

## MODELISATION DU FONCTIONNEMENT HYDRIQUE DES SOLS. PASSAGE DE L'ECHELLE MICROSCOPIQUE A L'ECHELLE MACROSCOPIQUE

---

*PERRIER E.*

### RESUME

Suivant l'échelle d'observation du sol, la modélisation des transferts hydriques s'appuie sur des lois physiques ou statistiques différentes. Cependant, lorsque l'on dépasse le cadre strict d'application des lois connues et que le fonctionnement du système eau-sol apparaît comme trop complexe à un niveau donné, on recherche des informations plus fines ou de différente nature. Leur prise en compte effective conduit inévitablement à des problèmes de transfert d'échelle. C'est le cas par exemple lorsque l'on cherche à intégrer des informations sur l'organisation structurale du sol dans un modèle de fonctionnement hydrique global.

Nous présentons ici une revue bibliographique de différentes méthodes théoriques récentes tentant d'effectuer le transfert d'échelle entre les processus mis en évidence à l'échelle microscopique (au niveau des grains et des pores constituant un sol) et les propriétés hydrodynamiques macroscopiques d'un échantillon de sol (de taille suffisamment grande vis-à-vis des dimensions granulométriques) .

En particulier, la méthode de simulation numérique des "gaz sur réseau" semble prometteuse: La représentation d'un fluide sous forme de particules élémentaires soumises à des règles de déplacement et de collision simples, les vitesses et le temps envisagés eux aussi sous une forme entièrement discrétisée, permettent de retrouver des comportements microscopiques et macroscopiques connus, qu'il s'agisse des équations différentielles de Navier-Stokes régissant la mécanique des fluides ou de la loi de Darcy caractérisant les écoulements dans un milieu poreux macroscopiquement homogène.

## I) PRESENTATION DU PROBLEME DE TRANSFERT D'ECHELLE EN MODELISATION HYDRODYNAMIQUE

### A) A chaque échelle du cycle de l'eau, différentes disciplines développent leurs propres modèles. Pourquoi pas?

Un certain nombre de modèles ont été mis au point pour simuler la dynamique de l'eau dans un sol. Chacun d'eux s'applique dans des conditions idéales restrictives, la première de ces conditions étant une certaine échelle d'utilisation; il n'est pas question a priori de considérer le sol comme un ensemble de grains et de pores pour évaluer la recharge d'une nappe à la suite d'une pluie. A chaque niveau d'étude, et pour un même processus étudié, à savoir des écoulements d'eau dans un sol, correspond un certain type de modélisation, avec bien souvent cohabitation de mondes clos; les physiciens des milieux poreux travaillent à l'échelle microscopique, les hydrodynamiciens au niveau macroscopique, les agronomes s'intéressent à l'évolution de stocks hydriques sur une parcelle, les hydrologues ont leurs propres modèles au niveau du bassin versant.

On peut considérer cette situation comme normale et satisfaisante. *"En général, deux phénomènes dont les longueurs caractéristiques sont très différentes ont peu d'influence l'un sur l'autre: On peut ainsi les étudier séparément. Par exemple, l'interaction de deux molécules d'eau voisines est la même, qu'elles soient dans un océan ou dans un verre d'eau. On peut aussi décrire de façon très précise une vague sur un océan comme une perturbation dans un milieu continu, sans avoir (et c'est heureux) à tenir compte de la structure moléculaire de l'eau. Le succès de la plupart des théories physiques vient de ce qu'elles ont su limiter les études à une certaine échelle de longueur et ignorer le reste."*(Kenneth Wilson, 1989)

Tant qu'un modèle répond aux objectifs qui ont conduit à sa mise en place, le bon sens indique de s'en tenir à la représentation utilisée, schématique par essence, et forcément incomplète, d'une réalité toujours complexe.

Par exemple, les transferts hydriques dans un bac à sable saturé d'eau sont bien décrits par un seul coefficient de proportionnalité  $K$  (appelé perméabilité du milieu) entre les flux hydriques et le gradient de charge hydraulique, comme l'indique la loi empirique établie par Darcy au siècle dernier. Dans ces conditions les considérations théoriques de Matheron (1979) démontrant mathématiquement l'émergence de la loi de Darcy à partir des équations de Navier Stokes bien connues en mécanique des fluides peuvent apparaître comme un jeu intellectuel, satisfaisant notre besoin de rationalité, mais purement gratuit.

## B) Où la nécessité du transfert d'échelle se fait sentir: Limitations de la loi de Darcy au niveau macroscopique

Lorsque qu'un modèle ne peut reproduire assez précisément le processus étudié à une certaine échelle, une façon naturelle de procéder consiste à rechercher des informations à un niveau plus fin. Ainsi, lorsque des fonctions globales de transfert ne permettent pas de quantifier correctement les flux générés par l'exploitation d'un gisement d'huile, les pétroliers procèdent à de nombreux prélèvements dans l'espace géologique concerné afin d'évaluer les perméabilités locales suivant la loi de Darcy. L'hétérogénéité du milieu naturel se traduit par une grande variabilité spatiale des coefficients de perméabilité et nous nous contentons ici d'évoquer l'importance accordée aux problèmes de transfert d'échelle entre ces niveaux macroscopique et "gigascope".

Nous plaçant au niveau macroscopique, la loi de Darcy elle-même n'est pas la panacée. Exprimons explicitement cette loi, établie expérimentalement, et dont l'utilisation reste soumise à des hypothèses très restrictives: Pour un sol saturé d'eau, un écoulement permanent uni-dimensionnel, un fluide incompressible et chimiquement pur, on vérifie que:

$$Q = -K \Delta P \quad (1)$$

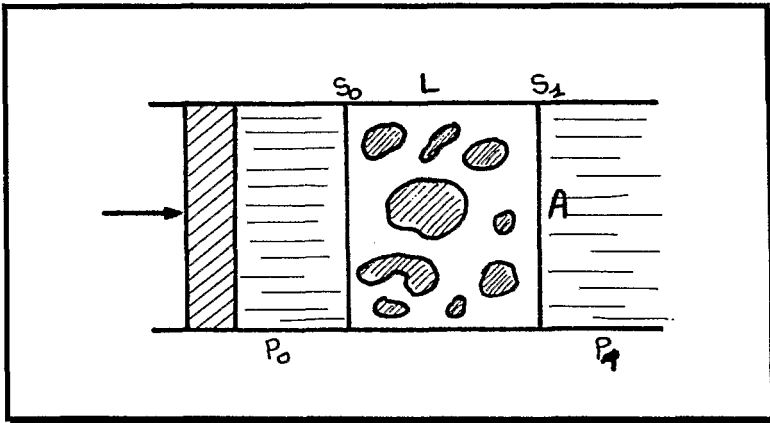


Figure 1. Expérience de Darcy

Si une différence de pression  $\Delta P$  est imposée entre deux sections parallèles distantes de  $L$  limitant un cylindre de section  $A$ , le débit  $Q$  de fluide est proportionnel à  $\Delta P$  (fig. 1). Si  $L$  et  $A$  varient, le coefficient de proportionnalité  $K$  reste constant pour un échantillon de sol homogène du point de vue hydrodynamique. Cette perméabilité  $K$  est une constante caractéristique du milieu poreux macroscopique.

