



**HAL**  
open science

# Modélisation d'écoulements multiphasiques de fluides viscoélastiques en milieux poreux

Vincent Le Maout

► **To cite this version:**

Vincent Le Maout. Modélisation d'écoulements multiphasiques de fluides viscoélastiques en milieux poreux. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Bordeaux, 2020. Français. NNT : 2020BORD0161 . tel-03103371

**HAL Id: tel-03103371**

**<https://theses.hal.science/tel-03103371>**

Submitted on 8 Jan 2021

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE PRÉSENTÉE  
POUR OBTENIR LE GRADE DE  
**DOCTEUR DE**  
**L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX**

École Doctorale de Sciences physiques et de l'ingénieur  
Spécialité Mécanique

Par Vincent Le Maout

**Modélisation d'Écoulements Multiphasiques de Fluides  
Viscoélastiques en Milieux Poreux**

Sous la direction de : Henri Bertin  
Co-directeur : Giuseppe Sciumè

Soutenue le 3 Novembre 2020

Membres du jury :

Mme LORTHOIS Sylvie, Directeur de recherche, IMFT Rapporteur  
M. SCHREFLER, Bernhard, Professeur, Université de Padovie Rapporteur

Mme AHMADI-SENICHAULT Azita, Professeur, I2M, Examineur  
M. QUINTARD Michel, Directeur de recherche, IMFT, Examineur  
M. NASSOY Pierre, Directeur de recherche, LP2N, Examineur  
M. BORDAS Stéphane, Professeur, Université du Luxembourg, Examineur  
M. SCIUME Giuseppe, Maître de conférences, Université de Bordeaux, Co-directeur  
M. BERTIN Henri, Directeur de recherche, I2M, Directeur de Thèse

## **Titre : Modélisation d'Écoulements Multiphasiques de Fluides Viscoélastiques en Milieux Poreux**

**Résumé:** Les écoulements multiphasiques viscoélastiques en milieux poreux sont au centre de nombreuses recherches fondamentales et appliquées. Initiés par l'industrie pétrolière, leur développement s'étend aujourd'hui sur un large éventail de domaines tels que le génie civil, les géosciences, les matériaux composites et plus récemment les sciences de la vie. La formulation mathématique de ces problèmes repose généralement sur des équations gouvernantes formulées directement à l'échelle macroscopique, ou dérivées par changement d'échelle à partir des relations microscopiques. Généralement, la seconde approche est privilégiée, car elle permet d'établir une connexion claire entre les différentes échelles de description du milieu poreux et d'identifier les hypothèses restrictives nécessaires à la formulation du problème. Cependant, lorsque le changement d'échelle est effectué, de nombreux paramètres restent encore à caractériser, et des conditions de fermeture supplémentaires sont à considérer afin d'obtenir un système mathématique fermé. Pour les écoulements d'intérêt, présentant à la fois un caractère multiphasique et viscoélastique, la prise en compte des relations macroscopiques empiriques usuelles peut être trop imprécise pour rendre compte correctement de la physique sous-jacente, et peu de données expérimentales permettent de renseigner les paramètres manquants à l'échelle du milieu poreux.

Une solution à ce problème consiste à modéliser numériquement les écoulements directement à l'échelle microscopique afin de retrouver les grandeurs manquantes par des expériences de microfluidique *in silico*. Dans ces travaux de thèse, une formulation mathématique d'écoulement multiphasique viscoélastique a ainsi été dérivée à l'échelle du pore pour deux applications d'intérêt : la modélisation de la récupération améliorée du pétrole et la croissance tumorale. La dérivation d'un modèle unique pour ces deux applications utilise les lois de conservation de grandeurs extensives à l'échelle microscopiques considérées lors des opérations de changement d'échelle. La formulation résultante permet une description multiphasique à travers une méthode d'interface diffuse et la prise en compte de la viscoélasticité des phases est modélisée par une loi constitutive d'Oldroyd-B. Le modèle mathématique, implémenté dans un code éléments finis, permet d'étudier comment la rhéologie viscoélastique des solutions de polymère peut être utilisée afin d'améliorer la mobilisation du pétrole à l'échelle du pore lors d'opérations de récupération tertiaire. L'influence de la viscoélasticité sur les résultats numériques obtenus, tout comme l'efficacité du procédé, est comparée aux résultats expérimentaux existant de la littérature. Dans un second temps, le modèle mathématique a été spécialisé pour simuler la croissance d'agrégats de cellules cancéreuses de quelques centaines de microns. L'analogie entre les tissus biologiques et les fluides viscoélastiques est courante pour des fins de modélisations mathématiques depuis les travaux de Steinberg sur la dynamique des tissus vivants. Dans cette thèse, cette similarité est utilisée afin d'étudier le comportement d'agrégats tumoraux dans différents environnements. La formulation biomécanique du problème permet de simuler le comportement de populations cellulaires soumises à des chargements mécaniques externes, qui montrent une modulation de leur vitesse de croissance selon l'état de contrainte du milieu. L'utilisation du modèle mathématique dans ce contexte permet d'isoler les effets mécaniques des effets biologiques sur le régime de croissance, et propose des explications originales sur l'évolution d'agrégats tumoraux en milieux confinés. Enfin, les capacités prédictives de la formulation sur plusieurs expériences *in vitro* permettent d'illustrer la pertinence de l'utilisation de modèles d'écoulements multiphasiques viscoélastiques pour les problèmes de croissances tumorales.

**Mots clés:** Milieux Poreux - Échelle Microscopique – Multiphasique - Viscoélastique - Récupération améliorée du pétrole - Croissance tumorale

---

## **Title: Modelling of Multiphase Flows of Viscoelastic Fluids in Porous Media**

**Abstract:** Viscoelastic multiphase flows in porous media are at the crossroad of many engineering sciences. Initiated with petroleum industry, their range of application is now extended to many additional areas, such as civil engineering, geotechnics, composite impregnation and more recently life sciences. Mathematical formulations of these problems often rely on governing equations formulated directly at the macroscale, or are derived from microscopic considerations using upscaling technics. Generally, the second approach is preferred as it permits to establish a clear connection between the scales of the porous media and to identify the restraining hypothesis necessary to the formulation of the equation system. However, when upscaling is performed, many unknown parameters remain to obtain a close set of equations, and additional closure relationships must be considered in order to find a solvable formulation. For the flows of interest, exhibiting multiphase and viscoelastic properties, the usual macroscale empirical relations may be too inaccurate to capture relevantly the influence of underlying physics at play, and few experimental data allow characterising the missing parameters.

A solution to this problem consists in performing numerical simulations at the microscale to extract missing information about media properties through microfluidic experiments *in silico*. To achieve this multi-scale modelling strategy, a pore scale model has been derived in this thesis for two applications of interest: improved oil recovery and tumor growth. The derivation of a unique model for these applications makes use of conservation equations at the microscale considered during upscaling operations. The obtained formulation allows a multiphase flow description by means of a phase-field method and the viscoelasticity of phases is introduced through the Oldroyd-B constitutive equation. The resulting mathematical model, implemented in a finite element code, permits to study in what extents the introduction of the polymer solution viscoelastic rheology during enhanced recovery process improves the mobilization of oil at pore scale. The influence of viscoelasticity on numerical solutions, as well as sweep efficiency of the medium, is compared to literature experimental results. On other hand, the mathematical model has been specialised to simulate the growth of a few hundred microns wide tumor aggregates. Since the precursor works of Steinberg the viscoelastic fluids analogy for cells aggregate is increasingly used for mathematical modelling. In this thesis, this similarity allows to study numerically the evolution of tumor aggregates in various environments. The biomechanical formulation of the problem permits to simulate cells population behaviour under mechanical load, which affects the growth rate according to the constraints in the system. In this context, the mathematical model is used to separate mechanical from biological effects, and provide original explanations on tumor growth in confined environment. The predictive capacity of the model on *in vitro* experiments shows the relevance of the viscoelastic multiphase flow for the tumor growth description.

**Keywords:** Porous Media – Microscale – Multiphase – Viscoelastic - Enhanced Oil Recovery - Tumor Growth

## Table des matières

Liste des abréviations .....	vi
Nomenclature .....	vi
I. Introduction .....	1
A. Quelques considérations épistémologiques .....	1
B. Contexte des travaux de thèse .....	2
II. Synthèse Sur Les Écoulements Multiphasiques De Fluides Viscoélastiques En Milieux Poreux ..	5
A. Introduction .....	5
B. Généralité Sur Les Milieux Poreux .....	5
1. Les différentes échelles d'un milieu poreux .....	5
2. Volume Élémentaire représentatif .....	6
3. Caractéristiques des milieux poreux .....	7
4. Équations régissant les écoulements multiphasiques dans les milieux poreux .....	9
5. Synthèse sur les écoulements multiphasiques en milieux poreux .....	18
C. Rhéologie des fluides non-newtoniens et focus sur la viscoélasticité .....	19
1. Fluides Newtoniens .....	19
2. Fluides Non-Newtoniens/Viscoélasticité .....	20
D. Applications Étudiées des Écoulements Multiphasiques de Fluides Viscoélastiques en Milieux Poreux .....	27
1. Récupération Améliorée du Pétrole par Injection de Solution de Polymère .....	27
2. Étude de la Croissance Tumorale .....	34
III. Modélisations Numériques des Écoulements Multiphasiques de Fluides Viscoélastiques en Milieux Poreux .....	40
A. Introduction .....	40
B. Généralité sur les méthodes d'interface diffuse .....	40
C. Dérivation des équations de conservation .....	41
1. Équations de conservation de la masse dans le système .....	43
2. Équations de conservation de la quantité de mouvement dans le système .....	45
3. Relations de fermeture .....	46
4. Mise sous forme adimensionnelle du système d'équations .....	52
5. Conditions aux limites .....	54
D. Résolution numérique .....	55
1. Discrétisation du système d'équation .....	55
2. Discussion sur l'algorithme de résolution .....	59
3. Simulations numériques .....	60
E. Conclusion .....	67

IV.	Modélisation de la Récupération Améliorée du Pétrole par Injection de Solution de Polymère	68
A.	Introduction .....	68
B.	Écoulements monophasique de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore .....	68
1.	Justification d'une étude d'écoulement monophasique de fluide viscoélastique à l'échelle du pore	68
2.	Cadre de l'étude.....	70
3.	Écoulements dans des tubes capillaires de sections périodiquement variables .....	71
4.	Microstructure en croix .....	76
5.	Discussion .....	81
C.	Écoulements Multiphasiques de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore.....	82
1.	Écoulements multiphasiques dans des tubes capillaires de sections périodiquement variables	83
2.	Écoulements multiphasiques dans des Microstructures en croix .....	88
3.	Discussion sur la récupération améliorée à l'échelle du pore .....	92
D.	Synthèse sur la Modélisation de la Récupération Améliorée par Injection de Polymères .....	95
V.	Modélisation de la Croissance Tumorale .....	97
A.	Introduction .....	97
B.	Modification du modèle pour la simulation de la croissance tumorale .....	98
1.	Lois de conservation de la masse .....	100
2.	Hypothèses de modélisation .....	101
3.	Caractérisation de la diffusion des cellules tumorales.....	101
4.	Diffusion de l'oxygène dans le système.....	103
5.	Caractérisation des transferts de masse entre espèces chimiques.....	104
6.	Forces volumiques.....	105
7.	Système complet et mise sous forme adimensionnelle .....	106
C.	Modélisation de la croissance d'un agrégat tumoral en milieu confiné. ....	107
1.	Protocole expérimental.....	107
2.	Modélisation numérique.....	109
3.	Résultats .....	112
4.	Discussion sur l'étude numérique et expérimentale simultanée de la croissance de sphéroïde en milieux confinés .....	120
D.	Étude de stabilité des sphéroïdes de cellules tumorales microscopiques .....	124
1.	Étude de la croissance libre d'un agrégat .....	125
2.	Influence du nombre de Péclet sur la stabilité du système .....	126
E.	Conclusions .....	131
F.	Matériel supplémentaire .....	132

VI.	Conclusion et discussion sur les travaux de thèses.....	133
A.	Discussion sur la modélisation de la récupération améliorée du pétrole.....	134
B.	Discussion sur la modélisation de la croissance tumorale.....	135
C.	Discussion générale sur ces travaux de thèse .....	136
VII.	Bibliographie .....	138

# Liste des abréviations

Abréviation	Description
TCAT	Théorie de la moyennisation thermodynamique
VER	Volume Élémentaire Représentatif
RAP	Récupération améliorée du pétrole
MCTS	Sphéroïdes de cellules tumorales

# Nomenclature

Convention d'écriture		
$x$	Grandeur scalaire	
$\mathbf{x}$	Grandeur vectorielle	
$\underline{\mathbf{x}}$	Grandeur tensorielle	
$x_\alpha$	Grandeur microscopique	
$x^\alpha$	Grandeur macroscopique	
$x_c$	Paramètre caractéristique du système	
Opérateur		
$\nabla(x)$	Opérateur gradient	
$\nabla \cdot \mathbf{x}$	Opérateur divergence	
$\underline{\underline{\nabla}}$	Dérivée covariante supérieure	
:	Produit tensoriel	
.	Produit scalaire	
$\underline{\mathbf{x}}^t$	Transposée d'un tenseur	
Symbole	Description	Unité (SI)
Chapitre II		
$\phi$	Porosité du milieu (suppose effective)	[-]
$V$	Volume du milieu	[m <sup>3</sup> ]
$T$	Tortuosité du milieu poreux	[-]
$f$	Facteur de forme	[-]
$t$	Temps	[s]
$\rho_\alpha$	Masse volumique de la phase $\alpha$	[kg. m <sup>-3</sup> ]
$\mathbf{v}_\alpha$	Vitesse de la phase $\alpha$	[m. s <sup>-1</sup> ]
$\underline{\underline{\mathbf{g}}}_\alpha$	Force volumique s'exerçant sur la phase $\alpha$	[N. m <sup>-3</sup> ]
$\underline{\underline{\mathbf{t}}}_\alpha$	Tenseur des contraintes internes dans la phase $\alpha$	[Pa]
$p_\alpha$	Pression de la phase $\alpha$	[Pa]
$p_c$	Pression capillaire	[Pa]
$p^d$	Pression de déplacement macroscopique	[Pa]
$\sigma_{\alpha\beta}$	Tension de surface entre la phase $\alpha$ et $\beta$	[N.m <sup>-1</sup> ]
$J$	Courbure moyenne de l'interface	[m <sup>-1</sup> ]
$\mathbf{n}_{\alpha\beta}$	Vecteur normal à l'interface orienté de la phase $\alpha$ vers $\beta$	[-]
$\theta_s$	Angle de contact statique entre la phase $\alpha$ et $\beta$ sur la paroi solide	[°]
$\theta_a$	Angle de contact d'avancée	[°]
$\theta_r$	Angle de contact de recul	[°]
$\eta_\alpha$	Viscosité de la phase $\alpha$	[Pa.s]
$\underline{\underline{\mathbf{K}}}^\alpha$	Tenseur de perméabilité relative de la phase $\alpha$	[m <sup>2</sup> ]
$S^\alpha$	Saturation de la phase $\alpha$	[-]
$k^\alpha$	facteur de perméabilité relative de la phase $\alpha$	[-]
$\underline{\underline{\mathbf{\tau}}}$	Tenseur des extra-contraintes	[Pa]
$a_\alpha$	Ordre de régression du modèle de Brooks-Corey	[-]
$\tau_c$	Contrainte critique des fluides de Bingham	[Pa]
$\underline{\underline{\dot{\Gamma}}}$	Tenseur taux de déformation	[s <sup>-1</sup> ]

$\dot{\gamma}$	Taux de cisaillement	[s <sup>-1</sup> ]
$q$	Consistance du fluide	[m <sup>-1</sup> .s] <sup>R</sup>
$R$	Rang du modèle de Cross	[-]
$G_p$	Rigidité du ressort du modèle viscoélastique	[Pa]
$\lambda$	Temps de relaxation des composants viscoélastiques	[s]
$\Pi$	Rapport de mobilité	[-]
<b>Chapitre III</b>		
$\omega_\alpha$	Fraction massique de l'espèce $\alpha$	[-]
$r_\alpha$	Terme de réaction chimique vers l'espèce $\alpha$	[kg. m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\mathbf{u}_\alpha$	Vitesse diffusive de l'espèce $\alpha$	[m. s <sup>-1</sup> ]
$\mu_\alpha$	Potentiel chimique de mélange de l'espèce $\alpha$	[N.m <sup>-2</sup> ]
$M$	Coefficient de mobilité de l'interface	[N <sup>-1</sup> .m <sup>4</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\mathcal{H}$	Énergie libre d'Helmholtz	[N.m <sup>-2</sup> ]
$T$	Température du système	[K]
$\Delta U$	Énergie libre de mélange	[N.m <sup>-2</sup> ]
$\Delta S$	Entropie du mélange	[N.m <sup>-2</sup> .T <sup>-1</sup> ]
$h^0$	Densité d'énergie libre d'Helmholtz d'un mélange à l'équilibre	[-]
$\epsilon$	Mesure caractéristique de l'interface	[m]
$\kappa$	Constante de normalisation de l'énergie à l'interface	[-]
$\nu_{fr}$	Coefficient de frottement de l'interface	[s <sup>-1</sup> ]
$\xi$	Constante de diffusion artificielle SU	[-]
<b>Chapitre IV</b>		
$\nu$	Fréquence des expansions des sections d'un tube capillaire ondulé	[-]
$R$	Facteur de résistance	[-]
$\Pi_m$	Mobilité microscopique de l'écoulement	[-]
<b>Chapitre V</b>		
$\omega_t^{eq}$	Fraction massique de cellule tumorale d'équilibre	[-]
$D_n^{eff}$	Coefficient de diffusion effectif des nutriments	[-]
$D_n$	Coefficient de diffusion des nutriments dans le milieu de culture	[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\gamma_t$	Taux de réplication cellulaire	[kg. m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\gamma_{ng}$	Consommation de nutriments pour la réplication	[kg. m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\gamma_{n0}$	Consommation de nutriments pour le métabolisme	[kg. m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$H_{w_n}$	Fonction d'inhibition par manque de nutriments	[-]
$H_p$	Fonction d'inhibition par contrainte mécanique	[-]
$\omega_n^{walls}$	Concentration de nutriment sur la paroi interne de la capsule	[-]
$h_a$	Coefficient sans dimension de transport à travers la membrane d'alginate	[s <sup>-1</sup> ]
<b>Nombre sans dimension</b>		<b>Définition</b>
Nombre de Reynolds (Re)		$\frac{\bar{\rho} v_c d_c}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}}$
Nombre Capillaire (Ca)		$\frac{(\eta_{s,w} + \eta_{p,w}) v_c}{\sigma}$
Nombre de Péclet (Pe)		$\frac{v_c d_c \epsilon}{M \sigma}$
Nombre d'Oldroyd ( $\beta$ )		$\frac{\eta_{p,w}}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}}$
Nombre de Weissenberg (Wi)		$\frac{\lambda v_c}{d_c}$
Nombre de Cahn ( $\delta$ )		$\frac{\epsilon}{d_c}$



