-13,9 \text{ mm}$ à $+13,9 \text{ mm}$) selon les deux directions cartésiennes. La distance $0,0$ est au centre de l'image. Afin de distinguer les petites fluctuations de la fonction, les valeurs comprises entre $0,03$ et $1,0$ sont représentées par la même couleur rouge (cf. la barre de couleur).

image non carrée¹. Cette image est isolée au sein d'un champ infini de voxels à valeur nulle (i.e. c'est un échantillon fini, extrait d'un milieu supposé infini).

La fonction d'autocorrélation mesurée sur une image est classiquement interprétée comme proportionnelle à la probabilité qu'ont deux pixels d'être dans la même phase. La fonction d'autocorrélation mesurée directement sur une image digitale se définit ainsi [Matheron, 1965, 1970, Brigham, 1974]

$$R_Z(r, s) = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \dot{z}_{ij} \dot{z}_{i+r, j+s}, \quad r, s = -L, \dots, (L-1) \quad (3.15)$$

où \dot{z}_{ijk} est la variable z_{ijk} centrée

$$\dot{z}_{ijk} = z_{ijk} - \varepsilon \quad (3.16)$$

(pour une image binaire). Elle possède plusieurs propriétés remarquables. Tout d'abord, on voit qu'elle est définie sur un support $2L \times 2L$, quatre fois plus grand (en deux dimensions) que le support de l'image. Ensuite, sa valeur à l'origine est la variance $R_Z(0, 0)$ de l'image qui, dans le cas binaire (1 : pores ; 0 : solide) vaut

$$R_Z(0, 0) = \sigma_Z^2 = \varepsilon - \varepsilon^2 \quad (3.17)$$

Afin que la fonction d'autocorrélation ne caractérise que la seule dépendance entre deux pixels de l'image séparés par une distance orientée (r, s) , on normalise souvent R_Z par la variance ; on obtient alors la fonction d'autocorrélation normalisée ρ_Z

$$\rho_Z(r, s) = \frac{R_Z(r, s)}{\sigma_Z^2} \quad (3.18)$$

qui vaut donc 1 à l'origine. Cette fonction est paire

$$\rho_Z(-r, -s) = \rho_Z(r, s) \quad (3.19)$$

En tant que paramètre structural mesurant la dépendance entre des pixels séparés par une distance (r, s) , elle tend à décroître aux « grandes distances » (i.e. lorsque le milieu devient « homogène »). Par construction, elle s'annule aux limites de son support. Enfin elle est à moyenne nulle [Anguy et al., 2001].

Le lien entre la fonction d'autocorrélation $R_Z(r, s)$ et la contrainte $C_Z(r, s)$ du modèle aléatoire stationnaire est un problème complexe relevant de l'inférence statistique [Matheron, 1965, 1970]. Dans le contexte où un échantillon unique est disponible (figure 3.3), l'utilisation pratique du modèle implique d'approximer $C_Z(r, s)$ (caractéristique d'une fonction aléatoire, i.e. d'une infinité de réalisations du milieu poreux) à partir de la connaissance de $R_Z(r, s)$, mesurée sur un échantillon unique (i.e. une seule réalisation).

Si la fonction aléatoire décrivant le milieu est ergodique, on a alors la relation [Matheron, 1970]

$$C_Z(r, s, t) = \langle \dot{z}_{ijk} \dot{z}_{i+r, j+s, k+t} \rangle \sim \frac{R_Z(r, s, t)}{K_{rst}} = \frac{\sum_{i,j,k=1}^L \dot{z}_{ijk} \dot{z}_{i+r, j+s, k+t}}{\text{Mes}(V \cap V_{-r, -s, -t})} \quad (3.20)$$

¹Ils sont aussi valides en trois dimensions.

Dans cette équation, V est le support de l'image et K_{rst} (covariogramme géométrique) est donc la mesure de l'intersection de V avec son translaté par $(-r, -s, -t)$ (noté $V_{-r,-s,-t}$). On a $K_{rst} = (L - r)(L - s)(L - t)$. La propriété d'ergodicité d'une fonction aléatoire permet, somme toute, de dire qu'une réalisation unique (si elle est suffisamment grande) est représentative de l'ensemble des réalisations possibles. Stationnarité et ergodicité sont le pendant statistique de la notion d'homogénéité rencontrée en milieu poreux. Mentionnons que si l'hypothèse d'ergodicité est souvent invoquée, il n'existe pas à notre connaissance de critères rigoureux pour la vérifier.

La stratégie proposée ici est donc beaucoup plus pragmatique. Il est clair que ce qui suit peut être interprété comme relevant des hypothèses de stationnarité et d'ergodicité. Notre idée est toutefois différente et nous tenons à la formuler clairement : on admet l'idée intuitive selon laquelle les composantes structurales « de petites tailles » du milieu poreux sont suffisamment échantillonnées par l'image pour que la partie de la fonction d'autocorrélation les décrivant puisse être interprétée statistiquement. Sur cette base, on se propose de contraindre le modèle aléatoire en ne conservant que la partie de la fonction d'autocorrélation mesurée $R_Z(r, s, t)$ relative aux hétérogénéités structurales de l'échantillon de longueur caractéristique inférieure à une longueur maximum L_c , restant petite devant la taille du support V de l'image disponible. La figure 3.5 illustre cette opération dans un cas 1-D. La figure 3.6 illustre la même opération en 2-D en mettant à zéro tout sauf la partie centrale, sur ± 32 pixels ($\sim 0,5$ mm). Une vue agrandie de la partie conservée est présentée sur la figure 3.7. La partie conservée de la fonction d'autocorrélation mesurée R_Z est définie par

$$R_Z^{L_c}(r, s, t) = \begin{cases} R_Z(r, s, t) & \text{si } -L_c \leq r, s, t < L_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.21)$$

Dans ces conditions, la contrainte du modèle aléatoire s'écrit

$$C_Z^{L_c}(r, s, t) = \begin{cases} \frac{\text{Mes}(V)}{\text{Mes}(V \cap V_{-r,-s,-t})} \frac{R_Z(r, s, t)}{R_Z(0,0,0)} & \text{si } -L_c \leq r, s, t < L_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.22)$$

Concernant les exemples à venir, et pour les longueurs L_c considérées, il se trouve que $\frac{\text{Mes}(V)}{\text{Mes}(V \cap V_{-r,-s,-t})} \rho_Z(r, s, t)$ est quasiment égal à $\rho_Z(r, s, t)$ (étant entendu que $-L_c \leq r, s, t < L_c$). C'est donc cette expression plus simple qui est impliquée dans les illustrations à venir. En cohérence avec cette approximation, les milieux poreux numériques qui seront présentés ont été générés sur un support V identique à celui utilisé pour la mesure de la fonction d'autocorrélation.

Dans ce qui suit, la longueur L_c introduite ci-dessus avec l'opération de « troncature » (mise à zéro) sera appelée longueur de corrélation. De même que pour les tailles des images, le choix de choisir une longueur de corrélation identique selon les deux directions cartésiennes de l'espace a pour seule motivation l'allègement des notations.

Il convient de noter que la troncature de la fonction d'autocorrélation est classiquement utilisée dans la littérature afin de contraindre un processus aléatoire [Joshy, 1974, Quiblier, 1984, Adler et al., 1990, Adler, 1992, Adler et al., 1992, Thovert et al., 1993, Kwiczen, 1994, Ioannidis et al., 1997, Ionmidis et al., 1997]. L'argument invoqué est cependant différent des nôtres : ces auteurs supposent que, dans un milieu « homogène », au-delà d'une certaine longueur dite

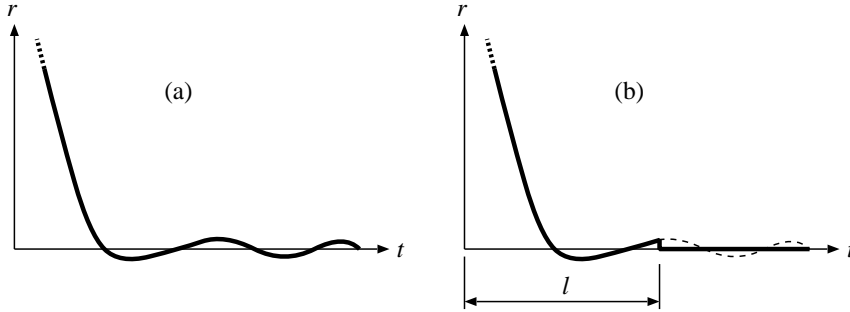


FIG. 3.5 – Illustration de la « troncature » de la fonction d'autocorrélation. En (a) une représentation de l'allure d'une fonction d'autocorrélation normée $\rho_Z(t)$ en fonction de la distance t (on a représenté que les distances positives, la fonction est paire). cette fonction vaut 1 à l'origine et décroît en fluctuant jusqu'à s'annuler à la limite de son support. En (b), la même fonction mais « tronquée » à partir de la distance l .

« longueur de corrélation », les petites fluctuations de la fonction d'autocorrélation ne sont plus significatives et peuvent être ignorées.

Notre motivation pour tronquer la fonction d'autocorrélation mesurée est différente. Tout d'abord, par construction, la fonction d'autocorrélation mesurée R_Z (équation 3.15) a une nature statistique. Très intuitivement, il est évident que cette nature statistique est d'autant plus marquée que la distance (r, s, t) est petite ; aux grandes distances, l'influence des frontières finies ∂V de l'échantillon disponible est plus marquée. Le propos tenu ici est beaucoup plus général et intuitif que des considérations sur l'homogénéité (voire l'ergodicité) du milieu observé.

Enfin et surtout, la stratégie pragmatique retenue ici pour contraindre notre modèle aléatoire est dictée par l'utilisation que l'on souhaite faire de ce modèle aléatoire. Le fil conducteur des chapitres 3 et 4 de ce document est la simplification d'images. De ce point de vue, il est immédiat que la contrainte $C_Z^{L_c}$ (équation 3.20) du modèle inclut une information structurale relative aux seules composantes du milieu observé de longueur caractéristique inférieure à la longueur L_c . En faisant varier L_c , on doit donc pouvoir reproduire (statistiquement), ou pas, certaines composantes structurales du milieu et évaluer ultimement leur impact sur la physique en s'appuyant sur les techniques de changement d'échelle vues dans les chapitres 1 et 2.

Ceci étant dit, il est entendu et évident qu'en contraignant le modèle aléatoire par une fonction telle que définie dans l'équation 3.22, nous faisons preuve de beaucoup de pragmatisme, au détriment de la rigueur théorique. Il convient donc de vérifier si, dans ces conditions d'utilisation, les réalisations du modèle sont quantitatives, i.e. constituées uniquement d'analogues (au sens statistique) des seules composantes structurales de l'échantillon observé, décrites par la partie conservée de la fonction d'autocorrélation.

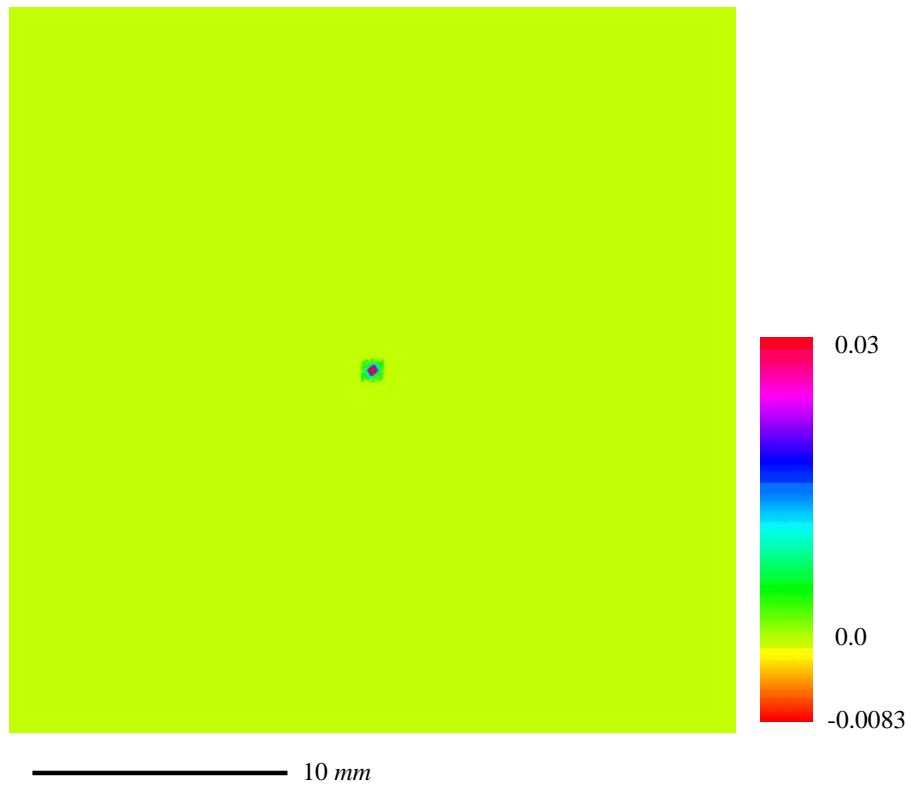


FIG. 3.6 – Illustration de la « troncature » en 2-D. L'autocorrélation de la figure 3.4 est mise à zéro pour les distances au-delà de ± 32 pixels ($\sim 0,5$ mm).

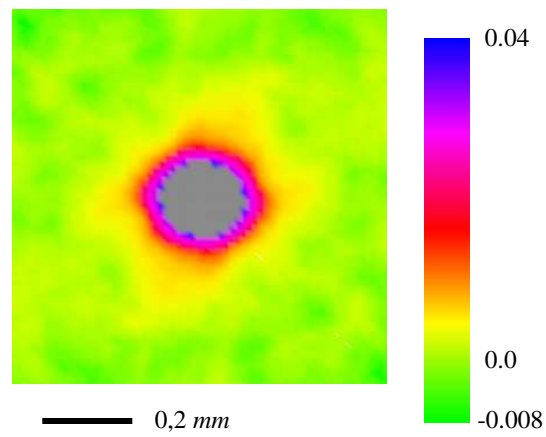


FIG. 3.7 – Agrandissement de la partie de la fonction d'autocorrélation conservée lors de la troncature (figure 3.6).

3.3.2 Apport des techniques de « réduction d'erreur » à la quantification de l'information portée par la contrainte du modèle

La figure 3.8 illustre en 2-D un exemple d'expérience numérique obtenue à l'aide de la version 2-D du modèle aléatoire.

Aux erreurs numériques près, on note la très bonne similarité entre la contrainte $\rho_Z^{L_c}$ du modèle et la fonction d'autocorrélation normée de la réalisation, $\rho_{Z,\text{réal}}^{L_c}$ sur les distances inférieures à L_c . Ce bon accord est d'autant plus visible sur la figure qui présente des sections de ces fonctions.

Dans ce qui suit, nous nous proposons de convaincre le lecteur que ce bon accord entre $\rho_Z^{L_c}$ et $\rho_{Z,\text{réal}}^{L_c}$ est un critère objectif pour établir que du point de vue des hétérogénéités (composantes structurales) de taille caractéristique inférieure à L_c (ici environ 0,5 mm), l'échantillon observé 3.8-(a) et la réalisation 3.8-(b) sont de vrais analogues.

L'argument présenté ci-dessus est basé sur le fait qu'un certain nombre de solutions pratiques au problème de retrouver un objet (une image digitale) à partir de son module de Fourier permettent de montrer heuristiquement que la seule connaissance de la fonction d'autocorrélation R_Z (equation 3.15), mesurée directement sur une image binaire de support fini, est suffisante pour retrouver systématiquement, au pixel près, cette image. On rappelle, que le module de Fourier $|\mathcal{F}(\nu_x, \nu_y)|$ s'obtient directement à partir de la seule connaissance de la fonction d'autocorrélation, selon le théorème de la corrélation [Brigham, 1974]

$$|\mathcal{F}(\nu_x, \nu_y)| = \sqrt{\text{TF}(R_Z(r, s))} \quad (3.23)$$

où TF () désigne la transformée de Fourier de son argument et ν_x et ν_y sont les nombres d'onde (horizontaux et verticaux). Le principe de l'algorithme permettant d'exhiber l'unicité de la relation entre une image binaire (2- ou 3-D) de taille finie et sa fonction d'autocorrélation est basée sur les travaux de Gerchberg and Saxton [1972] et est essentiellement dû à Fienup [1982]. Il a notamment été implémenté et appliqué à des images relevant de la communauté des milieux poreux par Anguy et al. [2001, 2003] et par Le Trong et al. [2001]. Par soucis de complétude, la forme la plus simple de ce type d'algorithme, dite algorithme de « réduction d'erreur » est rappelée sur la figure 3.10.

On part d'une estimation ad hoc de l'image (un bruit gaussien en l'occurrence). L'algorithme de réduction d'erreur procède par passages successifs du domaine spatial au domaine fréquentiel. A chaque itération, on applique deux contraintes :

1. une contrainte dite de Fourier, qui consiste simplement à remplacer le module de Fourier de l'estimation courante de l'image par $\sqrt{\text{TF}(R_Z)}$ (equation 3.23),
2. une contrainte objet qui consiste à annuler les points de l'image courante appartenant à un ensemble γ des points (x, y) tombant en dehors d'une estimation très grossière du support vrai de l'image à reconstruire, très grossièrement évalué ici comme un carré de côté la moitié du support carré de la fonction d'autocorrélation connue. Cette contrainte objet est une contrainte extrêmement faible.

A chaque itération on calcule aussi deux erreurs, une dans chaque domaine, qui valent zéro si l'estimation courante est égale, au pixel près, à l'image originale.

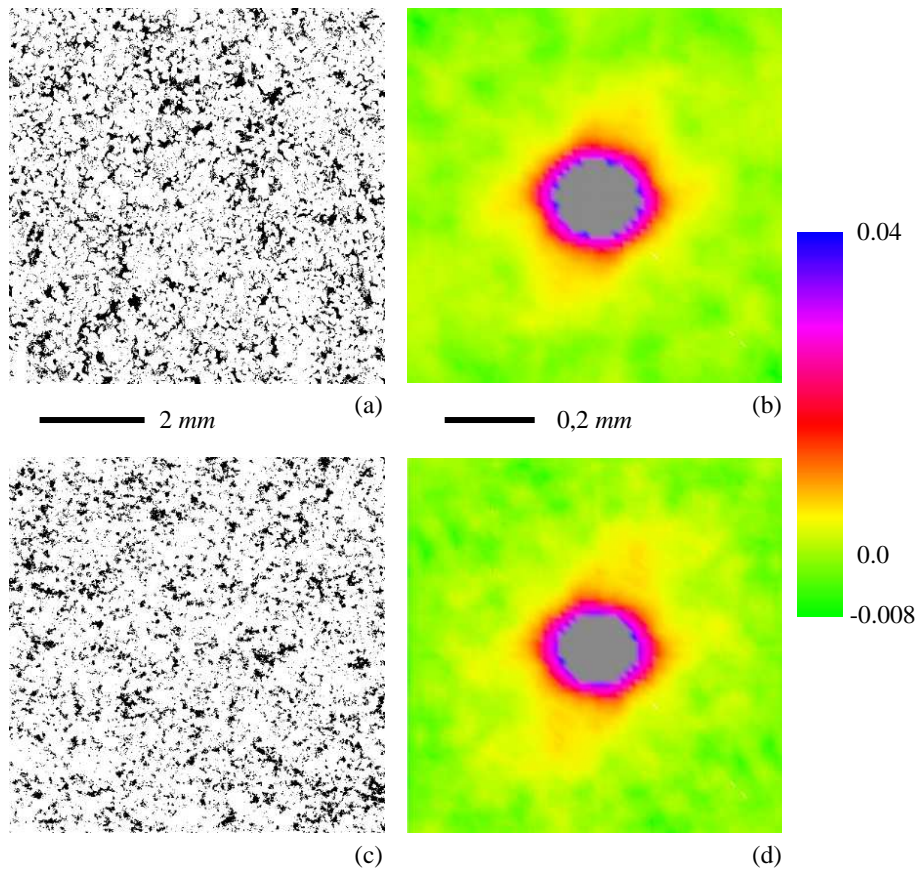


FIG. 3.8 – illustration en 2-D d’une réalisation du modèle aléatoire. En (a) une partie de l’image originale ayant servi de support à la mesure de la contrainte du modèle, il s’agit de l’image de la figure 3.3. En (b) contrainte du modèle, il s’agit de la fonction d’autocorrélation tronquée à ± 32 pixels ($\sim 0,5$ mm) des figures 3.6 et 3.7. En (c) une partie (un quart) d’une réalisation du modèle. L’image présentée mesure $6,9 \times 6,9$ mm ; taille d’un pixel : $13,57 \mu\text{m}$. En (d) la partie de la fonction d’autocorrélation, mesurée sur la réalisation, effectivement imposée par le modèle.

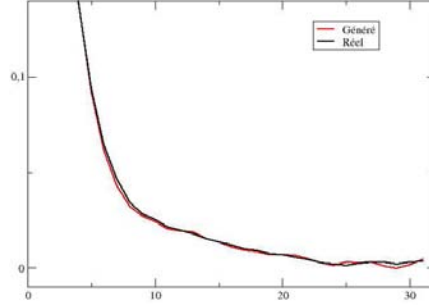


FIG. 3.9 – Section des fonctions contrainte et fonction d'autocorrélation générée, présentées dans la figure 3.8 (respectivement b et d). L'axe des abscisses est gradué en pixels.

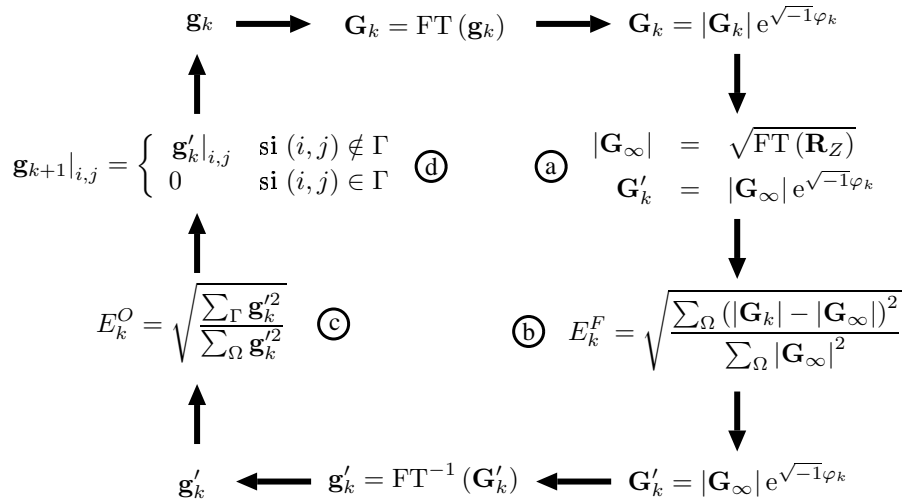


FIG. 3.10 – Algorithme de « réduction d'erreur » de Fienup [1982]. En haut à gauche, \mathbf{g}_k est l'estimation courante de l'image. On calcule sa transformée de Fourier \mathbf{G}_k à laquelle on applique la contrainte de Fourier en (a) : on remplace son module par $\sqrt{\text{TF}(R_Z)}$ (le module de Fourier de l'image à reconstruire, calculé à partir de la seule donnée de la fonction d'autocorrélation mesurée R_Z). On calcule en (b) une erreur de Fourier E_k^F permettant de suivre la convergence de l'algorithme. On repasse dans le domaine spatial par transformée de Fourier inverse, où on calcule en (c) une erreur objet E_k^O . On applique ensuite en (d) une contrainte objet très lâche : on annule les points de l'image en dehors d'une estimation très grossière de son support. On obtient une nouvelle estimation courante de l'image \mathbf{g}_{k+1} et deux erreurs, E_k^O et E_k^F qui s'annulent lorsque l'on a totalement reconstruit l'image originale. Pour plus d'informations, on pourra consulter les publications du groupe où cet algorithme est présenté [Anguy et al., 2001, 2003, Le Trong et al., 2001].

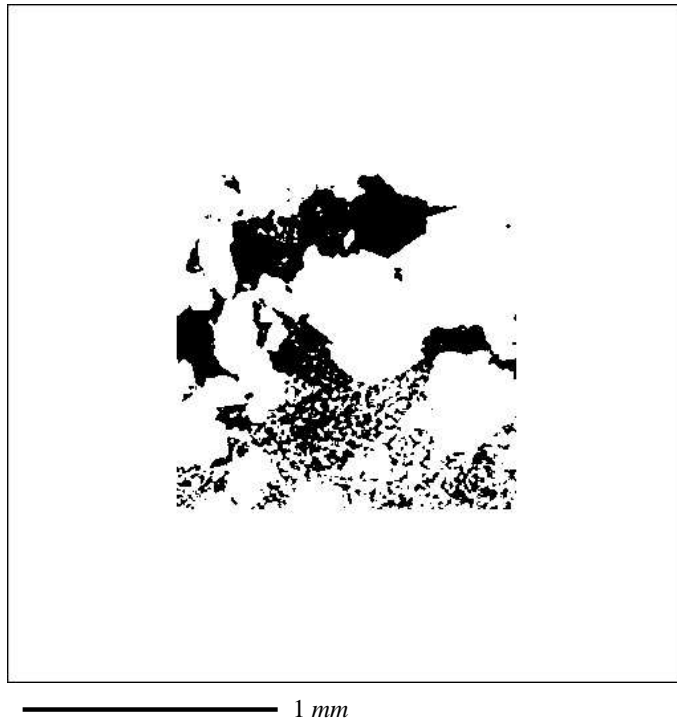


FIG. 3.11 – Image binaire d’un grès, de 256×256 pixels de $5 \mu m$ de côté. Les pixels fluides (valeur 1) sont en noir. Comme introduit sur la figure 3.10, la zone annulaire blanche représente l’ensemble des points γ .

Voyons maintenant la mise en œuvre de cet algorithme sur un exemple bidimensionnel.

Soit une image binaire 2-D de support fini (figure 3.11). La figure 3.12 représente sa fonction d’autocorrélation mesurée. La figure 3.13 représente l’estimation initiale que nous nous donnons de l’image à reconstruire (un champ gaussien de moyenne nulle et de variance unité). Les figures 3.14 à 3.18 représentent les estimations courantes de l’image à différentes itérations, le graphe de la figure 3.19 permet de suivre l’évolution de l’erreur objet en fonction de l’itération courante. À l’itération 12 (figure 3.14), on ne reconnaît aucune structure de l’image recherchée. À l’itération 15 880 (figure 3.15), on commence à distinguer dans l’image courante certaines des structures les plus grandes de l’image initiale. À l’itération 24 230 (figure 3.16), les structures de l’image initiale apparaissent clairement, correctement positionnées. Les frontières de ces grandes zones contrastées en cours de reconstruction ainsi que les structures plus fines (partie basse de l’image) sont encore très bruitées. L’image courante est encore loin d’être binaire. À l’itération 33 915 (figure 3.17), l’image initiale est quasiment totalement reconstruite, dans ses moindres détails. L’erreur objet n’est toutefois pas encore nulle du fait de présence de « bandes » de faibles amplitudes qui altèrent l’image. À l’itération 44 500 (figure 3.18), ces bandes ont disparues, l’image est binaire. Cette estimation finale est la reproduction au pixel près de

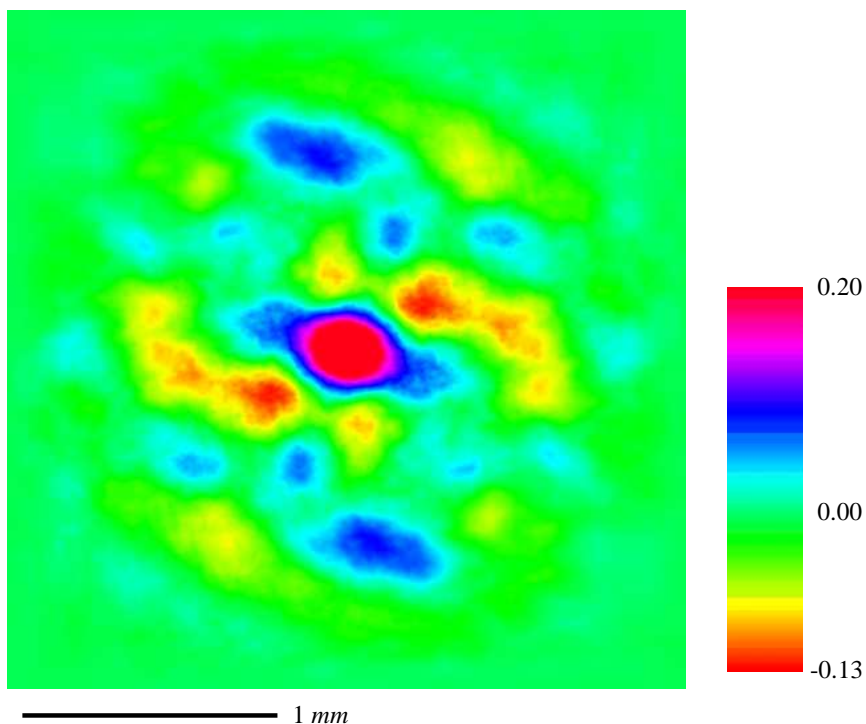


FIG. 3.12 – Fonction d'autocorrélation de l'image 3.11. Elle est définie sur un support quatre fois plus grand (512×512 pixels). Sur cette représentation, la fonction d'autocorrélation R_Z est centrée et normalisée par la variance $R_Z(0, 0)$. Afin de distinguer les petites fluctuations, toutes ses valeurs comprises entre 0,2 et 1 sont représentées avec la même couleur rouge (au centre).