Pour des écoulements transitoires, l'équation (1) est réécrite sous forme différentielle; elle est couplée avec une équation de continuité exprimant la conservation de la masse.

Parce que l'expression de la loi de Darcy est particulièrement simple, on a constamment cherché à la généraliser pour caractériser les flux macroscopiques dans leur ensemble. Ce sont les tentatives d'extension de cette loi en deçà de ses conditions initiales d'application qui soulèvent des questions théoriques et pratiques non résolues. Citons la généralisation aux écoulements multi-dimensionnels, où la perméabilité scalaire est remplacée par un tenseur de perméabilité; et la généralisation aux flux multiphasiques (eau, air, huile) où la constante de perméabilité, dans le cas d'un sol non saturé (circulation simultanée des deux fluides air et eau), est remplacée par un coefficient variable en fonction de la teneur en eau du sol, définissant ainsi une fonction  $K(\theta)$  caractéristique du fonctionnement hydrique d'un sol donné.

Ces généralisations introduisent de multiples paramètres de calage d'autant plus difficiles à estimer que les difficultés métrologiques sont importantes. Dans d'autres conditions la loi n'est plus applicable: C'est le cas des écoulements trop rapides (turbulence) ou trop lents, c'est aussi le cas des milieux déformables.

Prendre alors son microscope et regarder ce qui se passe à une échelle plus fine va ici faire apparaître les hétérogénéités locales, au niveau microscopique, et plus particulièrement la géométrie et l'organisation structurale du sol à ce niveau. Reste à déterminer comment se fait le passage des processus locaux identifiés à des équations hydrodynamiques macroscopiques. Le passage de Navier-Stokes à Darcy, dans le cadre de certaines hypothèses est un cas d'école; il servira souvent de référence pour tester la validité de la méthode de changement d'échelle utilisée.

## II) CHANGEMENT D'ECHELLE PAR INTEGRATION D'EQUATIONS DIFFERENTIELLES DANS UN MILIEU CONTINU

La validité des équations de Navier Stockes à l'échelle microscopique n'étant pas jusqu'à présent remise en cause, leur intégration devrait permettre de retrouver la loi de Darcy, ainsi que ses variantes ou ses éventuelles concurrentes. *"L'extraordinaire complexité du problème que pose la résolution d'une telle équation, compte tenu de la complexité de la géométrie des pores, contraste fortement avec le caractère très simple de la loi qui émerge au niveau macroscopique"* (Matheron, 1979) .

Pour un écoulement permanent suffisamment lent pour que l'on puisse négliger les termes d'énergie cinétique, l'équation de Navier peut prendre l'expression simplifiée suivante

$$\Delta u = \mu \text{ grad } p$$

(2)

où  $u$  et  $p$  représentent respectivement la vitesse et la pression ponctuelle.

Des solutions exactes existent pour caractériser les écoulements lents et permanents de fluide incompressible dans un pore de géométrie simple; par exemple dans une fissure parallépipédique, ou dans un tube circulaire de rayon  $r$  (loi de Poiseuille), exprimant la perméabilité ou conductance d'un pore de cette forme en fonction de ses dimensions.(De Marsily, 1981).

Mais cette équation n'est valable que dans les pores; et c'est l'expression des conditions aux limites, sur la surface de chaque grain, qui justifie l'inexistence d'intégrales mathématiques exactes pour une géométrie quelconque du sol. La linéarité de l'équation (2) laisse prévoir intuitivement la proportionnalité entre les variables macroscopiques correspondantes pour un dispositif expérimental donné. Mais que le coefficient de proportionnalité, la perméabilité de Darcy soit indépendante de la forme et de la taille de l'échantillon (dans un milieu homogène) est beaucoup plus surprenant. Matheron(1979) justifie ce phénomène au moyen de démonstrations mathématiques non élémentaires.

L'intégration numérique d'équations différentielles mettant en jeu des variables ponctuelles pour en déduire des relations entre les variables globales moyennes continue d'être l'objet de recherches approfondies de la part de physiciens et mathématiciens des milieux poreux. En particulier, une méthode de "prise de moyenne" d'équations microscopiques pour en déduire leur expression macroscopique connaît un certain succès(Whitaker, Quitard, 1985). Nous en donnons un aperçu dans les paragraphes suivants.

Dans le milieu poreux schématisé sur la figure 2,  $\beta$  représente la phase liquide ; la loi de Navier-Stokes peut s'écrire sous la forme i et l'équation de continuité sous la forme (ii)

$$0 = -\nabla p_{\beta} + \rho_{\beta} g + \mu_{\beta} \nabla^2 v_{\beta} \quad [i]$$