# I. Introduction

## A. Quelques considérations épistémologiques

Je tiens tout d'abord à profiter de l'introduction de ce manuscrit de thèse pour discuter en quelques mots d'un des objectifs personnels que ces travaux m'ont amené à considérer. Sans connaissances particulières du contexte théorique, la manière dont l'intitulé du sujet est énoncé provoque volontairement la curiosité sur la manière dont la vision 'sciences de la vie' s'accorde avec celle de la 'récupération de pétrole'. La problématique qui a immédiatement attiré mon attention sur ce sujet de thèse était le défi que représentait la simulation numérique de la croissance tumorale avec un modèle mathématique suffisamment général pour traiter, sans adaptation particulière, d'autres enjeux qualifiés « d'industriels » telle que la récupération améliorée du pétrole. Venant initialement d'une formation d'ingénieur, la séparation entre sciences fondamentales et science appliquées a toujours été clairement énoncée au cours de mes études, alors que ce sujet montre à quel point cette frontière n'est en fait qu'une limite arbitraire fixée pour répondre à un impératif d'employabilité. Dans ces travaux de thèse, le fil conducteur n'est donc pas initialement la réponse concrète à une problématique clinique ou industrielle (bien que cela nous motive à développer nos modèles), mais bien l'étude théorique des écoulements multiphasiques de fluides viscoélastiques en milieu poreux, qui dans un second temps, est utilisée dans les applications d'intérêt.

Le fait qu'une unique formulation mathématique puisse à la fois modéliser la croissance d'un agrégat de cellules tumorales et la récupération du pétrole provoquée par l'injection d'un fluide non-newtonien au sein d'une roche poreuse et perméable ne devrait pas surprendre les scientifiques. La démarche de modélisation s'affranchit souvent du contexte d'application en adaptant l'ensemble des paramètres du modèle à l'application désirée. Avec l'avancée des moyens informatiques et les performances des méthodes de résolution d'équations aux dérivées partielles, les modèles développés numériquement deviennent de plus en plus généraux. Cette avancée est particulièrement visible avec l'accès facilité à des logiciels commerciaux capables de traiter une gamme très large de problèmes d'ingénierie sans nécessité de modifier les modèles implémentés. L'utilisation de la mécanique des milieux continus sur des problématiques biologiques n'est pas nouvelle et a fait preuve de plusieurs succès pour expliquer l'origine de maladies.

Pour autant, il ne faut pas oublier qu'une tumeur n'est pas un fluide, et certainement pas du pétrole. L'aspect actif de la matière vivante reste difficile à simuler correctement sur des temps longs avec un unique modèle même aujourd'hui, ce qui constitue un frein à la modélisation des tissus biologiques. Dès lors, on peut se demander quel intérêt il y aurait à utiliser des approches mécanistiques sur des problématiques biologiques ? La réponse réside dans les objectifs d'une telle démarche de modélisation. L'établissement d'une formulation mécanique du problème ne doit pas supplanter les considérations biologiques mais chercher la contribution des paramètres biophysiques dans le développement de la maladie.

Les approches pluridisciplinaires comme celle utilisée dans ces travaux de thèse sont, de mon point de vue, au cœur des sciences contemporaines. Cela représente des défis scientifiques importants qui doivent être clairement bornés en définissant la contribution de chaque champ disciplinaire dans la réponse à la problématique posée. Il est important de garder à l'esprit les enjeux éthiques de ces approches, en particulier sur le rôle de la modélisation dans le traitement des maladies et le partage des responsabilités. Comme nous l'avons dit en préambule, cette démarche contribue de plus en plus à effacer les distinctions entre sciences fondamentales et appliquées ; sciences « dures » et sciences « molles ». Le choix de l'utilisation de la mécanique des fluides en milieux poreux dans le traitement

des cancers repose en partie sur des hypothèses empiriques ; néanmoins, les contributions d'une théorie quasi-centenaire comme celle des écoulements multiphasiques en milieux poreux nous semblent justifiées au regard des contributions qu'elle apporte à la compréhension de l'évolution de la maladie. Durant ces travaux, nous avons essayé de respecter cette vision en gardant à l'esprit les objectifs visés lors de l'application de notre modèle dans les problèmes d'intérêt. Sur ces considérations, je vous souhaite une agréable lecture.

### **B. Contexte des travaux de thèse**

L'étude des matériaux poreux et de leur comportement est intimement liée aux lois de conservations de la mécanique des milieux continus et de la thermodynamique. Ainsi, on pourrait attribuer l'origine des premiers développements d'une théorie des milieux poreux aux travaux fondateurs de Galilée, Newton et Bernoulli en mécanique et calcul différentiel. Pourtant (comme souvent en sciences), c'est à Leonard Euler (1707-1783) que nous devons la première définition d'un milieu poreux dans un livre posthume *Anleitung zur Naturlehre*. Il donnera également le premier exemple de milieux poreux saturés réels : l'éponge dans ses *Lettres à une princesse d'Allemagne*. Une description plus spécifique des milieux poreux sera décrite par les travaux fondateurs de Henri Darcy (1803-1858) qui, relia expérimentalement le volume d'eau écoulé à travers du sable à la perte de charge du fluide. Bien qu'obtenue empiriquement, cette loi est encore beaucoup utilisée de nos jours et a été justifiée analytiquement dans un cadre restreint d'écoulement et de matériaux. Une étude plus théorique des milieux poreux vides ou saturés devra attendre la maturation des théories de la mécanique des fluides, de l'élasticité et de la thermodynamique pour permettre l'émergence de réelles contributions. C'est à Vienne, en Autriche, que Karl von Terzaghi et Paul Fillinger se disputeront les premiers développements d'une théorie de milieux poreux saturés déformables en mécanique des sols durant la première moitié du XX<sup>e</sup> siècle. Plus tard, ces travaux seront repris par Maurice Biot qui étudiera la propagation d'onde acoustique dans un milieu poreux déformable saturé par un fluide visqueux et compressible, et formulera ainsi les bases de la théorie de la poroélasticité.

L'ajout d'une composante multiphasique à l'étude des milieux poreux saturés est un problème qui n'a émergé que dans la seconde partie du XX<sup>e</sup> siècle, due en partie au succès croissant de l'application de la théorie des milieux poreux aux problèmes industriels tels que l'étude de la propagation des ondes sismiques ou encore la récupération du pétrole. Si l'étude des écoulements multiphasiques remonte aux travaux de Young plusieurs siècles auparavant, leur incorporation dans la théorie des milieux poreux a soulevé de nouvelles interrogations sur la nature même des matériaux étudiés : quels liens entretiennent les différentes échelles de description d'un milieu poreux ? Jusqu'à présent, la question était généralement passée sous silence, et les équations constitutives du milieu étaient directement formulées à l'échelle dite de « Darcy », à laquelle les réseaux de pores ne sont pas directement visibles, et les quantités moyennées. L'introduction des lois d'écoulement multiphasique dans la théorie des milieux poreux est un problème qui touche essentiellement les échelles microscopiques : la répartition des phases dues aux forces capillaires, l'emplacement des interfaces et les échanges de masses entre composants étant difficiles à traiter avec une vision purement macroscopique.

Parallèlement à ces développements, la rhéologie des fluides considérés s'est complexifiée. L'application des théories des milieux poreux à des problèmes d'ingénierie a nécessité l'étude mécanique des propriétés des liquides concernés en géosciences (emploi de solution de polymère, mousse), puis dans d'autres branches industrielles (chimie cosmétique, agroalimentaire, biologie ...). Alors que de nombreux liquides correspondent bien à la description Newtonienne, les fluides plus visqueux, constitués d'une multitude d'espèces chimiques lourdes en solution (polymères, suspensions) ne répondent plus aux approximations usuelles. Leur contrainte interne doit alors être caractérisée en prenant en compte la déformation des composants dilués (*e.g.* les macromolécules). Une question qui émerge alors est l'influence de la rhéologie des fluides dans les écoulements en milieux poreux. Due à

la topologie de la microstructure des matériaux, le caractère viscoélastique peut sous certaines conditions piloter la dynamique des phases, changeant ainsi les régimes d'écoulement des fluides à l'échelle du pore.

L'étude détaillée des écoulements à l'échelle microscopique a donc émergé afin de renseigner plus précisément les phénomènes sous-jacents dans l'étude des milieux poreux. En particulier, il a été vu comment les propriétés de mouillabilité, capillarité et mobilité pilotaient de nombreux phénomènes macroscopiques tels que la répartition des phases au sein du matériau. Également, les interactions entre les espèces dilués et le matériau poreux ont été étudiées pour comprendre la rhéologie des écoulements de fluides complexes dans ces milieux. Afin de répondre à la problématique de cohérence multi-échelle, la recherche de dépendance des paramètres macroscopiques avec des variables microscopiques a permis un couplage unidirectionnel du microscopique vers le macroscopique. Cependant, ces relations sont basées sur une gamme restreinte de configurations des phases à l'échelle du pore, et une nouvelle caractérisation de ces dépendances est nécessaire à chaque raffinement de la physique microscopique.

Pour répondre à cette problématique, l'introduction de méthodes dites d'*upscaling* (changement d'échelle) vise à corriger les formulations existantes d'écoulements en milieux poreux, en utilisant les modèles microscopiques comme brique élémentaire à l'établissement des équations aux échelles supérieures. Indirectement, ces approches ont grandement contribué à développer des modèles complets à l'échelle du pore afin d'obtenir les formulations les plus complètes pour opérer le changement d'échelle. Une fois le modèle microscopique établi, les méthodes de changement d'échelle consistent à appliquer des opérateurs de moyennisation sur une géométrie représentative du milieu poreux. Les modèles mathématiques à l'échelle supérieure sont ainsi obtenus à partir des relations microscopiques, conservant ainsi la complexité physique des modèles des plus petites échelles et assurant la cohérence entre chaque niveau de description du milieu poreux. Différentes techniques de moyennisation (théorie de moyennisation thermodynamique, prise de moyenne volumique etc...) permettent d'établir une relation macroscopique à l'échelle de Darcy à partir des équations de conservation microscopique. Cependant, un problème récurrent survenant par ce type d'approche apparaît lors de la recherche des relations de fermeture du problème satisfaisantes. En effet, une fois l'opération d'*upscaling* effectuée, le nombre d'inconnues est souvent supérieur au nombre d'équations. De plus, en fonction du problème étudié, des relations expérimentales ne sont pas toujours disponibles, surtout si la physique à l'échelle du pore est complexe ; des hypothèses supplémentaires doivent alors être introduites afin d'obtenir un système mathématique résoluble, réduisant de la même manière le champ de validité du modèle.

Afin de corriger ces approximations, ces travaux de thèse proposent de simuler numériquement des écoulements multiphasiques de fluides viscoélastiques directement à l'échelle du pore, et ceux pour deux applications d'intérêt : la récupération améliorée du pétrole et la croissance tumorale. Le premier enjeu de cette démarche est la recherche d'une meilleure connaissance des effets viscoélastiques et capillaires à l'échelle du pore. L'étude *in silico* permet un découplage facilité des phénomènes physiques qui surviennent dans les milieux poreux réels. Ainsi, l'influence de la viscoélasticité peut être étudiée en toute généralité pour la récupération du pétrole, sans considérer un polymère en particulier, et en négligeant volontairement certains phénomènes tels que la dégradation mécanique, l'adsorption etc. De même, la simulation de la croissance d'un agrégat de cellules tumorales, qui compose la première étape du développement d'un cancer, permet de renseigner sur les forces biophysique en jeu sans considérer les effets génétiques dans une première approximation. Ces modélisations donnent alors des informations sur la dynamique des fluides considérés à l'échelle du pore, et peuvent permettre de guider les hypothèses nécessaires à l'établissement du modèle macroscopique.

Le second objectif à long terme de ces travaux est de fournir aux modèles macroscopiques des relations de fermeture sur des géométries représentatives du milieu étudié, afin de clore analytiquement le système d'équations obtenu par changement d'échelle sans recourir à des approximations. En se ba-

## Introduction

sant sur les résultats des simulations à l'échelle du pore pour calculer numériquement les relations manquantes entre les variables moyennées à l'échelle de Darcy, le modèle multi-échelle serait entièrement établi, et le couplage entre niveaux de description du matériau assurée par l'injection des résultats microscopiques dans les paramètres macroscopiques.

De par ces objectifs, ces travaux de thèse possèdent trois caractéristiques qui permettent de définir le cadre de nos recherches. Tout d'abord, le niveau de description de notre étude concerne l'échelle microscopique des milieux poreux. Deuxièmement, les écoulements étudiés ont un caractère multiphasique. Cela signifie la présence de plusieurs espèces chimiques au sein du système d'étude, et le traitement numérique explicite des interfaces. Enfin, au vu des applications du modèle, il a été choisi d'inclure l'étude d'un comportement viscoélastique de l'une ou plusieurs des phases en présence, et comparer les comportements du système d'étude relativement aux paramètres rhéologiques des fluides.

## II. Synthèse Sur Les Écoulements Multiphasiques De Fluides Viscoélastiques En Milieux Poreux

### A. Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons différents aspects théoriques, à la fois sur les écoulements multiphasiques en milieux poreux, la viscoélasticité et les applications choisies. Cette partie permettra ainsi d'introduire les bases qui serviront plus tard à construire un modèle mathématique pour nos recherches, ainsi qu'à présenter les travaux déjà existants sur ces sujets. Tout d'abord, nous introduirons certaines généralités sur les propriétés des milieux poreux et les différents niveaux de description existant de ces matériaux. Ensuite, nous verrons les lois d'écoulement d'un ou plusieurs fluides au travers des milieux poreux. Dans un second temps, nous discuterons la rhéologie des liquides viscoélastiques, l'origine physique de ces comportements et sa modélisation mathématique. Enfin, nous présenterons plus en détails les études déjà parues sur les applications choisies dans cette thèse, et l'insertion de nos contributions dans l'état actuel de la recherche dans ces domaines.