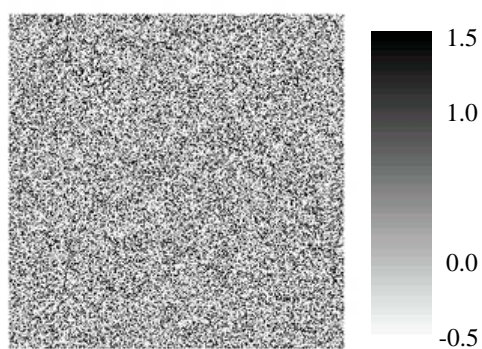


FIG. 3.13 – Estimation initiale (itération 0) de l'image de la figure 3.11. Comme nous n'avons a priori aucune information sur la structure de l'image, il s'agit d'un champ aléatoire normal de moyenne nulle et de variance unité.

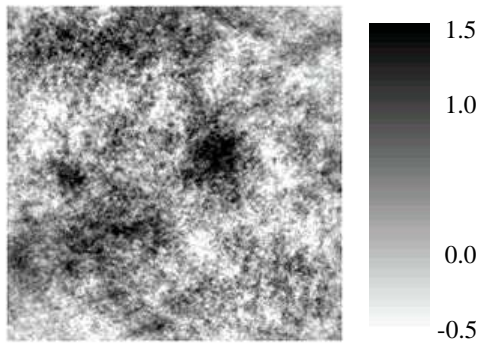


FIG. 3.14 – Estimation de l'image à l'itération 12 de l'algorithme d'« réduction d'erreur ». L'erreur objet vaut 0,123.

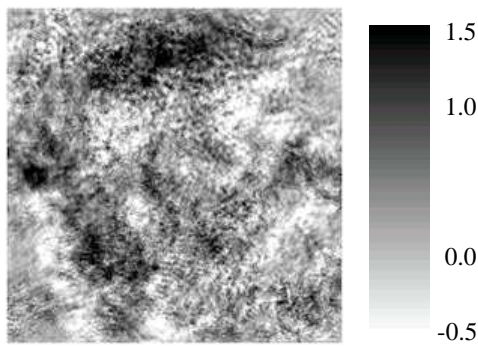


FIG. 3.15 – Estimation de l'image à l'itération 15 880 de l'algorithme d'« réduction d'erreur ». L'erreur objet vaut $5,79 \times 10^{-2}$.

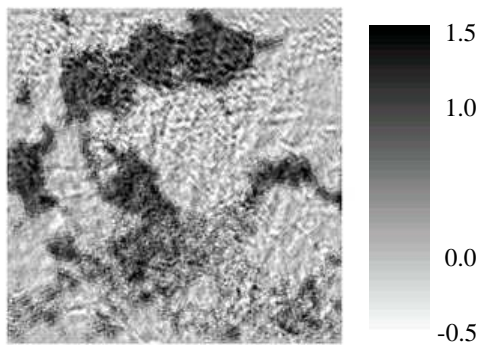


FIG. 3.16 – Estimation de l'image à l'itération 24 230 de l'algorithme d'« réduction d'erreur ». L'erreur objet vaut $3,87 \times 10^{-2}$.

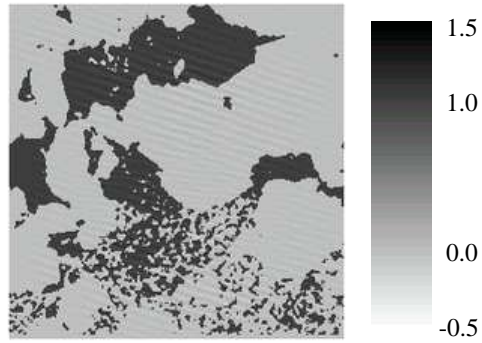


FIG. 3.17 – Estimation de l'image à l'itération 33 915 de l'algorithme d'« réduction d'erreur ». L'erreur objet vaut $8,20 \times 10^{-3}$.

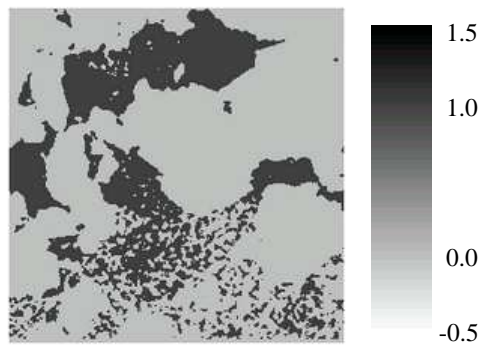


FIG. 3.18 – Estimation de l'image à l'itération 44 500 de l'algorithme d'« réduction d'erreur ». L'erreur objet vaut $4,80 \times 10^{-6}$. Cette image est la reproduction au pixel près de l'image originale (figure 3.11).

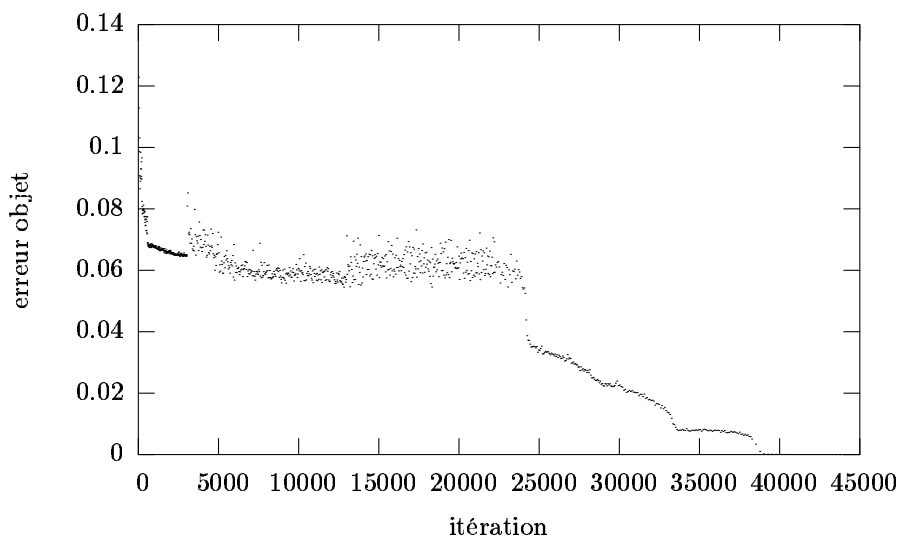


FIG. 3.19 – Évolution de l'erreur objet E^O au cours des itérations.

l'image originale.

Cette expérience numérique particulière nous a permis de retrouver exactement une image binaire à partir de sa seule fonction d'autocorrélation. L'utilisation d'autres estimations initiales gaussiennes que celle de la figure 3.13 a conduit systématiquement à retrouver, au pixel près l'image binaire recherchée [Anguy et al., 2001, 2003, Le Trong et al., 2001] ou une « ambiguïté triviale » de l'image recherchée. Par ambiguïté triviale, on entend ici une image que l'on sait avoir exactement la même fonction d'autocorrélation que l'image $f(x, y)$ à reconstruire, par exemple l'image miroir $f(-x, -y)$ ou encore $f(x, y)$ multipliée par une constante d'amplitude unitaire $e^{i\Phi} f(x, y)$. Ce résultat remarquable reste vrai pour toutes les images binaires que nous avons essayé de reconstruire à ce jour à l'aide de cette technique de réduction d'erreur. Il est entendu que ces ambiguïtés triviales changent, par exemple l'orientation de l'image reconstruite mais pas son apparence et qu'elles ne représentent pas des solutions multiples au problème de retrouver une image binaire à partir de la seule connaissance de sa fonction d'autocorrélation.

La figure 3.20 illustre quelques étapes d'une autre expérience numérique de reconstruction d'image, tirée de Le Trong et al. [2001].

L'ensemble des expériences numériques accomplies à ce jour et illustrées ci-dessus suggère ainsi (heuristiquement) qu'il y a unicité (i.e. qu'il existe une relation bijective) entre une image binaire de taille finie et sa fonction d'autocorrélation mesurée. La fonction d'autocorrélation mesurée est donc le descripteur le plus complet d'une image binaire de taille finie, qu'elle définit de manière unique. La fonction d'autocorrélation R_f mesurée sur une image f_{ij} sur un support de taille $L \times L$, et définie par $R_f(r, s) = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \hat{f}_{ij} \hat{f}_{i+r, j+s}$, porte deux types d'information :

1. par construction (du fait de la sommation) une information statistique sur la répartition spatiale de l'indicatrice de phase f_{ij} , $i, j = 1, \dots, L$

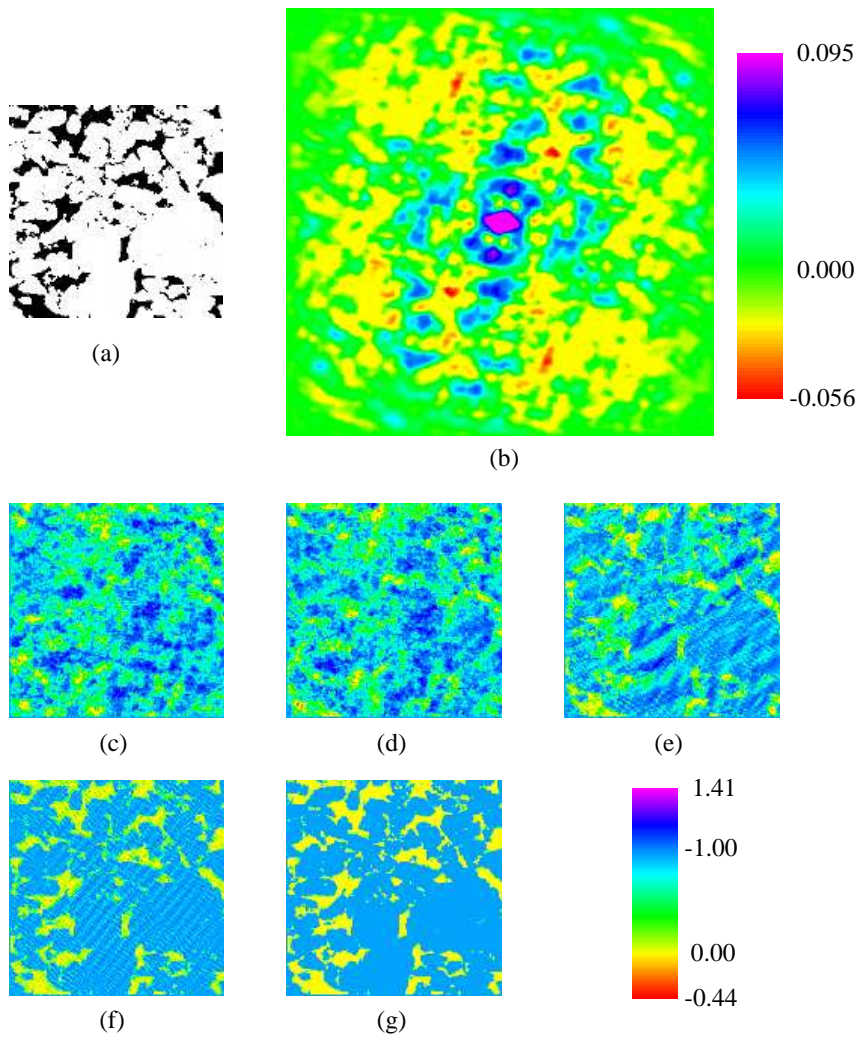


FIG. 3.20 – Illustration d’une expérience numérique de reconstruction d’image par algorithme de réduction d’erreur. En (a) l’image recherchée, en (b) sa fonction d’autocorrélation. En (c) estimation à l’itération 20 ; en (d) estimation à l’itération 560 ; en (e) estimation à l’itération 2560 ; en (f) estimation à l’itération 3360 ; en (g) estimation à l’itération 13875. Cette dernière estimation est égale au pixel près à l’image originale (a).

2. une information, superposée à la précédente, relative au seul échantillon utilisé pour sa mesure et liée à l'influence des frontières finies de l'échantillon [Matheron, 1965, 1970].

La fonction d'autocorrélation étant le paramètre structural le plus complet, comme montré heuristiquement ci-dessus, deux échantillons finis seront des analogues statistiques (au sens quantitatif) du terme si ils incluent tous les deux l'information structurale portée par la fonction d'autocorrélation.

La possibilité vue plus haut d'imposer, via le modèle aléatoire, la fonction d'autocorrélation mesurée pour $-L_c \leq (r, s, t) < L_c$ et $L_c \ll L$ illustre que la partie de la fonction d'autocorrélation mesurée relative aux structures de petite taille est essentiellement statistique et qu'à ce titre, l'échantillon réel observé de la figure 3.8-(a) et la réalisation du modèle aléatoire de la figure 3.8-(c) sont des analogues statistiques quantitatifs du point de vue des composantes structurales de taille inférieure à 0,5 mm (longueur de corrélation imposée).

A tous égards, le passage par troncature, de la fonction d'autocorrélation mesurée à la contrainte du modèle où seule l'information concernant les structures de taille inférieures à la longueur de corrélation est conservée doit être vu comme une simplification (suppression du contenu déterministe, i.e. lié au seul échantillon utilisé pour la mesure) d'un paramètre « trop complet » pour être utilisé dans le contexte d'un modèle aléatoire.

Pour que les réalisations du modèle soient considérées ici quantitatives, il reste toutefois à s'assurer qu'elles n'incluent pas, au-delà de la longueur de corrélation imposée, une structuration non contrôlée (non imposée) qui, le cas échéant pourrait avoir une influence sur la physique et donc biaiser notre étude de la relation entre propriétés physiques et microstructure.

3.3.3 Milieux poreux numériques de contenus variés : intérêt des techniques de recuit simulé

Dans la section 3.3.1, nous avons choisi de contraindre notre modèle aléatoire par une fonction

$$\rho_Z^{L_c}(r, s) = \frac{R_Z^{L_c}(r, s)}{\sigma_Z^2}, \quad -L_c \leq r, s < L_c, \quad L_c \ll L$$

où L_c est la longueur de corrélation et L la taille de l'image. La contrainte du modèle est obtenue en simplifiant la fonction d'autocorrélation mesurée en l'annulant au-delà de $\pm L_c$. Dans la section 3.3.2, nous avons vu que la propriété d'unicité, exhibée à l'aide des techniques de réduction d'erreur, combinée à l'aptitude du générateur à reproduire (aux erreurs numériques près) la contrainte du modèle est un gage que l'échantillon unique disponible et les réalisations du modèle sont analogues concernant leurs composantes structurales de taille inférieure à L_c . En faisant varier L_c , on peut donc, a priori, imposer telle ou telle composante structurale contenue dans l'échantillon observé, en accord avec l'idée de simplification de la microstructure associée ici à l'utilisation d'un modèle aléatoire de milieux poreux numériques. Il est ici entendu que la longueur de corrélation imposée L_c doit rester faible devant la taille de l'échantillon disponible (l'incapacité du modèle à imposer une contrainte $C_Z^{L_c^{\max}}$ implique que la nature de la contrainte n'est plus essentiellement statistique et fixe ainsi

la taille maximale des composantes structurales que l'on peut reproduire dans le contexte de cette utilisation pratique du modèle).

La longueur de corrélation L_c imposée détermine la taille du système d'équations algébriques non linéaires dont la solution numérique fournit les gains du filtre linéaire (equation 3.7). Ce système est surdéterminé puisqu'il comporte $(L_c + 1)^2$ inconnues en 2-D ou $(L_c + 1)^3$ en 3-D, et $(L_{c+1})^2 + L_c^2$ équations en 2-D ou $(L_c + 1)(2L_c + 1)^2 - 2L_c$ en 3-D. La résolution du système non linéaire se fait donc au sens d'une minimisation d'erreur. En d'autres termes, la nature surdéterminée du système (cas général d'un milieu anisotrope) implique que le modèle aléatoire reproduit la contrainte dans les réalisations au sens d'un « moindre carré ». Néanmoins, les figures 3.8 et 3.9 montrent que l'erreur introduite est minimale (et donc non considérée dans notre argumentaire). L'algorithme de Vignes et al. [1980], initialement utilisé au laboratoire [Anguy et al., 2001] pour résoudre le système non linéaire dans les versions 2-D du modèle existant à l'époque s'est avéré inapproprié à traiter les longueurs de corrélations de plus de quelques dizaines de pixels. Les contraintes CPU associées à cet algorithme robuste de résolution ne permettaient de reproduire que les composantes structurales de milieux très homogènes. Afin de pouvoir traiter les classes les plus variées de milieux poreux, de pouvoir reproduire dans nos milieux poreux numériques des caractéristiques structurales plus grandes et générer des milieux 3-D, nous avons développé dans les versions 2-D et 3-D du modèle aléatoire une nouvelle technique de résolution basée sur le recuit simulé.

Le recuit simulé : principe et bases

Le recuit simulé est une technique de minimisation d'une fonctionnelle qui s'inspire des principes de mécanique statistique décrivant le recuit d'un métal. Lors du lent refroidissement d'un matériau cristallin, sa configuration atomique s'organise de façon de plus en plus stable, de manière à minimiser son énergie interne. Ceci est décrit de façon statistique par la loi de Boltzmann : dans un solide à la température T , la probabilité $p(E, T)$ qu'existe une particule dont la configuration atomique lui confère une énergie interne E est proportionnelle à la quantité

$$p(E, T) \propto e^{-\frac{E}{kT}} \quad (3.24)$$

où k est la constante de Boltzmann. Dans les modèles de recuit, une modification de la configuration atomique d'une particule lui confère une nouvelle énergie interne et influe donc sur sa probabilité d'existence. Or la loi de Boltzmann favorise d'autant plus les états de basse énergie que la température est basse. En d'autres termes, avec la baisse de température, seules les structures ayant une configuration atomique stable ont finalement une probabilité non négligeable d'exister. Sur cette base, Metropolis et al. [1953] ont développé un algorithme de type Monte Carlo simulant le recuit d'un matériau. Kirkpatrick et al. [1983], en ont dérivé par simple analogie une méthode itérative d'optimisation dont la grande force est sa capacité à s'extraire de minima locaux, dans lesquels d'autres méthodes restent piégées, afin de converger vers un minimum global.

On considère l'ensemble des inconnues du système (pour notre problème, les coefficients a_{rst} , $r, s, t = 0, \dots, L_c$ du filtre linéaire) comme une configuration atomique variable dont on cherche à minimiser l'énergie, une fonctionnelle ad hoc dépendant de ces variables. Dans notre cas, à savoir déterminer

les coefficients obéissant à l'équation 3.7, on se propose de minimiser l'erreur quadratique entre la donnée $C_Y^{L_c}$ (obtenue à partir de la contrainte du modèle en résolvant l'équation 3.10) et son estimation courante $C_Y^{(i)}$ à l'itération i . Si on note $a_{rst}^{(i)}$, $r, s, t = 0, \dots, L_c$ l'estimation à l'itération i des coefficients du filtre linéaire, cette erreur quadratique est donnée par [Vignes et al., 1980]

$$E^{(i)} = \sum_{r=-L_c}^{L_c-1} \sum_{s=-L_c}^{L_c-1} \sum_{t=-L_c}^{L_c-1} \left(C_Y^{(i)}(r, s, t) - C_Y^{L_c}(r, s, t) \right)^2 \quad (3.25)$$

où $C_Y^{(i)}$ est l'estimation courante de l'autocorrélation de la population Y

$$C_Y^{(i)}(r, s, t) = \sum_{u=1}^{L_c} \sum_{v=1}^{L_c} \sum_{w=1}^{L_c} a_{rst}^{(i)} a_{r+u, s+v, t+w}^{(i)} \quad (3.26)$$

On introduit un paramètre fictif évolutif $T^{(i)}$, que l'on nomme température courante.

À l'itération i , on dispose donc d'une estimation courante de la solution $a_{rst}^{(i)}$ et de l'erreur courante $E^{(i)}$; on exécute les étapes suivantes

1. On perturbe l'estimation courante avec un champ aléatoire Δa_{rst} , $r, s, t = 0, \dots, L_c$

$$a'_{rst} = a_{rst}^{(i)} + \Delta a_{rst}, \quad r, s, t = 0, \dots, L_c \quad (3.27)$$

2. On calcule l'erreur associée à cette nouvelle configuration

$$E' = \sum_{r=-L_c}^{L_c-1} \sum_{s=-L_c}^{L_c-1} \sum_{t=-L_c}^{L_c-1} \left(C'_Y(r, s, t) - C_Y^{L_c}(r, s, t) \right)^2 \quad (3.28)$$

avec

$$C'_Y(r, s, t) = \sum_{u=0}^{L_c} \sum_{v=0}^{L_c} \sum_{w=0}^{L_c} a'_{rst} a'_{r+u, s+v, t+w} \quad (3.29)$$

3. Si cette nouvelle erreur est inférieure à l'erreur courante $E^{(i)}$, on adopte l'estimation a'_{rst} comme nouvelle estimation courante pour l'itération $i+1$. Si cette erreur est supérieure, on se donne la possibilité de l'accepter avec une probabilité p_{acc} définie par

$$p_{acc} = e^{-\frac{E^{(i)} - E'}{T^{(i)}}} \quad (3.30)$$

et directement dérivée de la loi de Boltzmann. En pratique, on procède à un tirage aléatoire uniforme entre 0 et 1 que l'on compare à cette probabilité. Si le test échoue, l'estimation courante reste inchangée.

4. On diminue la température courante $T^{(i)}$ et on commence l'itération suivante.

On constate à l'étape 3 qu'on se donne la possibilité d'augmenter l'erreur courante, c'est à dire de s'éloigner d'une solution optimale. C'est cette condition qui permet à la méthode du recuit simulé de s'extraire de minima locaux. La convergence globale est assurée par l'étape 4, c'est à dire la descente en température, ou « loi de recuit », puisque la probabilité d'accepter des augmentations d'erreur

(equation 3.30) diminue avec la baisse de température. En pratique, on procède à plusieurs itérations à température fixée, afin de trouver la configuration la plus stable possible à cette température.

Cette méthode présente toutefois la particularité d'être lourdement paramétrée. Nous devons en effet définir une configuration initiale $a_{rst}^{(0)}$, une température initiale $T^{(0)}$, un champ de perturbations aléatoires Δa_{rst} , une loi de recuit $T^{(i+1)} = f_R(T^{(i)})$ et le nombre d'itérations à température constante n_T . De par sa capacité à s'extraire des minima locaux avec une loi de recuit adéquate, la méthode, appliquée à notre problème, se révèle peu sensible à l'estimation initiale. On l'initialise donc avec un champ aléatoire normal respectant l'équation 3.6. Les conditions requises sur la perturbation sont (1) elle doit être aléatoire, (2) elle doit permettre d'atteindre tous les états possibles du système de variables. Ainsi, nous utilisons comme perturbation un champ aléatoire uniforme de bornes $[-1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-4}]$, généré à chaque itération. Le nombre d'itérations à température constante n_T est fixé arbitrairement à quelques centaines. Les deux derniers paramètres, la température initiale et la loi de recuit sont à la fois les plus délicats à définir (car extrêmement dépendants du système considéré) et déterminants pour la convergence de l'algorithme. Une température initiale trop basse ne permettra pas à la méthode d'explorer le champ possible de solutions en la faisant converger immédiatement vers un minimum probablement local. Trop haute, elle constitue une perte de temps inutile. Des remarques similaires s'appliquent à la loi de recuit. Ce sont sans doute pour ces raisons qu'ont été développés des techniques qui ont pour but d'adapter ces paramètres au problème considéré.

Kirkpatrick [1984] propose de fixer la température $T^{(0)}$ de telle manière qu'une augmentation d'erreur ait initialement une probabilité d'être acceptée de 0,8. Ceci nécessite de conduire quelques (n_T en pratique) itérations préalables, dans lesquelles on accepte toutes les augmentations d'erreur. L'augmentation moyenne de l'erreur au cours de ces itérations δE nous donne la température initiale

$$T^{(0)} = \frac{\delta \bar{E}}{\ln(0,8)} \quad (3.31)$$

van Laarhoven and Aarts [1987] proposent la loi de recuit adaptative suivante

$$T^{(i+1)} = \frac{T^{(i)}}{1 + \frac{T^{(i)} \ln(1+\delta)}{3\sigma_E^{(i)}}}, \quad 0 < \delta < 1 \quad (3.32)$$

qui module la vitesse de descente en température en fonction de mesures statistiques sur les n_T itérations précédentes : $\sigma_E^{(i)}$ est l'écart type de l'erreur au cours de ces itérations. Il ajoute cependant un paramètre borné supplémentaire δ permettant un contrôle plus fin de la vitesse de recuit.

Expériences numériques 2-D

La méthode du recuit simulé étant implémentée, nous reprenons ici l'expérience numérique 2-D initiée dans la section 3.3.2, figure 3.8, afin d'illustrer la place de notre modèle aléatoire dans la démarche de simplification de la microstructure. Sur la figure 3.8, seules les composantes structurales de taille inférieure à environ 0,5 mm ($L_c = 32$ pixels) de l'échantillon disponible ont été

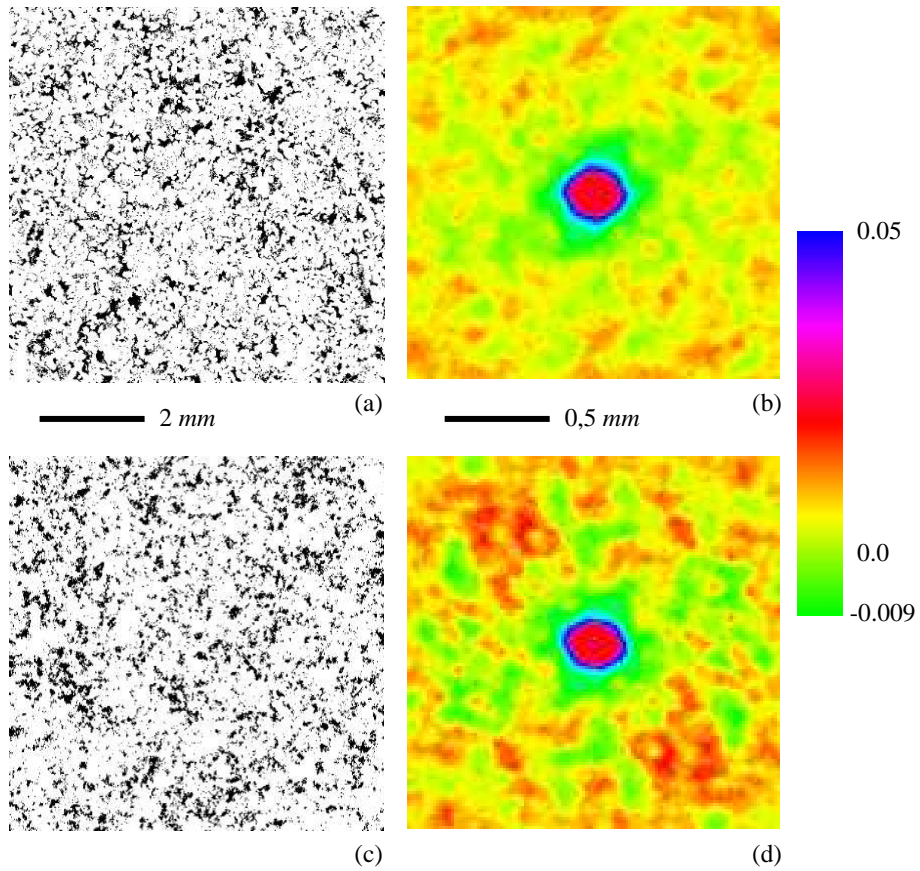


FIG. 3.21 – Illustration en 2-D d’une réalisation du modèle aléatoire. Cette figure est analogue à la figure 3.8. La longueur de corrélation est ici de 64 pixels ($\sim 1 \text{ mm}$).

reproduites dans les réalisations du modèle. Les figures 3.21 et 3.22 illustrent le même type d’expériences mais en reproduisant statistiquement dans les réalisations du modèle les composantes de l’échantillon observé de taille inférieures à 1 mm ($L_c = 64$ pixels) et taille inférieure à 2 mm ($L_c = 128$ pixels), respectivement. La possibilité de reproduire (aux erreurs numériques près) la contrainte du modèle, combinée aux résultats exposés dans la section 3.3.2 permet de dire une fois de plus que l’échantillon disponible et les réalisations du modèle sont des analogues statistiques concernant les composantes structurales de taille inférieure à L_c .