$$\nabla \cdot v_{\beta} = 0 \quad [ii]$$

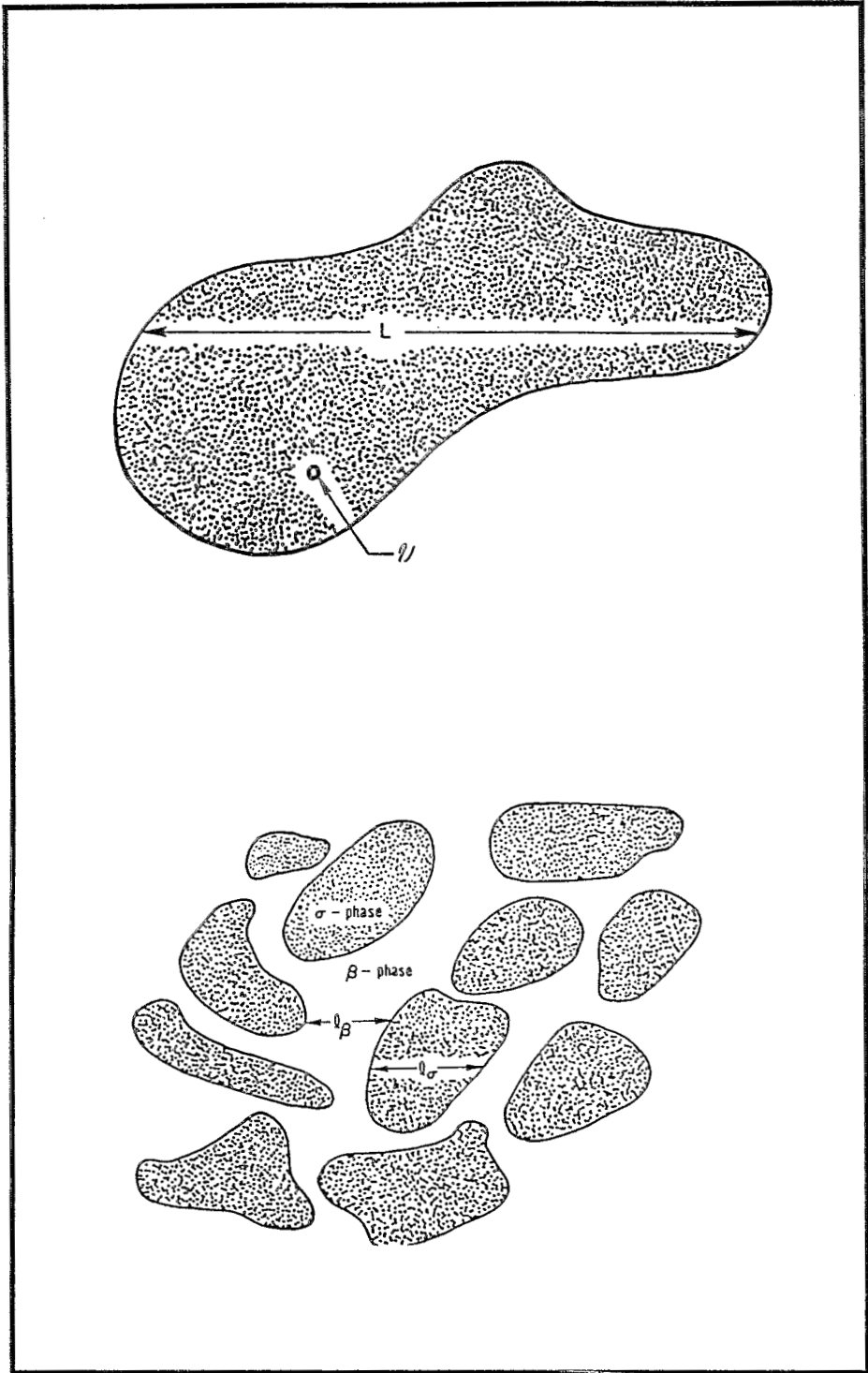


Figure 2. Prise de moyenne à l'échelle locale, sur un volume élémentaire représentatif  $V$  du système solide-fluide (Whitaker 1986)

Si, dans un certain volume  $V$ , on cherche à exprimer la pression macroscopique comme la moyenne  $\langle p_\beta \rangle$  des pressions ponctuelles  $p_\beta$  dans la phase  $\beta$ , il s'agit de calculer une intégrale volumique. Quand l'intégration est effectuée sur l'ensemble des termes de l'équation (ii), on obtient des moyennes (intégrales) de gradients de valeurs ponctuelles, alors que l'on s'intéresse au niveau macroscopique aux gradients des valeurs moyennes.

Le théorème de prise de moyenne volumique

$$\langle \Delta p_\beta \rangle = \Delta \langle p_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{S_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} p_\beta dS \quad [3]$$

permet d'exprimer la différence entre  $\langle \Delta p_\beta \rangle$  et  $\Delta \langle p_\beta \rangle$  comme une intégrale double sur la surface interfaciale limitant les phases solide et fluide. L'intégrale double s'annule pour l'équation (ii) puisque la vitesse du fluide doit être nulle sur les interfaces, mais ne n'est pas toujours le cas, comme pour l'équation (i) par exemple.

Les valeurs ponctuelles sont ensuite décomposées comme somme de leur moyenne et d'un terme de déviation par rapport à la moyenne.

$$p_\beta = \langle p_\beta \rangle + \overset{\text{---}}{p}_\beta \quad [4]$$

Suivent bon nombre d'approximations justifiées physiquement, puis l'expression des termes de déviation en fonction des valeurs moyennes (fermeture des équations) et en fonction de paramètres dépendant de la géométrie de l'espace poral. L'existence et l'unicité de solutions peuvent être démontrées.

Dans le cas de figure cité, on retrouve l'expression de la loi de Darcy (Whitaker, 1986). Le calcul analytique de la perméabilité est alors calculable pour une géométrie aussi simple et classique que celle du tube capillaire.

La méthode a l'avantage d'être générale; elle ne suppose, du moins au départ, aucune hypothèse restrictive; elle permet d'entrevoir des solutions théoriques pour représenter les écoulements multiphasiques ou les transferts en milieu déformables à partir de la connaissance d'équations microscopiques appropriées. Elle est utilisée pour appréhender d'autres phénomènes de transfert dans les milieux poreux (diffusion, adsorption, convection). La même technique est employée une deuxième fois pour des prises de moyenne à grande échelle dans le cas de milieux hétérogènes.

La méthode a l'inconvénient d'être plutôt hermétique pour le lecteur non averti, alors que chaque nouvelle application est subordonnée à de nouveaux calculs, et donc à la maîtrise complète de cette théorie

d'intégration. De plus il est préférable d'avoir une idée sur la nature des équations macroscopiques pour pouvoir effectivement les retrouver.

### III) CHANGEMENT D'ECHELLE PAR SIMULATION NUMERIQUE: REPRESENTATION DISCRETE DE L'ESPACE PORAL

On a déjà cité l'existence de résultats globaux, macroscopiques, pour des écoulements de fluide dans un pore de forme très simple. Un certain nombre de travaux représentent alors le milieu poreux par un ensemble "équivalent" de tubes ou de fractures, respectant une loi de distribution de pores connue. La perméabilité d'un faisceau de tubes ou de fractures identiques et parallèles est aisément obtenue à partir des conductances élémentaires. Mais pour une répartition aléatoire des pores dans plusieurs directions, même sur un maillage régulier, on procède par simulation numérique. La forme du réseau est variable suivant les travaux et la dimension euclidienne de l'espace, la distribution des pores peut être fractale ou log-normale, théorique ou mesurée, la répartition des pores (comme liens ou sites du réseau) aléatoire ou périodique.

C'est l'approche utilisée par exemple pour mettre en évidence des seuils critiques de pression ou de densité des pores à partir desquels l'eau percole à travers un réseau donné (Groupe poreux, 1985) : A une grande étendue de la distribution de la taille des pores correspond une large gamme de perméabilités locales qui induisent des écoulements préférentiels. Encore faut-il que ces pores soient suffisamment bien connectés pour que la perméabilité globale ne soit pas nulle. C'est seulement à partir d'un seuil précis de connectivité  $n_c$  (dépendant des détails du réseau) qu'une perméabilité globale apparaît (fig 3); elle s'exprime, pour un réseau de taille suffisamment grande devant la longueur de corrélation, suivant une forme classique en théorie de la percolation:

$$K = K_0 (n - n_c)^\mu \quad [5]$$

où  $\mu$  est un exposant universel ne dépendant que de la dimension euclidienne.