### B. Généralité Sur Les Milieux Poreux

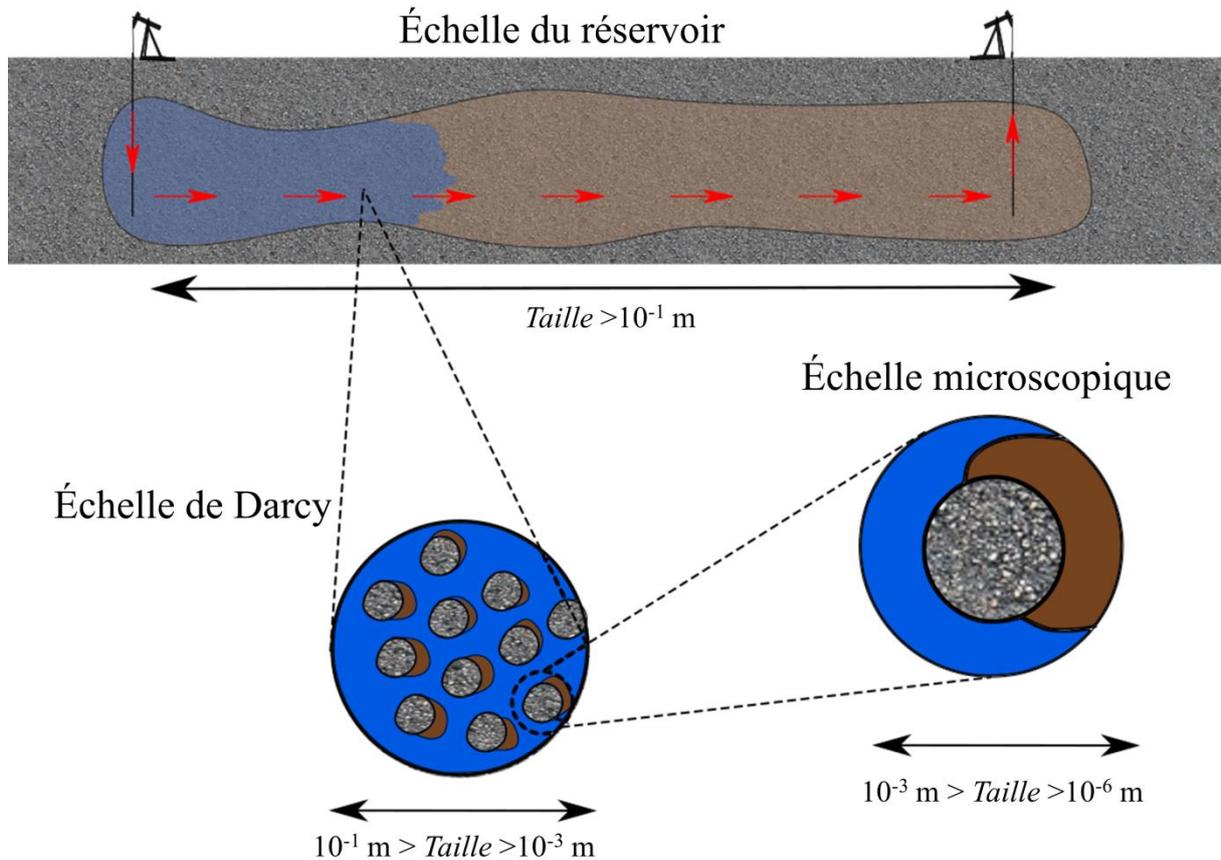
Les milieux poreux sont des matériaux qui se distinguent par la coexistence d'une matrice solide avec un réseau de canaux, les pores, où peuvent coexister un ou plusieurs fluides (Nielsen & Bejan, 2017). On distingue généralement les matériaux granulaires, résultant de l'empilement de grains de matière formant une matrice solide non convexe (on parle aussi de milieux « non consolidés »), et les matériaux dont la matrice solide est continue (qualifiés alors de « consolidés »).

#### 1. Les différentes échelles d'un milieu poreux

Il existe plusieurs niveaux de description des écoulements en milieux poreux, dont la taille et le nombre peuvent varier en fonction des matériaux et des applications considérées (De Boer, 2000; Zhang, et al., 2000; Gray & Miller, 2014). Cependant, on admet généralement au moins trois échelles de description caractérisées par les propriétés suivantes (Figure II-1):

- **L'échelle du pore** (aussi désignée par échelle microscopique dans ces travaux) : c'est l'échelle la plus petite du milieu poreux (du micromètre au millimètre) au sens où elle prend explicitement en compte la géométrie (complexe) du squelette solide et le caractère multiphasique des écoulements : les phases et les interfaces sont identifiables. Malgré la taille restreinte de ces niveaux de description, l'utilisation de la mécanique des milieux continus reste valide pour la plupart des matériaux considérés.
- **L'échelle de Darcy** (aussi désignée par échelle macroscopique dans ces travaux) : C'est l'échelle usuelle de description du milieu poreux (du millimètre à la dizaine de centimètres). Pour la plupart des problèmes d'ingénierie, une description à l'échelle du pore ne représente que peu d'intérêt, soit parce que les applications sont plus orientées vers une description globale des propriétés du milieu poreux, soit parce que décrire la résolution du problème à partir de l'échelle microscopique est difficile à mettre en œuvre du fait de la géométrie complexe de cette échelle et des ressources nécessaires à la résolution pore par pore. De ce fait, une résolution du problème à l'échelle de Darcy fait intervenir des variables d'état macroscopiques : en chaque point du domaine, les grandeurs physiques résultent d'une moyenne sur un volume minimal du matériau poreux, choisi de façon à ce que ses propriétés soient représentatives de milieu. Pour les écoulements multiphasiques, les interfaces ne sont pas visibles et l'occupation de l'espace poral est décrite en termes de fraction massique ou volumique.

- **Grandes échelles** : C'est l'échelle du milieu étudié dans son ensemble (de la dizaine de centimètre au kilomètre). L'étude de ces milieux fait généralement appel à une approche combinée de données géostatistiques et de simulations numériques des équations moyennées de l'échelle de Darcy sur des zones de propriétés constantes.



**Figure II-1: Description des différentes échelles des milieux poreux.**

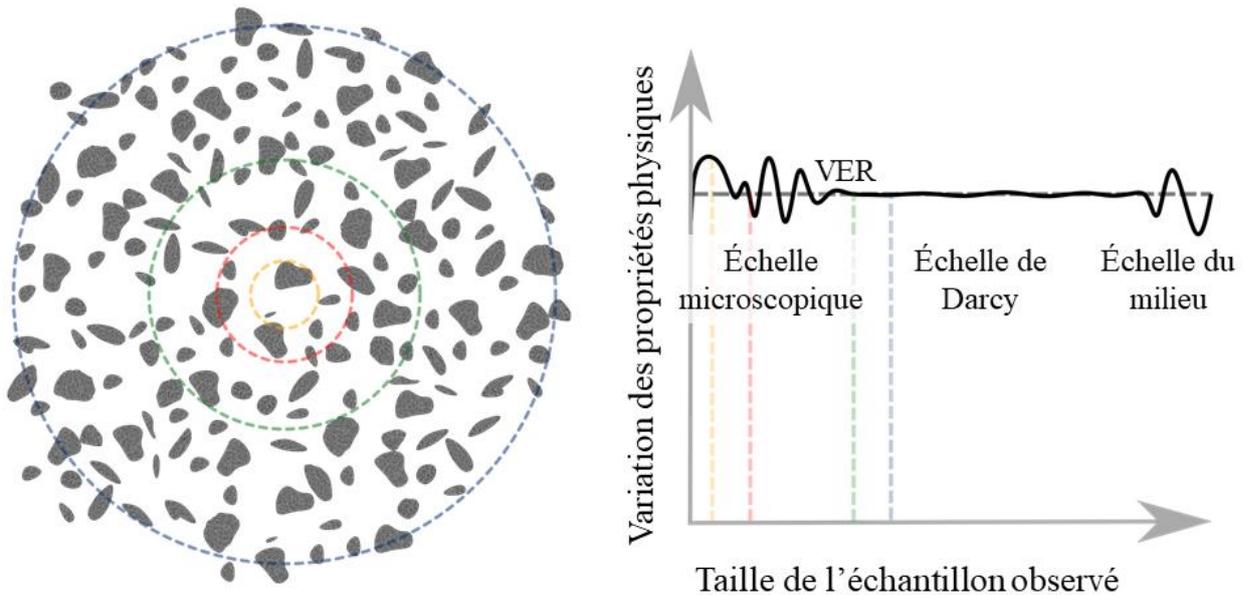
L'écoulement se fait d'un puits à l'autre et concerne (ici) deux phases fluides. Une description physique cohérente doit pouvoir prendre en compte toute la complexité des échelles inférieures dans la modélisation des échelles supérieures. Dans le cas contraire, la perte d'information dans le processus de changement d'échelle peut mener à des modélisations insatisfaisantes. Cette représentation peut s'étendre à tout milieu poreux et un nombre arbitraire de fluides en présence dans les pores.

## 2. Volume Élémentaire représentatif

La coexistence de plusieurs niveaux de description introduits en préambule suppose l'existence de plusieurs modèles mathématiques décrivant le même phénomène, mais pour des échelles de résolutions spatiales différentes. Il apparaît donc nécessaire d'établir un lien clair entre ces descriptions des milieux poreux, afin de s'assurer de la cohérence des modèles introduits quelle que soit l'échelle à laquelle se place l'observateur. Autrement dit, une description macroscopique doit être capable de prendre en compte la complexité de la physique à l'échelle du pore pour être satisfaisante. De la même façon, une description à l'échelle du réservoir doit pouvoir prendre en compte de façon pertinente la dynamique des échelles inférieures pour être représentative (Figure II-1).

En fonction de la taille du volume considéré, les paramètres géométriques d'un milieu poreux varient grandement sur les premiers ordres de grandeur du matériau (Figure II-2). À l'échelle de quelques pores, une disparité assez élevée de ces propriétés est encore possible du fait de l'agencement spécifique des micro-canaux autour du point d'observation. Néanmoins, il peut être supposé qu'il existe une taille minimale telle que, pour tout volume arbitraire au moins aussi grand, la valeur du paramètre

géométrique considéré devienne à peu près constante. On appellera ce volume minimal Volume Élémentaire Représentatif (VER) ( Nield & Bejan, 2017; Zhang, et al., 2000; Gray & Miller, 2014).



**Figure II-2: Schématisation du Volume Élémentaire Représentatif.**

Sur les premières échelles de description, une disparité des propriétés physiques est présente en fonction des zones considérées du matériau (pointillés jaunes et rouges). Cependant, observées sur un volume suffisamment grand (pointillés verts), ces propriétés varient peu d'un point à l'autre. On observe la même invariance pour des volumes arbitraires plus grands (pointillés bleus). Cependant, pour des milieux hétérogènes, aux grandes échelles, des variations peuvent de nouveau apparaître sur les grandes échelles du fait d'une différence de microstructure.

Le passage d'une description de l'échelle microscopique aux échelles supérieures se fait donc en supposant que les propriétés physiques du matériau restent inchangées une fois que l'unité de description du système est suffisamment grande. Ainsi, la dynamique microscopique dans un VER autour de différents points du matériau présentera de fortes similitudes. Cette hypothèse justifie alors l'utilisation d'une description moyennée de la physique à l'échelle de Darcy, en supposant que le volume élémentaire du domaine est en fait un VER, et donc que la physique microscopique sous-jacente varie peu.

Notons que malgré cette hypothèse, on observe dans la pratique une dépendance des propriétés physiques avec la taille du VER pour des milieux poreux fortement hétérogènes, notamment vers les grandes échelles (Figure II-2). Cela est dû à la structuration des milieux poreux qui, en fonction des événements géologiques (dépôts par couches de sédiments, séismes...) va entraîner un agencement des réseaux de pores différents d'une zone à l'autre. À l'échelle du milieu, en fonction de l'hétérogénéité du matériau, on pourra considérer l'existence de différents VERs, et donc des zones à dynamique différente, qu'il faudra prendre en compte. Dans ces conditions, une description statistique de VER peut être privilégiée ( Nield & Bejan, 2017; Zhang, et al., 2000).

L'existence supposée d'un VER et sa détermination fournissent un outil adapté au changement d'échelle. S'il est suffisamment représentatif du milieu poreux, la connaissance des phénomènes régissant l'écoulement au sein d'un VER fournit des informations sur l'écoulement à l'échelle de Darcy ; les propriétés géométriques locales de la microstructure s'approchant suffisamment de celles du VER pour que les effets pilotant la dynamique des écoulements restent les mêmes.

### 3. Caractéristiques des milieux poreux

Les propriétés physico-chimiques d'un milieu poreux sont grandement influencées par les propriétés intrinsèques des matériaux qui le composent : loi de déformation du squelette solide, propriétés physiques des fluides dans les pores etc... mais aussi, indépendamment de la nature des constituants, par

les proportions relatives des parties solides et liquides du matériau. C'est la porosité qui mesure la proportion de volume des pores  $V_{\text{PORES}}$  et du volume total  $V_{\text{TOTAL}}$  du milieu considéré :

$$\phi_{\text{TOTAL}} = \frac{V_{\text{PORES}}}{V_{\text{TOTAL}}} \quad \text{Eq II-1}$$

Pour autant, tous les pores ne participent pas de la même façon aux propriétés des matériaux poreux. Pour les milieux saturés par exemple, en fonction de leur connectivité entre eux, les canaux constituant les pores permettent ou non l'écoulement d'un fluide. L'existence de zones fermées, non reliées à d'autres pores, est à distinguer du reste du réseau. Un milieu poreux présentant un chemin complet reliant l'entrée et la sortie du réseau de pore est dit percolant. Si seul le volume des pores des chemins percolant  $V_{\text{PERCO}}$  d'un milieu poreux est considéré dans l'Eq II-1, la porosité est dite effective :

$$\phi_{\text{EFF}} = \frac{V_{\text{PERCO}}}{V_{\text{TOTAL}}} \quad \text{Eq II-2}$$

De par sa définition, on vérifiera toujours  $\phi_{\text{EFF}} \leq \phi_{\text{TOTAL}}$ . La différence entre la porosité du milieu et la porosité effective est appelée porosité résiduelle  $\phi_{\text{RES}}$ , telle que :

$$\phi_{\text{TOTAL}} = \phi_{\text{EFF}} + \phi_{\text{RES}} \quad \text{Eq II-3}$$

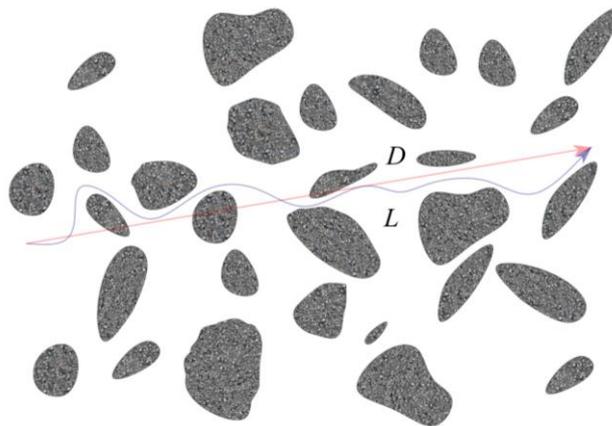
Dans la suite, par choix de lisibilité, nous ne considérerons que des porosités effectives dénotées simplement par  $\phi$ . Les différentes notions de porosité donnent des indications importantes quant à la répartition relative de la matrice solide du milieu poreux et des pores qui le constituent. Cependant, elles fournissent peu d'information sur l'agencement et la géométrie des micro-canaux. Pour certains phénomènes, ces informations sont essentielles.

L'introduction d'une mesure de tortuosité dans le milieu poreux sert à corriger les propriétés de transport et de diffusion au sein de la phase liquide, en prenant en compte le caractère courbé que peut présenter le réseau de pores (Figure II-3) (Brooks & Corey, 1964; Juarez Morejon, 2017). Elle peut se définir comme le rapport entre la longueur effective parcourue par le fluide dans les micro-canaux  $L$  et la distance fictive qu'il aurait parcourue dans un canal droit dirigé dans le sens de l'écoulement  $D$  au travers le milieu poreux (Pisani, 2011).

$$T = \frac{L}{D} \quad \text{Eq II-4}$$

À partir des coefficients de tortuosité et de porosité, certains auteurs définissent le facteur de structure  $f$  (Pisani, 2011):

$$f = \frac{\phi}{T} \quad \text{Eq II-5}$$



**Figure II-3: Tortuosité dans un milieu poreux.**

Expérimentalement, la porosité d'un milieu est relativement facile à estimer à partir des données de volume et de poids du matériau saturé et sec. La tortuosité en revanche est plus compliquée à évaluer.

Pour certaine classe de matériaux, il existe des estimations empiriques reliant porosité et tortuosité. Notons par exemple la relation dérivée dans Eq II-6 pour les milieux poreux résultant de l'empilement de solide de taille et forme identiques, pour lesquels on peut définir un facteur de forme noté  $m$  à partir de leur dimension :

$$f = m\phi^2 + (1 - m)\phi \quad \text{Eq II-6}$$

Le facteur de forme étant à adapter en fonction des grains constituant le squelette solide. Pour des grains sphériques par exemple, il a été montré que  $m \approx 0,75$  (Pisani, 2011).

#### 4. Équations régissant les écoulements multiphasiques dans les milieux poreux

Les caractéristiques géométriques influant les propriétés de transport de fluide dans un milieu poreux étant présentées, il est maintenant possible de dériver les modèles d'écoulement macroscopique en moyennant les équations microscopiques avec le *Thermodynamically Constrained Averaging Theory* (TCAT, (Gray & Miller, 2014)). L'objectif des modèles multi-échelles est double. Tout d'abord, il s'agit d'établir un lien entre la dynamique à l'échelle microscopique et la description à l'échelle d'intérêt. Cependant, ces procédures mathématiques font apparaître un grand nombre de relations souvent inconnues des physiciens et mécaniciens. Par conséquent, un second objectif de ces méthodes est d'identifier les approximations nécessaires pour fermer le système obtenu. Le TCAT n'est pas la seule méthode de changement d'échelle existante (Whitaker, 1996; Lasseux, et al., 1996; Lasseux, et al., 2019), mais elle a servi de base aux travaux de modélisation macroscopique sur lesquels s'appuie cette thèse. L'établissement d'un système multi-échelle d'écoulement en milieux poreux par cette méthode passe par plusieurs étapes (Gray & Miller, 2006):

1. Écriture du second principe de la thermodynamique (inégalité de l'entropie) à l'échelle du milieu.
2. Formulation des équations de conservation des variables extensives et des relations thermodynamiques à l'échelle du pore. Les relations sont ensuite moyennées sur des REV pour être formulées à l'échelle de Darcy.
3. Introduction des équations de conservations à l'échelle macroscopique dans l'inégalité de l'entropie à l'aide de multiplicateurs de Lagrange. De cette façon, l'écoulement au travers des milieux poreux est formulé sous la forme d'un problème d'optimisation : la solution doit minimiser la production d'entropie tout en vérifiant les équations de conservations macroscopiques dérivées précédemment. Le résultat de ces dernières étant toujours nul, les lois de conservations sont ajoutées sans changer le second membre du principe de la thermodynamique. Il en résulte l'inégalité entropique « contrainte » (IEC). Cette formulation présente l'avantage de faire apparaître, dans une même équation, les termes de création d'entropie et les termes mécaniques (contraintes, frottement, viscosité...) à leur origine.
4. Les multiplicateurs de Lagrange sont choisis spécifiquement afin de faire disparaître les termes temporels. Puis les termes restants sont regroupés en couple de flux/forces de même origine sous les hypothèses désirées (écoulement monophasique, incompressible etc...). L'inégalité résultante est alors appelée inégalité entropique « contrainte » simplifiée (IES), dans le sens où elle constitue une forme particulière de l'IEC. Cette inégalité est composée d'une somme de produits, chacun exprimant une relation force-flux, qui sont tous égaux à 0 à l'équilibre.
5. Les relations de fermeture reliant les variables d'intérêt sont dérivées à partir de l'IES. De la façon dont elles ont été dérivées, ces lois respectent les principes thermodynamiques des milieux poreux et, en fonction des hypothèses introduites, la complexité de la physique introduite

à l'échelle du pore. Des relations expérimentales ou numériques peuvent être nécessaires afin d'obtenir un système complet.