3.3.4 Recuit simulé et contrôle de l’information structurale imposée

La figure 3.23 résume les expériences numériques vues ci-dessus. Les réalisations synthétiques du modèle aléatoire incluent, ou n’incluent pas telle ou telle composante structurale, identifiée ici par sa longueur caractéristique, de

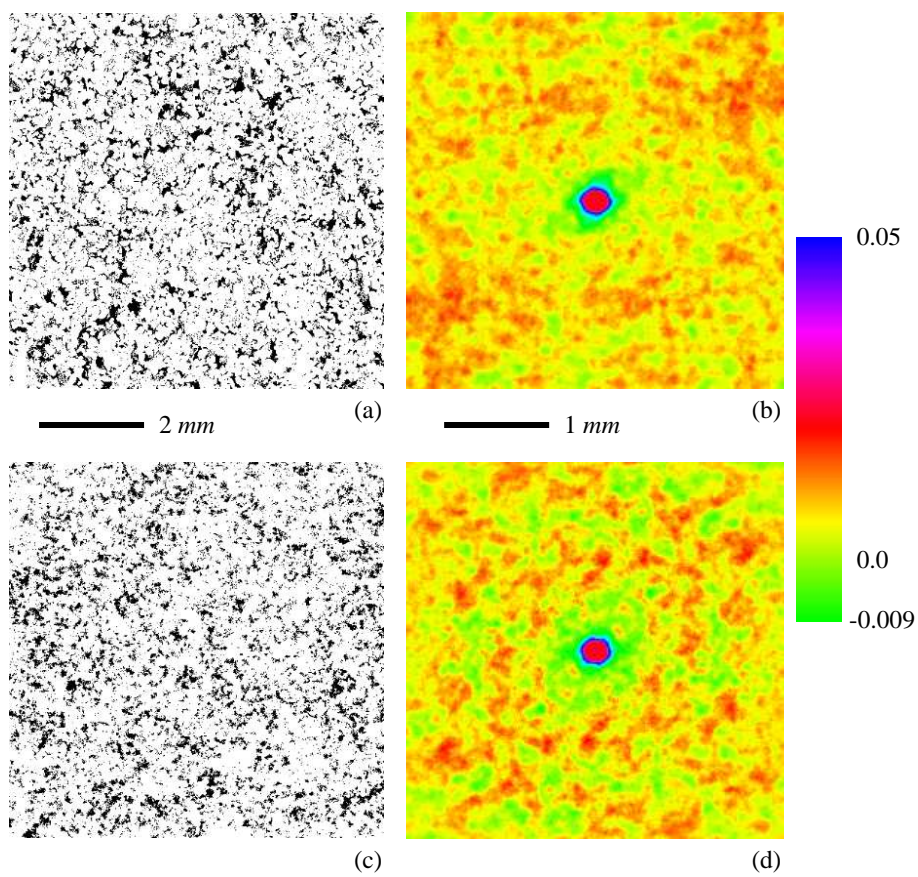
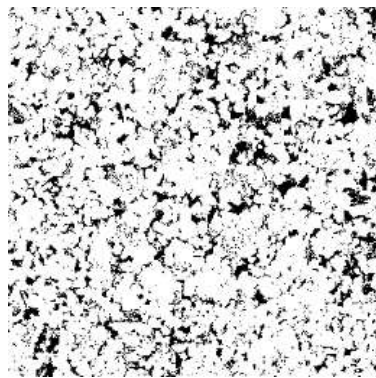
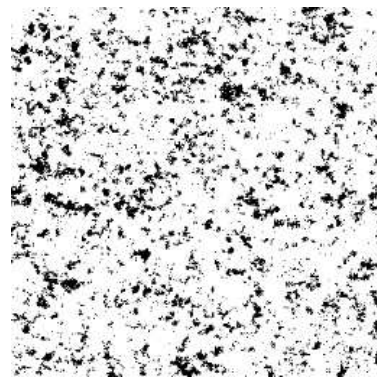


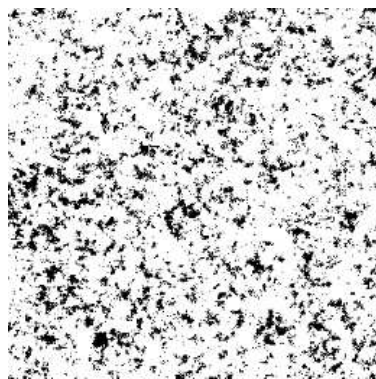
FIG. 3.22 – Illustration en 2-D d’une réalisation du modèle aléatoire. Cette figure est analogue à la figure 3.8. La longueur de corrélation est ici de 128 pixels ($\sim 2\text{ mm}$).



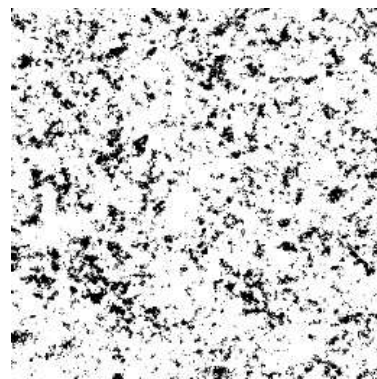
échantillon observé (a)



$L_C = 0,5mm$ (b)



$L_C = 2mm$ (d)



$L_C = 1mm$ (c)

FIG. 3.23 – Synthèse des expériences numériques présentées dans les figures 3.8, 3.21 et 3.22.

l'échantillon réel observé. Par exemple, le milieu synthétique de la figure 3.23-(d) inclut les hétérogénéités dont la taille est comprise entre 1 et 2 *mm* alors qu'elles sont absentes du milieu synthétique de la figure 3.23-(c). C'est ce type d'expérience qui nous permettra, à terme, de s'appuyer sur les techniques de changement d'échelle (chapitres 1 et 2) pour évaluer l'impact sur les propriétés physiques macroscopiques de telle ou telle composante structurale d'un milieu poreux réel. Néanmoins, pour ne pas biaiser l'étude de la relation entre la microstructure et les propriétés de transport \mathbf{D}^* et α , il faut s'assurer que les réalisations du modèle aléatoire n'incluent pas (au-delà de la longueur de corrélation L_c imposée) d'autres hétérogénéités que celles décrites statistiquement par la contrainte du modèle. La présence éventuelle de telles composantes de taille supérieure à la longueur de corrélation peut être mise en évidence grâce à la *densité spectrale de puissance de Fourier* (DSP). La densité spectrale de puissance d'une image binaire est la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation. Ces deux quantités étant liées par un simple opérateur mathématique, elles décrivent la même information (structurale) mais l'expriment de façon différente. Par construction la fonction d'autocorrélation souligne la signature des composantes de petite taille, la densité spectrale de puissance privilégie la signature des hétérogénéités de grande dimension. La DSP est une fonction permettant d'évaluer la contribution d'une composante structurale de taille et d'orientation donnée, à la variance totale de l'image. L'orientation et la taille de chaque hétérogénéité sont calibrées en nombres d'onde (ν_x, ν_y) , inversement proportionnels aux longueurs d'onde des hétérogénéités considérées. Du fait qu'elle souligne davantage les composantes structurales de grande taille, pour la plupart des couples (ν_x, ν_y) , la contribution à la variance totale de l'hétérogénéité est très faible [Anguy et al., 1994, Prince et al., 1995]. Il est donc classique de ne représenter que les hétérogénéités les plus fortes en terme de leur contribution à la variance totale de l'image. La figure 3.24 représente la densité spectrale mesurée sur la réalisation du modèle aléatoire de la figure 3.8 (longueur de corrélation 0,5 *mm*). Il est important de bien préciser ce qui est représenté sur ce schéma. En cumulé, les hétérogénéités représentées sur la figure 3.24 représentent 5 % de la variance de l'image. Les 95 % non représentés sont répartis sur la totalité du support de la DSP (i.e. $\nu_x, \nu_y \in [-1024, +1024]$). Le nombre d'onde étant inversement proportionnel à la longueur d'onde, les traces des hétérogénéités de plus grande taille se trouvent au centre de la DSP, les plus petites sont rejetées vers les bords. Sur la figure 3.24 le rayon de chaque cercle de centre (ν_x, ν_y) représente la contribution à la variance totale d'une hétérogénéité de taille et d'orientation calibrée par les nombres d'ondes ν_x et ν_y . La taille λ est donnée par

$$\lambda = \frac{2L}{\sqrt{\nu_x^2 + \nu_y^2}} \quad (3.33)$$

l'orientation θ par

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\nu_y}{\nu_x} \quad (3.34)$$

Afin de bien faire ressortir les hétérogénéités les plus fortes, le rayon d'un cercle est proportionnel au cube de la puissance. Le carré en pointillé représente la taille maximale des hétérogénéités imposées par le modèle avec une longueur de corrélation d'environ 0,5 *mm* (32 pixels). La signature des hétérogénéités

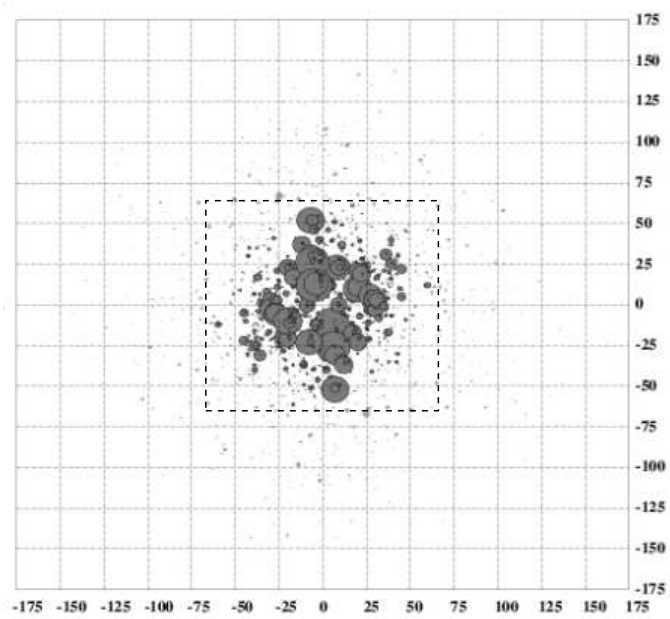


FIG. 3.24 – Représentation de la densité spectrale de puissance mesurée sur la réalisation du modèle aléatoire illustré sur la figure 3.8. La contrainte est imposée sur une longueur de ± 32 pixels ($\sim \pm 0,5$ mm), les nombres d'ondes discrets correspondants (± 64) sont repérés par le rectangle en pointillés.

structurales décrites par la contrainte du modèle sont à l'extérieur du rectangle en pointillé. En d'autres termes, les composantes structurales imposées via la contrainte du modèle s'organisent à notre insu à des échelles supérieures à L_c ! Du fait du fonctionnement du modèle aléatoire, ces hétérogénéités sont la conséquence des valeurs prises par le champ gaussien X utilisé en entrée du modèle. Ces hétérogénéités non imposées représentent un bruit structural, non contrôlé, qui peut éventuellement avoir un impact sur les processus physiques et biaiser une étude visant à expliquer les propriétés physiques effectives comme la conséquence des caractéristiques structurales de taille inférieure à L_c via la contrainte $C_Z^{L_c}$ (equation 3.22). Les nombres d'onde étant inversement proportionnels aux longueurs d'onde, toutes les composantes structurales représentées par des cercles à l'extérieur de ce rectangle sont effectivement imposées par le modèle, ainsi que nous l'avons vu dans la section précédente. Il apparaît clairement que la majorité (en terme de contribution à la variance totale de l'image) des composantes structurales contenues dans cette image n'ont pas été imposées via la contrainte du modèle. Les figures 3.25 et 3.26 représentent respectivement les DSP associées aux réalisations des figures 3.21 et 3.22, correspondant à des longueurs de corrélation d'environ 1 mm et 2 mm. On remarque immédiatement que lorsque L_c augmente les composantes de contribution relative à la variance totale se répartissent entre hétérogénéités imposées et non imposées (figure 3.21), et ne concernent les hétérogénéités non imposées que de façon minoritaire lorsque L_c atteint 2 mm. Le bruit structural est associé à des hétérogénéités de plus en plus faibles lorsque L_c augmente. De notre point de vue, le poids relatif de ce bruit structural est lié au fait qu'après mise à zéro de l'autocorrélation mesurée R_Z au-delà de L_c , la contrainte du modèle $R_Z^{L_c}(r, s) / R_Z^{L_c}(0, 0)$ ne vérifie plus une propriété importante d'une fonction d'autocorrélation : elle n'est plus à moyenne nulle [Anguy et al., 2001]. De ce point de vue, la contrainte (autocorrélation mesurée tronquée) n'est plus une fonction d'autocorrélation. En revanche la fonction d'autocorrélation d'une réalisation vérifie cette condition de moyenne nulle, qui est donc rétablie par des « pics » additionnels (non contrôlés) existant au-delà de la longueur de corrélation L_c qui sont liés aux hétérogénéités de grande taille apparaissant sur les DSP. L'amplitude de ces pics additionnels, i.e. le poids relatif des hétérogénéités associées aux distances supérieures à L_c est d'autant plus grande que l'écart par rapport à la condition de moyenne nulle est grand. Or, dans la pratique l'intégrale de la contrainte du modèle se rapproche « rapidement » de zéro lorsque L_c augmente. C'est ce qui explique la minimisation du bruit structural lors du passage des figures 3.24 à 3.21 puis à 3.22.

La méthode du recuit simulé en donnant la possibilité de simuler des milieux poreux numériques en imposant des longueurs de corrélation plus importantes, nous permet donc de minimiser le bruit structural non contrôlé apparaissant suite à notre utilisation très pragmatique du modèle aléatoire.

3.3.5 Conclusions

Dans ce troisième chapitre, nous avons tout d'abord présenté et illustré le modèle aléatoire 3-D de milieux poreux numériques 3-D implémenté au cours de cette thèse (section 3.1 et 3.2). Le modèle a été présenté comme la première étape d'une stratégie globale de simplification de la microstructure de milieux poreux réels, dans le but d'étudier de façon complète et prédictive la relation en-

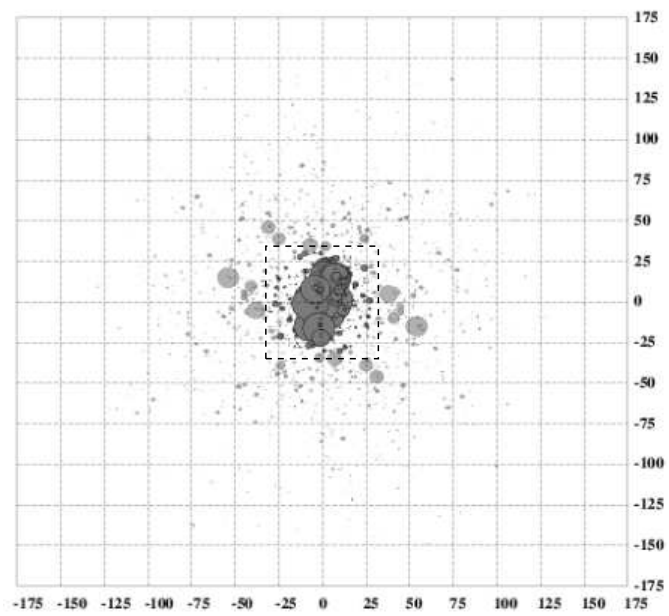


FIG. 3.25 – Représentation de la densité spectrale de puissance mesurée sur la réalisation du modèle aléatoire illustré sur la figure 3.21. La contrainte est imposée sur une longueur de ± 62 pixels ($\sim \pm 1$ mm), les nombres d'ondes discrets correspondants (± 32) sont repérés par le rectangle en pointillés. Les disques clairs sont associés à des hétérogénéités effectivement imposées par le modèle aléatoire.

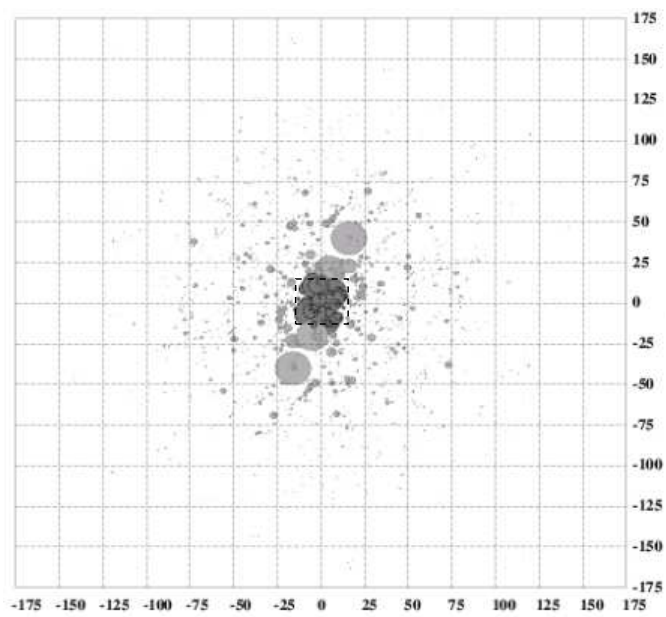


FIG. 3.26 – Représentation de la densité spectrale de puissance mesurée sur la réalisation du modèle aléatoire illustré sur la figure 3.22. La contrainte est imposée sur une longueur de ± 128 pixels ($\sim \pm 2$ mm), les nombres d'ondes discrets correspondants (± 16) sont repérés par le rectangle en pointillés. Les disques clairs sont associés à des hétérogénéités effectivement imposées par le modèle aléatoire.

tre microstructure et propriétés physiques macroscopiques de dispersion. Dans la section 3.3, nous avons abordé une question difficile, à savoir : lorsque le milieu poreux est connu au travers d'un échantillon unique de taille finie, les réalisations du modèle aléatoire peuvent-elles être considérées comme des analogues quantitatifs de l'échantillon ? Par analogues quantitatifs, et dans le cadre de notre démarche de simplification de la microstructure, on entend : des milieux incluant uniquement des analogues statistiques des composantes structurales de l'échantillon observé, échantillonnées par la contrainte du modèle aléatoire. Par souci de commodité, cette question fondamentale a été traitée ici en 2-D et il est entendu que toutes nos conclusions, rappelées ci-dessous se généralisent immédiatement en 3-D.

La stratégie mise en œuvre pour répondre à la question posée est de nature heuristique et numérique. Elle n'a aucune prétention théorique.

Concernant l'équivalence statistique, entre réalisations du modèle et l'échantillon observé pour les hétérogénéités structurales décrites par la contrainte du modèle (i.e. de longueur caractéristique inférieure à L_c), notre idée était d'exhiber un critère global pouvant se substituer à la comparaison d'une série de mesures ad hoc (par analyse d'images), caractérisant tel ou tel aspect de l'échantillon réel et des milieux générés. Le critère global est ici la possibilité de reproduire dans chaque réalisation la contrainte du modèle sur un support fini de taille fixée par L_c . La pertinence et la qualité de ce critère sont basées sur la mise en évidence heuristique (par le biais de l'algorithme de réduction d'erreur) de l'unicité de la relation entre une image binaire finie et sa fonction d'autocorrélation. Cette unicité suggère que la fonction d'autocorrélation $R_Z(r, s, t)$ mesurée sur une image en est un descripteur complet puisqu'elle la caractérise au pixel près.

De ce point de vue, la possibilité d'imposer sur une réalisation binaire du modèle aléatoire une partie $R_Z^{L_c}(r, s)$, $-L_c \leq r, s < L_c$, $L_c \ll L$ de la fonction d'autocorrélation mesurée est cohérente avec l'idée suivante : l'utilisation dans un contexte statistique, i.e. pour caractériser une infinité de réalisations binaires, du paramètre $R_Z(r, s)$; $-L_c \leq r, s < L_c$, décrivant totalement l'échantillon unique sur lequel il est mesuré, nécessite de simplifier R_Z afin de n'en conserver que les aspects statistiques. La mise à zéro de certaines valeurs de R_Z pour construire $R_Z^{L_c}$ est une simplification. Dans ce contexte, la capacité du modèle à imposer sur ses réalisations cette contrainte suggère bien que la partie de la fonction d'autocorrélation conservée est essentiellement statistique. La fonction d'autocorrélation étant un descripteur complet de la microstructure, l'échantillon disponible et les réalisations du modèle sont des analogues en ce qui concerne les composantes structurales décrites par $R_Z^{L_c}$, c'est à dire celles dont la taille est inférieure à L_c .

Ce premier élément de réponse apporté, il nous restait à vérifier, pour qualifier les réalisations d'analogues quantitatifs d'un échantillon réel, qu'elles n'incluent pas d'hétérogénéités au-delà de la longueur de corrélation imposée. L'examen des densités spectrales de puissance a révélé au-delà de L_c l'existence d'un bruit structural (non contrôlé), lié au fait que la contrainte imposée ne vérifie pas toutes les propriétés d'une fonction d'autocorrélation. Dans le contexte de notre modèle, ce bruit est la conséquence des valeurs prises par la population gaussienne initiale X (étape 1 du modèle) et son amplitude relative montre (expérimentalement) une très forte corrélation avec l'écart des propriétés de la contrainte avec les propriétés théoriques d'une fonction d'autocorrélation [An-

guy et al., 2001, Le Trong et al., 2001]. L'utilisation du recuit simulé permet alors de considérer des « plages » de longueurs de corrélation telles que la fonction $R_Z^{L_c}$ vérifie approximativement les propriétés d'une fonction d'autocorrélation. Le bruit structural inclus dans les réalisations est minimisé et de ce point de vue, les réalisations redeviennent cohérentes avec la notion de milieu poreux homogène (peu structuré) au-delà de L_c .

Il est clair que l'argumentation résumée ci-dessus pêche par son côté heuristique et qu'une réflexion complémentaire à un niveau théorique permettrait de la renforcer. Néanmoins, nous avons proposé un contexte pragmatique et numérique visant à confirmer que les réalisations de notre modèle sont cohérentes avec notre stratégie de simplification de la microstructure.

Étayer un peu plus nos conclusions est une des perspectives de ce travail de thèse. Ce chapitre 3 présente néanmoins à notre connaissance un effort original pour argumenter que des milieux poreux numériques générés à partir d'une mesure directe sur un échantillon unique peuvent être vus comme des analogues quantitatifs de l'échantillon réel observé, si un minimum de précautions est pris.

Ainsi, les milieux synthétiques générés, tel celui illustré sur la figure 3.2 peuvent être vus comme des milieux simplifiés dont le contenu structural est sinon maîtrisé, au moins quantifié.

Chapitre 4

Obtention de réseaux par morphologie mathématique

Il s'agit ici de construire des modèles de réseaux plus quantitatifs que dans le chapitre 2 et qui puissent être considérés comme des analogues de milieux poreux discrets du point de vue des propriétés physiques d'intérêt (\mathbf{D}^* , α). Notre idée est d'explicitier pour un échantillon observé (image digitale produite par le modèle aléatoire ou issue de la tomographie X, tel celui de la figure 4.1) les règles contrôlant l'affectation des tailles des rayons d'accès (« étranglements ») aux « pores » adjacents ; étant entendu que plusieurs approches indépendantes, relevant souvent des géosciences, tendent à montrer que ces règles sont suffisantes pour prédire les propriétés d'écoulement et de transport [Ehrlich et al., 1991a,b, McCreesh et al., 1991, Anguy et al., 2002, 1999]. Pour atteindre cet objectif, nous proposons une technique d'analyse d'images non linéaire, la morphologie mathématique [Serra, 1982, 1988]. Après une présentation des principes et des fonctions de base de la morphologie mathématique qui nous seront utiles, nous présentons une stratégie, basée sur une idée originale de Fricout et al. [2002] mise en œuvre pour extraire le « squelette filaire » de l'espace poreux discret 3-D, i.e. l'« ossature » du modèle de réseau. Nous montrons alors comment la donnée d'une telle transformée morphologique permet de mesurer localement et simplement les caractéristiques géométriques permettant d'affecter un « volume » au squelette et d'obtenir ainsi le modèle de réseau recherché.

4.1 Présentation intuitive des techniques d'analyse d'images mises en œuvre

On considère une image discrète, 3-D, binaire d'un milieu poreux (obtenu ici soit par imagerie 3-D sur un échantillon ou simulé via notre générateur aléatoire de milieux poreux numériques). Cette image digitale est définie dans \mathbb{Z}^3 . Elle est constituée d'un ensemble O de voxels représentant l'espace poreux et de l'ensemble complémentaire O^C de voxels représentant la matrice solide (4.1). L'idée est donc de s'appuyer sur des techniques d'analyse d'images quantitatives pour exprimer l'espace poreux discret original (figure 4.1) sous la forme d'un modèle de réseau constitué par exemple de tubes capillaires (les étranglements)

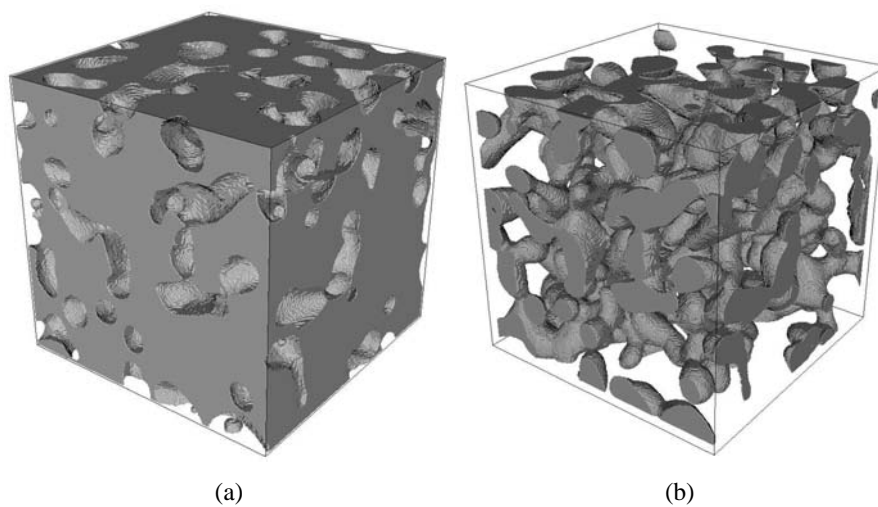


FIG. 4.1 – Exemple d'image digitale binaire. Il s'agit d'un échantillon réel de glace poreuse, acquis par tomographie X (gracieusement mis à notre disposition par le Centre d'Étude de la Neige, Météo France, St Martin d'Hères). La fraction volumique et l'organisation spatiale de la phase glace (b) étant intuitivement plus proche de la porosité des milieux rencontrés en hydrologie, la vue (b) est considérée ici comme représentant la porosité d'un milieu ad hoc dont la phase solide est représenté en (a). Ce choix n'obère en rien la généralité de l'approche puisqu'il s'agit ici uniquement d'illustrer les outils mis en œuvre sur un cas d'école restant acceptable dans le contexte du PNRH.

connectant des sphères (les pores). Le modèle de réseau est totalement défini par les paramètres suivants

- les coordonnées spatiales de chaque centre de pore (les noeuds du réseau),
- les connexions entre pores adjacents (les branches du réseau, qui fournissent notamment le nombre de coordination de chaque pore),
- les caractéristiques géométriques permettant d’affecter un volume aux noeuds et aux branches. Dans le cas d’un modèle de réseau de type « ball and stick » [Bakke and Øren, 1997, Lowry and Miller, 1995], illustré sur la figure 2.2, ces caractéristiques se résument à des rayons de sphères et de capillaires.