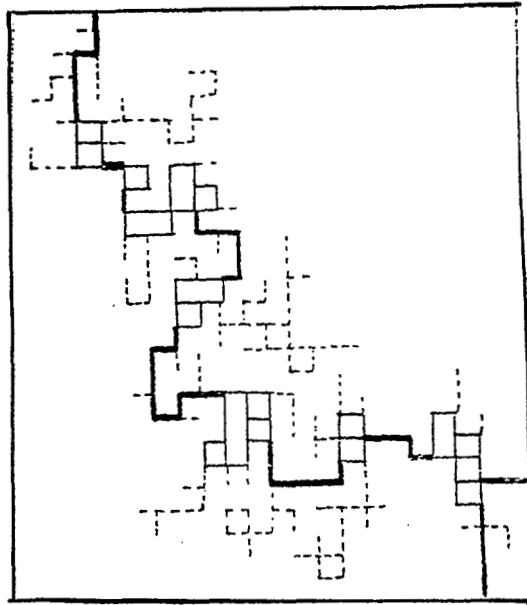


2.a  $n < n_c$

2.b  $n = n_c$

2.c  $n > n_c$

Percolation sur un ensemble d'aiguilles de position d'orientation aléatoires.  $n$  est le nombre total d'aiguilles sur la figure,  $n_c$  est le seuil de percolation.



Amas infini de percolation sur un réseau carré. Les traits pointillés représentent les bras morts et les traits gras les liens sensibles.

Figure 3. Réseau de percolation (Groupe poreux 1985)

Une méthode analogue permet de simuler de écoulements en milieu non saturé, ou la dynamique, au sein du milieu poreux ainsi schématisé de deux phases non miscibles. On utilise la loi de Laplace, qui exprime la pression capillaire sur l'interface séparant deux fluides non miscibles comme inversement proportionnelle au rayon de courbure; cela indique que les pores d'une taille donnée ne peuvent être remplis par le fluide "*non mouillant*" qu'à partir d'un certain seuil de pression capillaire. Là aussi, l'existence de chemins préférentiels dépendant de la répartition géométrique de pores sur le réseau, les transitions brutales des processus de drainage ou d'imbibition observés macroscopiquement à l'échelle du réseau est en contradiction avec l'approche darcynienne classique, "*la notion de perméabilités relatives des deux fluides ne restant valable que si l'on peut définir un volume élémentaire représentatif à l'échelle duquel le mélange des deux fluides peut être considéré comme homogène*" (Groupe poreux, 1985). Les inhomogénéités peuvent en effet s'étendre sur de très grandes échelles de longueur au voisinage de la saturation par un des deux fluides.

Cette représentation du sol comme un ensemble de pores idéalisé, conçus comme des réservoirs élémentaires au comportement hydrique connu est aussi présentée par Rieu(1990) qui l'utilise pour exprimer les caractéristiques hydrodynamiques d'un sol en fonction de sa dimension fractale.

#### IV) CHANGEMENT D'ECHELLE PAR SIMULATION NUMERIQUE. REPRESENTATION DISCRETE DE L'ESPACE PORAL ET DISCRETISATION DU FLUIDE. LES MODELES DE "GAZ SUR RESEAU"

##### A) Méthode

Récemment, de nouveaux modèles de simulation ont fait leur apparition en dynamique des fluides. On peut les considérer comme une application de la méthode des automates cellulaires (introduits par Von Neumann et Ulam), qui peuvent être définis comme des systèmes dynamiques où le temps, l'espace, et la "variable dépendante" sont discrétisés. La discrétisation de la variable dépendante (le flux hydrique en ce qui nous concerne) constitue la principale innovation par rapport aux méthodes de différences finies. Les automates cellulaires peuvent être représentés par un nombre fini de bits à chaque site d'une maillage régulier de l'espace. L'automate évolue discrètement, l'état de chacun des sites étant mis à jour à chaque itération temporelle par application de règles déterministes ou non, impliquant seulement un nombre fini de sites voisins.

La classe d'automates cellulaires définie de façon à ce que le comportement "moyen" obéisse aux équations hydrodynamiques de mouvement d'un fluide incompressible porte le nom de gaz sur réseau.

## B) Détermination pratique de réseaux et de règles

Les mises au point successives du type de réseau ainsi que des règles d'évolution des particules à une échelle quasi "pré-microscopique" sont guidées par un objectif de base: retrouver les équations traditionnelles de mécanique des fluides et les lois de comportement macroscopique précédemment bien établies, tout en respectant des principes élémentaires de physique, tels que la conservation de la masse et de la quantité de mouvement.

Exemple Le réseau carré du modèle HPP (Hardy, de Pazzis, Pomeau)(fig.4).

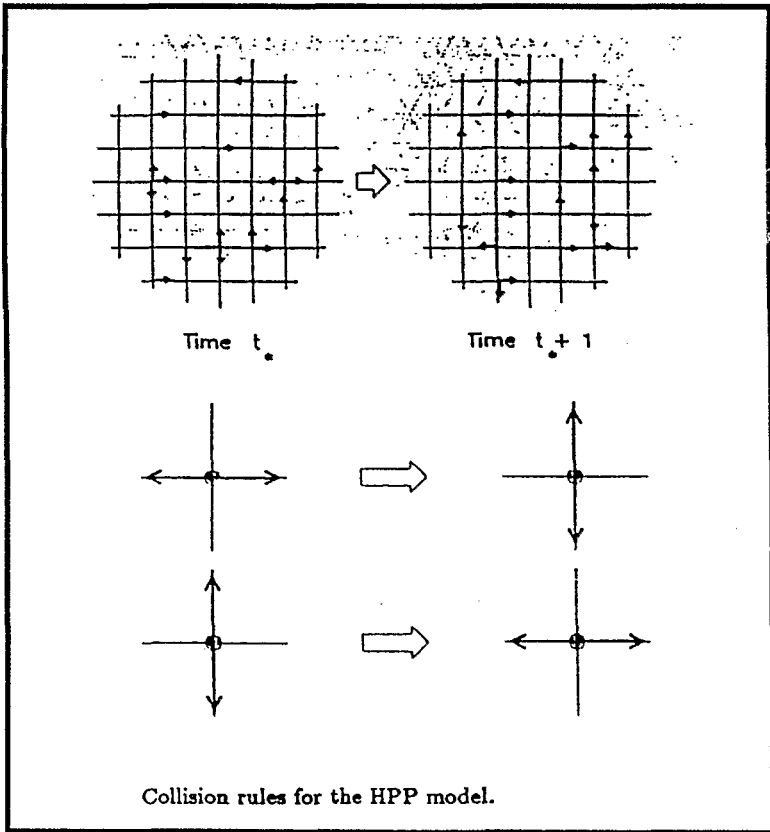


Figure 4. Modèle de "gaz sur réseau" HPP en dimension 2 (Frisch et al 1987)

Le modèle initial date de 1976 et a été développé en 2 dimensions. Les particules de fluide sont situées aux noeuds d'un réseau carré. Les vitesses de deux particules occupant un même site ne peuvent avoir

la même direction (principe d'exclusion) . Chaque site ayant quatre plus proches voisins est représenté par un vecteur de dimension 4, les composantes étant booléennes, 0 pour "occupé" et 1 pour "vide". A chaque itération d'une unité de temps, le système évolue en subissant alternativement une première phase de propagation par translation des 4 images binaires et une deuxième phase de collision: lorsque deux particules arrivent au même site avec deux directions opposées, elles repartent dans les deux autres directions orthogonales .La dynamique de ce modèle est invariante pour toute transformation conservant les symétries du réseau, en particulier pour les rotations à 90 degrés. Ce n'est pas suffisant pour respecter l'isotropie des flux. Cela conduit au choix maintenant communément accepté d'un réseau hexagonal en deux dimensions: le modèle FPP (Frisch,Hasslacher,Pomeau) (fig. 5).