Par la suite, seule l'étape 2 sera traitée en détail étant donné que les travaux menés dans cette thèse concernent essentiellement l'échelle microscopique. L'opérateur de moyennisation sera tout de même introduit à titre illustratif. Les formes finales des lois d'écoulement à l'échelle de Darcy résultant de l'étape 5 et les hypothèses nécessaires pour obtenir un système fermé seront également présentées. Les notations introduites reprennent celles de (Jakson, et al., 2009). Nous étudions ici l'écoulement d'un ou deux fluides immiscibles  $w$  et  $n$  au sein d'un solide indéformable  $s$ . Les fluides en présence sont supposés incompressibles et ne sont composés que d'une seule espèce chimique.

### i) Écriture des équations de conservation à l'échelle du pore

La description des écoulements à l'échelle du pore reprend les principes de la mécanique des milieux continus : la conservation des variables extensives au cours du temps est étudiée en chaque point en considérant les différents flux entrants et sortants, les termes sources et les transferts entre espèces. Dans un premier temps, nous considérons le passage d'un unique fluide à travers le milieu poreux afin de voir les spécificités de tels écoulements. Ensuite, nous verrons les différences qui émergent avec l'introduction d'une ou plusieurs phases supplémentaires à l'échelle du pore.

#### 1) Écoulement monophasique à l'échelle du pore : équations régissantes

Considérons dans un premier temps un unique fluide  $w$  s'écoulant dans un milieu poreux dont la matrice solide est désignée par  $s$ . Pour un tel système, les lois de conservation de la masse s'écrivent sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0 \quad \text{pour } \alpha \in \{w, s\} \quad \text{Eq II-7}$$

Pour un fluide incompressible et un squelette solide indéformable, l'équation précédente Eq II-7 peut se simplifier sous la forme d'une hypothèse d'incompressibilité:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha = 0 \quad \text{pour } \alpha \in \{w, s\} \quad \text{Eq II-8}$$

De même, la conservation du moment cinétique permet d'écrire à l'échelle microscopique:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - \rho_\alpha \mathbf{g}_\alpha - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}}_\alpha = 0 \quad \text{pour } \alpha \in \{w, s\} \quad \text{Eq II-9}$$

Si la phase solide est totalement indéformable, Eq II-9 peut simplement s'écrire dans la phase solide comme :

$$\mathbf{v}_s = 0 \quad \text{Eq II-10}$$

Sous les hypothèses énoncées, il n'est donc pas nécessaire de traiter explicitement les équations de conservation dans la phase solide ; celle-ci n'interagissant avec le système qu'à travers les surfaces de contact fluide-solide. De même, il est possible de simplifier Eq II-9 dans la phase fluide sous l'hypothèse de contraintes Newtoniennes (qui sera traitée en détail dans la partie dédiée à la rhéologie des fluides) et d'incompressibilité dérivée d'Eq II-8:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_w}{\partial t} + \mathbf{v}_w \cdot \nabla \mathbf{v}_w - \mathbf{g}_w - \frac{1}{\rho_w} \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \eta_w (\nabla \mathbf{v}_w + \nabla^t \mathbf{v}_w)) = 0 \quad \text{Eq II-11}$$

Le système formé des équations Eq II-8 et Eq II-11 forme le système de Navier-Stokes, qui régit les écoulements de fluide en mécanique des milieux continus. Cela signifie qu'à l'échelle du pore, les équations d'écoulement ne prennent pas en compte le caractère poreux du matériau car la géométrie microscopique du milieu est explicitement prise en compte grâce à une discrétisation spatiale appropriée (seulement l'espace occupé par le fluide est pris en compte) et aux conditions limites. Pour les

fluides visqueux, des conditions de non-glissement sont généralement introduites à l'interface fluide-solide.

Dans de nombreuses applications, si la vitesse est relativement faible, le terme non linéaire dans l'équation Eq II-11 peut être négligé. Dans la dérivation d'équations d'écoulements macroscopiques à l'échelle de Darcy, cette hypothèse est souvent considérée (Gray & Miller, 2006; Whitaker, 1986).

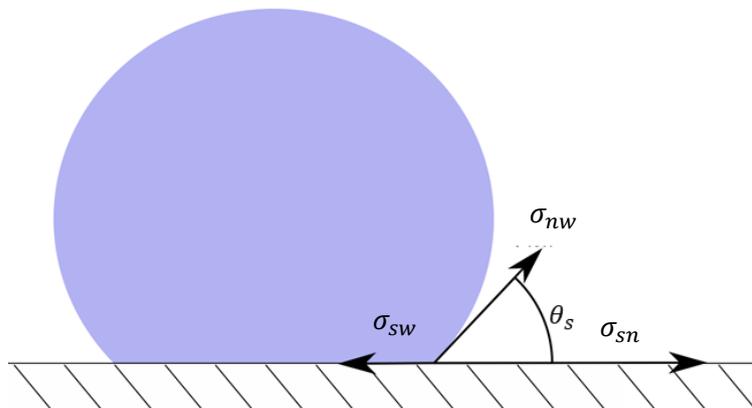
## 2) Écoulements Multiphasique à l'échelle du pore

Par rapport au cas monophasique, les écoulements de plusieurs fluides immiscibles se distinguent par l'existence de zones de contact entre les différentes entités qui composent le système : l'interface entre les deux fluides, notée  $wn$ , mais aussi entre le solide  $s$  et la phase  $w$  ainsi qu'avec la phase  $n$ . Comme précisée précédemment, à l'échelle microscopique, la prise en compte de ces effets doit se faire explicitement. Dans la suite, des écoulements d'un ou plusieurs fluides seront considérés dans un squelette poreux indéformable et immobile.

### a) Pression capillaires dans les milieux poreux

La géométrie des interfaces est physiquement pilotée par la tension interfaciale  $\sigma_{nw}$ , qui est une mesure macroscopique des forces d'attractions et de répulsions moléculaires s'exerçant entre les molécules de la phase  $w$  et celles de la phase  $n$ . Entre les deux phases liquides, cette différence de forces d'attraction/répulsion résulte, du point de vue de la mécanique des milieux continus, en une force supplémentaire, qui peut être modélisée sous la forme de la loi de Laplace (Gray & Miller, 2014; de Gennes, 1985). Cette loi s'exprime sous la forme d'une différence de pression (aussi appelée pression capillaire  $p_c$ ) en fonction de la tension de surface et de la courbure de l'interface, mesurée à partir de la normale sortante à la surface de contact  $\mathbf{n}_{nw}$  :

$$p_c = p_n - p_w = \sigma_{nw} \nabla \cdot \mathbf{n}_{nw} \quad \text{Eq II-12}$$



**Figure II-4: Mouillabilité des phases.**

En fonction des tensions de surfaces, la valeur de l'angle formé entre la surface solide et l'interface varie.

Les mêmes forces d'attraction/répulsion déterminent le degré d'affinité des fluides avec les surfaces solides (mouillabilité) et notamment la physique au point de rencontre de l'interface entre les deux fluides et la matrice solide, appelé point triple (Figure II-4). À l'équilibre, la somme des forces en ce point doit s'annuler ; il en résulte la relation analytique de Young (de Gennes, 1985; Anderson, 1986), qui relie la tension de surface entre la phase solide  $s$  et la phase  $n$  ( $\sigma_{sn}$ ); la tension de surface entre la phase  $w$  ( $\sigma_{sw}$ ) et enfin la tension interfaciale entre les deux fluides en présence ( $\sigma_{nw}$ ). L'angle  $\theta_s$  est appelé angle de contact statique (Figure II-4). C'est une fonction des tensions interfaciales entre les phases fluides et la matrice solide. Si cet angle est largement supérieur à  $90^\circ$ , la phase  $w$  est alors qua-

lifiée de mouillante tandis que la phase  $n$  sera non-mouillante (ce sera toujours le cas dans nos travaux sauf indications contraires), et inversement si l'angle est largement inférieur à  $90^\circ$  (Table II-1).

$$\sigma_{nw} \cos \theta_s = \sigma_{sn} - \sigma_{sw} \quad \text{Eq II-13}$$

Pour les écoulements multiphasiques en milieux poreux, la mouillabilité des phases est une propriété microscopique qui influe grandement sur les paramètres macroscopiques car elle est déterminante pour la répartition des fluides à l'intérieur des pores ainsi que de la localisation des interfaces (et donc des forces capillaires).

**Table II-1: Les différents états de mouillabilité**

$0^\circ < \theta_s < 75^\circ$	$75^\circ < \theta_s < 105^\circ$	$105^\circ < \theta_s < 180^\circ$
Non Mouillant	Neutre	Mouillant

Expérimentalement, il n'est pas rare de trouver que l'interface est stable non seulement pour l'angle de contact  $\theta_s$  exprimé par la relation Eq II-13, mais aussi pour toute valeur d'angle comprise dans un petit intervalle autour de  $\theta_s$ , borné par l'angle d'avancée  $\theta_a$  (plus grande valeur prise par l'angle de mouillage) et l'angle de recul  $\theta_r$  (plus grande valeur prise par l'angle de mouillage) (de Gennes, 1985). L'origine de cette observation est triple : la rugosité de la surface, qui n'est pas entièrement uniforme et présente des défauts microscopiques, la composition chimique du matériau, qui peut ne pas être homogène et légèrement contaminée par endroit, et enfin la présence ou non d'un film précurseur. La mouillabilité d'un milieu poreux peut donc présenter une variabilité à la fois spatiale, mais aussi en fonction des fluides imbibant initialement le milieu.

#### b) Équation de conservation des variables extensives

Pour l'évolution de la masse des espèces chimiques présentes à l'intérieur du VER, l'équation de bilan s'écrit en supposant que chaque phase est composée d'une seule espèce chimique (Gray & Miller, 2014):

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0 \quad \text{pour } \alpha \in \{w, n, s\} \quad \text{Eq II-14}$$

De même, la conservation de la quantité de mouvement pour chacune des espèces chimiques peut s'écrire:

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - \rho_\alpha \mathbf{g}_\alpha - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}}_\alpha = 0 \quad \text{pour } \alpha \in \{w, n, s\} \quad \text{Eq II-15}$$

Les propriétés physiques que doit respecter le système à l'interface  $ns$  varient grandement en fonction des auteurs et des applications. Dans la philosophie du TCAT par exemple, des équivalents aux équations Eq II-14 et Eq II-15 sont formulés sur les zones de contacts. Ces équations prennent en compte l'aspect plan de l'interface, et incluent, en plus des termes déjà présents dans les équations de conservation précédentes, des termes d'échange de masse et moment. L'introduction des forces capillaires se fait alors par des couplages de contraintes entre les espèces à l'interface. Un autre point de vue consiste aussi à prendre en compte les forces capillaires à travers un terme de force volumique (Jacqmin, 2000). Enfin, d'autres méthode de changement d'échelle considèrent l'interface comme une limite séparant deux sous-domaines : l'un occupé par la phase  $w$  et l'autre par la phase  $n$ . Dans ce cas, des con-

ditions aux limites sur la pression et la vitesse sont imposées (Whitaker, 1996). On adjoint alors les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{v}_w = \mathbf{v}_n \\ \underline{\mathbf{t}}_w \cdot \mathbf{n}_{wo} = \underline{\mathbf{t}}_n \cdot \mathbf{n}_{nw} + 2\sigma_{nw} \mathbf{j}_{n_{nw}} \end{cases} \quad \text{Eq II-16}$$

Nous verrons plus en détail le traitement mathématique des forces capillaires dans le développement de notre modèle numérique. Au contact du solide, sous l'hypothèse d'une matrice poreuse indéformable, les conditions sur les interfaces  $ws$  et  $ns$  sont généralement des conditions de non-glissement.

### c) Opération de changement d'échelle

En utilisant le formalisme du TCAT, le changement d'échelle s'effectue en appliquant des opérateurs de moyennisations sur les relations microscopiques établies précédemment. La moyennisation utilisée s'effectue avec l'opérateur  $\langle \cdot \rangle$  qui s'applique à une variable  $x$  évoluant à l'échelle microscopique selon la loi suivante :

$$x^\alpha = \langle x \rangle = \frac{\int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha x \, dV}{\int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha \, dV} \quad \text{Eq II-17}$$

La formulation des équations de conservation à l'échelle macroscopique s'obtient donc en appliquant l'opérateur  $\langle \cdot \rangle$  aux équations écrites à l'échelle microscopiques sur un VER (Gray & Miller, 2014). La moyennisation s'effectue sur les volumes, interfaces et points triples du système (Jakson, et al., 2009). La contribution de chaque entité géométrique (volume, surface, point) est donc intégrée implicitement dans le modèle macroscopique. Grace à la procédure de changement d'échelle le lien micro-macro est mathématiquement formulé, et les variables macroscopiques sont définies de façon précise à partir de leurs précurseurs microscopiques.

### ii) Loi d'Écoulement Monophasique à l'Échelle de Darcy

L'opérateur de moyennisation est appliqué sur le système de Navier-Stokes (Eq II-8-Eq II-11) dans l'approximation de vitesse faible. Son ajout dans l'inégalité de l'entropie, une fois le système restreint à nos hypothèses d'intérêt (SEI) permet de retrouver la relation force-flux suivante (Gray & Miller, 2006):

$$\underline{\mathbf{R}}^w \mathbf{v}^w = -\phi \rho^w \mathbf{g}^w - \phi \nabla p^w \quad \text{Eq II-18}$$

Où  $\underline{\mathbf{R}}^w$  est un tenseur symétrique défini positif résultant d'une caractérisation linéaire de fermeture entre la force et son flux conjugué dans l'inégalité d'entropie simplifiée. L'écriture de l'équation Eq II-18 résulte en plus de nombreuses approximations supplémentaires : pas de transfert de moment cinétique entre le fluide et la phase solide, écoulement isotherme, forces volumiques constantes, porosité constante etc... Analytiquement, il serait possible d'étendre la relation Eq II-18 à des approximations d'ordre supérieur, mais dans la pratique, cette loi est validée expérimentalement dans une large gamme d'écoulement. En posant que  $(\underline{\mathbf{R}}^w)^{-1} = \underline{\mathbf{K}}^w / (\phi^2 \eta^w)$  (Sciumè, et al., 2013) est une propriété du milieu appelée tenseur de perméabilité, la loi usuelle de Darcy est retrouvée :

$$\mathbf{v}^w = -\frac{\underline{\mathbf{K}}^w}{\phi \eta^w} (\nabla p^w - \rho^w \mathbf{g}^w) \quad \text{Eq II-19}$$

D'autres méthodes de moyennisation permettent d'obtenir un résultat similaire sous les mêmes hypothèses (Whitaker, 1986).

### iii) Modèles macroscopiques d'écoulement diphasique en milieux poreux

Les modèles d'écoulement résultant des processus de moyennisation (notamment le TCAT) utilisent peu d'hypothèses simplificatrices *a priori* sur le système étudié, et les relations obtenues sont initialement très générales (Jakson, et al., 2009; Miller & Gray, 2009; Miller & Grey, 2009). Dans le cas multiphasique, les contributions des points triples et des forces aux interfaces sont explicitement considé-

rées, augmentant drastiquement la complexité des systèmes d'équations. Ces modèles sont très lourds à implémenter et à utiliser numériquement (le modèle complet d'écoulement diphasique du TCAT implique 31 variables). Ils nécessitent des caractérisations expérimentales pour lier entre elles certaines variables et moyennent des quantités microscopiques (qu'on peut également traiter numériquement avec des modèles numériques à l'échelle du pore (Luévano-Rivas & Valdés-Parada, 2015), tandis que les propriétés des fluides et solides nécessaires à considérer sont parfois difficiles à mesurer. Une première simplification consiste alors à négliger la dynamique des points triples dans le système. En utilisant le TCAT, on obtient alors un système de 25 variables. Pour retrouver les principaux modèles utilisés dans la littérature, on suppose que les interfaces sont sans masse et qu'à l'échelle du pore les processus d'évolution de la configuration des phases sont quasi-statiques. Cela permet d'alléger de façon importante le système d'équations (la dynamique des interfaces n'est plus traitée explicitement) et de prendre en compte les forces capillaires à l'interface entre les deux fluides à travers la définition d'une pression capillaire moyenne dans le VER. Cette pression capillaire est représentative du saut de pression entre le fluide non-mouillant et le mouillant.