Il s’agit donc ici d’extraire l’ensemble de ces paramètres par une mesure quantitative sur une image digitale 3-D du milieu poreux considéré. Deux approches sont à priori envisageables.

1. Segmenter l’espace poreux en ses composantes fondamentales, pores et étranglements, par exemple à l’aide de fronts d’onde géodésiques, très utilisés pour segmenter un objet complexe en ses composantes structurales élémentaires [Serra, 2002]. Simplifier ensuite la géométrie de ces éléments, par exemple sous la forme de sphères et de capillaires droits. La philosophie est ici de simplifier la micro-géométrie de l’espace poreux. La difficulté inhérente à cette approche est qu’il n’existe pas d’accord général sur la définition de pore et d’étranglement [Dullien, 1992]. La figure 4.2 illustre ce point en deux dimensions. Si l’on « voit » sur la figure 4.2-(a) un « volume » assimilable à un pore possédant trois connexions, quel critère quantitatif et aussi universel que possible adopter pour partitionner l’espace poreux (en blanc) en un domaine « pore » et trois domaines « connexion » qu’il s’agirait ensuite de simplifier pour obtenir le réseau de pores de la figure 4.2-b ?
2. Une alternative à cette approche consiste à imposer dans le réseau la topologie de l’espace poreux (et certaines propriétés de nature géométrique, par exemple les points terminaux) via une transformée morphologique particulière, le squelette filaire de l’espace poreux. Contrairement à la stratégie précédente, les pores et les étranglements ne sont pas identifiés formellement mais émergent en tant que propriétés du squelette filaire : ses noeuds étant associés au centre des pores, les étranglements étant portés par ses branches. Les caractéristiques géométriques décrivant la taille et la forme des pores peuvent alors être mesurées simplement en se servant du squelette comme support [Bakke and Øren, 1997]. Ici le modèle de réseau est davantage une représentation de la réalité.

Notre souhait d’aller vers une extraction quantitative de l’information micro-structurale de l’image nous impose le choix de la deuxième stratégie, qui permet d’éviter tout recours à un critère de taille, forcément arbitraire, pour définir les composantes élémentaires de l’espace poreux (les pores et les étranglements).

La stratégie adoptée nous impose ainsi de quantifier dans un premier temps l’information topologique de l’espace poreux original sous la forme d’un squelette filaire (au sens d’une ligne dans \mathbb{Z}^3 ayant une épaisseur de un voxel), centré et homotopique à l’espace poreux initial (i.e. préservant la topologie ainsi que certaines propriétés géométriques telles que les points terminaux). Sur la figure 4.3, une illustration du squelette est tracée en pointillés. Cet outil fait immédiatement émerger les centres de pores (noeuds du graphe) et les connexions en-

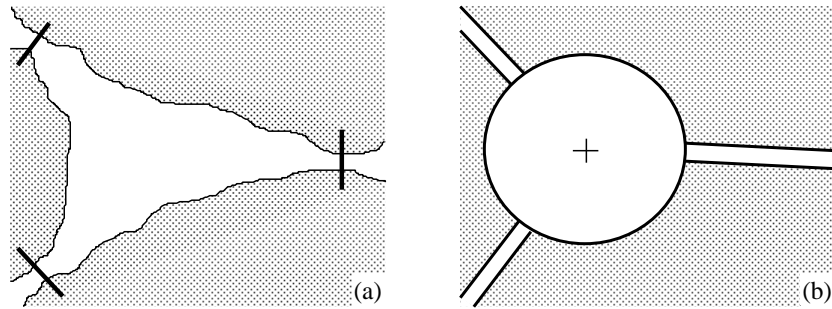


FIG. 4.2 – Illustration en 2-D du problème de l'extraction d'un réseau de pores d'une image de l'espace poreux : en (a) l'image discrète d'un pore (porosité en blanc, matrice solide en grisé) possédant trois connexions avec des pores voisins, dont les sections minimales sont repérées par des traits épais, en (b) une représentation possible de l'espace poreux sous la forme d'une sphère et de trois tubes capillaires.

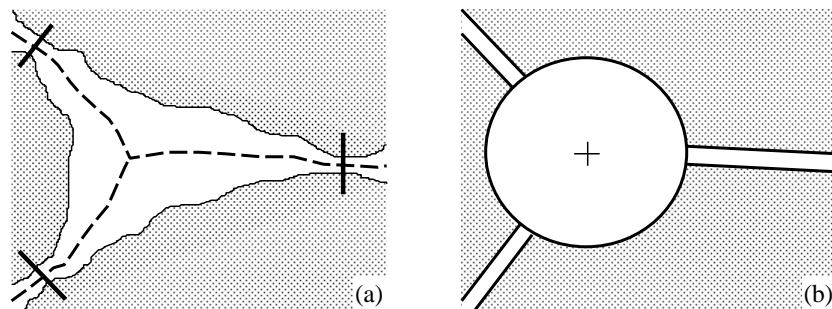


FIG. 4.3 – Illustration en 2-D de l'utilisation du squelette filaire pour extraire l'information nécessaire à la construction du réseau de pore. On retrouve en (a) l'image du pore de la figure 4.2 et le squelette de l'espace poreux en pointillé.

tre les noeuds (les branches du graphe), c'est à dire la topologie du milieu. La connaissance du squelette et la donnée du milieu poreux initial permettent d'obtenir simplement et localement les caractéristiques géométriques permettant d'affecter un volume aux composantes élémentaires de l'espace poreux. La section de chaque branche (connexion) peut être mesurée entre deux noeuds comme indiqué schématiquement sur la figure 4.4, la section minimale fournissant alors le rayon (équivalent) du capillaire droit représentant l'étranglement [Bakke and Øren, 1997, Liang et al., 2000]. La localisation des sections minimales permet de calculer immédiatement (par simple comptage de voxels) le volume du pore ainsi délimité et donc le rayon équivalent de la sphère retenue par exemple pour le représenter dans le modèle de réseau.

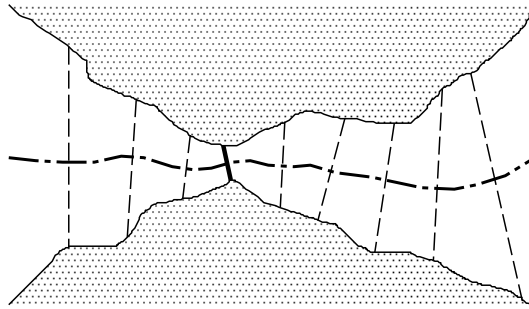


FIG. 4.4 – Illustration en 2-D du repérage de la position et de l’aire d’un étranglement entre deux pores. En grisé, la matrice solide délimite une zone de connexion entre deux pores (dont les centres seraient à droite et à gauche de la figure), en trait mixte est tracé le squelette (qui se limite donc ici à une branche). Tout au long de cette branche, on mesure les sections droites de la connexion (dont les traces sont en pointillé). La section minimale nous donne la position et l’aire de l’étranglement (en trait épais).

4.2 Les outils de la morphologie mathématique

Notre démarche consiste à extraire, d’une image digitale 3-D originale, l’information nécessaire à la construction d’un modèle de réseau. Les outils mis en œuvre relèvent plus spécifiquement de la morphologie mathématique, théorie d’analyse d’images non linéaire initiée par Matheron [1975] et développée par Serra [1982, 1988]. Nous nous contentons ici de présenter les résultats et outils nécessaires à notre démarche, les développements théoriques rigoureux étant notamment détaillés dans les deux ouvrages de référence de Serra [1982, 1988].

4.2.1 Érosion et dilatation

En traitement du signal linéaire la structure fondamentale est l’espace vectoriel. La morphologie mathématique s’applique quant à elle sur un treillis complet. Dans ce travail, nous considérons le treillis $\mathcal{P}(E)$ des sous-ensembles d’un ensemble E , E étant \mathbb{R}^3 (cas dit continu) ou \mathbb{Z}^3 (cas dit discret), ce dernier étant l’espace dans lequel sont définies nos images digitales. Dans la suite, on note en minuscule les éléments de E (i.e. les points), en majuscule les éléments de $\mathcal{P}(E)$ (i.e. les ensembles) et entre accolades les ensembles de points. Par exemple si a, b, c sont des points de E (c’est à dire $a, b, c \in E$), l’ensemble $X = \{a, b, c\}$ appartient au treillis des sous-ensembles de E (c’est à dire $X = \{a, b, c\} \in \mathcal{P}(E)$). On note de plus que X est inclus dans E (c’est à dire $X \subset E$).

On définit le *transposé* \check{X} de X par [Matheron, 1975]

$$\check{X} = \{-p : p \in X\} \quad (4.1)$$

et le *translaté* $X_{\rightarrow b}$ de X par le vecteur b par [Matheron, 1975]

$$X_{\rightarrow b} = \{p + b : p \in X\} \quad (4.2)$$

Dans ce cadre, on se donne un ensemble X à étudier qui est dans notre cas l’ensemble des voxels poreux de l’image et son complémentaire X^C qui est

l'ensemble des voxels solides ([Matheron, 1967] adopte la convention contraire). Ils sont liés par la relation [Serra, 2001]

$$X \cap X^C = \emptyset \quad \text{et} \quad X \cup X^C = E \quad (4.3)$$

où \emptyset représente l'ensemble vide. Les deux opérations de base de la morphologie mathématique sont l'*érosion* et la *dilatation*. Soit un ensemble B symétrique (c'est à dire égal à son transposé : $\check{B} = B$) que l'on appelle *élément structurant*. Si cet élément structurant est centré à l'origine de notre espace, alors le translaté de B en p , c'est à dire $B_{\rightarrow p}$ est centré en p . L'érodé $\varepsilon_B(X)$ de X par B (aussi noté $X \ominus B$) est l'ensemble défini par [Matheron, 1967]

$$\varepsilon_B(X) = X \ominus B = \bigcap_{p \in B} X_{\rightarrow p} = \{p : B_{\rightarrow p} \subseteq X\} \quad (4.4)$$

c'est à dire que l'érodé de X est le lieu des positions du centre p de l'élément structurant $B_{\rightarrow p}$ lorsque celui-ci est inclus dans X .

Le dilaté $\delta_B(X)$ de l'ensemble X par B (aussi noté $X \oplus B$) est l'ensemble défini par [Matheron, 1967]

$$\delta_B(X) = X \oplus B = \bigcup_{p \in X} B_{\rightarrow p} = \{p : B_{\rightarrow p} \cap X \neq \emptyset\} \quad (4.5)$$

c'est à dire que le dilaté de X est l'ensemble des points p tels que l'élément structurant $B_{\rightarrow p}$ centré en p touche X . Ces opérations sont illustrées en 2-D sur la figure 4.5.

Ces opérations sont dites *duales vis-à-vis de la complémentation* [Serra, 1982]

$$\delta_B(X) = (\varepsilon_B(X^C))^C \quad \text{et} \quad \varepsilon_B(X) = (\delta_B(X^C))^C \quad (4.6)$$

c'est à dire qu'éroder X revient à dilater X^C et vice-versa. Elles sont aussi associatives et commutatives [Matheron, 1967].

4.2.2 Représentation de l'image, connexité et distance digitale.

L'acquisition d'une image digitale 3-D se fait généralement selon une grille discrète cubique [Meyer, 1992, Serra, 2001]. Bien qu'il en existe d'autres, nous avons choisi dans un premier temps de conserver cette grille cubique pour représenter nos objets. Parmi les autres représentation possibles d'une image tridimensionnelle, on peut citer par exemple la grille cubique à faces centrées qui, moyennant un décalage de certains plans de l'image, permet d'obtenir une représentation plus isotrope des données. Un voxel est en effet alors en contact avec 12 voisins immédiats, d'éloignements identiques, qui génèrent une boule unité en forme de cube-octaèdre à 14 faces [Meyer, 1992]. Sur la grille cubique, la boule unité est un cube de 27 voxels ou un tétraèdre de 7 voxels, selon la connexité choisie. Notre choix de conserver la grille cubique est motivé par les faits que (1) les outils y sont, dans un premier temps, plus simples et plus immédiats à développer, (2) l'adaptation de notre démarche à la grille cubique à face centrée peut se voir comme une perspective d'amélioration des résultats obtenus.

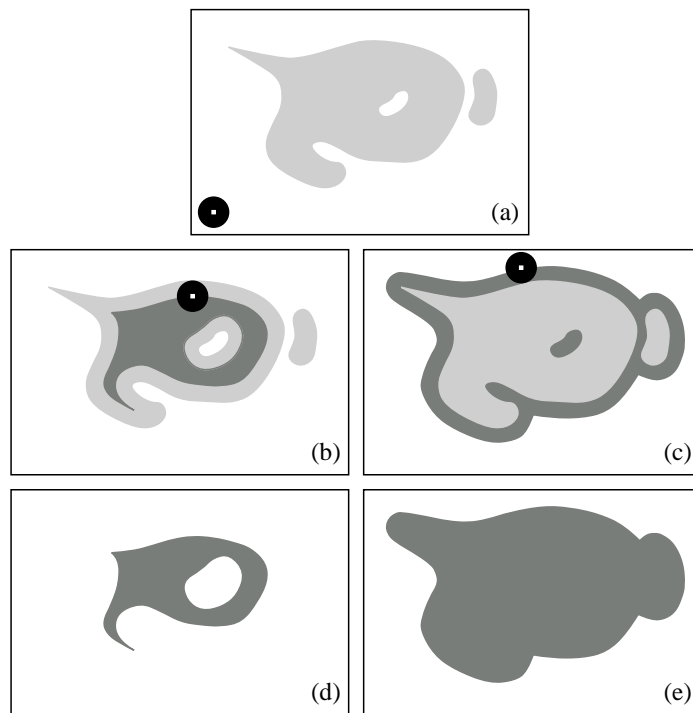


FIG. 4.5 – Illustration des opérations d'érosion et de dilatation dans $\mathcal{P}(\mathbb{R}^2)$ d'un ensemble par un élément structurant symétrique. En (a) un ensemble en gris clair, un élément structurant symétrique en noir avec son origine en blanc. En (b) on érode l'ensemble par l'élément structurant. En gris foncé, l'érodé de l'ensemble de départ, que l'on retrouve en (d). En (c) on dilate l'ensemble par l'élément structurant. En gris foncé le dilaté de l'ensemble de départ que l'on retrouve en (e).

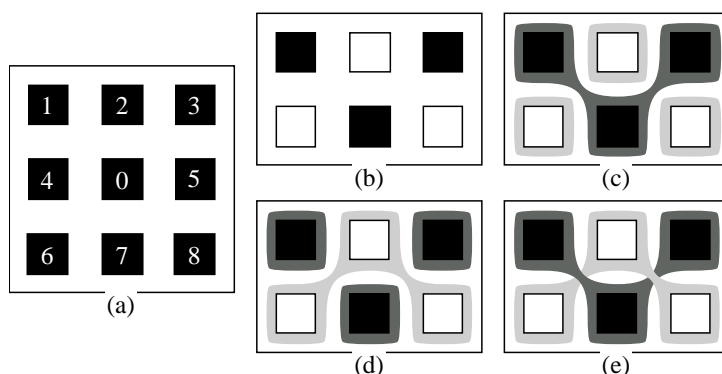


FIG. 4.6 – Illustration en 2-D du problème du choix d'une connexité par arc en maille carrée. La question est de définir, en (a), lesquels des pixels marqué de 1 à 8 sont considérés comme connectés au pixel central (marqué 0). En (a) une image comprenant trois voxels « objet » (en noir) et trois voxels « fond » (en blanc) organisés en damier. Avons nous représenté un objet unique (b) ou trois objets séparés par un fond d'un seul tenant (c) ? Quoiqu'il en soit, il est évident qu'il nous faut éviter l'écueil, lors de la définition de notre connexité par arcs, illustré en (d), où objet et fond s'interpénètrent.

Aux noeuds de cette grille sont placés des voxels « objet » (qui représentent l'objet auquel on s'intéresse) et des voxels « fond ». L'ensemble des voxels « objet » forme l'ensemble O et l'ensemble des voxels « fond » forme son complémentaire noté O^C .

Sur cette grille, il nous faut définir une connexité digitale [Serra, 2001], c'est à dire définir quels sont les voisins d'un voxel que l'on considère comme connectés à lui. Cette définition, en maille cubique est loin d'être triviale. Plaçons nous en deux dimensions, dans la grille carrée donc, pour illustrer le problème et considérons un pixel et ses voisins les plus proches (figure 4.6-(a)). En premier lieu, il semble légitime de considérer que les quatre pixels marqués 2, 4, 5 et 7 sont connectés au pixel marqué 0. C'est la 4-connexité. Pour se donner la possibilité d'obtenir des objets connexes visuellement plus minces (par exemple une chaîne de pixels alignés en diagonale), on est tentés de considérer aussi les voisins diagonaux (1, 3, 6 et 8) comme connectés au pixel 0. C'est la 8-connexité. Ce faisant, on constate qu'on ne peut appliquer cette 8-connexité à la fois aux pixels « objet » (figure 4.6-(c)) et aux pixels « fond » (figure 4.6-(d)) sous peine d'un paradoxe topologique (figure 4.6-(e)). Il nous faut donc définir deux connexités par arcs différentes pour les pixels « objet » et pour les pixels « fond ». En maille carrée on utilise classiquement la 8-connexité pour l'objet et la 4-connexité pour le fond [Rosenfeld and Kak, 1976, Rosenfeld and Pfaltz, 1968].

En trois dimensions, un voxel a 6 voisins avec lesquels il partage une face, 12 voisins avec lesquels il partage une arête et 8 voisins avec lesquels il partage un sommet (ce qui fait 26 voisins en tout). Dans la suite de ce chapitre, on appellera ces voisins, respectivement, F-voisins, A-voisins et S-voisins. La 6-connexité ne considère comme connectés à un voxel que ses F-voisins (figure 4.7-(a)), la 18

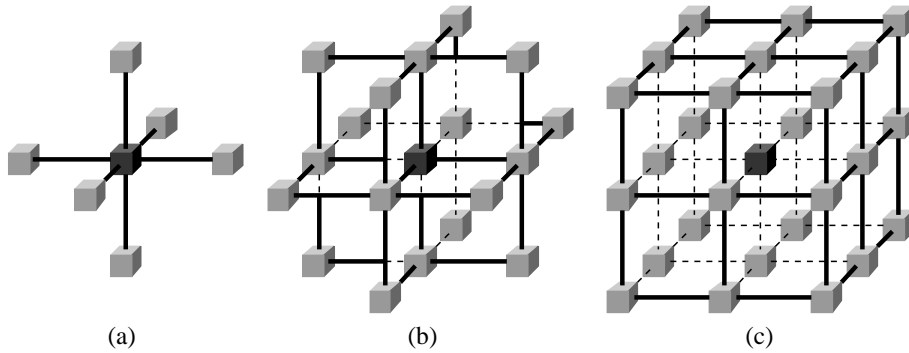


FIG. 4.7 – Les trois connexités en maille cubique : (a) 6-connectivité, (b) 18-connectivité et (c) 26-connectivité. Le voxel considéré est en noir, ses voisins en gris.

connectivité ajoute les A-voisins (figure 4.7-(b)) et la 26-connectivité ajoute les S-voisins (figure 4.7-(c)). Pour les mêmes raisons qu'en 2-D, on utilisera la 26-connectivité pour l'objet et la 6-connectivité pour le fond. On note $V_{26}(x)$ l'ensemble des 26 voisins du voxel x .

Cet ensemble augmenté du voxel x lui-même nous définit la *boule digitale unité* $B_1(x)$ centrée en x qui est donc dans notre cas un cube de trois voxels de côté. Cette boule digitale est invariante par translation, on la note donc simplement B_1 . On déduit la boule B_n de taille n de la boule unité par dilatations successives [Serra, 1988]

$$B_n = B_{n-1} \oplus B_1 \quad (4.7)$$

On remarque que le membre de droite de cette équation peut se lire « dilaté de la boule B_{n-1} par la boule unité » ou « dilaté de la boule unité par la boule B_{n-1} ».

Il nous reste à doter notre espace d'une métrique, c'est à dire à définir une distance digitale sur notre grille. Elle nous permettra d'effectuer des mesures géométriques sur notre image et de construire les cartes de distance dont nous aurons besoin. En prenant comme unité le pas de la grille cubique, la distance euclidienne $d_E(a, b)$ entre deux points a et b , de coordonnées respectives (x_a, y_a, z_a) et (x_b, y_b, z_b) , est donnée par

$$d_E(a, b) = \sqrt{(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 + (z_b - z_a)^2} \quad (4.8)$$

Les F-voisins d'un voxel sont donc à une distance euclidienne de 1, les A-voisins à une distance de $\sqrt{2}$ et les S-voisins à une distance de $\sqrt{3}$.

En analyse d'images, cette distance « vraie » est classiquement approximée par une *distance discrète*, à valeurs dans \mathbb{Z} . Ceci présente deux avantages d'ordre technique. (1) Les valeurs discrètes sont manipulées de façon beaucoup plus performante par les ordinateurs que les valeurs réelles. (2) Ces distances approchées peuvent être définies par la notion de « chemin minimal », ce qui permet la construction efficace de *cartes de distance*, dans lesquelles à chaque voxel objet on associe sa distance au fond. On appelle *chemin* C_{26} entre le voxel p_0 et le voxel p_k l'ensemble des voxels $C_{26} = \{p_i\}_{i=1,k}$ tel que p_i est un voisin de p_{i-1} , pour

$1 \leq i \leq k$, au sens de la 26-connexité [Thiel, 2001] i

$$C_{26}(p_0, p_k) = \{p_i : p_i \in V_{26}(p_{i-1}), \forall i \in [1, k]\} \quad (4.9)$$

la distance digitale associée à la 26-connexité d_{26} , entre deux voxels a et b est alors définie par

$$d_{26}(a, b) = \min(l(C_{26}), C_{26} \in \text{chemins}_{26}(a, b)) \quad (4.10)$$

où $\text{chemins}_{26}(a, b)$ désigne l'ensemble des chemins possibles entre a et b et l'opérateur $l(\cdot)$ renvoie le nombre de voxels de son argument. On montre que cette distance s'écrit en fonction des coordonnées des voxels a et b

$$d_{26}(a, b) = \max(|x_b - x_a|, |y_b - y_a|, |z_b - z_a|) \quad (4.11)$$

Cette distance a l'avantage d'être cohérente avec la notion de boule digitale définie plus haut, c'est à dire que la boule B_n peut aussi être définie, de façon plus intuitive, par

$$B_n = \{p : d_{26}(o, p) \leq n\} \quad (4.12)$$

où o est le centre de la boule. Ceci est dû au fait que la famille des dilatations δ_{B_n} , d'éléments structurants B_n dote l'espace digital d'une métrique [Serra, 1988].

4.2.3 Le squelette et l'axe médian

Étant donné notre objectif, présenté en section 4.1, les quatre propriétés souhaitées du squelette sont [Serra, 1982] les suivantes

1. Être homotopique à (c'est à dire ici conserver la topologie et les points terminaux de) l'espace poreux digital initial.
2. Être fin au sens d'une ligne digitale d'épaisseur 1 voxel.
3. Être centré dans l'objet initial.
4. Être basé sur une distance digitale.

Nous allons voir que ces quatre propriétés souhaitées et motivées par la problématique physique posée (expliciter les règles contrôlant l'affectation des tailles de rayons d'étranglements aux pores adjacents) ne peuvent être vérifiées qu'au sens d'un compromis.

En toute rigueur, le squelette d'un ensemble X est le lieu des centres de toutes les *boules maximales* de X [Serra, 1982]. Une boule maximale est une boule complètement incluse dans X et qui n'est pas contenue dans une autre boule complètement incluse dans X . Ceci est illustré sur la figure 4.8 en 2-D (on parle alors de disques maximaux). Dans le plan euclidien (\mathbb{R}^2), le squelette vérifie bien les propriétés 1 et 3 vues précédemment (la propriété 4 n'a bien sûr pas lieu d'être considérée). Il est par construction homotopique à l'objet initial (il conserve sa topologie et ses points terminaux), il est centré au sens d'un disque maximal basé sur la distance euclidienne et il est fin au sens d'une ligne (d'épaisseur nulle dans \mathbb{R}^3). La généralisation en 3-D de ce squelette euclidien amène une première difficulté majeure : le squelette d'un objet tridimensionnel est, de manière générale, surfacique, et non plus filaire, comme l'illustre la figure 4.9 (nous avons perdu la propriété souhaitée n°2). Le squelette au sens

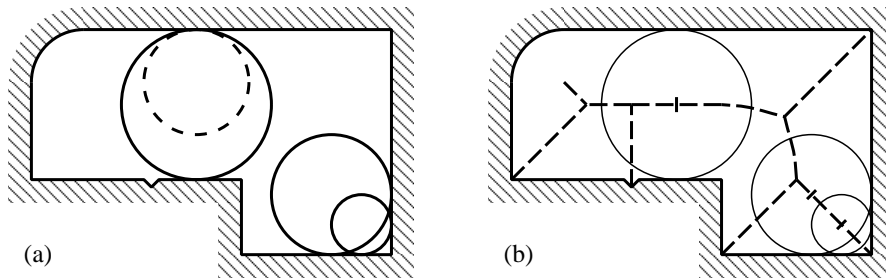


FIG. 4.8 – Illustration en 2-D de la définition du squelette. En (a), en trait plein sont dessinés des disques maximaux de l'ensemble délimité par les hachures. En pointillé, un disque qui n'est pas maximal puisque contenu dans un autre (entre autres). En pratique, en 2-D, un disque maximal touche les frontières de l'objet en au moins deux points. En (b) l'ensemble des centres de tous les disques maximaux génère le squelette de l'objet (en pointillé).

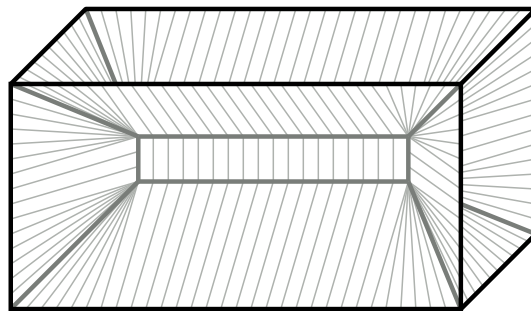


FIG. 4.9 – Squelette (en gris) dans l'espace euclidien à trois dimensions d'un pavé (dont les arêtes sont en noir). Le squelette dans \mathbb{R}^3 est généralement constitué de surfaces.

boules maximales dans \mathbb{R}^3 est donc bien (dans le cas général, cf. Serra [1988], §11), homotopique à l'objet initial X , mais son utilisation directe pour faire émerger les composantes élémentaires de l'espace poreux (pores et étranglements) n'est pas aisée (sinon impossible). Dans la suite, le squelette au sens des boules maximales va donc être remplacé par la notion voisine, issue des techniques d'amincissement, d'axe médian de l'espace poreux. Cet axe médian, que nous nommerons désormais « squelette filaire » doit vérifier les propriétés 1 à 3 citées plus haut : il doit être homotopique à l'objet initial, fin et centré. La recherche de ce squelette filaire se fait pratiquement dans \mathbb{Z}^3 , espace de définition de nos images, on ajoute donc la propriété 4 : il doit pouvoir être mis en évidence sur la base d'une distance discrète.