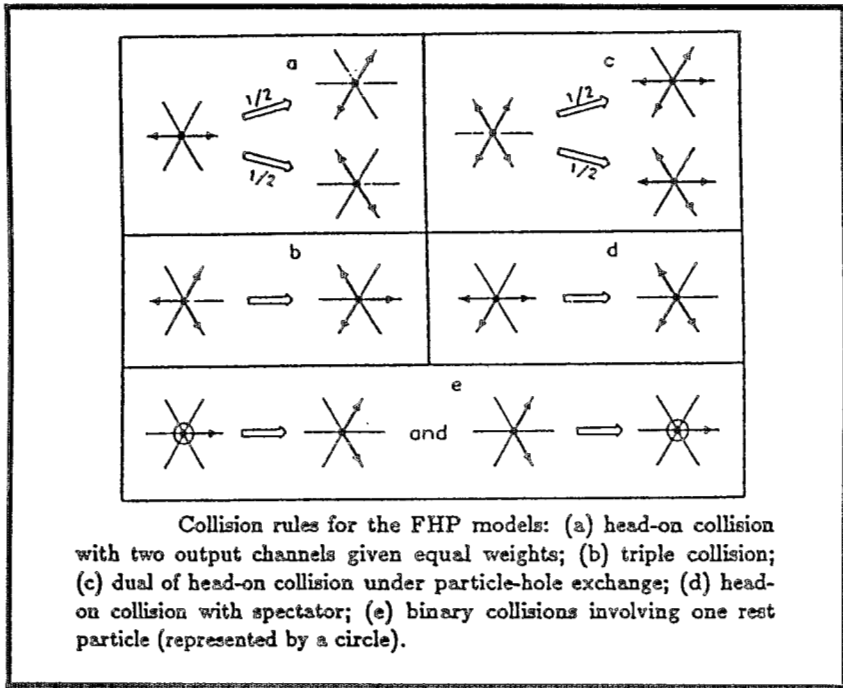


Figure 5. Réseau hexagonal: règles de collision pour le modèle FHP en dimension 2 (Frisch et al 1987)

Six directions  $c_i$  de déplacement sont possibles à chaque noeud. Certains auteurs rajoutent une septième composante au vecteur booléen  $n_i(x)$  représentant l'état d'un site  $x$ , introduisant des particules au repos (de vitesse nulle). Toutes les règles de collision conservant globalement la masse ( $N = \sum_{i,x} n_i(x)$ ) et la quantité de mouvement ( $G = \sum_{i,x} n_i(x) c_i$ ) sont acceptées. Des règles non-déterministes (tirage au sort) sont introduites lorsque plusieurs issues sont possibles à la suite d'une collision.

En trois dimensions, aucun réseau régulier n'ayant pu exhiber les symétries requises pour respecter l'isotropie, l'extension de la méthode s'effectue pour l'instant sur le projeté d'un réseau hypercubique à faces centrées construit initialement en dimension 4 (fig. 6)

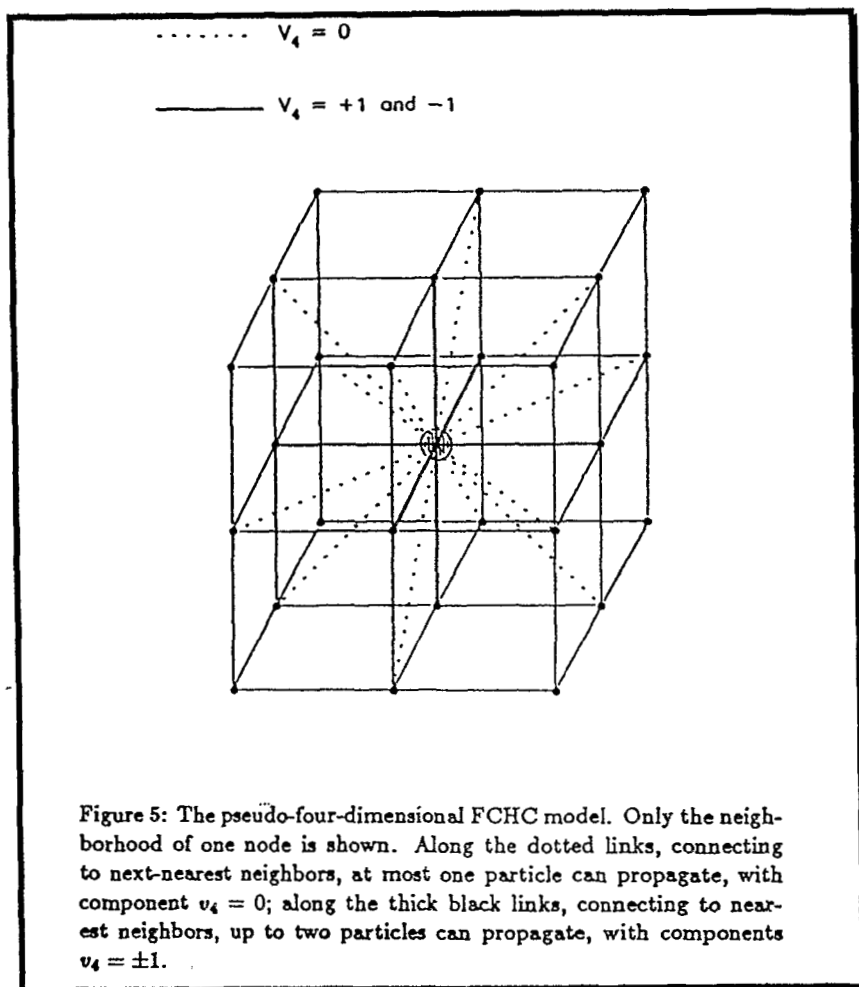


Figure 5: The pseudo-four-dimensional FCHC model. Only the neighborhood of one node is shown. Along the dotted links, connecting to next-nearest neighbors, at most one particle can propagate, with component  $v_4 = 0$ ; along the thick black links, connecting to nearest neighbors, up to two particles can propagate, with components  $v_4 = \pm 1$ .

Figure 6. En dimension 3, projection du modèle FCHC (Frisch et al 1987)

### C) Démonstrations théoriques d'un transfert d'échelle "adéquat"

Les démonstrations théoriques visent essentiellement à retrouver les équations de Navier Stokes, à partir de considérations statistiques et d'une prise de moyenne sur des sous ensembles du réseau de taille convenable.