Tout d'abord, il convient d'introduire une mesure de l'occupation relative des pores par les fluides en présence pour les écoulements multiphasiques. Cette variable est le degré de saturation  $S$ . La saturation d'un fluide mesure le rapport entre le volume occupé par un fluide et le volume des pores du VER:

$$S^\alpha = \frac{V_\alpha}{V_{\text{PORES}}} \quad \text{pour } \alpha = w, n \quad \text{Eq II-20}$$

En l'absence de termes de réactions chimiques, les équations de conservation de la masse Eq II-14, moyennées sur le VER par l'opérateur précédent (Eq II-17) dans chacune des phases, s'écrivent alors (Gray & Miller, 2006):

$$\frac{\partial(S^\alpha \phi \rho^\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (S^\alpha \phi \mathbf{v}^\alpha) = 0 \quad \text{pour } \alpha = w, n \quad \text{Eq II-21}$$

L'équation Eq II-21 mesure l'évolution temporelle de la saturation de chaque phase en fonction de la porosité du milieu, ainsi que de la vitesse relative de chaque fluide en présence. On peut cependant réduire le nombre d'inconnues du système en notant que  $\sum_{\alpha \in \{w, n\}} S^\alpha = 1$ , ce qui permet de connaître la saturation de la phase  $n$  en modélisant uniquement l'évolution de la saturation de  $w$ .

En suivant une procédure similaire à celle décrite pour obtenir l'équation Eq II-21, on peut obtenir à l'aide de la TCAT une loi de Darcy généralisée qui relie la vitesse macroscopique du fluide  $\mathbf{v}^\alpha$  au gradient de pression  $p^\alpha$  ainsi qu'aux forces volumiques  $\mathbf{g}^\alpha$  qui s'y appliquent (Mckee, 2013):

$$\mathbf{v}^\alpha = - \frac{\underline{\mathbf{K}}^\alpha}{S^\alpha \phi \eta^\alpha} (\nabla p^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g}^\alpha) \quad \text{pour } \alpha = w, n \quad \text{Eq II-22}$$

Dans l'équation précédente Eq II-22,  $\eta^\alpha$  représente la viscosité dynamique macroscopique du fluide considéré et  $\underline{\mathbf{K}}^\alpha$  le tenseur de perméabilité effective. C'est à travers ce terme que les affinités d'une des phases avec le milieu considéré sont prises en compte : plus la perméabilité relative est élevée, plus le fluide s'écoule facilement au sein du milieu poreux. On peut ajouter que la perméabilité relative d'une phase est généralement écrite sous la forme suivante :

$$\underline{\mathbf{K}}^\alpha = k^\alpha \underline{\mathbf{K}} \quad \text{pour } \alpha = w, n \quad \text{Eq II-23}$$

Où  $k^\alpha$  est le facteur de perméabilité relative de la phase  $\alpha$  et  $\underline{\mathbf{K}}$  la perméabilité intrinsèque du milieu poreux. Ainsi, sous forme tensorielle, la perméabilité effective de la phase dans l'équation Eq II-22 présente les mêmes caractéristiques que le tenseur de perméabilités absolues en termes d'isotropie (ou non). Il est simplement corrigé du facteur  $k^\alpha$  pour prendre en compte la coexistence des phases au sein des pores. Ce coefficient est une inconnue du problème, et varie aussi bien en fonction des facteurs géométriques du milieu poreux (tel que la porosité) que des propriétés des fluides en question. Analytiquement, on le détermine généralement en introduisant une loi de perméabilité. Nous discuterons

plus en détail de cet aspect dans la partie dédiée. Suivant cette hypothèse, la vitesse de la phase obéit à une loi de Darcy pondérée par un coefficient  $k^\alpha/\eta^\alpha$  souvent appelé facteur de mobilité de la phase.

Plusieurs extensions des équations de Darcy généralisées permettent de complexifier la physique à l'échelle du pore sous-jacente dans l'équation Eq II-22. Une dérivation des équations macroscopiques par prise de moyenne fait ressortir des termes de couplages entre les vitesses des phases permettant ainsi de prendre en compte les transferts de quantités de mouvements qui ont lieu sur l'interface entre les fluides  $w$  et  $n$  (Whitaker, 1996; Pasquier, et al., 2017). La prise en compte de ce phénomène peut corriger la modélisation donnée par l'Eq II-22 dans les milieux très perméables, où les surfaces de contact entre les phases en présence sont importantes.

$$\mathbf{v}^\alpha = -\frac{\mathbf{K}^\alpha}{S^\alpha \phi \eta^\alpha} (\nabla p^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g}^\alpha) + \underline{\mathbf{K}}^{\alpha\kappa} \mathbf{v}^\kappa \quad \text{pour } \alpha, \kappa = w, n; \alpha \neq \kappa \quad \text{Eq II-24}$$

Le tenseur  $\underline{\mathbf{K}}^{\alpha\kappa}$  étant le tenseur de couplages visqueux. C'est une nouvelle inconnue du problème qu'il est nécessaire de déterminer avec de nouvelles équations de fermeture.

Notons qu'une autre extension possible des équations de Darcy généralisée permet d'ajouter la prise en compte d'effets inertiels dûs à une vitesse importante des fluides à l'intérieur du milieu poreux (Lasseux, et al., 2008). En effet, le système de Darcy généralisé requiert implicitement que les écoulements considérés soient lents. L'ajout d'un effet inertiel à l'équation Eq II-22 permet d'étendre la loi macroscopique d'écoulement multiphasique à une gamme plus étendue de vitesse, aboutissant ainsi à un équivalent multiphasique du modèle de Darcy-Forchheimer (Whitaker, 1996; Lasseux, et al., 2008) :

$$\mathbf{v}^\alpha = -\frac{\mathbf{K}^\alpha}{S^\alpha \phi \eta^\alpha} (\nabla p^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g}^\alpha) + \frac{\mathbf{K}^\kappa}{S^\kappa \phi \eta^\kappa} (\nabla p^\kappa - \rho^\kappa \mathbf{g}^\kappa) - \underline{\mathbf{F}}^{\alpha\kappa} \mathbf{v}^\kappa - \underline{\mathbf{F}}^{\alpha\alpha} \mathbf{v}^\alpha \quad \text{for } \alpha, \kappa = w, n; \alpha \neq \kappa \quad \text{Eq II-25}$$

Cette fois, les tenseurs supplémentaires introduits  $\underline{\mathbf{F}}^{\alpha\gamma}$  et  $\underline{\mathbf{F}}^{\alpha\alpha}$  sont des termes de corrections inertiels qui sont fonction des vitesses d'écoulement des fluides. Leur évaluation est généralement effectuée en résolvant numériquement un modèle périodique d'écoulement microscopique.

Macroscopiquement, la pression capillaire est généralement introduite dans le système d'équation comme correspondant simplement au saut de pression entre les phases fluides  $p^c = \langle p^n - p^w \rangle = \langle p^n \rangle - \langle p^w \rangle$  en utilisant l'opérateur de changement d'échelle sur l'Eq II-12. Cette vision présente un défaut majeur : elle suppose que l'opérateur de moyennisation de la pression capillaire est le même que celui appliqué aux équations de conservation de la masse. Or la pression capillaire est une discontinuité présente uniquement sur la surface entre les fluides, et ne peut être utilisée dans des opérateurs volumiques (Hassanizadeh & Gray, 1993). Dans la philosophie du TCAT, cette définition de  $p^c$  revient alors à négliger les contributions des interfaces  $wn$  à l'échelle du pore ainsi que dans le processus de changement d'échelle (Gray & Miller, 2011), et chercher une relation de la pression capillaire uniquement en fonction de la saturation de la phase mouillante  $p^c(S^w)$ .

À moins de négliger toutes forces capillaires à l'échelle macroscopique (ce qui correspond à l'équation de Buckley-Leverett (Pasquier, et al., 2017)), la relation entre la pression capillaire et la saturation doit être précisée pour fermer le système. Des exemples de relation communément utilisés seront discutés par la suite. Si on prend la pression capillaire et la pression de la phase non mouillante comme variables primaires, il est possible de traiter le système formé des équations Eq II-21 et Eq II-22 en injectant les expressions de la vitesse des phases dans l'équation de continuité (Eq II-21). Pour un écoulement diphasique constitué des phases  $w$  et  $n$ , l'Eq II-21 devient :

$$\begin{cases} \left( \phi \frac{\partial}{\partial t} (S^w) - \nabla \cdot \left( S^w \phi \frac{k^w}{\eta^w} \underline{\mathbf{K}} (\nabla p^n - \nabla p^c(S^w) - \rho^w \mathbf{g}^w) \right) \right) = 0 \\ \left( -\phi \frac{\partial}{\partial t} (S^w) - \nabla \cdot \left( (1 - S^w) \phi \frac{k^n}{\eta^n} \underline{\mathbf{K}} (\nabla p^n - \rho^n \mathbf{g}^n) \right) \right) = 0 \end{cases} \quad \text{Eq II-26}$$

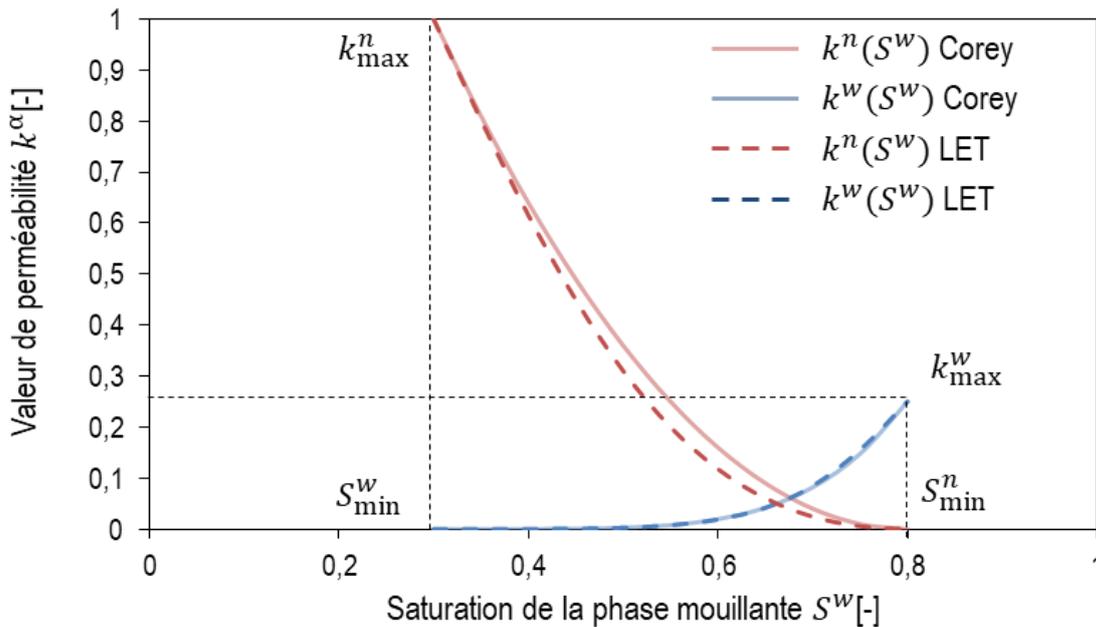
On trouve un système fermé de deux inconnues  $p^n$  et  $S^w$  avec deux équations pour les déterminer, à condition que la loi de perméabilité des fluides soit connue, tout comme la loi de la pression capillaire.

iv) Loi de Perméabilité Relative

Les perméabilités relatives des phases dans le système macroscopique Eq II-26 jouent un rôle important sur la forme de la solution, permettent de caractériser la perméabilité effective du milieu poreux pour un fluide donné compte tenu de la présence de l'autre fluide.

La perméabilité relative d'une phase est une fonction monotone de sa saturation (Brooks & Corey, 1964) (plus un fluide est présent dans les pores, plus facile sera son écoulement donc plus élevée sera sa perméabilité relative). Plusieurs modèles de complexités variables existent pour caractériser la loi de perméabilité d'un milieu poreux. Un des modèles très utilisé pour sa facilité d'emploi est le modèle empirique de Brooks-Corey. Ce modèle fait intervenir la saturation résiduelle de chaque fluide présent dans le milieu poreux  $S_{\min}^\alpha$  qui est la saturation minimale des phases. C'est la plus faible fraction volumique que peuvent atteindre les fluides à l'intérieur des pores. Lorsque la valeur de saturation tend vers la saturation résiduelle, la perméabilité tend vers 0. Le facteur de perméabilité relative  $k^\alpha$  d'un fluide s'écrit en fonction de la perméabilité maximale  $k_{\max}^\alpha$  (Brooks & Corey, 1964; Mckee, 2013):

$$\begin{cases} k^w = k_{\max}^w \left( \frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w - S_{\min}^n} \right)^{a_w} \\ k^n = k_{\max}^n \left( 1 - \frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w - S_{\min}^n} \right)^{a_n} \end{cases} \quad \text{Eq II-27}$$



**Figure II-5: Variation de la perméabilité relative avec la saturation de la phase mouillante w.**  
 Paramètres utilisés :  $k_{\max}^w = 0.25$ ;  $k_{\max}^n = 1$ ;  $S_{\min}^w = 0.3$ ;  $S_{\min}^n = 0.2$ . Pour le modèle de Corey,  $a_w = 5$ ;  $a_n = 2$ . Pour le modèle LET,  $L_w = E_w = 4$ ;  $T_w = 1$ ;  $L_n = E_n = 2$ ;  $T_n = 1$ . On voit ici que le modèle LET peut approximer le modèle de Corey grâce à ses nombreux paramètres. Néanmoins, sa calibration est non triviale.

Les exposants  $a_w$  et  $a_n$  sont des paramètres de régression souvent de l'ordre de 3 ou 4 (Brooks & Corey, 1964). Ce modèle a ensuite été étendu ou corrigé, souvent de façon empirique (Sigmund & McCaffery, 1977; Chierici, 1984), afin de pouvoir mieux représenter les données expérimentales pour des gammes de saturation plus étendues. On peut citer à titre d'exemple le modèle LET (Lomeland, et al., 2005; Mckee, 2013) :

$$\left\{ \begin{array}{l} k^w = k_{\max}^w \frac{\left(\frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{L_w}}{\left(\frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{L_w} + E_w \left(1 - \frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{T_w}} \\ k^n = k_{\max}^n \frac{\left(1 - \frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{L_n}}{\left(1 - \frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{L_n} + E_n \left(\frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{T_n}} \end{array} \right. \quad \text{Eq II-28}$$

Les coefficients  $L_w$ ,  $E_w$  et  $T_w$  contrôlant respectivement les pentes du début, milieu et fin de la courbe de perméabilité en fonction de la saturation pour chaque fluide. Ils sont en général calculés par des algorithmes d'optimisation, leur signification physique n'étant pas déterminée. Un exemple de relation perméabilité-saturation est montré Figure II-5.

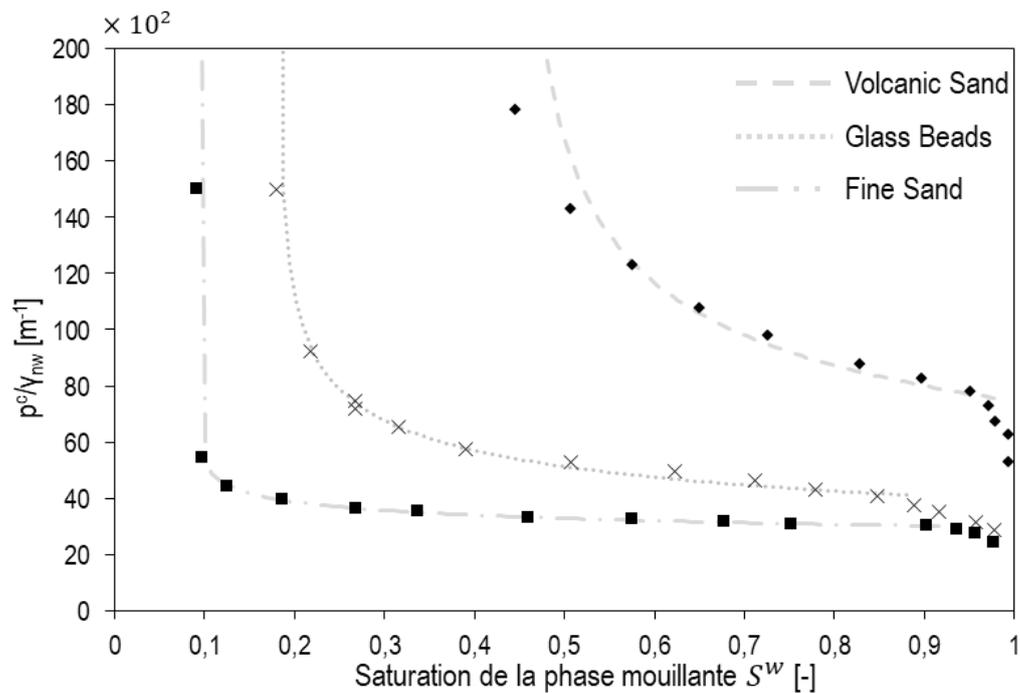
D'après les exemples précédents, il est visible que malgré le rôle déterminant que jouent les coefficients de perméabilités relatives de chaque fluide, ces paramètres sont des propriétés intrinsèques du milieu poreux considéré. Les lois analytiques développées reposent en grande partie sur les travaux analytiques de Corey et s'adaptent *a posteriori* au cas considéré. De façon alternative, l'émergence des méthodes de changement d'échelle a contribué à rechercher des moyens de déterminer le tenseur de perméabilité en fonction de la microstructure du milieu. En effet, sur des milieux poreux résultant de la répétition d'un même motif (milieux formés d'empilement de grains identiques par exemple), des conditions de symétrie inhérentes à la géométrie des pores à l'échelle microscopique permettent de trouver des relations satisfaites pour chacune des perméabilités relatives (Whitaker, 1996; Whitaker, 1996; Lasseux, et al., 1996; Lasseux, et al., 2008; Luévano-Rivas & Valdés-Parada, 2015). La moyenne de variables calculée sur un VER permet ensuite d'obtenir des valeurs numériques de perméabilité.