Quelque soit l'approche mise en œuvre pour exhiber le squelette filaire, les trois premières propriétés ne sont pas triviales à maintenir dans l'espace digital et, de ce point de vue, le squelette filaire digital ne peut être pratiquement déterminé qu'au sens d'un compromis entre ces propriétés [Serra, 1982]. Dans le cadre des travaux (encore récents) menés au laboratoire pour extraire par analyse d'images quantitative le squelette filaire d'une image de l'espace poreux d'un milieu, deux stratégies ont été privilégiées :

- La première a été initiée par Olivier Saboureau dans le cadre de son projet de fin d'études, sous la responsabilité de Yannick Anguy. L'idée qui sous tend cette approche est qu'en 3-D, le squelette au sens boules maximales et le squelette filaire sont des notions voisines et que le second doit pouvoir être obtenu en tant que sous-ensemble du premier, par un post-traitement adapté.
- La seconde est celle détaillée plus loin dans ce document (section 4.3). Dans le cadre général de la recherche du squelette au sens des boules maximales digitales, le squelette filaire est obtenu comme le résultat d'une approche originale de la propriété 3 (le centrage), approche due à Fricout et al. [2002]. La figure 4.30, page 104, illustre les résultats obtenus par cette approche.

Avant de préciser en détail la méthode, nous présentons deux outils auxquels elle fait appel : la carte des distances et la distance géodésique pondérée.

4.2.4 La carte des distances

La *carte des distances* (ou *image des distances*) est un outil pratique souvent utilisé pour obtenir le squelette au sens boules maximales [Meyer, 1992]. La carte des distances associe à chaque voxel objet de l'image sur laquelle elle est mesurée, la distance minimale qui le sépare du fond. Il en résulte une image de même support que l'image originale, en niveaux de gris (c'est à dire à valeurs dans \mathbb{Z}). Dans l'espace euclidien, on montre que les lignes de crêtes de cette carte des distances, c'est à dire ses points qui ont un aval non simple (points multiples) ou qui n'ont pas d'amont, ainsi que définis dans Serra [1988], appartiennent au squelette, au sens des boules maximales, de l'objet. La figure 4.10 illustre la notion de carte de distance et la notion de points de crête. Dans l'espace digital, \mathbb{Z}^2 ou \mathbb{Z}^3 , la principale difficulté est liée à la détection des points de crêtes en vue d'obtenir le squelette. Si les points à amont nul sont immédiatement accessibles en tant que maxima locaux de la fonction distance, l'identification des points multiples est complexe car cette caractéristique ne se préserve pas dans le cas discret. Un certain nombre de stratégies existent cependant dans

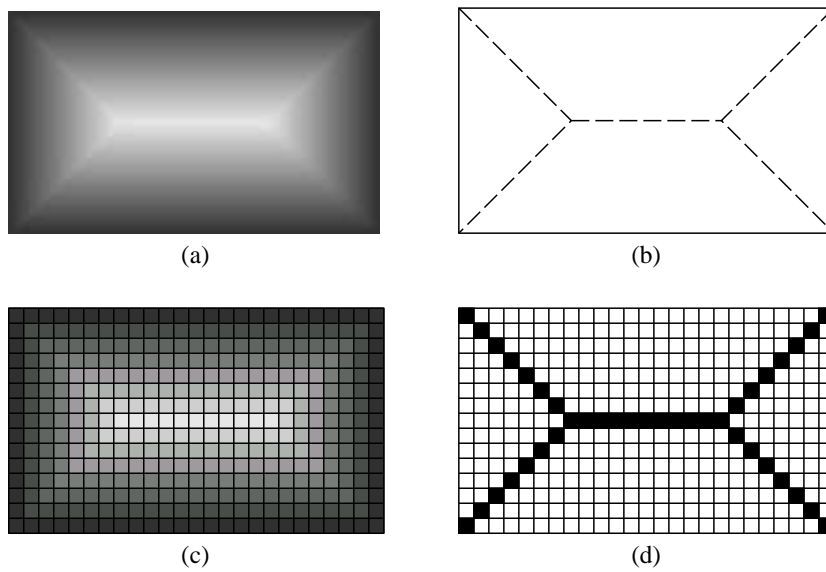


FIG. 4.10 – Illustration en 2-D de la fonction distance en continu (sur \mathbb{R}^2) et en digital (sur \mathbb{Z}^2) sur un rectangle. L'objet (X) est un rectangle plein. En (a) et (c) est représentée la fonction distance en niveau de gris (les valeurs croissent avec l'éclaircissement), en (b) le squelette dans \mathbb{R}^2 en pointillé et en (d) le squelette dans \mathbb{Z}^2 en noir. Les points de crête à amont nul forment la branche principale, horizontale, du squelette (ce sont les maxima locaux de la carte des distances). Les points à aval multiple (points localement séparables en digital) forment les quatre branches annexes du squelette.

la littérature pour identifier les points de crête discrets. Citons par exemple la stratégie intuitive proposée par Zhou et al. [1998] et utilisée par Fricout et al. [2002].

Étant donné la distance digitale définie par l'équation 4.11, on définit la distance entre un point et un ensemble par

$$d_{26}(a, X) = \min(d_{26}(a, p), p \in X) \quad (4.13)$$

c'est à dire que la distance entre le point a et l'ensemble X est la distance entre le point a et le point p de X le plus proche de a . La fonction carte des distances associée à l'ensemble X est alors la fonction définie pour tout $p \in X$ par

$$d_X(p) = d_{26}(p, X^C), \quad p \in X \quad (4.14)$$

A chaque voxel p de l'objet X elle associe sa distance au fond X^C . Elle est construite de la façon suivante. On initialise d'abord tous les points de cette carte des distances avec une valeur représentant l'infini (le plus grand entier représentable par la machine par exemple). On la construit ensuite séquentiellement en propageant un front depuis la frontière ∂X de X . Cette frontière est rigoureusement définie comme l'ensemble

$$\partial X = X \setminus X \ominus B_1 \quad (4.15)$$

c'est à dire que la frontière ∂X est l'ensemble X auquel on a ôté son érodé par la boule unitaire. En pratique, on repère les points de l'objet X ayant un voisin « à l'extérieur », i.e. dans X^C , et on leur affecte la distance 1¹. La propagation du front se déroule ainsi : on considère deux ensembles appelés fronts, un front sur lequel on travaille (le front courant) et un front que l'on construit pour l'itération suivante. On initialise le front courant avec l'ensemble ∂X . On procède ensuite aux itérations suivantes : pour chacun des points f du front courant, on considère successivement chacun de ses voisins v . Si ce voisin appartient à l'objet et si sa distance au fond est supérieure à la distance de f plus 1 (c'est à dire qu'on ne lui a pas encore affecté de distance ou qu'on lui a affecté une distance trop grande), alors on lui affecte la distance de f plus 1 et on l'ajoute au front de propagation suivant. Lorsque tous les points du front courant ont été traités, on échange les rôles des fronts et on itère. Cet algorithme très simple, dû à Dijkstra [1959], permet de construire rapidement et à faible coût informatique la carte des distances d'un objet. Il est rendu possible par la définition par chemin minimal de la distance digitale : la distance au fond d'un voxel est donnée par la distance au fond de ses voisins, par simple prolongation de leurs chemins minimaux [Thiel, 2001].

4.2.5 Distance géodésique, opérateurs géodésiques

Dans de nombreux problèmes d'analyse d'images il est nécessaire de pouvoir mesurer la distance entre deux points ou d'utiliser des opérateurs (dilatation, érosion) à l'intérieur d'un objet, c'est à dire en prenant en compte sa forme et ses éventuels « trous ». Ceci est formalisé par les opérateurs géodésiques [Lantuejoul and Beucher, 1981]. On définit une nouvelle distance dite distance géodésique,

¹Par convention, la carte des distances prend la valeur 0 pour les points n'appartenant pas à l'objet.

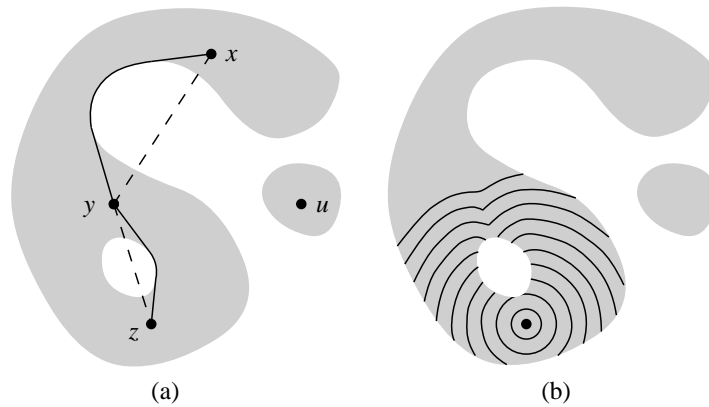


FIG. 4.11 – Illustration en 2-D, dans l'espace euclidien, de la distance géodésique et de la propagation d'un front géodésique dans un ensemble masque (en gris). En (a), les distances euclidiennes entre les points x , y et z sont représentées par les segments rectilignes en pointillé. Elle est définie dans tout l'espace, ici \mathbb{R}^2 . Les arcs en trait plein représentent les distances géodésiques associées au masque X entre ces mêmes points. Ces arcs sont complètement contenus dans X , la distance géodésique est donc toujours supérieure ou égale à la distance euclidienne. La distance géodésique entre ces points et le point u , situé dans une autre partie connexe de X est infinie : il n'existe pas d'arcs menant de ces points à u complètement contenu dans le masque. En (b), illustration de la propagation d'un front géodésique depuis le point z dans le masque X . Les lignes de propagation sont les traces de *dilatations géodésiques* successives du point z . Ce sont donc aussi les traces des disques géodésiques de centre z .

attachée à un ensemble considéré comme un masque. Cette nouvelle distance engendre une classe de nouveaux opérateurs, dits géodésiques, qui nous mènera finalement à la *reconstruction*, outil puissant de filtrage et de segmentation.

La distance géodésique entre deux points d'un ensemble X se définit comme la longueur du chemin le plus court entre ces deux points qui soit complètement contenu dans X . Si un tel chemin n'existe pas, cette distance vaut par convention $+\infty$ (la distance géodésique est une distance généralisée). En considérant la figure 4.11-(a), on constate aisément que la distance géodésique est toujours supérieure ou égale à la distance euclidienne. On la note dg^X . En suivant un cheminement analogue à celui qui nous a conduit de la distance digitale (équation 4.10) à la carte des distances (équation 4.14), on peut construire une *carte des distances géodésiques* à un ensemble Y dans l'ensemble X .

$$dg_Y^X(p) = dg^X(p, Y), \quad p \in X, p \notin Y \quad (4.16)$$

Les traits pleins de la figure 4.11-(b) peuvent aussi se voir comme les courbes de niveau de la carte des distances géodésiques au point x dans l'ensemble X . De la même manière que la carte des distances classique, elle est généralement construite par propagation d'un front géodésique depuis la frontière du marqueur Y . La distance géodésique nous permet de construire la *boule géodésique* $B_n^X(p)$

de centre p et de rayon n

$$B_n^X(p) = \{q : q \in X, dg(p, q) \leq n\} \quad (4.17)$$

Cette boule géodésique, contrairement aux boules euclidiennes ou aux boules digitales B_n n'est généralement pas invariante par translation (elle est même inexistante si $p \notin X$), comme illustré sur la figure 4.11-(b). La *dilatation géodésique* de taille n de l'ensemble Y dans l'ensemble X est alors définie par

$$\delta_n^X(Y) = \bigcup_{q \in Y} B_n^X(q) = \{p : p \in X, \exists r \in Y, dg^X(r, p) \leq n\} \quad (4.18)$$

On l'implémente dans la pratique en itérant la dilatation unitaire [Serra, 2001]

$$\delta_n^X(Y) = \underbrace{\delta_1^X(\delta_1^X(\dots \delta_1^X(Y) \dots))}_{n \text{ fois}} \quad (4.19)$$

La dilatation géodésique unitaire s'obtient très simplement comme l'intersection entre une dilatation classique par la boule digitale unité et le masque X [Serra, 2001]

$$\delta_1^X(Y) = (Y \oplus B_1) \cap X \quad (4.20)$$

Ceci n'est vrai que pour la dilatation par la boule unité. Il est immédiat de constater que les dilatations géodésiques successives de n'importe quel ensemble Y dans l'ensemble X ont pour limite l'ensemble X (ou du moins, toutes les composantes connexes de X qui contiennent une composante de Y). C'est à dire que si X est un ensemble connexe ou si toutes les parties de X contiennent un élément de Y , à partir d'une certaine taille n_0 de dilatation, on a [Serra, 2001]

$$\forall n > n_0, \delta_n^X(Y) = \delta_{n_0}^X(Y) = X \quad (4.21)$$

Cette opération, fondamentale en analyse d'images, s'appelle *reconstruction* des parties de l'ensemble X *marquées* par Y . On la note [Serra, 2001]

$$r^X(Y) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \delta_n^X(Y) \quad (4.22)$$

4.3 Extraction du squelette filaire

Comme présenté précédemment, il s'agit donc ici d'obtenir dans \mathbb{Z}^3 le squelette filaire de l'espace poreux, au sens d'un « bon » compromis entre les quatre propriétés souhaitées, listées dans la section 4.2.3. La stratégie décrite ci-dessous est basée sur l'idée assez intuitive que l'axe médian ou squelette filaire, dans l'espace digital, est une « quantité voisine » du squelette au sens des boules maximales. Cette idée de quantité voisine a plusieurs expressions. D'un point de vue expérimental et de façon tout à fait qualitative, Olivier Saboureau a constaté que pratiquement, l'ensemble des points localement séparables et des maxima locaux de la carte des distances constituent, pour certains objets, davantage une « ligne épaisse » qu'un ensemble de surfaces. En ce qui nous concerne, la notion de quantité voisine se traduit en considérant que le squelette filaire peut être appréhendé en modifiant légèrement la définition du squelette euclidien, lieu des centres des boules maximales de l'objet. Plus précisément, nous « assouplissons » la notion de centrage au sens des boules maximales impliquées dans la

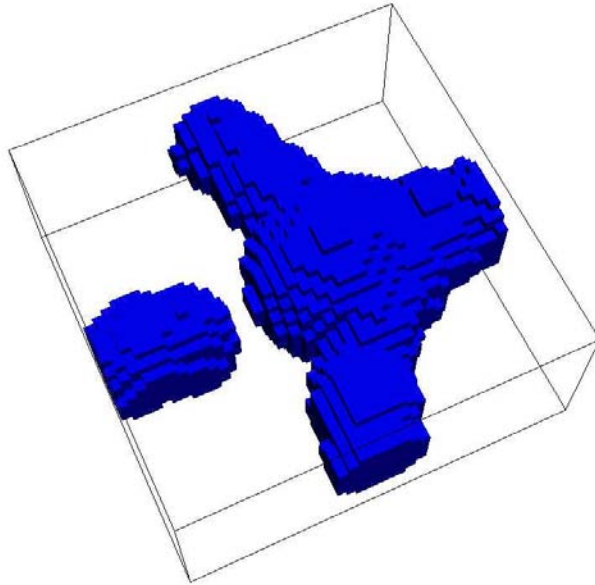


FIG. 4.12 – Image discrète 3-D test de petite taille ($50 \times 50 \times 20$ voxels). On visualise la porosité de l'échantillon. Dans les figures suivantes (4.13 à 4.23) on va suivre pas à pas les résultats des différentes étapes de la stratégie mise en œuvre.

définition du squelette. Ce centrage est présenté de façon précise dans la section suivante et repose sur une idée originale de Fricout et al. [2002]. Néanmoins, il est important de mentionner que la motivation de ces auteurs n'était pas, à notre connaissance, celle présentée ci-dessus. Elle était liée à la différence de résolution entre les plans horizontaux et la direction verticale, caractéristique des données acquises par microscopie confocale.

Les modèles de réseaux sur lesquels sont résolus les problèmes de fermetures doivent être périodiques selon les trois directions de l'espace. De ce fait, nous considérons que l'image à partir de laquelle nous allons extraire l'information topologique et géométrique est elle aussi périodique. Cette prise en compte de la périodicité dans la construction du squelette filaire et la mesure de l'information géométrique et topologique est une originalité de ce travail par rapport aux travaux de Fricout et al. [2002].

4.3.1 Centrage dans le plan au sens d'un disque maximum

O désigne l'ensemble des voxels fluides de notre image (O^C est donc l'ensemble des voxels solides). La figure 4.12 représente un objet-test, sur lequel on va suivre dans le détail chaque étape de la méthode mise en œuvre, en gardant cet objet original en filigrane (figures 4.12 à 4.23). On rappelle que les images traitées sont considérées comme périodiques, ce qui revient en pratique à considérer les faces opposées de l'image comme étant juxtaposées.

L'approche consiste à considérer indépendamment les unes des autres les n sections 2-D formant l'image 3-D. Les sections, notées $F_{i,i=1,n}$ sont choisies selon

une direction arbitraire. On a

$$\bigcup_{i=1}^n F_i = O \quad (4.23)$$

Désignons par e_z la direction selon laquelle nous découpons nos sections et e_x et e_y les deux directions des repères associés aux sections. On note x_p , y_p et z_p les trois coordonnées d'un voxel p de l'image. Dans chaque section F_i de l'image, on construit la carte des distances bidimensionnelle, sur le même schéma que l'équation 4.14, en utilisant la distance digitale d_8

$$d_{F_i}(p) = d_8(p, F_i^C) \quad (4.24)$$

Comme vu dans la section 4.2.4, les maxima locaux de la carte des distances d'une section i sont centrés au sens des disques maximums et appartiennent donc au squelette digital de l'espace poreux échantillonné par la section F_i .

$$U_i = \{p : d_{F_i}(p) \geq d_{F_i}(v), \forall v \in V_8(p)\} \quad (4.25)$$

où $V_8(p)$ est l'ensemble des 8 voisins de p dans la grille carré \mathbb{Z}^2 . L'union U de ces maxima locaux fournit un objet tridimensionnel [Fricout et al., 2002]

$$U = \bigcup_i U_i \quad (4.26)$$

Les voxels de l'ensemble U sont centrés dans le plan e_z (au sens disques maximums). Sur la figure 4.13, cet ensemble est visible en rouge. De façon cohérente avec le discours tenu dans la section 4.2.3, il est surfacique et peu épais. Il est aussi bruité, suite à l'utilisation de la carte des distances, sensible à la rugosité de surface.

Il convient de noter que nous n'avons conservé ici que les maxima locaux de la carte des distances. Ils ne constituent qu'une partie des points du squelette accessibles par le biais de la carte des distances, l'autre partie étant l'ensemble des points multiples. Toujours suivant Fricout et al. [2002], nous avons implémenté l'algorithme de Zhou et al. [1998] qui permet d'extraire des voxels supposés multiples. En pratique, la quasi totalité des voxels ainsi ajoutés disparaît lors de la complémentation du centrage (cf. section suivante). Cette constatation, ajoutée à l'absence d'arguments rigoureux quand à la nature multiple des voxels mis en évidence par cette méthode nous a poussé à l'abandonner et à ne conserver que les maxima de la carte des distances. Une perspective immédiate des travaux de cette thèse, en vue de raffiner les résultats obtenus, est donc de mettre en œuvre une stratégie rigoureuse pour identifier ces points multiples.

4.3.2 Complémentation du centrage

Nous définissons une carte des distances dans la direction perpendiculaire aux sections F_i (i.e. e_z), comme suit [Fricout et al., 2002]

$$d_z(p) = \min(d_{26}(p, q), p \in O, q \in O^C, x_q = x_p, y_q = y_p) \quad (4.27)$$

L'ensemble M' des maxima de cette fonction contient les voxels centrés selon la troisième direction

$$M' = \{p \in O : d_z(p) \geq d_z(v), \forall v \in V_z(p), v \in O\} \quad (4.28)$$

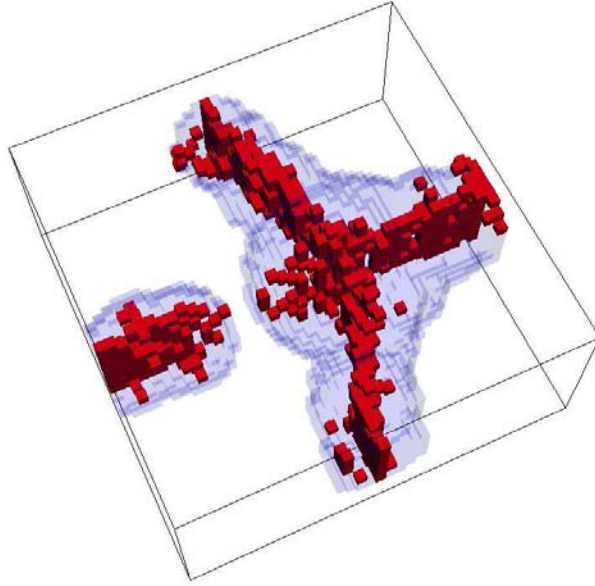


FIG. 4.13 – Union en rouge des maxima locaux de la carte des distances dans chaque section de l’image (ensemble U des voxels centrés dans chaque plan horizontal). Il est replacé dans l’objet O original (affiché en filigrane). La direction d’empilement est la « verticale » dans ces images.

où $V_z(p)$ est l’ensemble des voisins de p selon la direction e_z (i.e. le voxel immédiatement « au-dessus » et le voxel immédiatement « au-dessous ») On forme l’ensemble M comme l’intersection des ensembles U et M' [Ercout et al., 2002]

$$M = U \cap M' \quad (4.29)$$

M est donc l’ensemble des voxels de notre objet O centrés dans \mathbb{Z}^3 au sens d’une intersection entre un ensemble de voxels (candidats pour appartenir au squelette filaire) centrés dans \mathbb{Z}^2 au sens des disques maximaux et d’un ensemble de voxels candidats centrés dans \mathbb{Z} au sens de la distance d_z . Il est visible sur la figure 4.14. Il apparaît immédiatement que le centrage associé à l’ensemble M , plus « souple » que le centrage au sens des boules maximales, résulte en un ensemble où l’aspect filaire l’emporte largement sur le caractère surfacique, habituellement associé au squelette 3-D. Le choix fait ici de donner à l’axe médian et au squelette des définitions de même type (i.e. ensemble de voxels centrés, en considérant deux centrages différents) est une manière d’exprimer explicitement que ce sont deux notions « voisines ». Malgré le côté forcément assez arbitraire de cette façon d’obtenir l’axe médian, elle produit à notre sens un ensemble plus proche du squelette conventionnel que via un amincissement, par exemple.

L’ensemble M obtenu est fortement déconnecté. Ce résultat est donc le point de départ pour la construction d’un squelette vérifiant mieux la propriété souhaitée n°1 (cf. page 76), c’est à dire l’homotopie.

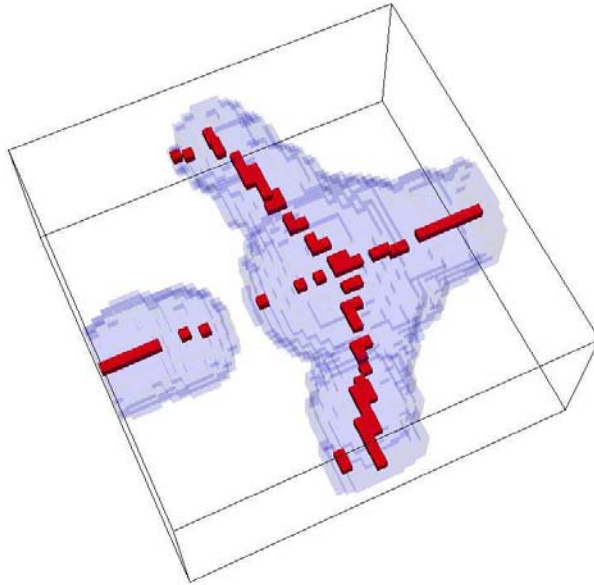


FIG. 4.14 – Ensemble en rouge des voxels centrés dans les plans horizontaux d’une part et selon la verticale d’autre part (c’est l’ensemble M).

4.3.3 Connexité du squelette filaire et distance géodésique pondérée

La figure 4.14 illustre bien la difficulté de préserver, sur la grille digitale, la connexité d’un objet centré [Beucher, 1989].

L’objectif de cette section est d’obtenir à partir de l’ensemble M un ensemble S connexe, pour chaque partie connexe de notre objet O . Il est recherché en traçant des « chemins » courts (basés sur la fonction distance géodésique) et aussi centrés que possible (basés sur la carte des distances 3-D de l’objet) entre les parties connexes de M . La distance géodésique pondérée permet de réaliser ce compromis de façon simple. Lors de la construction de la fonction distance géodésique, on attribue à chaque voxel, en plus de sa distance géodésique, une pondération qui dans notre cas sera sa distance à l’extérieur de l’objet (la valeur de la fonction distance classique d_O en ce point, en fait). Lorsque l’on cherche à construire un chemin, on remontera le long des voxels dont la distance géodésique va décroissante et en sélectionnant parmi ceux-ci, ceux qui ont la pondération la plus forte (c’est à dire ceux qui sont le « mieux » centrés). Voici plus en détails le fonctionnement de l’algorithme mis en œuvre.

A partir d’un point p quelconque de M , sélectionné par balayage de l’image, on procède à la reconstruction de la partie connexe de M marquée par le point p

$$S = r^M(\{p\}), \quad p \in M \quad (4.30)$$

La fonction distance géodésique pondérée à l’ensemble S dans l’objet O nous permet de trouver le plus proche voxel q d’un autre sous-ensemble connexe de M . Il suffit d’arrêter la propagation géodésique du front de construction de la

fonction au moment où il atteint un tel voxel q appartenant à M . On construit maintenant le chemin C reliant l'ensemble S au voxel q . On cherche parmi les voisins de ce dernier ceux qui ont une distance géodésique inférieure ou égale à la sienne et, parmi ceux-ci, on ajoute au chemin celui qui possède la pondération (sa valeur dans la carte des distances 3-D) la plus forte. On itère ce processus jusqu'à atteindre un voxel de S . Le chemin C de q à S est alors l'ensemble des voxels p_i

$$C(q, S) = \{p_i\}_{i \in [0, k]} \quad (4.31)$$

tels que p_0 vérifie

$$p_0 = q \quad (4.32)$$

p_k vérifie

$$\exists r : r \in S, r \in V_{26}(p_k) \quad (4.33)$$

et chaque voxel $p_{i, i \in [1, k-1]}$ vérifie

$$\begin{cases} p_{i+1} \in A, A = \{s : s \in V_{26}(p_i), dg_S^X(s) \leq dg_S^X(p_i)\} \\ d_O(p_{i+1}) \geq d_O(t), \forall t \in A \end{cases} \quad (4.34)$$

On ajoute ce chemin à S

$$S = S \cup C(q, S) \quad (4.35)$$

ainsi que la reconstruction de la partie connexe de M marquée par le voxel q

$$S = S \cup r^M(\{q\}) \quad (4.36)$$

Le processus est itéré (ajout d'un chemin, ajout de la reconstruction) jusqu'à reconnection complète de l'ensemble M . Ceci est simplement détecté lorsqu'il n'est plus possible de trouver de point q , point de départ d'un chemin. On applique cette méthode à toutes les autres parties connexes de l'objet. Le squelette S ainsi obtenu est visible sur la figure 4.15. Il est connexe, c'est à dire topologiquement équivalent à l'espace poreux original. Les chemins $C(q, S)$, si ils avaient été construits sur la seule base de la ligne de plus grande pente de la distance géodésique n'auraient que la propriété d'être courts. La contrainte apportée par la carte des distances 3-D, par le biais de la distance géodésique pondérée [Fricout et al., 2002], permet d'inclure dans ces chemins la propriété de centrage (propriété souhaitée n°3, cf. page 76), toutefois différente de celle vue dans les section 4.3.1 et 4.3.2.