Les règles de déplacement et de collision peuvent être traduites sous forme d'équations "microdynamiques" booléennes:

$$Ni(x+ci, t+1) = Ni(x, t) + \sum_{s, s'} A(s, s') (s'_t - s_t) \prod_j n_j^{s_j} (1 - n_j)^{s'_j}$$

Ces équations de Boltzmann relient les composantes binaires du vecteur d'état en chaque site entre l'instant  $t$  et l'instant  $t+1$ . Elles s'écrivent sous une forme probabiliste en considérant l'ensemble de réalisations possibles du modèle. Des solutions exactes existent pour les situations d'équilibre. L'expression statistique de quantités moyennes, (population moyenne, densité moyenne, quantité de mouvement moyenne, vitesse moyenne) est explicitée.

Le passage au continu est approximé par l'évolution du système pour des états d'équilibre locaux rapprochés dans le temps et dans l'espace; une équation de continuité est induite par le respect de la conservation de la masse et de la quantité de mouvement; au moyen de développements mathématiques classiques en physique statistique mais relativement complexes, l'émergence de l'équation de Navier-stokes est acquise.

#### D) Vérifications expérimentales et principaux développements

En fait l'essentiel des résultats est obtenu par simulation numérique. Les premiers succès de la méthode ont entraîné de nombreux développements. Une application classique est la simulation des écoulements dans un milieu poreux: On retrouve la loi de Darcy

En deux dimensions, et sur un réseau hexagonal, Jeulin (1979) simule la circulation de fluide dans un conduit poreux. Les parois latérales et la présence de grains sont des limites à l'écoulement introduisant une nouvelle règle de collision: une particule butant sur un obstacle repart dans la direction opposée. (Cela reproduit les conditions classiques de non-glissement sur les interfaces liquide-solide, puisque la vitesse moyenne est ainsi nulle sur les parois). Si  $n$  particules sortent du conduit au travers des bords gauche et droits laissés "ouverts",  $n$  particules sont réinjectées pour simuler l'immersion dans un milieu infini. Pour créer un gradient de pression horizontal, des particules en nombre  $pn$  sont introduites sur le bord gauche et animées d'une vitesse horizontale vers la droite. La conservation de la quantité totale de particules est alors assurée par l'introduction de  $6$  fois  $n(1-p) / 6$  particules sur les bords à chaque itération (fig.7) La variation de  $p$  de  $0$  à  $1$  permet de faire varier le gradient de pression. Une stabilisation du flux hydrique est assez rapidement obtenue. Le flux est alors proportionnel au gradient de pression, ce qui constitue une reproduction numérique de l'expérience de Darcy (Fig.8).

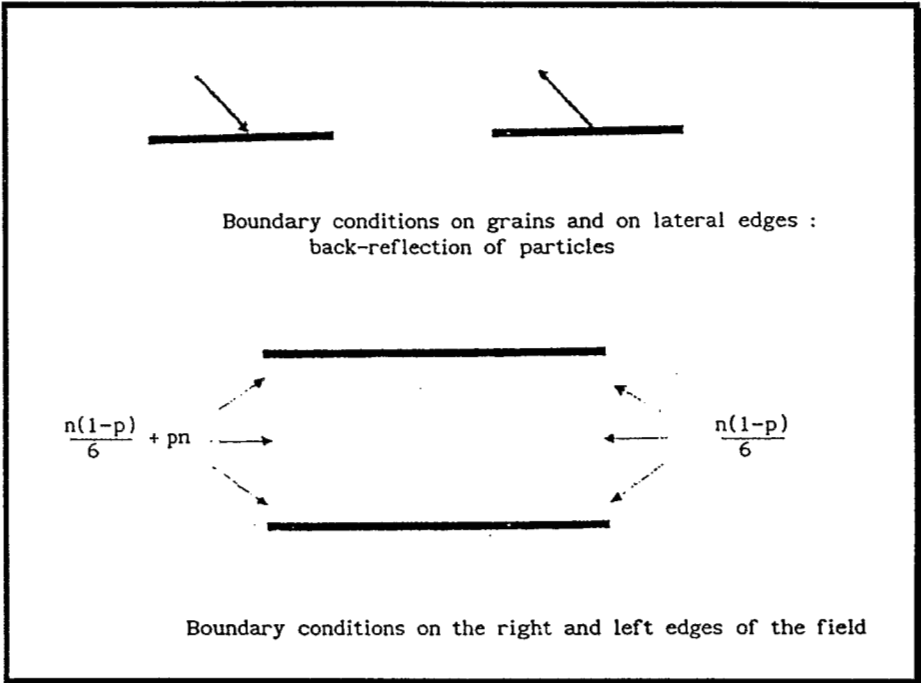


Figure 7. Conditions aux limites d'un modèle de gaz sur réseau dans le cas d'un système poreux fini (Jeulin 1990)

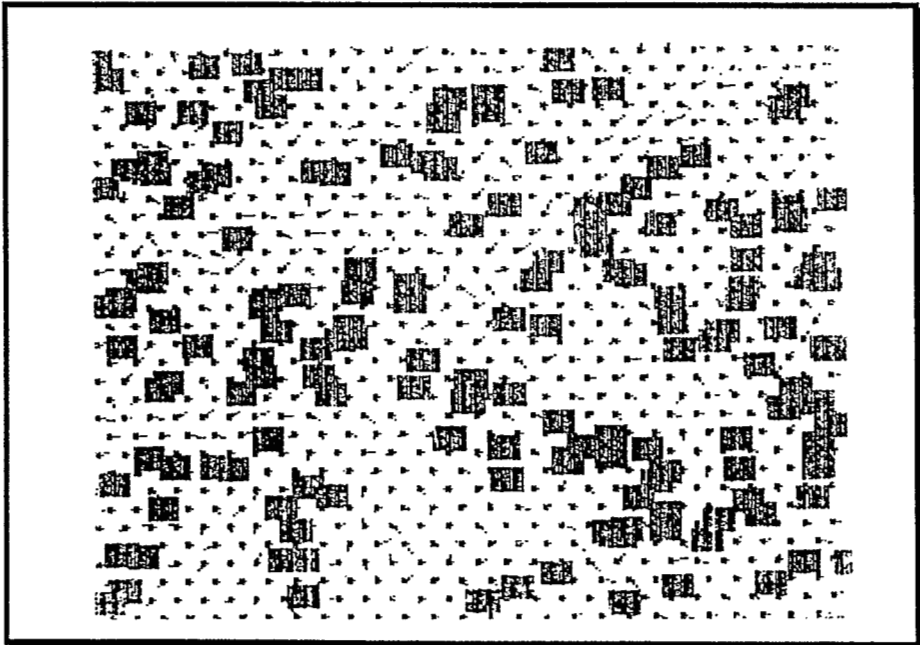


Figure 8. Particules de fluide circulant dans un milieu poreux aléatoire. Vérification "expérimentale" de la loi de Darcy (Jeulin 1990)

Rothman et Keller (1988) ont étendu la méthode à la simulation d'écoulements bi-phasiques en dimension 2.