#### v) Variation de la Pression Capillaire

La dernière relation à caractériser afin de fermer le système Eq II-26 est la dépendance de la pression capillaire avec la saturation. Tout comme les modèles de perméabilités relatives, les lois utilisées reposent généralement sur des arguments empiriques, et sont adaptées aux cas étudiés. Le modèle le plus utilisé reste le modèle de Brooks et Corey, bien que d'autres modèles plus complexes existent (Brooks & Corey, 1964; Lomeland & Ebeltof, 2008). En première approximation, cette loi s'énonce :

$$p^c = p^d \left(\frac{S^w - S_{\min}^w}{1 - S_{\min}^w}\right)^{-1/B} \quad \text{Eq II-29}$$

Où  $p^d$  est la pression de déplacement et  $B$  une constante représentative de la disposition et taille des pores. La dépendance de la pression capillaire avec la saturation de la phase mouillante est tracée pour plusieurs milieux sur la Figure II-6. La loi de Corey permet de modéliser qualitativement les données expérimentales associées aux différents milieux.



**Figure II-6: Comparaison du modèle de Corey avec des mesures expérimentales (Brooks & Corey, 1964).**

Les données expérimentales, représentées par des symboles, proviennent de mesures effectuées pour des écoulements eau/vapeur. Les lignes résultent d'une modélisation par la loi de Corey. Volcanic sand  $p^d = 75 \text{ Pa}$ ,  $B = 2,9$ ; Glass beads  $p^d = 30 \text{ Pa}$ ,  $B = 8,1$ ; Fine sand  $p^d = 41 \text{ Pa}$ ,  $B = 3,5$ .

À cause des phénomènes d'hystérésis de l'angle de contact (qui influent grandement sur la pression capillaire), différentes courbes de pressions capillaires sont obtenus expérimentalement lors de l'imbibition et le drainage. Afin de prendre en compte ces phénomènes analytiquement, il est nécessaire d'utiliser plusieurs fois le modèle de Corey avec des paramètres de corrélation différents. La relation entre pression capillaire et saturation est alors comprise entre les deux courbes de drainage et d'imbibition obtenues (qui correspondent aux valeurs extrêmes de l'angle de contact qui varie entre l'angle d'avancée et de recul).

## 5. Synthèse sur les écoulements multiphasiques en milieux poreux

Dans cette section, la caractérisation des écoulements multiphasiques en milieux poreux a été détaillée. Tout d'abord les niveaux de description de cette classe de matériaux ont été revus et explicités. La caractérisation géométrique des milieux poreux a permis de donner une définition du Volume Élémentaire Représentatif, essentielle pour distinguer chacune des échelles à laquelle il est possible de décrire les écoulements. Ensuite, l'application directe de la mécanique des milieux continus à l'échelle microscopique a permis de trouver les équations de continuité et de conservation de la quantité de mouvement que devait respecter chaque fluide. En appliquant un opérateur de moyennisation, ces équations microscopiques peuvent être formulées à l'échelle de Darcy, où plusieurs modèles d'écoulement coexistent du fait des hypothèses simplificatrices effectuées sur le système. Enfin, l'étude des relations saturation-perméabilité relative a permis de faire ressortir quelques modèles existants dans la littérature, tout comme pour la pression capillaire au sein du milieu. D'un point de vue pratique, les méthodes de caractérisation des écoulements multiphasiques qui nécessitent le moins d'hypothèses sur le système d'étude résultent d'opérations de changement d'échelle (Whitaker, 1996; Gray & Miller, 2014). Cependant, leur résolution complète nécessite la résolution d'un modèle macroscopique couplé à un modèle microscopique. Une bonne connaissance de la microstructure est alors essentielle pour valider la pertinence de ces approches.

Jusqu'à présent, peu d'hypothèses ont été formulées sur la nature des fluides en question, si ce n'était leur incompressibilité supposée. Dans la prochaine partie, nous proposons d'étudier la rhéologie des fluides non-newtoniens que nous souhaitons introduire dans nos travaux.

## C. Rhéologie des fluides non-newtoniens et focus sur la viscoélasticité

La rhéologie (formé du grec « *rheo* » : couler et « *logo* » : l'étude), la science qui étudie la déformation des matériaux, est une théorie relativement jeune (1920 (Oswald, 2005)). Motivée par une généralisation de la mécanique des milieux continus à des catégories plus larges de comportement, elle fait le lien entre la loi de déformation du milieu considéré et les contraintes résultantes. En mécanique des fluides notamment, la rhéologie permet de quantifier l'effet de déformations d'entités microscopiques diluées sur les lois d'écoulement par rapport à un fluide usuel. Parmi les fluides dotés d'une microstructure, les fluides viscoélastiques sont des matériaux qui exhibent à la fois des comportements fluides et solides. Sur des temps relativement courts, ils présentent une élasticité ainsi qu'une résistance aux sollicitations extérieures du fait de la déformation de leurs composants internes, qui emmagasinent ainsi l'énergie transmise à la manière d'un solide élastique. Pourtant, observé sur une échelle de temps plus longue, un fluide viscoélastique soumis à un taux de cisaillement finira par s'écouler à la manière d'un fluide classique. Cette différence de comportement en fonction de l'échelle temporelle considérée inspirera un des pères fondateurs de la rhéologie, Markus Reiner, à baptiser le rapport entre les temps caractéristiques de réponse d'un fluide viscoélastique et de l'échelle d'observation de l'expérience nombre de Deborah, d'après la prophétesse du livre des Juges (ancien testament) qui aurait énoncé : « The mountains flow before the Lord » (Reiner, 1964). Cette dénomination n'est pas anodine : elle montre deux caractéristiques essentielles des fluides viscoélastiques. Tout d'abord, les montagnes « coulent » comme tous les matériaux. Mais elles ne coulent pas à l'échelle de l'homme : son espérance de vie est trop courte par rapport au temps géologique de formation et d'érosion de la montagne ; contrairement au temps d'observation éternel du Dieu de la prophétesse pour lequel les montagnes semblent alors « couler » tel un fluide. Reiner, qui aura essayé de combiner les deux points de vue de la mécanique des milieux continus (solides et fluides) avec la naissance de la rhéologie, explique que la seule différence entre ces matériaux vient de ce nombre adimensionnel : plus le nombre de Deborah est grand, plus le matériau est « solide », impliquant de fait que le temps d'observation nécessaire pour l'introduction d'une modélisation fluide sera élevé. Inversement, un nombre de Deborah faible indique un comportement « fluide » plus marqué, et que le caractère élastique du matériau survient sur des échelles temporelles très courtes.

Dans cette section, nous proposons tout d'abord de revoir l'hypothèse sous-jacente qui régit la plus grande partie des fluides visqueux usuels, qu'on qualifie alors de Newtonien. Dans un second temps, les modifications de l'approximation Newtonienne entraînées par la prise en compte du caractère viscoélastique de certains fluides seront présentées. Dans ce chapitre par souci de simplicité, ces développements considéreront uniquement des écoulements monophasiques dans un milieu poreux indéformable.

### 1. Fluides Newtoniens

L'équation de conservation de la quantité de mouvement Eq II-11 relie la variation de la vitesse du fluide  $\mathbf{v}$  aux forces volumiques qui s'y appliquent,  $\mathbf{g}$ , ainsi qu'au tenseur des contraintes internes  $\underline{\mathbf{t}}$ . En mécanique des fluides, il est d'usage de séparer le tenseur des contraintes en une partie isotrope et une partie déviatrice :

$$\underline{\mathbf{t}} = -p\underline{\mathbf{I}} + \underline{\boldsymbol{\tau}} \quad \text{Eq II-30}$$

Dans Eq II-30, le terme  $p$  est la pression hydrostatique du fluide et  $\underline{\boldsymbol{\tau}}$  est généralement appelé tenseur des extra-contraintes. Ce dernier terme regroupe toutes les contributions visqueuses qui interviennent lors de l'écoulement, et est égal au tenseur nul à l'équilibre (dans le cas statique). L'approximation Newtonienne consiste à supposer que le tenseur des extra-contraintes est une fonction du taux de déformation du fluide  $\dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{v})$ , et d'en écrire l'approximation de Taylor au premier ordre d'après le cas statique (Gray & Miller, 2014; Spagnolie, 2015; Cho, 2016) :

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}(\dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}) = \underbrace{\underline{\boldsymbol{\tau}}(0)}_{\mathbf{0}} + \frac{\partial \underline{\boldsymbol{\tau}}}{\partial \dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}} + \underline{\boldsymbol{O}}(\dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}^2) \quad \text{Eq II-31}$$

Sous l'hypothèse d'isotropie du fluide et de symétrie du taux de déformation, cette relation peut se simplifier sous la forme :

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}(\dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}) = \eta \left( \dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}} - \frac{2}{3} \nabla \cdot (\mathbf{v}) \underline{\mathbf{I}} \right) + \eta' \nabla \cdot (\mathbf{v}) \underline{\mathbf{I}} \quad \text{Eq II-32}$$

Où  $\eta$  et  $\eta'$  sont initialement des inconnues résultant du développement de Taylor. Cependant, afin de fermer le système, ces termes sont transformés en caractéristiques intrinsèques des fluides étudiés, et correspondent respectivement à sa viscosité et sa viscosité de dilatation (aussi appelé seconde viscosité). Sous l'hypothèse d'incompressibilité des fluides  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ , le système se simplifie encore, et Eq II-32 devient :

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}(\dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}}) = \eta \dot{\underline{\boldsymbol{\Gamma}}} \quad \text{Eq II-33}$$

Cette relation linéaire est illustrée sur la Figure II-7. Introduit dans Eq II-30, puis de nouveau injecté dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement Eq II-11 et couplé à l'équation sur la conservation de la masse Eq II-8, le système de Navier-Stokes pour un fluide visqueux incompressible est retrouvé :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \\ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \eta \nabla \cdot (\nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{v}) \end{cases} \quad \text{Eq II-34}$$

Le système de Navier-Stokes est le modèle théorique pilotant les écoulements de fluides visqueux. Si le fluide étudié ne présente pas de caractère rhéologique particulier, il permet de prédire correctement les vitesses des écoulements et la pression des fluides d'après leur masse volumique et leur viscosité.

## 2. Fluides Non-Newtoniens/Viscoélasticité

D'après l'Eq II-31, l'approximation Newtonienne peut être vue comme une approximation du premier ordre d'une réelle loi constitutive qui relierait les contraintes du fluide à son taux de cisaillement. De plus, théoriquement, elle ne serait valide que pour une gamme réduite de gradients de vitesse pour respecter les hypothèses d'un développement de Taylor. Néanmoins, dans la pratique, cette approximation modélise correctement le comportement des fluides pour de nombreuses applications scientifiques et industrielles, même à vitesse élevée.

Les configurations pour lesquelles cette approximation rencontre une réelle limitation concernent les fluides pour lesquels le tenseur de contrainte ne dépend pas uniquement du taux de cisaillement. De nombreux fluides (mousses, solutions de polymère...) transportent avec eux des entités diluées et déformables qui interagissent avec l'écoulement. Le temps de relaxation de ces constituants internes est très élevé (jusqu'à l'ordre de la seconde) par rapport au temps de relaxation moléculaire ( $10^{-10}$  s (Spagnolie, 2015)) qui compose normalement la particule fluide, et permet le développement des équations de conservation. Autrement dit, pour ces fluides qualifiés de « complexes », l'existence d'une structure intermédiaire entre l'échelle moléculaire et l'échelle du *continuum* nécessite l'extension de la loi de Newton pour pouvoir être modélisée par une approche continue et correspondre aux observations expérimentales sur le comportement de tels fluides.

i) Fluides Newtoniens Généralisés

La première approche pour généraliser l'équation (Eq II-33) à une catégorie plus large de fluides consiste à corriger phénoménologiquement l'approximation Newtonienne en supposant une dépendance entre la viscosité du fluide et le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ , donné par les termes extra-diagonaux du tenseur taux de déformation  $\underline{\dot{\Gamma}}$ . Ainsi, la forme du système de Navier Stokes (Eq II-34) est préservée et seul le paramètre de viscosité est modifié. L'équation Eq II-33 devient alors :

$$\underline{\tau}(\dot{\gamma}) = \eta(\dot{\gamma})\underline{\dot{\Gamma}} \quad \text{Eq II-35}$$

En fonction des mesures rhéologiques préalables de la viscosité des fluides non-Newtoniens, plusieurs cas sont possibles (Oswald, 2005):

- Si  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} < 0$ , le fluide est rhéofluidifiant : sa viscosité diminue avec le taux de cisaillement,
- Si  $\frac{\partial \eta}{\partial \dot{\gamma}} > 0$ , le fluide est rhéoépaississant : sa viscosité augmente avec le taux de cisaillement (Figure II-17).

La viscosité de ces fluides peut être modélisée par la loi de Cross :

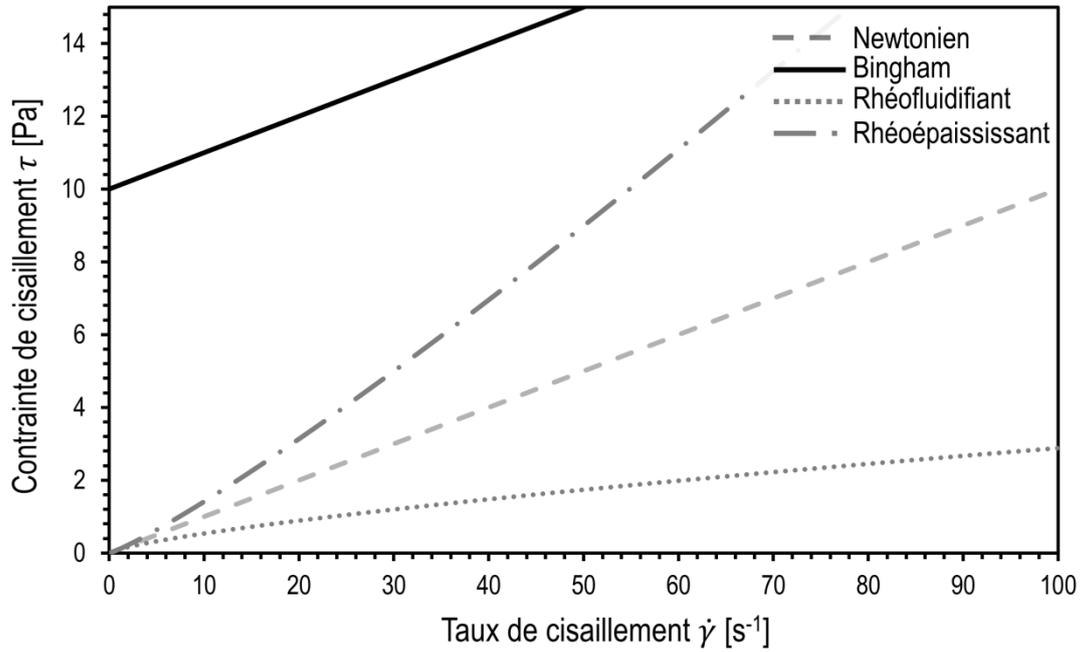
$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \frac{\eta_0 - \eta_{\infty}}{1 + (q\dot{\gamma})^R} \quad \text{Eq II-36}$$

Ce modèle décrit le passage continu d'une viscosité à faible taux de cisaillement  $\eta_0$  à une viscosité à fort taux de cisaillement  $\eta_{\infty}$ . Le paramètre  $q$  est appelé consistance du fluide et se mesure en seconde. L'exposant  $R$  est une mesure des propriétés rhéofluidifiantes ( $R < 0$ ) ou rhéoépaississantes ( $R > 0$ ) du fluide considéré. Ces deux derniers paramètres sont ajustés en fonction de données expérimentales. Notons que pour  $R=0$ , l'hypothèse Newtonienne est retrouvée et la viscosité devient alors la moyenne de  $\eta_0$  et  $\eta_{\infty}$ . Pour simplifier la loi précédente, on peut généralement faire l'hypothèse que  $\eta_0 \gg \eta_{\infty}$  (ou inversement dans le cadre de fluide rhéoépaississant). La loi de Cross peut alors se mettre sous la forme d'une loi puissance à partir d'un certain taux de cisaillement ( $\dot{\gamma}^R \gg 1$ ), aussi appelée loi d'Oswald-de Waele (Oswald, 2005) avec une pseudo-viscosité  $\tilde{\eta}_0$  mesurée en  $\text{Pa.s}^{1-R}$  (Figure II-7):

$$\eta(\dot{\gamma}) = (\eta_0 q^{-R}) \dot{\gamma}^{-R} = \tilde{\eta}_0 \dot{\gamma}^{-R} \quad \text{Eq II-37}$$

Notons que certains fluides ont une viscosité tellement élevée à faible taux de cisaillement ( $\eta_0 \gg 1$ ) que leur écoulement n'est pas visible sur les échelles de temps usuelles de la mécanique des fluides. En revanche, ils se comportent comme des fluides visqueux une fois que la contrainte de cisaillement appliquée est supérieure à une valeur critique  $\tau_c$ . Cette catégorie de matériaux est appelée fluide à seuil (ou fluide pseudo-plastique ou encore de Bingham) et peut être modélisée d'après la loi suivante (Figure II-7):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\gamma} = 0 \text{ si } \tau < \tau_c \\ \dot{\gamma} = \frac{\tau - \tau_c}{\eta_{\infty}} \text{ si } \tau > \tau_c \end{array} \right. \quad \text{Eq II-38}$$



**Figure II-7: Lois constitutives reliant contraintes et taux de cisaillement pour différentes classes de fluides.**

La ligne en tiret gris représente un fluide Newtonien de viscosité  $\eta = 0,1$  Pa.s et sert de comparaison par rapport aux fluides non-Newtoniens. La ligne continue noire représente la loi constitutive d'un fluide de Bingham de contrainte seuil  $\tau_c = 10$  Pa. La loi rhéofluidifiante (pointillés gris) et la loi rhéoépaississante (alternance tiret et pointillés) sont modélisées par des lois d'Oswald-de Waehle de paramètre  $k = 1$  et de puissance  $R = -0,15$  et  $R = 0,27$  respectivement.