Le squelette filaire est par endroit épais de deux voxels ; c'est une conséquence de l'utilisation de la carte des distances pour son obtention [Serra, 2001].

4.3.4 Finesse du squelette filaire (post-traitement)

L'identification (à venir) des composantes élémentaires formant l'espace poreux digital original (pores et étranglements) à partir de la connaissance du squelette filaire nécessite qu'il soit fin au sens « un voxel d'épaisseur ». L'objectif de cette section est de satisfaire cette condition en appliquant un post-traitement très simple aux parties encore « épaisses » (i.e. faisant deux voxels d'épaisseur) du squelette illustré sur la figure 4.15.

On fait subir à l'ensemble S un amincissement homotopique [Serra, 1982, 2001]. Un amincissement homotopique consiste à éliminer les points simples d'un objet (ici l'ensemble S) au fur et à mesure qu'on les rencontre lors de balayages

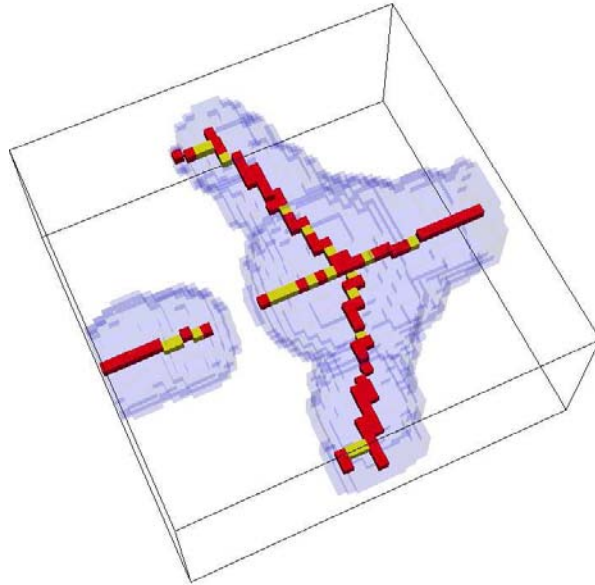


FIG. 4.15 – Première ébauche de notre squelette, constitué des points centrés (en rouge) connectés en utilisant la fonction distance géodésique pondérée par la fonction distance 3-D (voxels en vert).

successifs de l'image. On arrête le processus lorsque l'objet ne contient plus de points simples. On rappelle qu'un point simple est un point dont la suppression ne modifie pas la topologie de l'objet. Des critères simples ont été développés qui permettent de caractériser un point simple de façon locale, i.e. en ne considérant que son voisinage immédiat. Le plus simple et le plus rapide est sans conteste le critère de Bertand and Malandin [1994] qui s'énonce ainsi : le point p de l'ensemble S est un point simple si, et seulement si

- p est 26-connecté à une seule composante 26-connexes de $S \cap V_{26}(p)$ et
- p est 6-connecté à une seule composante 6-connexes de $S^C \cap V_{18}(p)$.

Ce critère est implémenté ainsi :

- Autour du point p , on extrait l'ensemble $S \cap V_{26}(p)$. On reconstruit la composante connexe de cet ensemble marquée par un voisin de p . Si p possède un autre voisin dans $S \cap V_{26}(p)$ qui n'appartient pas à la composante connexe reconstruite, le critère n'est pas vérifié.
- Sinon, on procède de la même manière avec $S^C \cap V_{18}(p)$.

Le critère de Bertand and Malandin [1994] est un critère suffisant pour préserver la topologie (i.e. le noyau homotopique) de l'objet S (figure 4.15). Les points terminaux i.e. les points extrémités des terminaisons ballantes (« dangling ends ») forment un sous-ensemble des points simples mais doivent être préservés par l'amincissement (ils font partie de la propriété souhaitée n°1). La caractérisation de ces points terminaux avant amincissement n'est pas triviale. Néanmoins la relative finesse de notre squelette nous autorise à ce stade à considérer qu'un point n'ayant qu'un voisin est un point terminal. L'amélioration de ce critère est une des premières perspectives de ce travail.

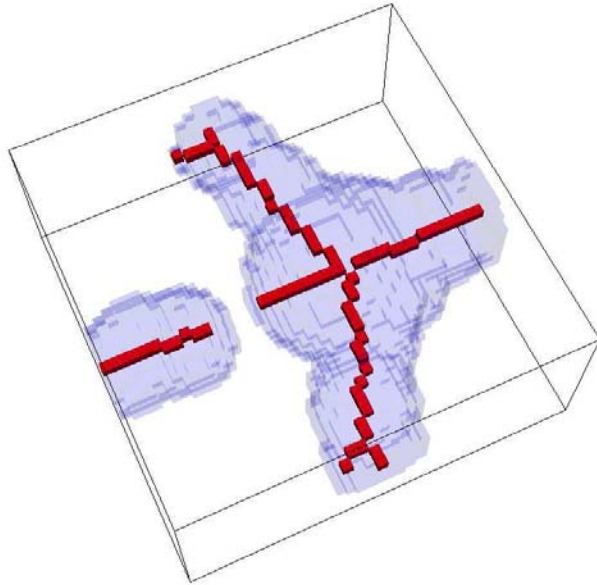


FIG. 4.16 – Notre squelette après l’amincissement homotopique, avec conservation des points terminaux.

Le squelette après amincissement est visible sur la figure 4.16.

4.3.5 Bilan : le squelette filaire en tant que compromis

Dans cette section 4.3, nous avons, par le biais d’outils de la morphologie mathématique, extrait l’« axe médian » ou « squelette filaire » S d’un objet O . Nous avons abordé cet exercice en partant de l’idée résumée ici. (Dans ce qui suit, l’emploi du mot « squelette » sans le qualificatif « filaire » désigne le squelette en tant que lieu des centres des boules maximales).

Ainsi que le préconise Meyer [1992], toute démarche d’analyse d’images quantitative devrait d’abord être menée dans un espace de moindre « dimension » (i.e. en 2-D plutôt qu’en 3-D, binaire plutôt qu’en niveaux de gris, etc.) puis être généralisée à la « dimension » du problème original. Ceci est motivé par le fait que les méthodes basées sur les outils de la morphologie mathématique se généralisent *presque* toujours aux « dimensions » supérieures [Meyer, 1992]. Dans l’espace euclidien à deux dimensions (\mathbb{R}^2), le squelette est cohérent avec l’idée intuitive d’« axe centré » que l’on s’en fait, par analogie avec la biologie par exemple. C’est une quantité qui possède les trois premières propriétés souhaitées pour atteindre notre objectif (homotopie, centrage et finesse). En adaptant la philosophie de Meyer [1992] à notre problème, nous adoptons pour le squelette et le squelette filaire en 3-D des définitions analogues (i.e. ensemble de points centrés) qui sont ainsi de notre point de vue des quantités « voisines ». Ils ne diffèrent que par le centrage utilisé pour les construire, qui a été adapté de façon tout à fait pragmatique, pour le squelette filaire, afin de mieux respecter une propriété souhaitée : la finesse au sens « un voxel d’épaisseur ». Cette approche est basée sur l’expérience — cette section présente une réflexion à posteriori. En

effet, elle découle des travaux originaux de Fricout et al. [2002] qui a obtenu des squelettes filiformes sur des géométries arborescentes particulières comme conséquences d'un centrage original, motivé par des anisotropies de résolution de ses images. C'est donc sur la base de ses résultats que nous avons construit notre démarche, qui nous a permis de nous placer dans un cadre général et rigoureux développé notamment par l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris. Des exemples de squelettes obtenus seront présentés dans la section 4.6 (figure 4.26, page 101 et figure 4.30, page 104).

4.4 Extraction des composantes élémentaires de l'espace poreux comme propriétés du squelette filaire

4.4.1 Partition du squelette filaire, mesures topologiques

Nous nous appuyons dans cette section sur les travaux de Liang et al. [2000] qui proposent une classification des voxels d'un squelette filaire (obtenu de façon ad hoc) en trois catégories : voxel terminal, noeud ou branche. Cette classification est basée sur le concept de λ -voisinage. Dans \mathbb{Z}^3 , deux voxels sont λ -voisins si

- ils sont F-voisins, ou
- ils sont A-voisins et n'ont aucun F-voisin en commun, ou
- ils sont S-voisins et n'ont aucun A-voisin ou F-voisin en commun.

Cette définition est basé sur l'idée intuitive que lorsqu'un voxel possède plusieurs 26-voisins, eux même 26-adjacents les uns des autres, on ne le considère connecté qu'avec ceux avec lesquels il partage « le plus » (une face représentant « plus » qu'une arête qui elle même représente « plus » qu'un sommet). Ce concept est transposable en 2-D : deux voxels sont λ -voisins en 2-D si

- ils sont A-voisins ou
- ils sont S-voisins et ne possèdent pas de A-voisin communs.

Par exemple, sur l'illustration en 2-D de la figure 4.17 (b), le pixel noir de droite possède quatre 26-voisins mais seulement trois 3 λ -voisins.

Sur cette base, un voxel ayant exactement un λ -voisin est un voxel terminal, un voxel ayant exactement 2 λ -voisins est un voxel de branche, un voxel ayant plus de 2 λ -voisins est un noeud.

L'avantage de considérer le λ -voisinage sur un objet fin est illustré par les figures 4.17-(a) et (b) : le 26-voisinage (ou le 8-voisinage en 2-D) génère trop de voxels nodaux qui peuvent conduire à agréger artificiellement deux noeuds différents [Liang et al., 2000].

La figure 4.18 illustre l'application du critère de Liang et al. [2000] sur le squelette filaire.

On remarque que le squelette contient des points terminaux (et les branches ballantes qui les portent) qui ne correspondent pas à des centres de pores (et à des connexions). Ceci est dû à la sensibilité du squelette filaire à la rugosité. Sur la figure 4.18, on distingue trois points terminaux « artificiels », qui conduisent à l'identification de deux noeuds artificiels (repérés par des flèches). De façon cohérente avec leur nature géométrique, l'élimination de tels points terminaux (et donc les branches ballantes qui les portent et les noeuds artificiels qu'ils

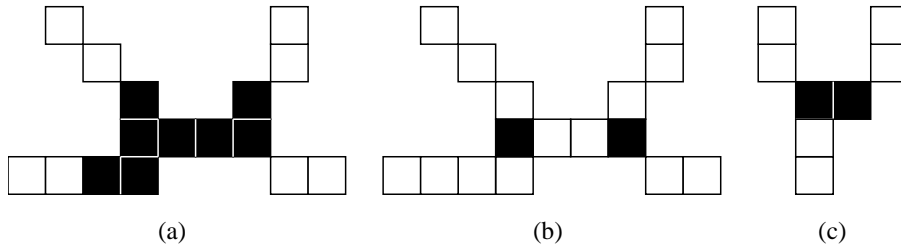


FIG. 4.17 – Avantage du λ -voisinage lors de la classification des voxels du squelette. En (a) des voxels d'un squelette fin son classés en tant que voxels de branche (en blanc) ou en tant que noeuds (en noir) en utilisant le 26-voisinage. En (b) les même voxels sont classés en utilisant le λ -voisinage. Dans le premier cas, on n'identifie qu'un seul *cluster* de voxels nodaux là où, intuitivement, on en voit deux. Ceci est obtenu en (b). En (c) une illustration du *clustering* des voxels nodaux, malgré l'utilisation du λ -voisinage (d'après Liang et al. [2000]).

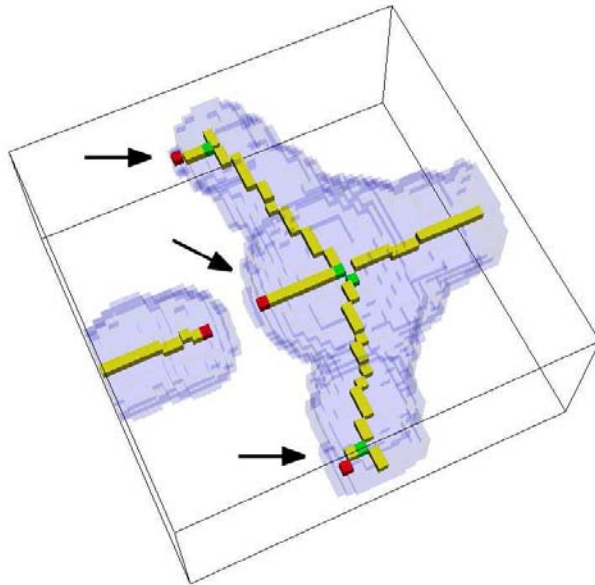


FIG. 4.18 – Identification sur le squelette filaire des points terminaux (en rouge), des noeuds (en vert) et des branches (en jaune) selon le nombre de λ -voisins qu'ils possèdent. Les flèches désignent trois points terminaux résultant de la rugosité de la surface de l'objet. Les branches ballantes qui les portent conduisent à l'identification de deux noeuds « artificiels » (i.e. n'étant pas associés à un centre de pore).

produisent) est traitée dans la section suivante.

L'utilisation du λ -voisinage pour la caractérisation des points du squelette filaire conduit parfois malgré tout à l'identification de plusieurs noeuds contigus (par exemple sur la figure 4.18). Dans ce cas, suivant Liang et al. [2000], on place le centre du pore au barycentre des noeuds.

4.4.2 Caractérisation géométriques des composantes élémentaires du modèle de réseau

A l'issue de la section 4.4.1, nous avons obtenu un squelette filaire « codifié » (i.e. dont les voxels sont rangés dans un des trois catégories : noeud, branche ou point terminal), qui caractérise la topologie de l'espace poreux original (les pores interconnectés sont clairement identifiés). Le passage de la quantité filaire (figure 4.16) au modèle de réseau recherché nécessite d'affecter des dimensions aux composantes élémentaires du réseau (pores et étranglements). La caractérisation géométrique des étranglements commence par la détermination de leurs rayons effectifs. La méthode mise en œuvre, illustrée sur la figure 4.4, a été proposée par Bakke and Øren [1997] et Liang et al. [2000]. Elle consiste à extraire la section locale de l'espace poreux associée à un point courant d'une branche (i.e. l'intersection entre le plan normal à la branche en ce point et l'espace poreux) et à mesurer son rayon. Le plan est tout d'abord déterminé dans \mathbb{R}^3 puis digitalisé.

On interpole dans un premier temps localement (en chaque voxel de chaque branche) le squelette par une courbe continue (i.e. définie dans \mathbb{R}^3) en considérant ses deux voisins. On en déduit l'équation du plan normal au squelette en chaque point de ses branches. L'intersection entre ce plan et l'objet initial (l'espace poreux digital) fournit ainsi la section locale de l'espace poreux associée au point courant de la branche.

Soit p_0 un voxel courant d'une branche et p_a et p_b ses deux premiers voisins, de coordonnées respectives (x_0, y_0, z_0) , (x_a, y_a, z_a) et (x_b, y_b, z_b) . L'équation paramétrique de la courbe quadratique qui interpole localement le squelette dans \mathbb{R}^3 est [Liang et al., 2000]

$$\begin{cases} x = \frac{1}{2}(t^2 - t)x_a + (1 - t^2)x_0 + \frac{1}{2}(t^2 + t)x_b \\ y = \frac{1}{2}(t^2 - t)y_a + (1 - t^2)y_0 + \frac{1}{2}(t^2 + t)y_b \\ z = \frac{1}{2}(t^2 - t)z_a + (1 - t^2)z_0 + \frac{1}{2}(t^2 + t)z_b \end{cases} \quad (4.37)$$

où $t \in [-1, 1]$ est le paramètre (i.e. l'abscisse curviligne). Un vecteur directeur de sa tangente en p_0 s'obtient par dérivation de ces expressions et en posant $t = 0$, on trouve [Spiegel, 1973]

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} x_b - x_a \\ y_b - y_a \\ z_b - z_a \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

Ce vecteur directeur a une norme qui vaut

$$\|\vec{n}\| = \sqrt{(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 + (z_b - z_a)^2} \quad (4.39)$$

Soit $\vec{p_0p}$ le vecteur position d'un point courant p par rapport au point p_0 , le produit scalaire de ces deux vecteurs nous donne la distance d entre le point p et le plan P , multipliée par la norme $\|\vec{n}\|$. Avec les notations de la figure 4.19, la

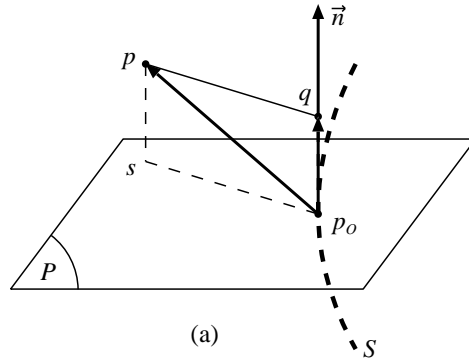


FIG. 4.19 – Distance d'un point p à un plan, défini par un point p_0 et sa normale \vec{n} , dans \mathbb{R}^3 . La courbe S en pointillés représente l'interpolation locale du squelette filaire autour du point p_0 , \vec{n} est un vecteur tangent à S en p_0 . P est le plan de normale \vec{n} passant par p_0 . La distance entre un point p et le plan P est donnée par $\|\vec{p_0q}\|$, q étant le projeté de p sur \vec{n} . D'après les propriétés du produit scalaire, on a $\|\vec{p_0q}\| = \frac{|\vec{p_0p} \cdot \vec{n}|}{\|\vec{n}\|}$.

définition géométrique du produit scalaire de deux vecteurs nous donne [Spiegel, 1973]

$$|\vec{p_0p} \cdot \vec{n}| = \|\vec{p_0q}\| \cdot \|\vec{n}\| = d \|\vec{n}\| \quad (4.40)$$

L'expression analytique de l'équation 4.40 nous donne la distance d d'un point p au plan P , normal à la courbe interpolant le squelette filaire au point p_0

$$d = \frac{(x_b - x_a)(x - x_0) + (y_b - y_a)(y - y_0) + (z_b - z_a)(z - z_0)}{\sqrt{(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 + (z_b - z_a)^2}} \quad (4.41)$$

Dans \mathbb{R}^3 , le plan euclidien est l'ensemble des points p pour lesquels cette distance vaut 0. Dans la grille digitale, nous définissons le plan comme l'ensemble des voxels p dont le centre est à une distance (euclidienne) du plan euclidien inférieure à $\frac{\sqrt{3}}{2}$ (en prenant comme unité la taille d'un voxel). Ceci assure que les voxels du plan, considérés comme des petits cubes de côté 1 dans \mathbb{R}^3 , ont au moins un point de contact avec le plan euclidien, quelque soit son orientation. Implémenté dans la grille digitale, ce critère permet d'obtenir des plans digitaux de un ou deux voxels d'épaisseur, tel qu'illustré sur la figure 4.21.

La construction de l'intersection entre un plan digital et l'objet est implémentée ainsi : à partir du voxel courant sur la branche du squelette filaire, on procède à une reconstruction géodésique dans l'objet O en ne considérant que les voxels obéissant au critère défini ci-dessus (i.e. appartenant au plan digital normal à la branche). Le résultat obtenu est illustré sur la figure 4.21 et sur la figure 4.23.

Nous venons de nous donner le moyen d'associer à chaque voxel de branche du squelette filaire la section normale (au squelette) de l'espace poreux. Notre objectif est d'identifier, sur chaque branche, la section que l'on peut associer à un étranglement qui connecte deux pores. La géométrie que nous avons choisie pour

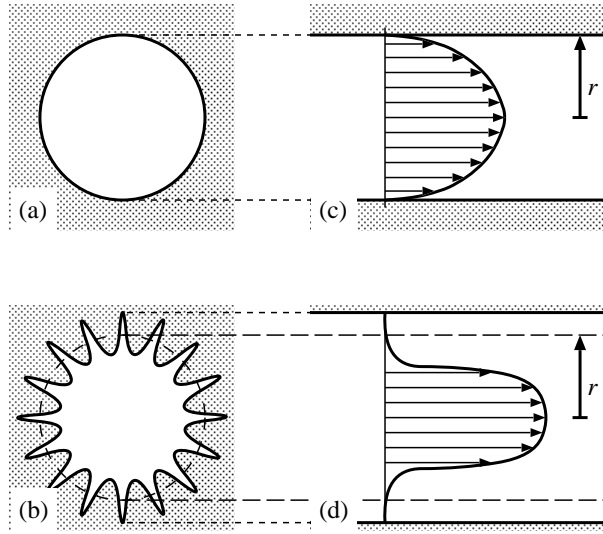


FIG. 4.20 – Illustration du biais induit par l'utilisation du rayon équivalent dans l'estimation des rayons des tubes capillaires, vis à vis des processus simulés. En (a) et (b) sont représentés les sections de deux étranglements d'aires égales, en (c) et (d) le profil de la connexion et le profil des vitesses d'un écoulement incompressible. L'utilisation du rayon équivalent conduit à modéliser ces deux connexions par des capillaires identiques, de rayon r (en (c), la connexion et le capillaire modèles sont évidemment identiques). Le rayon hydraulique prend en compte la rugosité de surface et produit un rayon plus faible.

le modèle de réseau, pores sphériques et étranglements cylindriques (« *ball and stick model* » [Bakke and Øren, 1997]) conduit à procéder à cette identification sur la base d'une mesure de rayon, l'étranglement étant naturellement placé à l'endroit où ce rayon est minimal (notion de rayon d'accès à un pore).

Une manière de mesurer le rayon équivalent d'une section est d'utiliser le rayon hydraulique (equation 4.43), classiquement utilisé dans le contexte du transport et de l'écoulement, principalement parce qu'il permet de prendre en compte la rugosité. Il fournit une mesure plus « physique » que le rayon équivalent, ainsi qu'illustré sur la figure 4.20 (equation 4.20).

Étant donné une section d'aire A et de périmètre P , le rayon équivalent est donné par

$$r_E^S = \sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (4.42)$$

le rayon hydraulique r_H est défini par

$$r_H^S = \frac{2A}{P} \quad (4.43)$$

Le facteur 2 permet d'assurer que le rayon hydraulique d'un disque est bien égal à son rayon vrai (et non pas la moitié). On constate aisément qu'une rugosité ou une forme s'éloignant du disque va augmenter le périmètre de la section et, à aire équivalente, diminuer d'autant son rayon hydraulique. En contrepartie, cet outil

nous obligera à mesurer le périmètre des étranglements. Le rayon hydraulique peut aussi être utilisé pour l'estimation des rayons des pores. Dans ce cas, pour un pore de volume V et d'enveloppe d'aire A , le rayon hydraulique est donné par

$$r_H^V = \frac{3V}{A} \quad (4.44)$$

Toutefois nous n'utiliserons pas cette méthode pour estimer les rayons des pores puisque dans nos modèles de réseaux de pores, les boules représentant les pores ne sont que des « réservoirs » à porosité, aucun processus physique ne s'y déroule. Dans ce cas, on s'applique donc seulement à conserver le volume des pores dans le modèle et c'est rayon équivalent, défini pour un volume par

$$r_E^V = \frac{3V}{4\pi} \quad (4.45)$$

qui le permet.

L'étape suivante est donc, pour chaque voxel de branche du squelette filaire, de mesurer le rayon hydraulique de la section d'espace poreux associée. Ceci nécessite d'estimer sa surface et son périmètre (équation 4.43). La mesure de l'aire est faite ainsi

- on projette les sections discrètes obtenues par reconstruction dans un plan sur l'un des plans du repère cartésien. Ceci est illustré en 2-D sur la figure 4.22,
- on compte le nombre de voxels de la surface projetée (qui nous donne une mesure de son aire) que l'on divise par le cosinus de l'angle entre la normale à la section (équation 4.38) et la normale au plan de projection.

Pour mesurer le périmètre de la section, on repère ses bords, c'est à dire l'ensemble de ses voxels qui sont en contact avec l'extérieur de l'objet. Ces voxels sont représentés en rouge sur la figure 4.21. Cet ensemble de voxels est réduit à une ligne fine par un amincissement homotopique identique à celui que subit le squelette à l'étape du post-traitement (section 4.3.4). Le nombre de voxels de cette ligne fine fournit sa longueur, de façon cohérente avec la distance digitale que nous utilisons (équation 4.11). Le rayon hydraulique associé à la section se déduit immédiatement par l'équation 4.43. Lorsque la section extraite est de trop faible extension (correspondant à un étranglement très étroit), il n'est pas toujours possible d'en extraire un « bord » qui forme une courbe fermée. La mesure du périmètre étant impossible, on n'utilise pas le rayon hydraulique mais le rayon équivalent qui ne se base que sur l'aire de la section (équation 4.42).

Le rayon de l'étranglement associé à une branche du squelette est le rayon hydraulique minimum sur cette branche. L'emplacement des étranglements est montré sur la figure 4.23.

Il arrive qu'un minimum ne puisse pas être trouvé sur une branche, i.e. les rayons associés aux voxels de cette branche diminuent régulièrement jusqu'à atteindre un point terminal. Ce point terminal, qui n'est donc pas connecté à un noeud voisin par un étranglement (ainsi que défini plus haut : rayon d'accès minimal entre deux centres de pores), est alors associé à une rugosité de surface ou à la présence d'un « coin » dans l'objet. Un tel point terminal est éliminé. En comparant les figures 4.18 et 4.23, on constate que les trois points terminaux répondant à ce critère (repérés par des flèches sur la figure 4.18) ont été ainsi éliminés.

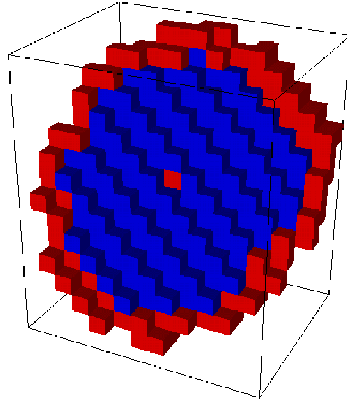


FIG. 4.21 – Exemple de section associée à un point courant (voxel central en rouge) d’une branche du squelette filaire, obtenue par la méthode décrite dans la section 4.4.2. Le calcul du périmètre de la section est basé sur les voxels rouges de la périphérie.

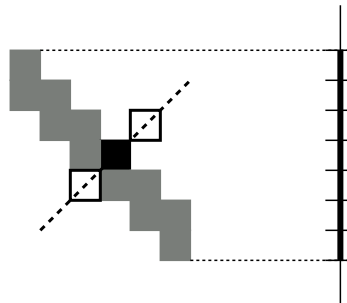


FIG. 4.22 – Illustration en 2-D de la mesure de l’aire des sections digitales. En gris est représenté la trace d’une section digitale obtenue par reconstruction à partir d’un point du squelette (en noir). En blanc les deux voxels du squelette qui ont permis de calculer l’interpolation, en trait pointillé, qui nous donne l’orientation du plan de la section. Pour calculer sa surface, on projette la section sur un plan de base du repère, à droite. L’aire de cette surface projetée est immédiatement mesurable (il suffit de compter les voxels qui la composent). La division de cette aire par le cosinus de l’angle entre les normales au plan de la section et au plan de projection nous donne l’aire associée à la surface grise (i.e. l’aire de la section).

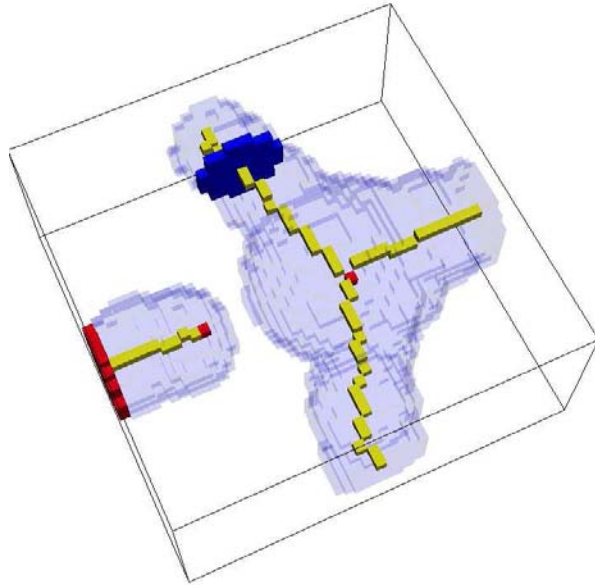


FIG. 4.23 – Plans digitaux matérialisant les étranglements dans notre objet, i.e. placés aux niveau des rayons locaux minimums. Ils partitionnent l'espace poreux en 2 pores. C'est ce type de plan qui sert aux mesures de rayons hydrauliques en chaque voxel des branches du squelette.