Deux types de particules coexistent, représentant deux fluides immiscibles, "bleu" et "rouge". Sur un réseau hexagonal, deux vecteurs aux 7 composantes binaires caractérisent les vitesses possibles pour chaque "espèce" de particules. La présence d'une particule bleue et d'une rouge en un même site et dans la même direction est exclue. La masse de chacun des fluides reste constante et la quantité de mouvement totale est conservée en chaque site. Lors d'une collision, lorsque différentes issues sont possibles, les solutions qui encouragent le regroupement de particules de même couleur sont choisies (fig. 9) (Formellement, les règles de collision sont celles qui minimisent le travail effectué par le flux contre le champ de couleur local). Un nombre plus grand de sites "voisins" est donc utilisé.

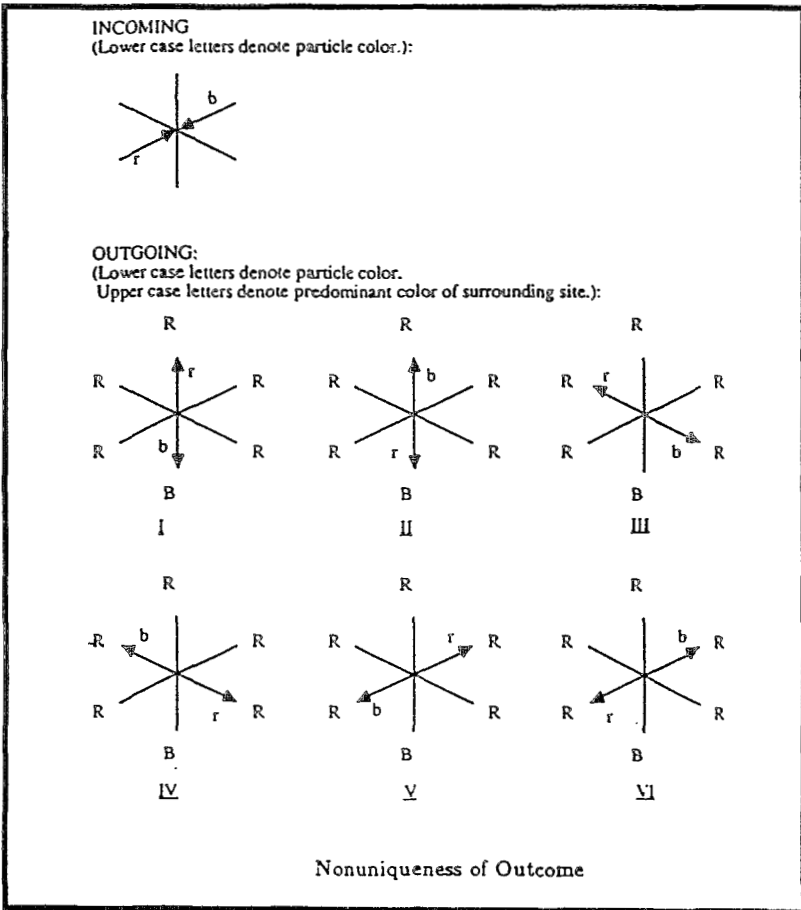
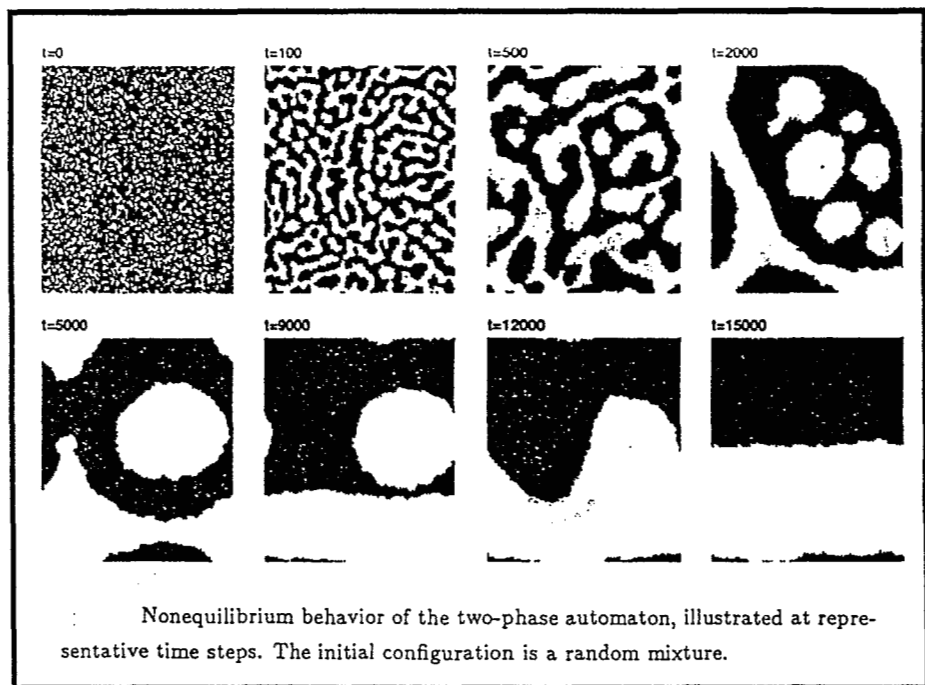


Figure 9. Regroupement des particules d'un même fluide (Rothman et Keller 1988)



A l'équilibre, les expériences numériques montrent que le modèle obéit à la loi de Laplace exprimant la tension superficielle aux interfaces.

Pour des situations initiales en déséquilibre (fluides homogénéisés), les simulations numériques reproduisent la séparation des phases, en accord avec l'expérience; assez loin de l'interface, à l'intérieur d'une des deux phases fluides, on retrouve la validité des équations de Navier-Stokes.(fig. 10)



**Figure 10.** Les différentes étapes de la séparation de deux fluides non miscibles initialement homogénéisés (Rothman et Keller 1988)

Sans prétendre à l'exhaustivité, citons l'utilisation de la méthode:

- pour un mélange de 3 fluides (Gunstensen, 1989) ;
- pour tester l'aptitude du modèle à provoquer des transitions de phase par l'adjonction de règles d'interaction à distance entre particules de même nature (Appert, Zaleski, 1990) ;
- pour déterminer expérimentalement (numériquement) la perméabilité d'un lit de sphères en dimension 3 et comparer avec les bornes (Chang, 1989) supérieures et inférieures théoriques.

Dans les nombreuses applications rapportées, le type de comportement observé est en excellent accord avec la théorie; des phénomènes connus mais plus ou moins bien expliqués peuvent être

simulés. Par contre la confrontation du modèle avec des expériences réelles et des valeurs numériques mesurées n'a eu lieu que dans un petit nombre de cas de figure, principalement sur des modèles de réseaux capillaires gravés de type Lenormand.