Il est possible de réécrire le système Eq II-38 sous une forme plus proche de Eq II-35 afin de déterminer une viscosité équivalente. On trouve alors le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 = \infty \\ \eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \tau_c \dot{\gamma}^{-1} \text{ si } \tau > \tau_c \end{array} \right. \quad \text{Eq II-39}$$

D'après Eq II-39, un fluide de Bingham est donc une réécriture du modèle de Cross avec  $\eta_0 \rightarrow \infty$  lorsque le taux de cisaillement tend vers 0, un exposant  $R=1$ , une consistance  $q = \tau_c^{-1} - \dot{\gamma}^{-1}$ , et une viscosité finale à fort taux de cisaillement  $\eta_\infty$ , correspondant aussi à la viscosité Newtonienne finale une fois le taux de cisaillement suffisamment grand (le second terme de viscosité disparaissant avec l'augmentation du taux de cisaillement, comme montré Figure II-8). Cependant, d'un point de vue physique, rien ne les distingue d'un fluide rhéofluidifiant sur de très courts intervalles de taux de cisaillement (Oswald, 2005).

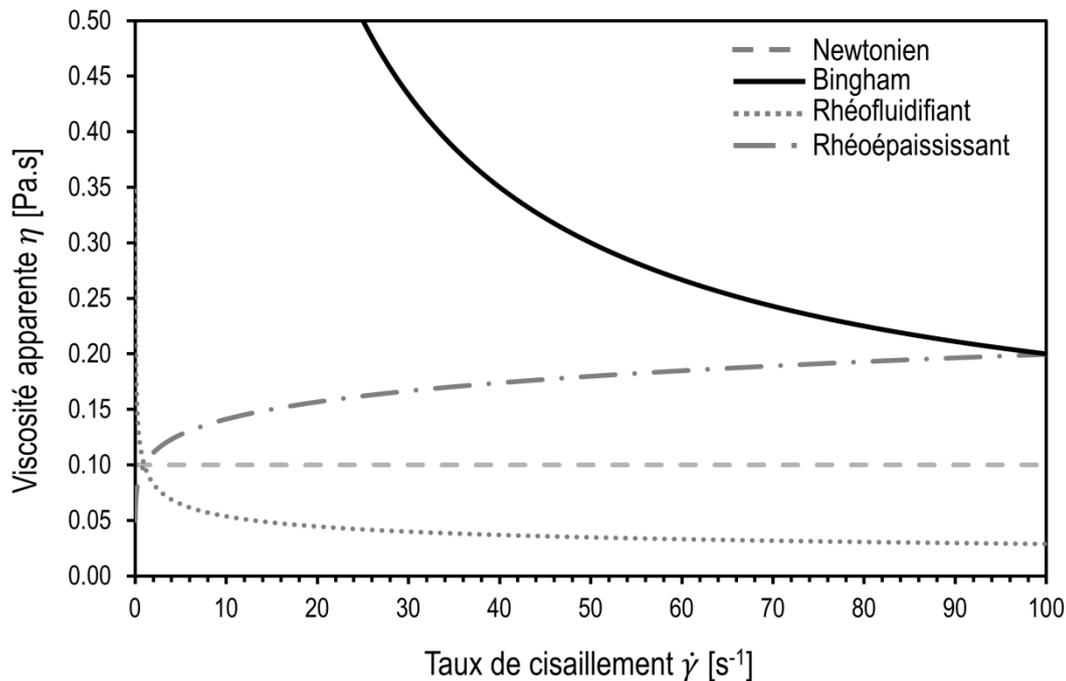
Il est également envisageable de considérer que certains fluides à seuil suivent un comportement non-Newtonien une fois la contrainte critique dépassée. Des modèles plus généraux comme le modèle de Herschel-Bucklet permettent de rendre compte de ce comportement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\gamma} = 0 \text{ si } \tau < \tau_c \\ \dot{\gamma} = \sqrt[1-R]{\frac{\tau - \tau_c}{\tilde{\eta}_\infty}} \text{ si } \tau > \tau_c \end{array} \right. \quad \text{Eq II-40}$$

Ramenée encore une fois sous la forme d'une viscosité apparente proche de Eq II-35, on peut écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) = \infty \\ \eta(\dot{\gamma}) = \tilde{\eta}_\infty \dot{\gamma}^{-R} + \tau_c \dot{\gamma}^{-1} \text{ si } \tau > \tau_c \end{array} \right. \quad \text{Eq II-41}$$

On retrouve alors la combinaison d'un fluide de Bingham avec un fluide suivant la loi d'Oswald-de Waehle, qui montre un caractère rhéofluidifiant ou rhéoépaississant de la solution selon la valeur de  $R$  une fois la valeur de contrainte critique dépassée.



**Figure II-8: Viscosité apparente des fluides non-Newtoniens en fonction du taux de cisaillement.**

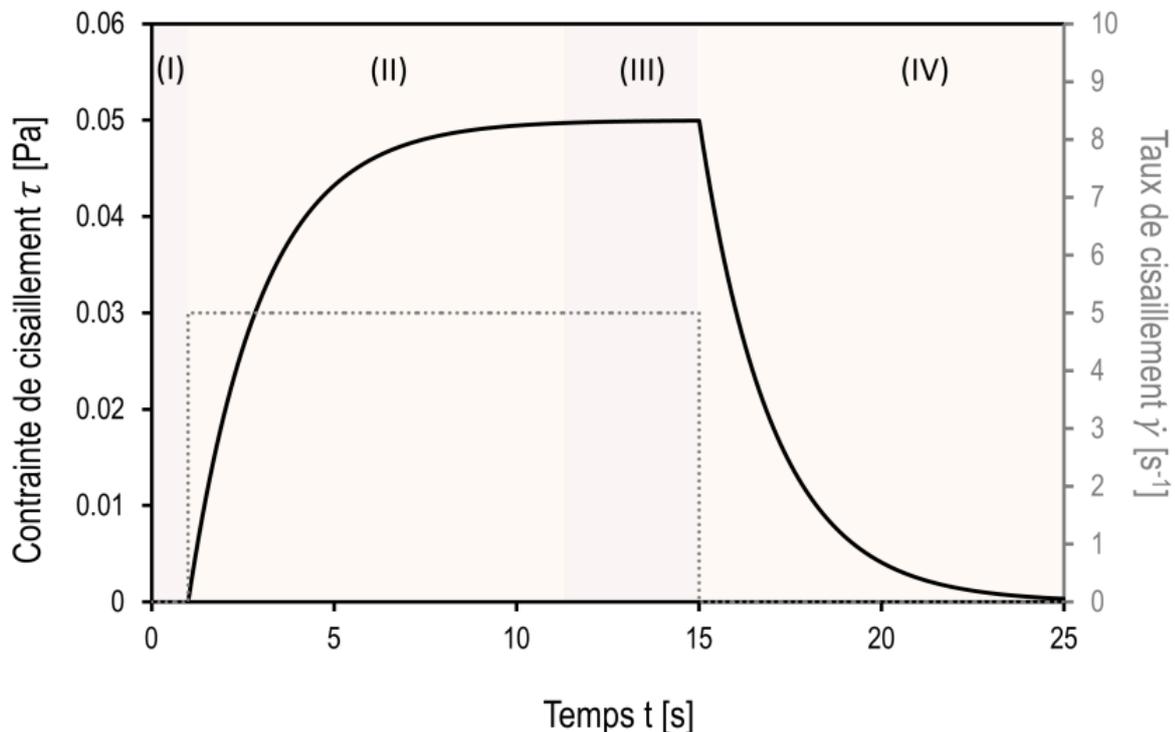
Les fluides considérés sont identiques à ceux de la Figure II-7. On voit alors que les fluides de Bingham ont un comportement similaire au fluide rhéofluidifiant, mais sur des gammes de cisaillement plus restreintes. A fort taux de cisaillement, la viscosité des fluides de Bingham est identique à celle des fluides Newtoniens.

Les modèles précédents permettent une bonne modélisation des fluides non-Newtoniens dans de nombreuses situations. Cependant, les propriétés rhéologiques étant essentiellement fonction du taux de cisaillement, ces lois sont valides principalement pour des régimes permanents d'écoulement. Dans des situations plus complexes tels que des écoulements transitoires ou des écoulements à taux de cisaillement variables, ces modèles montrent une certaine contradiction : ils sont censés décrire les effets de déformation de composants internes du fluide considéré sans pour autant comporter de paramètres temporels rendant compte de l'état de ces constituants. Par exemple, le caractère rhéofluidifiant ou rhéoépaississant d'une solution est intimement lié aux déformations de sa microstructure sous cisaillement (Oswald, 2005) (alignement de particules dans le sens de l'écoulement, stratification des composants d'une suspension...). Pour autant, quel que soit le modèle introduit, les effets rhéologiques ne dépendent que de la valeur courante du tenseur des contraintes, sous entendant une réorganisation quasiment instantanée des composants du fluide. Dans la pratique, on distingue plutôt une transition (souvent non-linéaire) d'un état de contrainte à un autre (Spagnolie, 2015). Des effets de mémoire sont de plus considérés pour prendre en compte les déformations passées de la microstructure dans le comportement rhéologique présent. Ce caractère évolutif est pris en compte par la viscoélasticité d'un fluide, que nous allons détailler dans la prochaine partie.

## ii) Fluides Viscoélastiques – Modèle d'Oldroyd-B

Comme introduit précédemment, la principale propriété de cette catégorie de modèle rhéologique est la prise en compte du caractère dynamique de la déformation des composants internes d'un fluide dans sa réponse à une contrainte extérieure (ou à un taux de cisaillement imposé). On retrouve dans ce choix de description les considérations de Reiner sur le caractère à la fois solide et liquide des fluides étudiés (illustrées sur la Figure II-9). Si le fluide est au repos suffisamment longtemps, toutes ces con-

traintes internes se dissipent, et le fluide est à l'équilibre (I). Soumis à un taux de cisaillement imposé (II), ces matériaux suivent des lois constitutives de solides élastiques sur des temps de réponse courts, correspondant au temps de déformation de la microstructure du fluide viscoélastique. Si la contrainte est appliquée sur un temps prolongé (III), on observe alors une mise en écoulement du fluide. Les contraintes se stabilisent (la microstructure ne se déforme plus). Contrairement au fluide Newtonien, l'arrêt de l'application d'une déformation extérieure (IV) ne stoppe pas instantanément l'écoulement d'un fluide viscoélastique. Des contraintes résiduelles internes décroissent avec une dynamique inverse à l'étape (II), et perdurent jusqu'à ce que l'énergie élastique emmagasinée par les composants du fluide se dissipe entièrement, et que l'organisation de la microstructure des constituants reprenne sa configuration initiale.



**Figure II-9: Mise en écoulement d'un fluide viscoélastique (trait plein noir) sous l'action d'un incrément de taux de cisaillement (trait pointillé gris).**

Contrairement aux fluides Newtoniens généralisés, la réponse des fluides viscoélastiques est variable dans le temps. Modélisation par un modèle de Maxwell :  $G_p = 0,005$  Pa et  $\eta_p = 0,01$  Pa.s.

L'étude rhéologique des fluides viscoélastiques peut se faire de plusieurs façons. Historiquement, les premiers modèles viscoélastiques (Maxwell, Oldroyd...) privilégiaient une approche continue pour caractériser les contraintes introduites par la prise en compte de la viscoélasticité sur l'écoulement des fluides. La plupart des modèles rhéologiques suivent cette philosophie. On parle alors, analogiquement aux milieux poreux de modèles viscoélastiques macroscopiques. Plus récemment, une approche relevant davantage de la physique statistique a également été introduite (Spagnolie, 2015).

Pour les fluides viscoélastiques, la réponse des composants internes du fluide à une contrainte ou un taux de déformation imposé joue un rôle central. Du point de vue de la modélisation, il peut alors être préférable de caractériser de façon précise les déformations que subissent les espèces diluées dans le fluide viscoélastique si leur forme géométrique est connue, et ensuite d'étudier leur répercussion sur l'écoulement. Cette méthode est souvent utilisée pour décrire les configurations des chaînes de polymères hydrosolubles diluées dans un solvant (Cho, 2016). Les modèles viscoélastiques microscopiques permettent d'établir une description multi-échelle et caractérisent les effets viscoélastiques à partir des déformations des constituants de la solution (Hulsen, et al., 1997; Bris & Lelièvre, 2009). Ils ont l'avantage de permettre le calcul précis des configurations microscopiques du fluide considéré

(au moins en terme de moyenne) tout en modélisant les contraintes viscoélastiques associées à l'écoulement.

Numériquement, on observe également un gain de stabilité de ce genre d'approche, au détriment d'un temps de calcul plus élevé (Bris & Lelièvre, 2009). Dans le meilleur des cas, ces méthodes décrivent les mêmes phénomènes avec des outils mathématiques différents (tels que les théories cinétiques et probabilistes) par rapport à la mécanique des milieux continus. Dans cette situation, la modélisation multi-échelle permet une justification physique du modèle rhéologique employé ainsi que la détermination précise de l'origine des contraintes internes des fluides à l'échelle macroscopique. Ainsi, cette description montre que le caractère élastique des fluides viscoélastique ne provient pas de la déformation des composants internes (élasticité mécanique), mais plutôt des nombreuses conformations que peuvent adopter la microstructure du matériau (élasticité entropique). Ce niveau de description permet également de donner des limites à l'emploi de certaines descriptions macroscopiques (comme le modèle d'Oldroyd-B, qui ne considère pas de limite à la contrainte viscoélastique). Dans le cas général cependant, tous les modèles viscoélastiques macroscopiques ne correspondent pas toujours à une moyennisation d'une description multi-échelle. Dans la suite de nos travaux, nous considérerons essentiellement des modèles rhéologiques continus.

L'écriture d'une équation constitutive dynamique nécessaire pour décrire des contraintes viscoélastiques évolutives fait intervenir des dérivées temporelles tensorielles qui doivent être indépendantes du référentiel choisi pour décrire le système. Plusieurs objets mathématiques répondent à ce critère ; néanmoins, la plupart des modèles rhéologiques privilégient la dérivée covariante supérieure (aussi appelée dérivée d'Oldroyd) d'un tenseur  $\underline{\mathbf{T}}$  transporté par un champ de vitesse vectoriel  $\mathbf{v}$  (Spagnolie, 2015; Oswald, 2005):

$$\frac{d\underline{\mathbf{T}}}{dt} = \underline{\underline{\mathbf{T}}} = \frac{\partial \underline{\mathbf{T}}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \underline{\mathbf{T}} - (\nabla \mathbf{v})^t : \underline{\mathbf{T}} - \underline{\mathbf{T}} : (\nabla \mathbf{v}) \quad \text{Eq II-42}$$

En utilisant cette définition, le modèle rhéologique le plus simple de viscoélasticité consiste à supposer l'action d'un ressort de rigidité  $G_P$  en série avec un amortisseur de viscosité  $\eta_P$  décrit par le modèle de Maxwell (Eq II-43) :

$$\frac{\eta_P}{G_P} \underline{\underline{\mathbf{T}}} + \underline{\mathbf{T}} = \eta \underline{\dot{\mathbf{T}}} \quad \text{Eq II-43}$$

On remarque alors que le terme  $\frac{\eta_P}{G_P}$  est homogène à un temps. Généralement, on dénote ce rapport par  $\lambda$  qu'on appelle alors temps de relaxation viscoélastique. Dans une description macroscopique de la viscoélasticité, cette grandeur caractérise le temps moyen pour que les composants internes du fluide reprennent leur configuration d'équilibre une fois le système isolé de toute action extérieure (contraintes ou taux de cisaillement).