Cet « ébarbulage » [Fricout et al., 2002, Serra, 2002] n'est toutefois pas toujours suffisant. La grande sensibilité du squelette digital à la rugosité de surface et la complexité géométrique de l'espace poreux d'un milieu réel conduit parfois à l'identification de centres de pores très proches, séparés par des branches très courtes. Sur de telles branches, les rayons mesurés sont grands par rapport à leur longueur et elles ne peuvent pas formellement être associées à un étranglement connectant deux pores. En accord avec Liang et al. [2000], nous éliminons donc les étranglements dont le rayon est supérieur à la distance qui sépare les noeuds qu'ils connectent. Ces noeuds sont alors associés à un seul centre de pore, qui est placé en leur barycentre.

Les plans digitaux associés aux étranglements (figure 4.23) partitionnent l'espace poreux en pores, de façon cohérente avec la stratégie présentée en début de chapitre et illustrée sur la figure 4.3. Le centre de chaque pore est placé au barycentre des noeuds qu'il contient. Le volume des pores est mesuré simplement en comptant le nombre de voxels qu'ils contiennent. Ceci est implémenté en procédant à la reconstruction géodésique de chaque pore dans l'espace poreux initial, à partir d'un des noeud qu'il contient et en considérant les plans matérialisant les étranglements comme des frontières. Le volume représenté par les voxels de ces « plans » digitaux est également partagé entre les pores qu'ils séparent. Le rayon équivalent de chaque pore est ensuite calculé via l'équation 4.45.

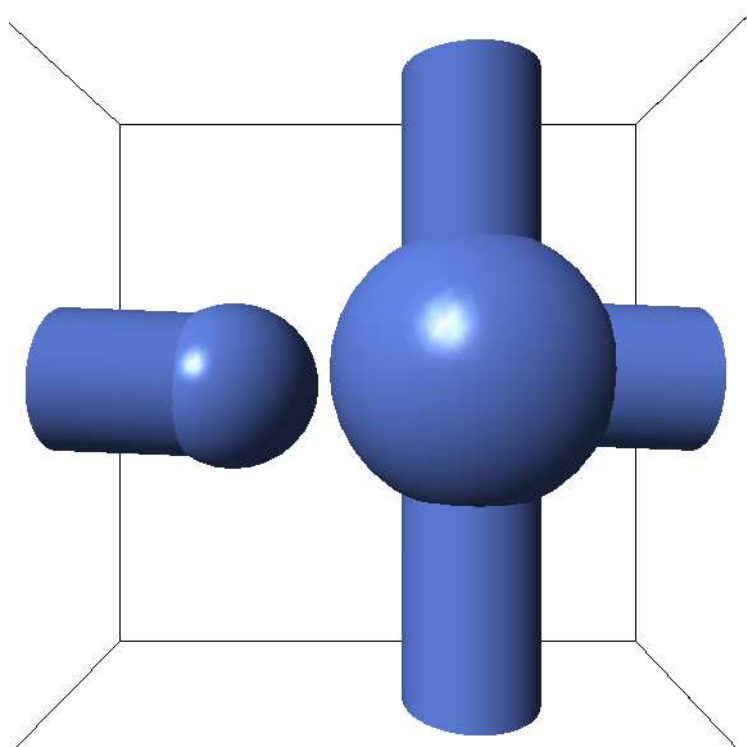


FIG. 4.24 – Modèle de réseau construit à partir des mesures effectuées sur l'objet-test (figure 4.12). Ce réseau très simple à vocation illustrative contient deux pores et deux liens traversant les limites de la cellule par périodicité.

4.5 Modèles de réseaux « quantitatifs » obtenus

La figure 4.24 présente le modèle de réseau obtenu à partir des mesures sur l'objet-test. Du fait de la périodicité de l'image, et donc du réseau, la cellule unitaire contient deux pores et deux liens.

Les figures 4.25 à 4.31 illustrent la mise en œuvre de la méthode sur des images plus grandes et plus complexes.

La figure 4.31, représentant un réseau de grande taille obtenu à partir des images digitales présentées dans la figure 4.1, amène quelques commentaires. On constate tout d'abord que certains éléments géométriques du modèle de réseau s'interpénètrent. Il est évident que ces contacts ne sont pas pris en compte lors des calculs et simulations réalisés dans les modèles de réseaux. La philosophie de ces modèles est de modéliser la manière dont communiquent deux pores vis-à-vis d'un phénomène physique, ces deux pores étant considérés comme de simples « réservoirs de porosité » où n'ont lieu que des redistributions. A ce titre, l'interpénétration des éléments géométriques du réseau, si elle est visuellement gênante, n'est pas en contradiction avec les fondements du modèle et est classiquement rencontrée dans la littérature [Bakke and Øren, 1997, Lowry and Miller, 1995]. Ensuite il convient de remarquer que la méthode de partitionnement de l'espace poreux en pores élémentaires (tels qu'illustrés sur la figure 4.27) n'est pas parfaite et conduit parfois à l'identification d'un pore de rayon plus faible qu'un étranglement qui lui est connecté (on en voit un au centre de la figure 4.31). L'élimination des points terminaux du squelette filaire résultant de la rugosité de la surface de l'objet ne fonctionne pas de façon parfaite telle qu'implémentées et conduit parfois à l'identification de tels pores « aberrants ». Afin de pouvoir mener les calculs dans les modèles de réseaux, nous proposons simplement d'éliminer ces pores et de comptabiliser leur volume dans le pore auquel ils sont connectés.

4.6 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons mis en place un outil d'analyse d'images ad hoc permettant la mesure, sur une image digitale binaire 3-D d'un milieu poreux, des informations nécessaires à la construction d'un modèle réseau de pores constitué de pores sphériques et d'étranglements capillaires. Cet outil est développé sur une base rigoureuse de morphologie mathématique, en introduisant un squelette filaire défini de façon analogue au squelette morphologique euclidien, moyennant un assouplissement de la notion de centrage. Le squelette filaire est ainsi obtenu au sens d'un compromis entre plusieurs propriétés incompatibles, en accord avec Serra [1982].

Les principales difficultés dans cet exercice sont classiquement liées à l'implémentation sur la grille digitale et à la sensibilité du squelette à la rugosité de surface. Ces difficultés sont levées ici par des critères objectifs, issus de la littérature par exemple [Liang et al., 2000] ou originaux. Il convient de noter que le squelette filaire est obtenu de façon automatique (i.e. sans intervention « manuelle » sur le squelette final).

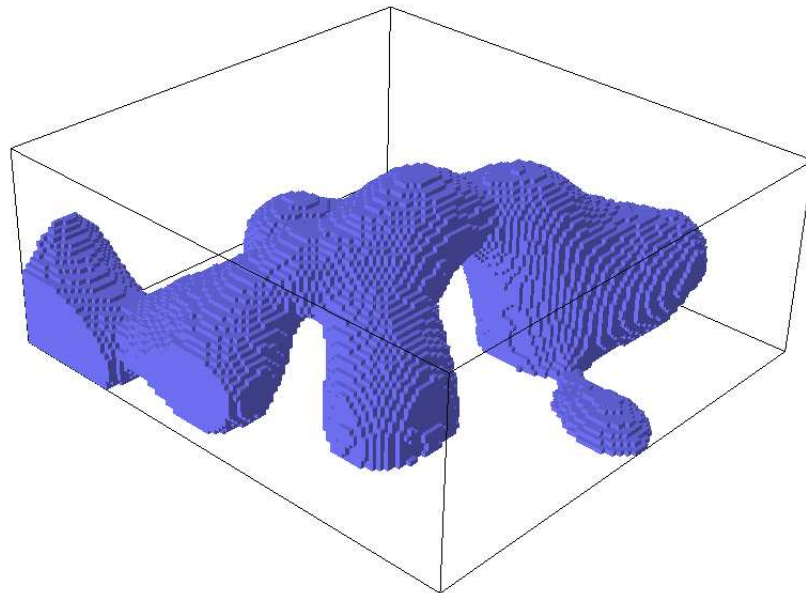


FIG. 4.25 – Image test de plus grande dimension. Il s'agit d'une partie de l'espace poreux de l'échantillon présenté sur la figure 4.1, de $113 \times 107 \times 44$ voxels.

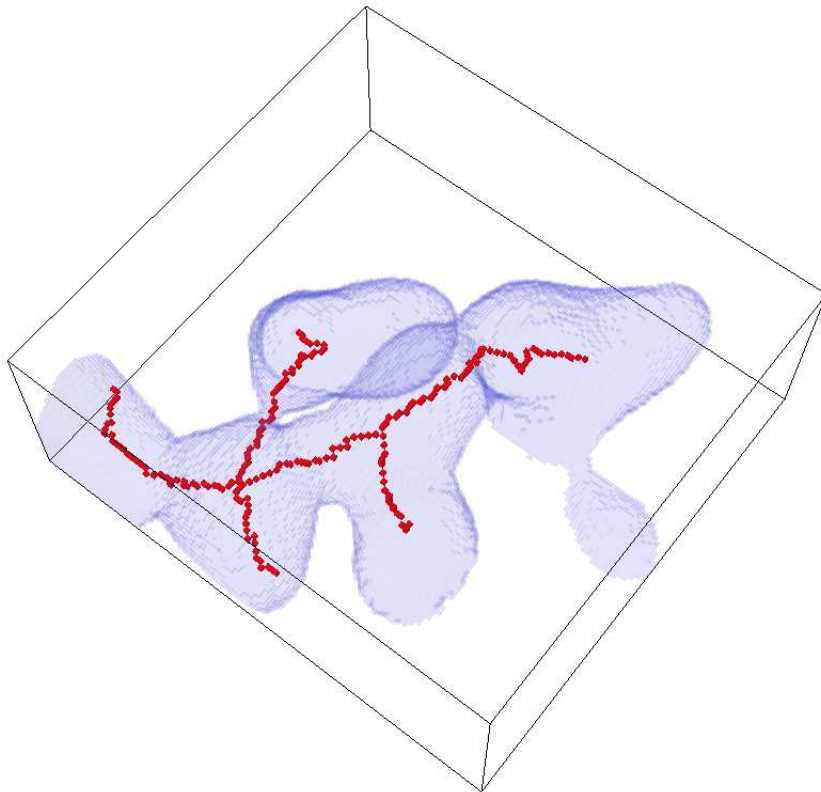


FIG. 4.26 – Squelette filaire (en rouge) de l'objet présenté sur la figure 4.25 (et affiché ici en filigrane), après élimination automatique des branches ballantes « polluantes ». On remarque que la branche du squelette et le point terminal repérant le petit « pore » sur la droite de la figure a été éliminée lors de ce processus. Cette partie de l'objet, de très faible épaisseur (5 voxels au maximum), est le reliquat d'un pore qui a été intercepté par les bords de l'image lors de l'acquisition et qui a été considéré comme une « rugosité » de la surface.

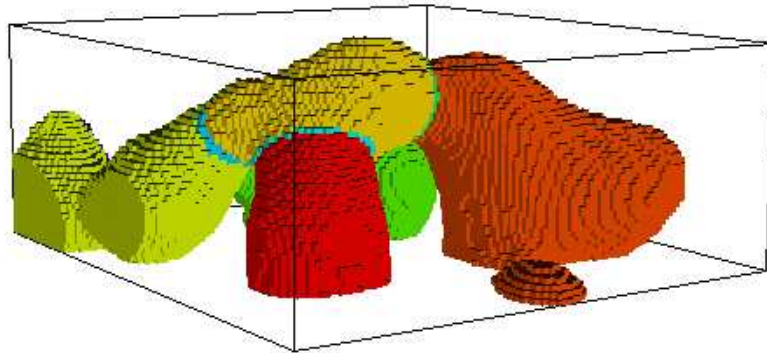


FIG. 4.27 – Espace poreux de la figure 4.25, partitionné en 5 pores de couleurs différentes, séparés par des étranglements (représentés par des plans digitaux, plans dont on voit les traces à la surface de l'objet, qui ont servi à calculer les rayons hydrauliques des étranglements).

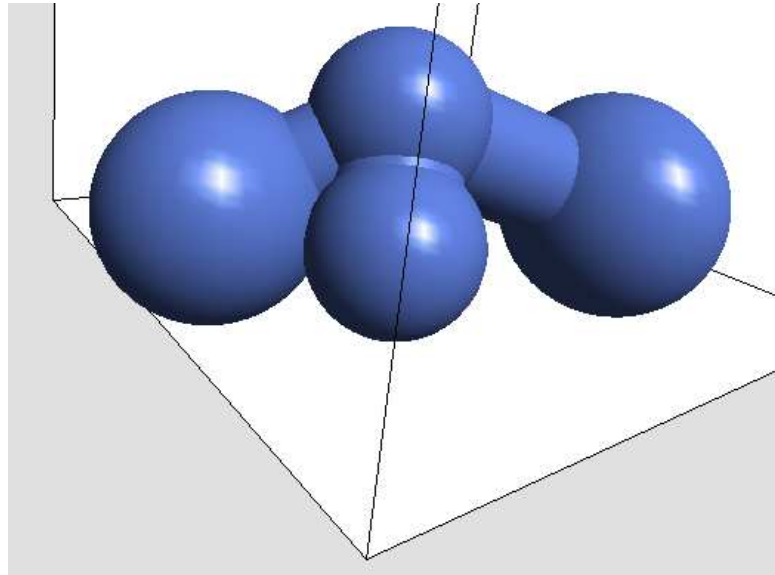


FIG. 4.28 – Modèle de réseau obtenu à partir du squelette filaire de la figure 4.26 de l'objet présenté sur la figure 4.25. Le réseau contient 5 pores dont le volume a été déterminé lors du partitionnement, illustré sur la figure 4.27.

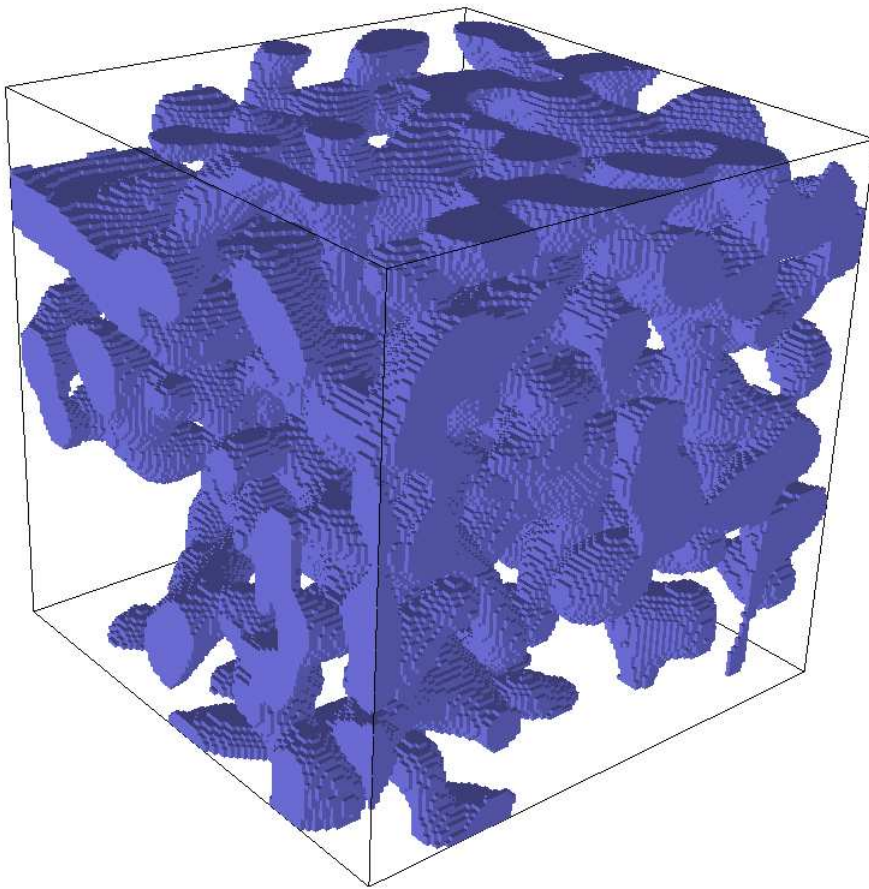


FIG. 4.29 – Image digitale ($128 \times 128 \times 128$ voxels) de la porosité d'un échantillon de glace poreuse.

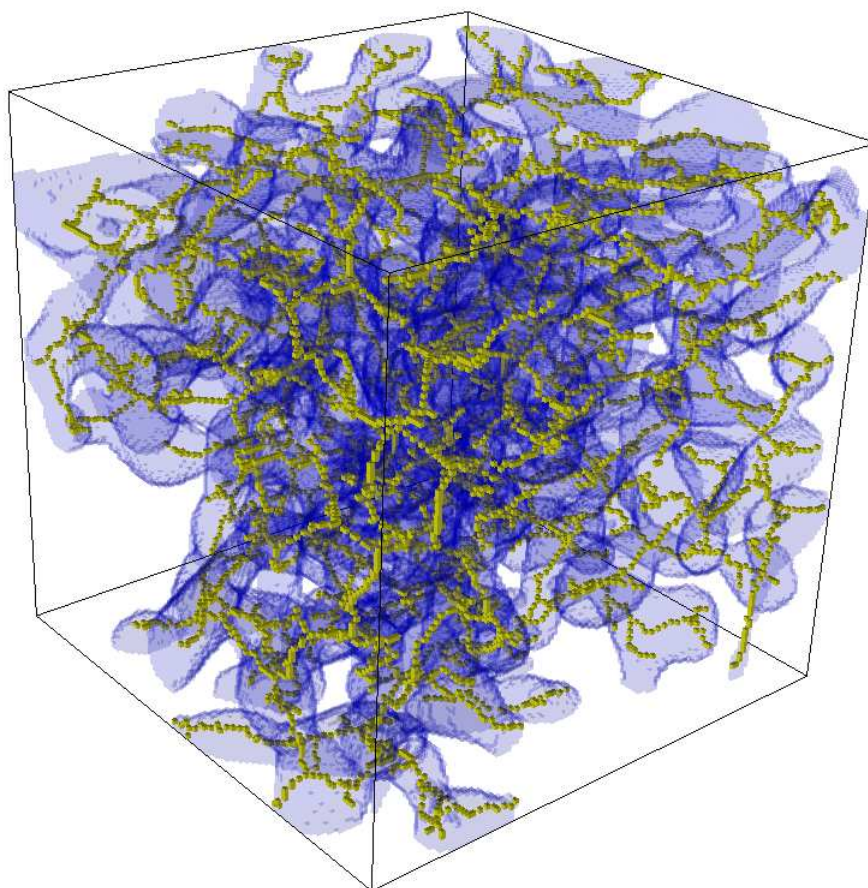


FIG. 4.30 – Squelette filaire (en jaune) de l'image présentée sur la figure 4.29, affichée ici en filigrane. Le squelette présenté ici n'a pas encore été nettoyé de ses branches ballantes superflues.

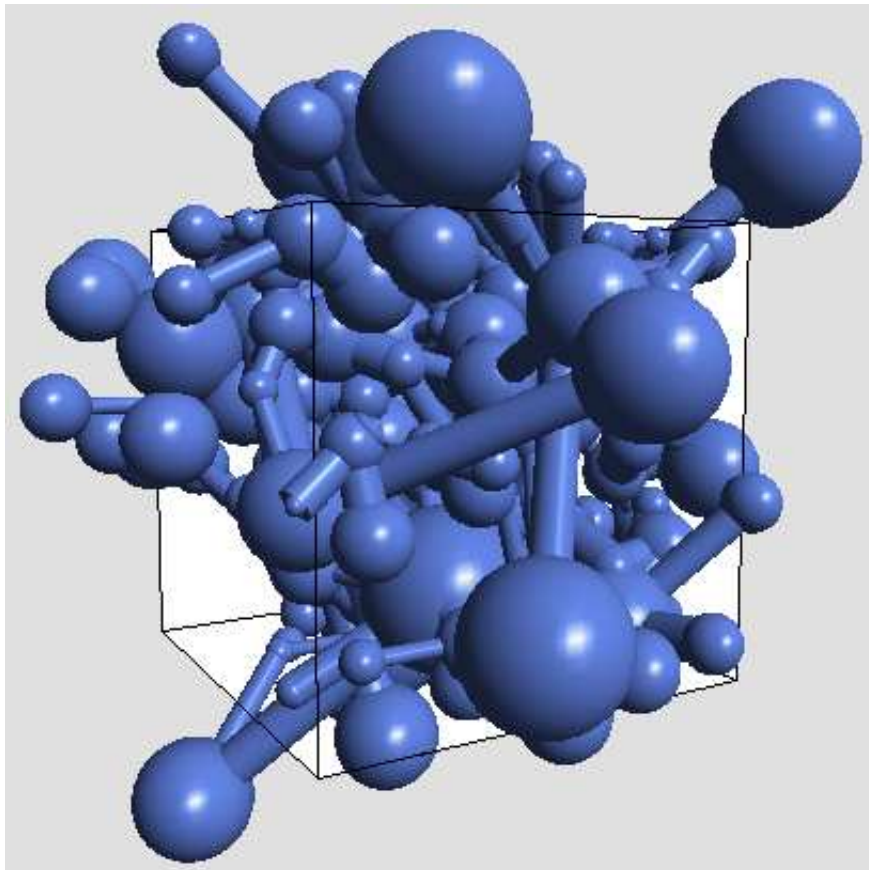


FIG. 4.31 – Modèle de réseau de pores obtenu à partir du squelette de la figure 4.30 de l'objet de la figure 4.29. Le réseau contient 142 pores sphériques et 343 connexions. Le cube en blanc délimite la cellule unitaire du réseau, (i.e. tous les centres des pores sphériques du modèle de réseau sont situés dans ce cube). Les tubes capillaires sortant de ce cube connectent des pores au travers des limites du réseau, par périodicité. A l'extrémité de chacun de ces capillaires est placé le pore du réseau adéquat, décalé par périodicité.

Conclusions et perspectives

Au cours de cette thèse, nous avons eu l'occasion de participer à la mise en place d'une stratégie globale dont le but à terme est l'investigation complète et prédictive de la relation entre les propriétés macroscopiques de transport et de transfert d'un milieu réel, observé, et sa microstructure. La partie aval de cette démarche globale est basée sur le modèle physique de la prise de moyenne volumique qui permet l'évaluation des propriétés effectives d'intérêt en intégrant notamment l'effet de l'ensemble des caractéristiques microstructurales incluses dans une cellule unitaire (Volume Élémentaire Représentatif), dont la construction est l'objet de la partie amont, basée sur l'analyse d'images quantitatives. Dans ce document, nous avons choisi de présenter d'abord le « volet physique » (chapitres 1 et 2) puis le « volet image » de la démarche (chapitres 2 et 3).

Le premier chapitre de ce document est de nature essentiellement bibliographique. Dédié au modèle physique de la prise de moyenne volumique, il nous a permis de montrer que dans le cas d'un fluide binaire (un solvant, l'eau et un soluté, le NAPL aqueux), la description macroscopique de la lente dissolution dans l'aquifère de globules d'hydrocarbures peu miscibles piégés (la dispersion active) peut être appréhendée par le biais de deux coefficients macroscopiques : le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse entre la phase aqueuse et le NAPL α . Les problèmes de fermeture exhibés par la prise de moyenne volumique locale permettent de calculer à l'échelle macroscopique, rigoureusement et sans hypothèses constitutives sur le milieu, \mathbf{D}^* et α en intégrant les effets de l'ensemble des paramètres et variables contenus dans la description microscopique du problème, notamment les effets de la microstructure (configuration des interfaces microscopiques entre les phases en présence : solide, aqueuse et NAPL). Après quelques illustrations bibliographiques du calcul des coefficients macroscopiques de dispersion, en intégrant l'information structurale de cellules unitaires très simples (milieux dits « ordonnés »), le chapitre 2 présente le type de cellule unitaire que nous nous proposons d'utiliser pour le calcul de \mathbf{D}^* et α . Le choix de ces cellules unitaires dont il s'agit de mettre à l'échelle l'information microstructurale dans les coefficients macroscopiques de dispersion, est motivé par deux choix.

1. Les cellules unitaires doivent être pertinentes vis-à-vis des processus physiques considérés.
2. Leur microstructure doit être plus simple que la microstructure réelle du milieu poreux d'intérêt, de façon à pouvoir étudier de manière complète et prédictive la relation entre les propriétés de transport d'un milieu et sa microstructure sous-jacente. D'un point de vue plus technique, la nature simplifiée de la cellule unitaire doit permettre de relaxer les contraintes

informatiques limitant typiquement la quantité d'information portée par la cellule unitaire.

L'idée est donc ici de ne conserver dans la cellule unitaire que l'information sur les règles décrivant l'association des tailles des rayons d'accès (étranglements) entre pores adjacents, règles présentées dans de nombreuses approches indépendantes comme contrôlant l'essentiel des phénomènes de transport et d'écoulement. Ces règles sont explicitées sous la forme de modèles de réseaux de pores dans lesquels pores et étranglements sont représentés par des objets géométriques simples, ici des sphères et des capillaires droits (figure 2.2). La mise à l'échelle de l'information structurale contenue dans ce type de cellule unitaire nous a amené à généraliser au cas de réseaux irréguliers les programmes numériques de résolution des problèmes de fermeture. Cette généralisation consiste principalement à prendre en compte l'orientation quelconque des capillaires de façon compatible avec la périodicité du réseau. La visualisation de ces réseaux (par exemple sur la figure 4.31) a nécessité de reprendre des programmes de visualisation originellement développés au laboratoire par Éric Betton lors de son stage de DEA (2000).

Nous nous sommes alors livré à des expériences numériques illustrant les tendances \mathbf{D}^* et α en fonction du nombre de Péclet obtenues avec ce type de représentation simplifiée de la microstructure. Les tendances obtenues dans le chapitre 2 du document, classiques pour \mathbf{D}^* mais moins pour α (comportement asymptotique à fort Péclet original) restent cependant qualitatives. En effet les modèles de réseaux utilisés dans ce chapitre (dits modèles de réseaux aléatoires) ont une vocation illustrative. Les règles qui y sont reproduites sont ad hoc (et donc qualitatives) et ne résultent pas d'un processus de simplification visant à réduire la complexité de l'espace poreux d'un échantillon réel observé (par exemple sous la forme d'une image 3-D discrète) à ces simples règles décrivant l'affectation des tailles de rayons d'accès aux pores adjacents. Ce processus de simplification, dont la finalité est d'obtenir des modèles de réseaux quantitatifs est décrit dans les chapitres 3 et 4 du document, qui relèvent tous deux de l'analyse d'images.