### E) Réflexions sur la méthode de transfert d'échelle

Dans ce cadre, la modélisation est la même quelle que soit la taille du réseau. Le changement d'échelle s'étudie simplement par la simulation d'un réseau plus grand. Le réseau peut être alors partitionné en des régions (macrolattice) regroupant plusieurs sites; une quantité hydrodynamique telle que la vitesse macroscopique du fluide sur une région donnée est calculée comme moyenne des vitesses de toutes les particules présentes dans la région (coarse-grain averaging) .

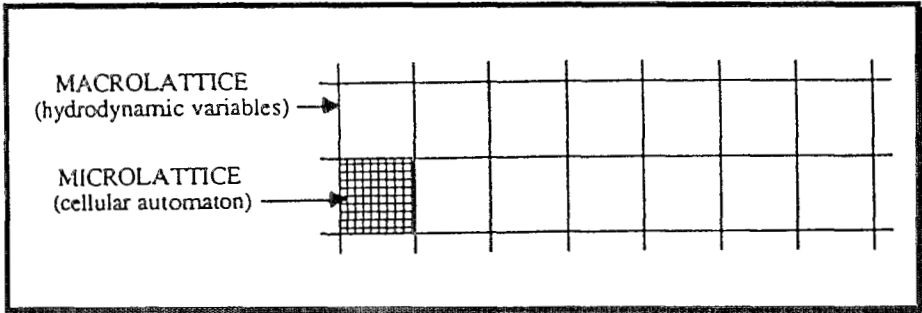


Figure 11. Prise de moyenne spatiale (Boghosian, Rothman 1988)

Il s'ensuit une approximation de la valeur de la variable microscopique qui ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs. (Par contre les erreurs d'arrondi des algorithmes de différences finies sur des nombres réels n'ont pas lieu d'exister) . La méthode introduit un bruit statistique sur l'estimation d'une variable macroscopique, en rapport avec l'échelle de la région sur laquelle s'effectue la prise de moyenne. La principale limitation est évidente: elle découle des possibilités de calcul des ordinateurs, qui ne seront jamais infinies.

Le transfert d'échelle est essentiellement empirique; il utilise la notion d'expériences numériques, parfaitement contrôlées; les équations microscopiques étant respectées, on peut tenter d'évaluer ce qu'elles induisent aux niveaux supérieurs dans diverses conditions.

On peut constater, peut-être avec étonnement que le respect d'un petit nombre de règles simples au niveau pré-microscopique conduit à un comportement global plus complexe (Stockes). Les phénomènes de transferts peuvent être décrits à une échelle encore supérieure par des équations à nouveau relativement simples (Darcy) dans certaines conditions restrictives.

*"Lattice gases thus bridge not only the microscopic "molecular" and continuum scales, but also the macroscopic scale of volume-averaged flow. This traversal of scales presents an attractive opportunity for the numerical study of the relationships between the microscopic structure of a porous medium and macroscopic parameters such as permeability" (Rothman,1988) .*

S'étant libéré de la nécessité de conditions aux limites simples, la méthode des gaz sur réseau permet l'étude de l'influence de géométries quelconques sur des écoulements. Dans le cas d'un sol, on pourrait même envisager la simulation de modifications dynamiques de cette géométrie (exemple: retrait gonflement). Le problème du transfert d'échelle se pose alors de nouveau, sur un autre plan, celui de la détermination de caractéristiques morphologiques et structurales, de la modélisation du milieu lui-même et non de son comportement; sachant que les données expérimentales sont disponibles à différentes échelles. et que le sol peut présenter plusieurs niveaux d'organisation intermédiaires entre le micro et le macroscopique.

## V) CONCLUSION

La simplicité relative des modèles formulés de façon discrète dès leur conception contraste avec le formalisme mathématique nécessaire à l'expression d'équations différentielles. Les résolutions concrètes des équations n'étant presque toujours envisageables qu'après approximations, discrétisation et résolution numérique, il est tentant d'utiliser des méthodes résolument discrètes, éventuelle même au prix d'approximations initiales qui peuvent paraître simplistes. Les techniques présentées restent pour l'instant dans le domaine théorique, peut-être à cause de leur nouveauté. Les premiers succès des méthodes de gaz sur réseau incitent à construire des représentations schématiques du réel sous forme d'interactions simples entre objets élémentaires, croyant que la complexité de la dynamique globale résulte essentiellement de la juxtaposition d'un grand nombre d'évènements élémentaires. Le transfert d'échelle est alors analysé au moyen d'expériences numériques. Un telle approche est par essence informatique. Il reste à trouver un compromis entre le niveau de discrétisation et les temps de calcul.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Appert C.,S.Zaleski, 1990. Lattice Gas with a liquid-gas transition. Phys. Rev. Lett 64,1-4.
- Boghosian B. M. , D. H. Rothman, 1998. A Cellular-Automata Simulation of Two Phase Flow on the CM2-Connection Machin Computer, MIT Porous Flow Project, report no 1, edited by D.H.Rothman,M.I.T.,Cambridge, Mass.

- Chang C., 1989. Numerical studies of the permeability of a 3D model geometry. MIT Porous Flow Project, report no 2, edited by D.H.Rothman, M.I.T., Cambridge, Mass.
- De Marsily G., 1981. Hydrogéologie quantitative, Masson Paris.
- Frisch U., D.d'Humières, B.Hasslacher, P.Lallemand, Y.Pomeau, J.P.Rivet, 1987. Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. Complex Systems 1, 649-707.
- Groupe poreux PC, Baudet C., E.Charlaix, E.Clément, J.P.Hulin, E.Guyon, C.leroy, 1985. Scaling concepts in porous media. in "scaling phenomena in disordered systems" NATO conferences, ed. Plenum, London
- Gunstensen A.K., 1989. A three-phase immiscible lattice gas. MIT Porous Flow Project, report no 2, edited by D.H.Rothman, M.I.T., Cambridge, Mass.
- Jeulin D., Tang Chang Qing, 1989. Lattice gas flow simulations in 2-D random porous media. Rapport Ecole des Mines de Fontainebleau.
- Matheron, G., 1979. L'émergence de la loi de Darcy. Publication interne. Ecole des mines de Fontainebleau.
- Rieu M., 1990. Représentation fractale du sol et de son fonctionnement hydrique. Seminfor "Transfert d'échelle".
- Rothman, D.H., J.M.Keller, 1988. Lattice gas automata for immiscible two phase flow. J.Stat.Phys.52, 1119.
- Whitaker S., 1986. Flow in porous media: A theoretical Derivation of darcy's law. Transport in Porous Media pp 3-25.
- Whitaker S., M.Quintard, 1989 Cours avancé sur les transferts dans les milieux poreux homogènes et hétérogènes. Prise de moyenne à l'échelle locale et Prise de moyenne à grande échelle.
- Wilson K., 1989. Les phénomènes de physique et les échelles de longueur. in L'ordre du chaos, Bibliothèque Pour la science, Editions Belin.