L'idée de la démarche de simplification mise en œuvre est la suivante : partant d'une image digitale d'un échantillon unique réel observé, en rechercher une représentation quantitative sous la forme d'un modèle de réseau en s'appuyant sur des techniques d'analyse d'images. L'objectif du chapitre 3 est de recourir à la modélisation aléatoire pour générer des milieux poreux numériques 3-D (des images synthétiques) incluant ou n'incluant pas telles ou telles composantes structurales afin d'en évaluer, à terme, l'impact sur la physique. Cette étape représente une première simplification de la microstructure complexe des milieux poreux réels. Notre contribution a consisté à définir les conditions dans lesquelles il est possible, à partir d'une mesure directe sur un échantillon unique de taille finie (en l'occurrence la fonction d'autocorrélation de l'indicatrice de phase de l'échantillon) de générer des milieux poreux numériques qui puissent être considérés comme des analogues quantitatifs de l'échantillon observé. Dans le contexte de notre démarche de simplification de la microstructure, on entend par « analogue quantitatif » un milieu synthétique constitué des seuls analogues (statistiques) des composantes structurales de l'échantillon réel décrites par le descripteur poreux (ici, la fonction d'autocorrélation) mesuré. Nous avons donc développé une version 3-D d'un modèle aléatoire où une série de milieux poreux

numériques sont produits comme réalisations d'une fonction aléatoire stationnaire caractérisée par sa fonction d'autocorrélation (et sa densité de probabilité, qui se résume dans le cas binaire à la porosité). La contrainte du modèle stochastique mis en œuvre est une fonction formée en ne conservant que la partie de la fonction d'autocorrélation mesurée sur l'échantillon disponible, de taille $L_x \times L_y \times L_z$, relative aux composantes structurales de l'échantillon de tailles inférieure à $L_x^c \times L_y^c \times L_z^c$. Cette limite est assimilée ici à une longueur de corrélation et vérifie $L_{x,y,z}^c \ll L_{x,y,z}$ de façon à ce que la contrainte du modèle aléatoire soit de nature essentiellement statistique. Le modèle aléatoire 3-D implémenté au cours de cette thèse est illustré sur la figure 3.2 du chapitre 3.

Les milieux poreux réels étant systématiquement formés par une hiérarchie de composantes structurales (ou hétérogénéités) de taille croissantes, on peut donc à priori imposer ou pas une composante de taille donnée en ajustant la longueur de corrélation. Pour établir si les milieux générés ainsi sont des analogues quantitatifs de l'échantillon, nous nous sommes appuyés sur des travaux antérieurs au laboratoire [Anguy et al., 2001, 2003] montrant que la fonction d'autocorrélation mesurée sur une image binaire de taille finie en est une mesure complète puisque sa seule donnée permet de retrouver systématiquement et au pixel près l'image sur laquelle elle a été mesurée. Ce résultat original (et manifestement encore méconnu dans la communauté des milieux poreux) combiné à la capacité du modèle aléatoire à reproduire dans ses réalisations la partie de la fonction d'autocorrélation dont la nature est essentiellement statistique devient alors un critère objectif global pour affirmer qu'aux échelles inférieures à la longueur de corrélation, échantillon et réalisations sont statistiquement analogues. Toutefois, aux échelles supérieures, nous observons que les réalisations du modèle incluent, à notre insu, un bruit structural non imposé et lié à la manière très pragmatique dont nous contraignons le modèle aléatoire stationnaire. La fonction contrainte ne vérifie en effet plus certaines propriétés mathématiques de la fonction d'autocorrélation. L'expérience a révélé que l'intensité de ce bruit structural est d'autant plus forte que cet écart aux propriétés de la fonction d'autocorrélation est important et que ce dernier diminue rapidement lorsque la longueur de corrélation augmente. Les techniques de recuit simulé implémentées dans le modèle aléatoire au cours de cette thèse permettent d'imposer des longueurs de corrélation importantes qui nous ont permises de déterminer expérimentalement les conditions dans lesquelles le bruit structural est minimisé. L'ensemble de ces travaux représente, de notre point de vue un premier argumentaire supportant l'idée que les réalisations du modèle aléatoire ainsi produites et l'échantillon sont des analogues quantitatifs. Il est toutefois entendu que l'argumentaire développé dans le chapitre 3 mérite encore d'être mûri et précisé.

Disposant d'une image digitale 3-D d'un échantillon réel ou d'une image synthétique de cet échantillon (au sens défini au chapitre 3), nous avons cherché dans le chapitre 4 à ne conserver de l'image digitale 3-D originale que les règles contrôlant l'affectation des tailles de rayons d'accès aux pores adjacents. En nous appuyant sur une technique d'analyse d'images non linéaire, la morphologie mathématique, nous avons recherché le squelette filaire de l'espace poreux de l'image digitale. La recherche de ce squelette filaire (figure 4.30) a été faite au sens d'un compromis entre 4 propriétés souhaitées. Ici encore, nous avons fait preuve de pragmatisme. Concernant le compromis évoqué ici, la manière d'aborder la propriété souhaitée de centrage, s'inspirant d'une idée originale de

Fricout et al. [2002], a notamment facilité la vérification d'une autre propriété souhaitée : la finesse du squelette, généralement difficile à vérifier en 3-D lorsque le point de départ de la démarche est la définition rigoureuse du squelette : le lieu des centres de toutes les boules maximales [Serra, 1982]. Le squelette filaire déterminé, les composantes élémentaires de l'espace poreux, i.e. les pores et les étranglements, émergent en tant que propriétés du squelette, évitant tout recours à un critère de taille, forcément subjectif. Il est alors possible par des techniques relativement simples de caractériser pores et étranglements par des éléments géométriques plus ou moins simples. Dans le cadre de cette thèse, les étranglements sont décrits par des capillaires droits et les pores par des sphères, donc. Les modèles de réseaux ainsi obtenus représentent une première approximation des règles contrôlant l'affectation des rayons d'accès aux pores adjacents dans l'échantillon réel.

Tout au long de ce document, nous avons essayé de présenter notre démarche globale pour l'étude de la relation entre les propriétés physiques macroscopiques (\mathbf{D}^* et α) et la microstructure sous-jacente, d'une façon linéaire, avec en amont la simplification consistant à ne conserver dans des milieux synthétiques qu'une partie de l'information structurale portée par l'échantillon. Puis une deuxième simplification consistant à réduire l'information contenue dans ces milieux synthétiques à l'expression plus simple des règles contrôlant l'affectation des rayons d'accès aux pores adjacents. Enfin le calcul des propriétés de transport par changement d'échelle qui permet d'intégrer dans les coefficients \mathbf{D}^* et α les effets des caractéristiques structurales microscopiques conservées après ces deux simplifications. Les interactions entre ces différents « modules » sont donc évidentes. Ils ont été toutefois traités de manière indépendante les uns des autres comme le reflète ce document. La première perspective à ce travail est donc évidemment d'appliquer la démarche globale à quelques cas d'études. A plus courte échéance, nous nous proposons de comparer les valeurs des propriétés physiques obtenues par calcul sur des images discrètes et sur les modèles de réseaux équivalents.

Concernant les perspectives génériques des différents « modules », il s'agit d'une part d'améliorer le réalisme des phénomènes physiques simulés dans les modèles de réseaux et d'autre part de raffiner la construction du réseau.

Ci dessous sont présentées quelques perspectives intéressantes.

- Koplik and Lasseter [1985] proposent une mise en place du NAPL basée sur une approximation des équations de Stokes lors d'un écoulement diphasique dans un réseau de pores 2-D. Cette méthode semble mener à une mise en place du NAPL plus réaliste, bien que plus complexe à mettre en œuvre. Elle autorise en particulier la présence d'interfaces dans les tubes capillaires et les pores (dans notre cas, ces interfaces sont toujours à la limite entre ces éléments) qui nécessiterait une reformulation des problèmes de fermeture dans le modèle de réseau.
- Zhou et al. [2000] utilisent des faisceaux de tubes capillaires de section carrée pour prendre en compte l'échange entre le NAPL piégé et le film d'eau qui se forme dans les coins du capillaire. Leurs résultats tendent à montrer qu'à fort Péclet, c'est le processus de diffusion dans ces coins qui contrôle l'échange.
- De nombreux milieux poreux naturels, tels les milieux agrégés, sont isotropes ou anisotropes dans une seule direction, perpendiculaire aux plans de sédimentation. Ces propriétés doivent permettre d'estimer l'autocor-

relation 3-D de ces milieux à partir de lames minces pétrographiques 2-D via, par exemple, la transformée de Hankel [Sneddon, 1972] ou à l'aide d'arguments stéréologiques, dans le but de générer à terme des modèles de réseaux 3-D à partir de la donnée d'une section pétrographique 2-D conventionnelle.

Bibliographie

- P. M. Adler. *Porous media : Geometry and transport*. Butterworth-Heinemann, 1992.
- P. M. Adler, C. G. Jacquin, and J. A. Quiblier. Flow in simulated porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, 16 :691–712, 1990.
- P. M. Adler, C. G. Jacquin, and J. F. Thovert. The formation factor of reconstructed porous media. *Water Resources Research*, 28 :1571–1574, 1992.
- A. Ahmadi, A. Aigueperse, and M. Quintard. Calculation of the effective properties describing active dispersion in porous media : from simple to complex unit cells. *Advances in Water Resources*, 24 :423–438, 2001a.
- A. Ahmadi, A. Aigueperse, and M. Quintard. Upscaling of nonwetting phase residual transport in porous media : A network approach. *Transport in Porous Media*, 43 :309–353, 2001b.
- A. Aigueperse. *Dispersion dans un aquifère contaminé par des hydrocarbures*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 1998.
- H. P. Amaral Souto and C. Moyne. Dispersion in two-dimensional periodic porous media. part ii. dispersion tensor. *Physics of Fluids*, 9(8) :2253–2263, August 1997.
- Y. Anguy, S. Belin, D. Bernard, B. Fritz, and J. B. Ferm. Modeling physical properties of sandstone reservoirs by blending 2d image analysis data with 3d capillary pressure data. *Physics and Chemistry of the Earth, Part A : Solid Earth and Geodesy*, 24(7) :581–586, 1999.
- Y. Anguy, S. Belin, R. Ehrlich, and A. Ahmadi. Interpretation of mercury injection experiments using a minimum set of porous descriptors derived by quantitative image analysis. *Image Analysis & Stereology*, 21(2) :127–132, 2002.
- Y. Anguy, D. Bernard, and R. Ehrlich. Towards realistic flow modelling. creation and evaluation of two-dimensional porous media : an image analysis approach. *Surv Geophys*, 17 :287–365, 1996.
- Y. Anguy, R. Ehrlich, A. Ahmadi, and M. Quintard. On the ability of a class of random models to portray the structural features of real, observed, porous media in relation to fluid flow. *Cement & Concrete Composites*, 23 :313–330, 2001.

- Y. Anguy, R. Ehrlich, and C. Mercet. Is it possible to characterize the geometry of a real porous medium by a direct measurement on a finite section? (1) the phase retrieval problem. *Mathematical Geology*, 35(7) :167–789, 2003.
- Y. Anguy, R. Ehrlich, C. M. Prince, V. Riggert, and D. Bernard. The sample support problem for permeability assesment in reservoir sandstones. In J. M. Yarus and R. L. Chambers, editors, *A. A. P. G. Computer Applications in Geology, N° 3 : Stochastic modeling and geostatistics*, pages 37–54. A. A. P. G., Tulsa, Oklahoma, 1994.
- R. Aris. On the dispersion of a solute by diffusion, convection and exchange between phases. *Proc. Roy. Soc. London A*, 252 :538–550, 1956.
- Y. Bachmat and J. Bear. Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media. 1 : The continuum approach. *Transport in Porous Media*, 1 (3) :213–240, 1986.
- A. L. Baehr and M. Y. Corapcioglu. A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products 2 : numerical solution. *Water Resources Research*, 23 :201–213, 1987.
- S. Bakke and P.-E. Øren. 3-d pore-scale modelling of sandstones and flow simulations in the pore networks. *SPE Journal*, 2 :136–148, June 1997.
- J. F. Barrett and J. F. Coales. An introduction to the analysis of non linear control systems with random inputs. In *Proceedings of the IEEE Monograph*, volume 154M, pages 190–199, 1955.
- J. F. Barrett and D. G. Lampard. An expansion for some second order probability dsitributions and its application to noise problem. *IEEE Transaction in Information Theory*, IT-23 :10–15, 1955.
- J. Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York, 1972.
- J. Bear. Modelling flow and contaminant transport in fractured rocks. In J. Bear, C. F. Tsang, and G. de Marsily, editors, *Flow and contaminant transport in fractured rock*, pages 1–37. Academic Press, San Diego, 1993.
- G. Bertand and G. Malandin. A new characterization of three-dimensional simple points. *Pattern Recognition Letters*, pages 169–175, 1994.
- S. Beucher. Squelettes connexes et non connexes. Internal Report n° 7/89, Centre de Morphologie Mathématique de l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris, March 1989.
- M. Blunt and P. King. Relative permeabilities from two- and three-dimensional pore-scale network modeling. *Transport in Porous Media*, 6 :407–433, 1991.
- E. O. Brigham. *The fast fourier transform*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
- N. A. Broste. Digital generation of random sequences with specified autocorrelation and probability functions. Report No RE-TR-70-5, Alabama, Advanced Sensors Laboratory, Research and Engineering Directorate, U.S. Army Missile Command, Redstone Arsenal, 1969.

- R. G. Carbonell and S. Whitaker. Dispersion in pulsed systems ii : Theoretical developments for passive dispersion in porous media. *Chem Eng Sci*, 38 : 1795–1802, 1983.
- M. A. Celia and P. C. Reeves. Recent advances in pore scale models for multiphase flow in porous media. *Rev. Geophys.*, 33(Suppl.), 1995.
- I. Chatzis, N. R. Morrow, and H. T. Lim. Magnitude and detailed structure of residual oil saturation. *SPE Journal*, paper 10681, April 1983.
- R. Chella, D. Lasseux, and M. Quintard. Multiphase, multicomponent fluid flow in homogenous and heterogenous porous media. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 53(3) :335–346, 1998.
- M. Y. Corapcioglu and A. L. Baehr. A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products 1 : theoretical considerations. *Water Resources Research*, 23 :191–200, 1987.
- M. Y. Corapcioglu and S. Panday. Compositional multiphase flow models. In M. Y. Corapcioglu, editor, *Advances in porous media*, pages 1–59. Elsevier, Amsterdam, 1991.
- R. A. Dawe, E. G. Mahers, and J. K. Williams. Pore scale physical modelling of transport phenomena in porous media. In J. Bear and Y. Corapcioglu, editors, *Advances in transport phenomena in Porous Media*, pages 49–76. Kluwer Academic Publishers, 1987.
- E. W. Dijkstra. A note on two problems in connexion with graphs. *Numerische Matematik*, 1 :269–271, 1959.
- F. A. L. Dullien. *Porous Media, Fluid transport and pore structure*. Academic Press, London, second edition, 1992.
- D. A. Edwards, M. Shapiro, H. Brenner, and M. Shapira. Dispersion of inert solutes in spatially periodic, two-dimensional model porous media. *Transport in Porous Media*, 6 :337–358, 1991.
- R. Ehrlich, S. J. Crabtree, K. O. Horkowitz, and J. P. Horkowitz. Petrography and reservoir physics i : objective classification of reservoir porosity. *American Association of Petroleum Geologists Bulletin*, 75(10) :1547–1562, 1991a.
- R. Ehrlich, E. L. Etris, D. Brumfield, L. P. Yan, and S. J. Crabtree. Petrography and reservoir physics iii : physical models for permeability and formation factor. *American Association of Petroleum Geologists Bulletin*, 75(10) :1579–1592, 1991b.
- A. Eidsath, R. G. Carbonell, S. Whitaker, and L. R. Herrmann. Dispersion in pulsed systems iii comparison between theory and experiments for packed beds. *Chemical Engineering Science*, 38(11) :1803–1816, 1983.
- E. L. Etris, D. Brunfield, and R. Ehrlich. Relations between pore throats and permeability : a petrographic/physical analysis of some carbonates grainstones and parkstones. *Carbonate and Evaporites*, pages 17–32, 1988.

- I. Fatt. The network model of porous media i. capillary characteristics. *Transaction AIME*, 207 :144–159, 1956a.
- I. Fatt. The network model of porous media i. dynamic properties of a single size tube network. *Transaction AIME*, 207 :160–163, 1956b.
- I. Fatt. The network model of porous media i. dynamic properties of networks with tube radius distribution. *Transaction AIME*, 207 :164–181, 1956c.
- J. B. Ferm, R. Ehrlich, and G. A. Crawford. Petrographic image analysis and petrophysics : analisys of crystalline carbonates grainstones and parkstones. *Carbonate and Evaporites*, 8(1) :90–108, 1993.
- L. A. Ferrand and M. A. Celia. The effect of heterogeneity on the drainage capillary pressure–saturation relation. *Water Resources Research*, 28(3) :859–870, 1992.
- J. R. Fienup. Phase retrieval algorithms : A comparison. *Applied Optics*, 21 : 2758–2769, 1982.
- G. Fricout, L. A. Cullen-McEwen, I. S. Harper, D. Jeulin, and J. F. Bertram. A quantitative method for analysing 3-d branching in embryonic kidneys : development of a technique and preliminary data. *Image Analysis and Stereology*, 21 :37–41, 2002.
- J. J. Fried and M. A. Combarous. Dispersion in porous media. In V. T. Chow, editor, *Advances in Hydroscience*, volume 7, pages 167–282. Academic Press, 1971.
- R. W. Gerchberg and W. O. Saxton. A practical algorithm for the determination of phase from image and diffraction plane plane pictures. *Optik*, 35 :237–246, 1972.
- L. C. Gratton and H. J. Fraser. Systematic packing of spheres with particular relation to porosity and permeability. *Journal of Geology*, 43(8) :785–909, 1935.
- W. G. Gray. A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engeneering Science*, 30(2) :229–233, 1975.
- R. A. Greenkorn. *Flow phenomena in porous media. Fundamentals and applications in petroleum, water and food production*. Marcel Dekker, Inc., 1983.
- U. G. Gujar and D. G. Lampard. Generation of random signals with specified probability density function and power density spectra. *IEEE Trans. Autom. Control*, pages 716–719, 1968.
- D. J. Gunn and C. Pryce. Dispersion in packed beds. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 47(10) :T341–T350, 1969.
- W. B. Haines. Studies in the physical properties of soil, part v. *Journal of Agricultural Science*, 20 :97–116, 1930.

- E. M. Holiday. Transformation of a set of pseudo-random numbers into a set representing any desired probability and correlation. Report No RE-TR-69-25, Alabama, Advanced Sensors Laboratory, Research and Engineering Directorate, U.S. Army Missile Command, Redstone Arsenal, 1969.
- L. Ingber. Simulated annealing : practice versus theory. *Mathematical and Computer Modelling*, 18(11) :29–57, 1993.
- M. Ioannidis, M. Kwiecien, I. Chatzis, I. Macdonald, and F. Dullien. Comprehensive pore structure characterization using 3d computer reconstruction and stochastic modeling. *SPE*, paper 38713, 1997.
- M. A. Ionnidis, M. J. Kwiecien, and I. Chatzis. Electrical conductivity and percolation aspects of statistically homogeneous porous media. *transport in Porous Media*, 29 :61–86, 1997.
- G. R. Jerauld and S. J. Salter. The effect of pore-structure on hysteresis in relative permeability and capillary pressure : Pore-level modeling. *Transport in Porous Media*, 5 :103–151, 1990.
- M. Y. Joshy. *A class of stochastic models for porous media*. PhD thesis, University of Kansas, 1974.
- S. Kirkpatrick. Optimization by simulated annealing - quantitative studies. *Journal os Statistical Physics*, 34 :975–986, 1984.
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220 :671–680, 1983.
- J. Koplik. Creeping flow in two-dimensional networks. *Journal of Fluid Mechanics*, 119 :219–247, 1982.
- J. Koplik and T. J. Lasseter. Two-phase flow in random network models of porous media. *SPE paper*, 11014, 1985.
- M. J. Kwiecien. *On the comprehensive characterization of porous media via computer reconstruction and stochastic modelling*. PhD thesis, University of Waterloo, 1994.
- C. Lantuejoul and S. Beucher. On the use of geodesic metric in image analysis. *Journal of microscopy*, 121 :39–49, 1981.
- E. Le Trong, Y. Anguy, R. Ehrlich, and A. Ahmadi. Evaluation of porous microstrutures generated in a stochastic manner from thin section data. *Image Analysis ans Stereology*, 20(Suppl. 1) :425–431, 2001.
- R. Lenormand and C. Zarcone. Physics of blob displacement in a two-dimensional porous medium. *SPE Formation Evaluation*, paper 14882, 1988.
- Z. Liang, M. Ioannidis, and I. Chatzis. Geometric and topological analysis of three-dimensional porous media : pore space partitioning based on morphological skeletonization. *Journal of Colloid and Interface Science*, 221 :13–24, 2000.

- M. I. Lowry and C. T. Miller. Pore-scale modeling of nonwetting-phase residual in porous media. *Water Resources Research*, 31(3) :455–473, 1995.
- G. Matheron. *Les variables régionalisées et leur estimation. Une application de la théorie des fonctions aléatoires aux sciences de la nature*. Masson & Cie, Paris, 1965.
- G. Matheron. *Éléments pour une théorie des milieux poreux*. Masson & Cie, Paris, 1967.
- G. Matheron. La théorie des variables régionalisées et ses applications. Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique de Fontainebleau, fascicule 5, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1970.
- G. Matheron. *Random sets and integral geometry*. Wiley, New York, 1975.
- A. Mayer and C. T. Miller. An experimental investigation of pore-scale distributions of nonaqueous phase liquids at residual saturation. *Transport in Porous Media*, 10(1) :57–80, 1993.
- C. A. McCreesh, R. Ehrlich, and S. J. Crabtree. Petrography and reservoir physics ii : relating thin section porosity to capillary pressure, the association between pore types and throat sizes. *American Association of Petroleum Geologists Bulletin*, 75(10) :1563–1578, 1991.
- N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6) :1087–1092, 1953.
- F. Meyer. Mathematical morphology : from two dimensions to three dimensions. *Journal of Microscopy*, 165(1) :5–28, 1992.
- C. T. Miller, M. Poirier, M. M. Neil, and A. S. Mayer. Dissolution of trapped non aqueous phase liquids : mass transfer characteristics. *Water Resources Research*, 26(11) :2783–2796, 1990.
- K. K. Mohanty, H. T. Davis, and L. E. Scriven. Physics of oil entrapment in water-wet rock. *SPE Reservoir Engineering*, paper 9406, February 1987.
- P. E. Øren and W. V. Pinczewski. Fluid distribution and pore-scale displacement mechanisms in drainage dominated three-phase flow. *Transport in Porous Media*, 20 :105–133, 1995.
- S. E. Powers, L. M. Abriola, and W. J. Weber, Jr. An experimental investigation of nonaqueous phase liquid dissolution in saturated subsurface systems : Steady state mass transfer rates. *Water Resources Research*, 28(10) :2691–2705, 1992.
- S. E. Powers, C. O. Loureiro, L. M. Abriola, and W. J. Weber, Jr. Theoretical study of the significance of non-equilibrium dissolution of non aqueous phase liquids in subsurface systems. *Water Resources Research*, 27 :463–477, 1990.
- C. M. Prince, R. Ehrlich, and Y. Anguy. Analysis of spatial order in sandstones ii : grain clusters, packing flaws and the meso-scale structure of sandstones. *Journal of Sedimentary Research*, A65(1) :13–28, 1995.

- J. A. Quiblier. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media. *Journal of Colloid and Interface Science*, 98(1) :84–101, March 1984.
- M. Quintard and S. Whitaker. Two-phase flow in heterogeneous porous media : the method of large-scale averaging. *Transport in Porous Media*, 3 :357–413, 1988.
- M. Quintard and S. Whitaker. One and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems. *Advances in Heat Transfer*, 23 : 369–464, 1993.
- M. Quintard and S. Whitaker. Convection, dispersion and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 17(4) :221–239, 1994a.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media i : The cellular average and the use of weighting functions. *Transport in Porous Media*, 14 :163–177, 1994b.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media ii : Generalized volume averaging. *Transport in Porous Media*, 14 : 179–206, 1994c.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media iii : Closure and comparison between theory and experiment. *Transport in Porous Media*, 15 :31–49, 1994d.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media iv : Computer generated porous media for three-dimensional systems. *Transport in Porous Media*, 15 :51–70, 1994e.
- M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media v : Geometrical results for two dimensional systems. *Transport in Porous Media*, 15 :183–196, 1994f.
- M. Quintard and S. Whitaker. Dissolution of an immobile phase during flow in porous media. *Ind Chem Chem Res*, 38(3) :833–844, 1999.
- A. Rosenfeld and A. C. Kak. *Digital picture processing*. Academic Press, New-York, 1976.
- A. Rosenfeld and J. L. Pfaltz. Distance functions on digital pictures. *Pattern Recognition*, 1 :33–61, 1968.
- Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, second edition, 2000.
- J. Serra. *Image analysis and mathematical morphology*, volume 1. Academic Press, London, 1982.
- J. Serra. *Image analysis and mathematical morphology*, volume 2 : Theoretical advances. Academic Press, London, 1988.
- J. Serra. Course on morphological operators. Technical report, École des Mines de Paris, 2001.

- J. Serra. Morphological descriptions using three-dimensional wavefronts. *Image Analysis & Stereology*, 21(Suppl. 1) :13–21, 2002.
- I. N. Sneddon. *The Use of Integral Transforms*. McGraw-Hill, New York, 1972.
- M. R. Spiegel. *Analyse vectorielle. Cours et problèmes*. Schaum, 1973.
- G. Taylor. Dispersion of solute matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. Roy. Soc. London A*, 219 :186–203, 1953.
- E. Thiel. Géométrie des distances de chanfrein. Habilitation à diriger des recherches, Université de la Méditerranée (Aix-Marseille II), 2001.
- J. F. Thovert, J. Salles, and P. M. Adler. Computerized characterization of the geometry of real porous media : their discretization, analysis and interpretation. *Journal of Microscopy*, 170(1) :65–79, 1993.
- E. Touboul, R. Lenormand, and C. Zarccone. Immiscible displacements in porous media : testing network simulators by micromodel experiments. *SPE Journal*, paper 16954, 1987.
- P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. *Simulated annealing : theory and applications*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1987.
- H. Ventsel. *Théorie des probabilités*. Editions Mir, Moscou, 1973.
- J. Vignes, R. Alt, and M. Pichat. *Algorithmes numériques : analyse et mise en oeuvre*, volume 2 : équations et systèmes non linéaires. Technip, Paris, 1980.
- S. Whitaker. Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy’s law. *Transport in Porous Media*, 1(1) :3–25, 1986.
- S. Whitaker. The method of volume averaging. In J. Bear, editor, *Theory and applications of transport in porous media*, volume 13. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- D. Zhou, L. Dillard, and M. J. Blunt. A physically based model of dissolution of nonaqueous phase liquids in the saturated zone. *Transport in Porous Media*, 39 :227–255, 2000.
- Y. Zhou, A. Kaufman, and A. W. Toga. Three-dimensional skeleton and centerline generation based on an approximate minimum distance field. *The Visual Computer*, 14 :303–314, 1998.

RÉSUMÉ

Dans ce travail, nous nous concentrons sur l'étude de la relation entre d'une part la structure sous-jacente d'un milieu poreux à l'échelle du pore et d'autre part le tenseur de dispersion \mathbf{D}^* et le coefficient d'échange de masse α décrivant à l'échelle macroscopique (dans le cas binaire) le devenir d'un polluant peu miscible piégé dans un aquifère saturé. Le choix d'utiliser des modèles de réseaux « réalistes » (pour mettre pratiquement à l'échelle l'information microstructurale dans les équations macroscopiques de dispersion) nous conduit à proposer une stratégie globale, basée sur l'analyse d'images quantitative, dont nous développons plusieurs aspects (modèle stochastique, squelettisation, etc.) dans le but à terme de prendre en compte les effets sur \mathbf{D}^* et α des caractéristiques structurales de milieux poreux réels.

MOTS CLEFS

Changement d'échelles – Dispersion en milieu poreux – Microstructure – Modèles aléatoires – Squelette filaire – Réseaux de pores

ABSTRACT

In this work, we focus on the study of the relation between the structure of a porous medium at the pore scale, and the dispersion tensor \mathbf{D}^* and the mass exchange coefficient α describing at the macroscopic scale the fate of a pollutant of low miscibility (binary case) trapped in a saturated aquifer. The choice to use « realistic » pore network models (to practically upscale the microstructural information into the macroscopic dispersion equation) leads us to propose a global strategy based on quantitative image analysis. Several aspects of this global strategy are developed (random model, skeletonization, etc.) with the aim to take into account ultimately the effects of the structural characteristics of real porous media on \mathbf{D}^* and α .

KEYWORDS

Change of scales – Dispersion in porous media – Microstructure – Random models – Skeletonization – Pore network models