Un raffinement du modèle précédent consiste à combiner l'action du modèle de Maxwell de paramètres  $G_P$  et  $\eta_P$ , en parallèle d'un amortisseur visqueux qui représenterait un solvant Newtonien de viscosité  $\eta_S$  transportant les agents viscoélastiques (Figure II-10). La loi constitutive d'Oldroyd-B correspondante s'écrit alors (Oldroyd, 1950):

$$\frac{\eta_P}{G_P} \underline{\underline{\mathbf{T}}} + \underline{\mathbf{T}} = (\eta_P + \eta_S) \left( \underline{\dot{\mathbf{T}}} + \frac{\eta_S \eta_P}{G_P (\eta_P + \eta_S)} \underline{\underline{\mathbf{T}}} \right) \quad \text{Eq II-44}$$

Dans cette équation, la dérivée convective du tenseur taux de cisaillement apparaît également dans le second membre. Le coefficient  $\frac{\eta_S \eta_P}{G_P (\eta_P + \eta_S)}$  est également homogène à un temps et peut s'écrire :

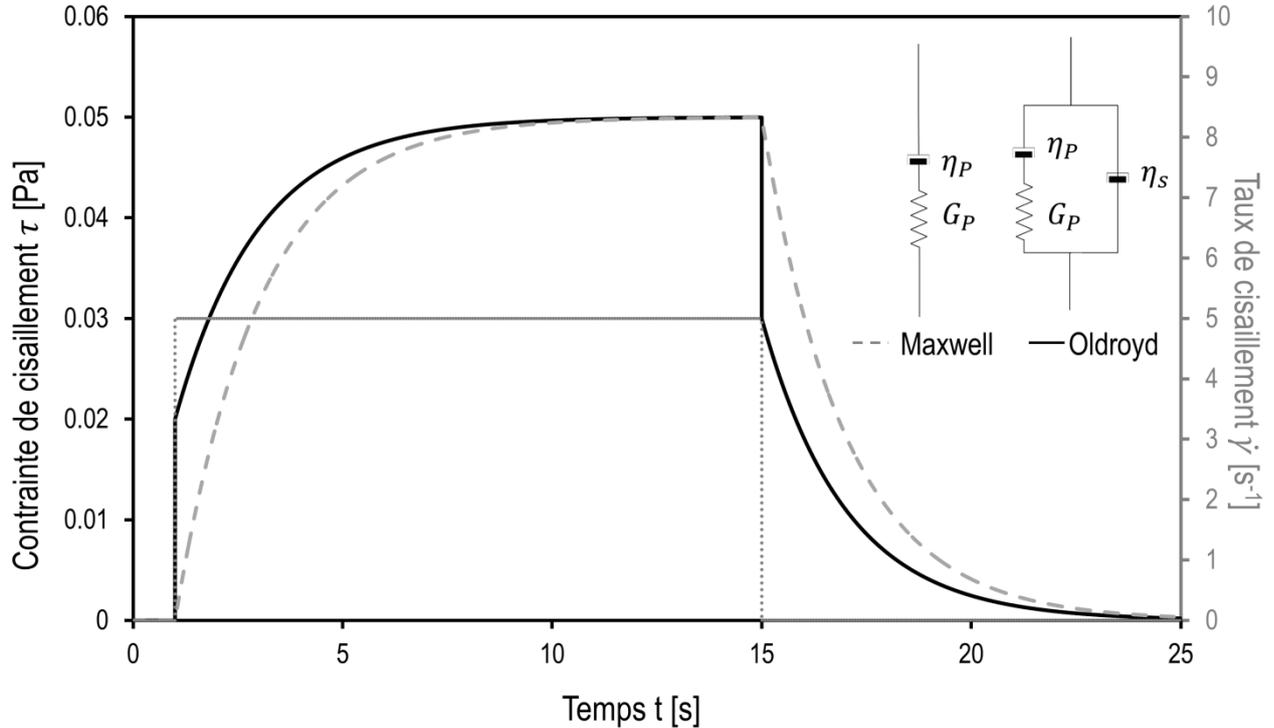
$$\lambda_2 = \frac{\eta_S \eta_P}{G_P (\eta_P + \eta_S)} = \lambda_1 \frac{\eta_S}{(\eta_P + \eta_S)} \quad \text{Eq II-45}$$

Où  $\lambda_1$  correspond au taux de relaxation viscoélastique  $\lambda$  utilisé dans le modèle de Maxwell. Il est possible de réécrire la loi constitutive Eq II-44 de façon simplifiée en admettant l'hypothèse que le modèle d'Oldroyd-B décrit l'action combinée d'un élément viscoélastique et d'un solvant visqueux

(Figure II-10). On peut alors décomposer le tenseur des extra-contraintes selon une contribution purement viscoélastique  $\underline{\tau}_V$  et une contribution Newtonienne. Ainsi, l'équation Eq II-33 s'écrit :

$$\underline{\tau}(\dot{\underline{\Gamma}}) = \eta_s \dot{\underline{\Gamma}} + \underline{\tau}_V \quad \text{Eq II-46}$$

En injectant Eq II-46 dans Eq II-44, on trouve alors que  $\underline{\tau}_V$  obéit au modèle de Maxwell décrit par Eq II-43 avec comme paramètre un temps caractéristique  $\lambda_I$  et de viscosité  $\eta_p$ .



**Figure II-10: Réponse des modèles viscoélastiques d'Oldroyd-B (ligne continue noire) et Maxwell (ligne discontinue grise) sous l'action d'un taux de cisaillement (ligne pointillée grise).**

Les modèles rhéologiques correspondant sont illustrés dans le coin supérieur droit. Contrairement aux fluides de Maxwell, le modèle Oldroyd-B comporte une contribution Newtonienne qui se traduit par l'apparition instantanée de contraintes internes sous l'action d'un taux de cisaillement. La décharge est similaire à celle des fluides de Maxwell.

Le modèle Oldroyd-B est très utilisé dans la littérature pour décrire l'action de solutions de polymère en régime dilué. Cette loi présente de plus l'avantage d'être retrouvée analytiquement en considérant des entités diluées sous forme de chaînes Hookéennes soumises à un mouvement brownien et des forces de friction du solvant (Hulsen, et al., 1997). Il présente cependant le défaut de ne pas borner les contributions viscoélastiques des contraintes. Des modèles permettent de corriger ce phénomène non physique comme les modèles FENE (Finite-Extensibility-Nonlinear-Elastic). Ils nécessitent cependant l'introduction de nouveaux paramètres qui sont parfois difficiles à relier à des propriétés physiques du système étudié (Spagnolie, 2015).

### iii) Nombre Adimensionnel et Régime D'écoulement

Afin de caractériser les forces pilotant l'écoulement d'un fluide, le système de Navier-Stokes décrit par l'Eq II-34 est souvent réécrit sous forme adimensionnelle. Pour les fluides Newtoniens incompressibles, le passage d'un régime d'écoulement laminaire à un régime d'écoulement turbulent peut généralement être décrit seulement par le nombre de Reynolds qui quantifie le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses d'un fluide. Cependant, la prise en compte du caractère non-Newtonien introduit d'autres forces, notamment des forces élastiques, qu'il convient alors de comparer aux forces usuelles. Comme décrit en préambule de cette partie, une mesure du caractère viscoélastique d'une solution, le nombre de Deborah  $De$  compare le temps de relaxation du système (temps de dissipation

des contraintes internes du matériau) au temps d'observation de l'expérience (par exemple, l'inverse du taux de cisaillement qui pilote l'écoulement de Poiseuille, ce qui donne  $De = \lambda\dot{\gamma}_c$ ). Le nombre de Deborah fournit une information heuristique sur les comportements (solide ou liquide) attendus d'un matériau adapté à l'échelle de temps de l'observateur. Dans la pratique, on utilise d'avantage le nombre de Weissenberger  $Wi$  pour caractériser le rapport entre les forces élastiques et les forces inertielles (Poole, 2012). Physiquement, ces deux nombres caractérisent des observations différentes ; on observe cependant dans la littérature qu'ils sont souvent utilisés comme un même nombre, souvent parce que le taux de cisaillement du fluide est utilisé dans la définition du nombre de Deborah pour caractériser l'échelle de temps de l'expérience. Dans le cas d'un écoulement sous cisaillement (cavité entraînée, écoulement de Poiseuille), on trouve alors des définitions similaires pour les deux nombres (Poole, 2012).

L'augmentation des forces élastiques au sein de l'écoulement est donc principalement renseignée par le nombre de Weissenberg ( $Wi = \lambda u_c / d_c$ ). Cette quantité croît linéairement avec le temps de relaxation de la chaîne polymérique en solution et la vitesse du fluide, et est inversement proportionnelle à la taille du système. L'augmentation du nombre de Weissenberg s'accompagne par une déviation du caractère laminaire de l'écoulement, même à bas Reynolds (Groisman & Steinberg, 2000), qui présente plusieurs aspects similaires avec la turbulence usuelle : une décohérence des lignes de courant, présentant une forte anisotropie, et une augmentation de la pression due à des recirculations (résistance à l'écoulement). On parle alors de turbulence à bas Reynolds ou turbulence élastique, l'origine de ce comportement étant la forte déformation des agents élastiques dilués sous cisaillement qui entraîne des contraintes importante dans le fluide.

Ce changement de régime illustre que l'introduction d'une loi de comportement viscoélastique ne résulte pas uniquement à donner un caractère dynamique à la viscosité de la solution, contrairement aux fluides newtoniens généralisés. La définition d'une loi constitutive comportant un effet de mémoire permet d'introduire des considérations rhéologiques propres aux solutions viscoélastiques qui entraînent une physique différente des fluides usuels. Dans la suite de ce chapitre, l'utilisation des considérations rhéologiques précédentes, couplée à la physique des écoulements en milieux poreux, permet de décrire les applications d'intérêt de cette thèse.

### **D. Applications Étudiées des Écoulements Multiphasiques de Fluides Viscoélastiques en Milieux Poreux**

Dans ces travaux de thèse, deux applications directes d'un modèle d'écoulement de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore sont étudiées : il s'agit de la récupération améliorée du pétrole et de l'étude de la croissance d'agrégats de cellules tumorales dans des environnements confinées. Nous proposons de voir dans cette section comment notre étude s'insère dans les recherches actuelles concernant ces deux applications, et quel apport il est envisageable d'attendre du modèle mathématique par rapport aux problématiques respectives de chacune.

#### **1. Récupération Améliorée du Pétrole par Injection de Solution de Polymère**

Le pétrole est une huile composée d'une multitude de composés organiques, essentiellement des hydrocarbures, piégés dans des formations géologiques particulières : leur migration provoquée par les conditions de pression et température en profondeur est bloquée par une roche couverture imperméable. Les hydrocarbures sont alors piégés au sein d'un milieu poreux (sables, carbonates...), et forment un gisement. La caractérisation de l'extraction du pétrole requiert alors l'utilisation de la théorie des milieux poreux.

Le terme de récupération améliorée du pétrole désigne toutes méthodes ou activités permettant d'augmenter le rendement d'un gisement pétrolier (De Haan, 1995). La récupération améliorée concerne donc potentiellement chacune des phases d'exploitation d'un puits de pétrole que l'on réparties généralement suivant trois étapes :

- i) La **récupération primaire** qui comprend toutes les méthodes de productions « naturelles » du pétrole (*i.e.* qui s'appuie uniquement sur l'énergie interne du réservoir sans apport extérieur). Il s'agit généralement de forages verticaux réalisés de façon à faire remonter l'huile par différence de pression entre l'intérieur du réservoir et la surface. Au cours de l'extraction, la pression de réservoir chute, entraînant une diminution de la différence de pression, jusqu'à ce qu'un équilibre s'établisse. À la fin de cette étape, on estime que le taux de récupération de l'huile est situé entre 5% et 30% du pétrole présent initialement dans le réservoir (Juarez Morejon, 2017; Mckee, 2013).
- ii) Pour contrer l'effet de baisse de pression lors de la récupération d'huile, la **récupération secondaire** consiste à injecter un fluide (généralement de l'eau ou du gaz) afin de maintenir la pression dans le réservoir, permettant ainsi de continuer l'extraction du pétrole. On estime qu'à la fin de la récupération secondaire, le gisement a été exploité entre 35% et 50% (Juarez Morejon, 2017; Mckee, 2013). L'efficacité de la récupération secondaire repose en grande partie sur le rapport de mobilité entre le pétrole (indiqué par ' $\sigma$ ') et le fluide injecté (indiqué par ' $w$ ') défini par (Sorbie, 1991):

$$\Pi = \frac{k^w \eta^\sigma}{k^\sigma \eta^w} \quad \text{Eq II-47}$$

Où  $k$  et  $\eta$  désignent respectivement le facteur de perméabilité des phases en présence et leur viscosité dynamique, introduits précédemment. Une mobilité faible (proche ou inférieure à l'unité) caractérise un front d'avancement stable du fluide injecté dans le milieu poreux. Ce déplacement en « piston » conduit à un balayage efficace du pétrole en place à l'échelle du réservoir. En revanche, pour des rapports de mobilité élevés, des instabilités dans le front apparaissent dû à des effets de digitation visqueuse (Homsy, 1987), notamment lorsque les fluides en présence ont des viscosités très différentes. Le déplacement microscopique de l'huile n'est pas efficace et le pétrole occupe majoritairement le milieu (forte saturation  $S^o$ ). De plus, cette situation est favorable à une percée précoce de l'eau (établissement d'un chemin de moindre résistance entre les puits d'injection et le puits de production), laissant la plupart du réservoir non-balayé (Sorbie, 1991). Le pétrole restant en place à la suite de ce procédé est par conséquent ou bien contourné par le fluide injecté dans le réseau de pores, ou bien piégé par des forces capillaires.

- iii) Suite à l'exploitation primaire et secondaire, en fonction de critères économiques et techniques, il peut être choisi de poursuivre l'exploitation du gisement avec une technique de **récupération tertiaire**, plus coûteuse à mettre en place que les opérations de récupérations primaires et secondaires. Ces méthodes visent à modifier les paramètres de mobilités (viscosité, mouillabilité, tension de surface...) des phases en présence afin de permettre leur récupération. La récupération du pétrole suite à cette opération peut augmenter entre 5% et 20%.

La récupération améliorée consiste à augmenter l'efficacité de la récupération d'huile d'une des méthodes de production précédentes (Sorbie, 1991). Ce procédé se distingue de la récupération tertiaire qui désigne plutôt les procédés visant à récupérer spécifiquement l'huile résiduelle piégée dans le réservoir.

Parmi les méthodes de récupération améliorée du pétrole, une des méthodes de récupération chimique consiste à utiliser des polymères hydrosolubles dans la solution injectée dans le gisement lors de la récupération secondaire. Ce procédé est souvent utilisé du fait qu'il ne nécessite que peu d'adaptation

par rapport à une méthode usuelle de récupération secondaire (Sheng, et al., 2015). Initialement, cette méthode visait à améliorer le rapport de mobilité défini par Eq II-47 en admettant qu'une solution de polymère (référé par ' $p$ ') serait plus visqueuse ( $\eta^p \gg \eta^w$ ), et que l'obstruction de certains pores par les macromolécules de polymère réduirait la perméabilité de la solution injectée ( $k^p < k^w$ ). Par conséquent, le rapport de mobilité  $M$  d'une solution de polymère serait inférieur à celui de l'eau (Needham & Doe, 1987), et permettrait une meilleure exploitation du gisement.

### i) Propriété des polymères utilisés

L'usage de plus en plus répandu de méthodes de récupération améliorée du pétrole a contribué à étudier de façon théorique et expérimentale les écoulements de solutions de polymère au sein des milieux poreux. Afin de prédire l'efficacité de la récupération par injection de polymère par rapport à d'autres techniques moins coûteuses, il est essentiel de pouvoir caractériser le comportement des solutions utilisées dans le milieu poreux.

### 3) Caractéristiques des polymères utilisés pour la RAP

Les deux polymères les plus utilisés pour la récupération du pétrole sont le polyacrylamide (HPAM), obtenu synthétiquement par polymérisation de l'acrylamide, et le xanthane, qui est un biopolymère obtenu par fermentation microbienne (Sorbie, 1991; Needham & Doe, 1987; Azad & Trivedi, 2019; Chauveteau, 1986). L'utilisation croissante de ces polymères a largement contribué à développer des études rhéologiques en laboratoire et dans les milieux poreux, avec une différence notable de comportement (Skauge, et al., 2018).

La structure chimique du xanthane consiste en une combinaison de glucose, mannose, acide glucuronique et acide pyruvique. Il est produit par fermentation microbienne de *Xanthomonas campestris* et est utilisé dans de nombreuses applications (géothermie, produits alimentaires et cosmétiques...) (Tyssee & Vetter, 1981). Sa masse molaire avoisine  $10^6$  g/mol. En solution, les molécules de xanthane exhibent des comportements rhéologiques qui varient selon leur masse molaire (Zirnsak, et al., 1999) (comme la plupart des solutions de polymère dilués (Cho, 2016; Tyssee & Vetter, 1981)). Cependant, restreint aux formulations utilisées pour la récupération améliorée du pétrole, les chaînes de molécules sont supposées rigides (les configurations de molécules de polymère varient peu), correspondant ainsi mathématiquement à un modèle rhéofluidifiant (Azad & Trivedi, 2019; Takada, et al., 1991) plutôt que viscoélastique. Notons que la viscosité du xanthane varie peu en fonction des paramètres de salinité (force ionique de la solution) contrairement aux polymères synthétiques (Zirnsak, et al., 1999; Lopes, et al., 2014). Si certaines études ont montré que la température jouait *a priori* un rôle limité sur les propriétés viscosifiantes du xanthane (Zirnsak, et al., 1999), il semblerait néanmoins que les conditions thermiques d'utilisation pour des applications de récupération du pétrole influent sur la dégradation du polymère (Needham & Doe, 1987; Tyssee & Vetter, 1981). De plus, ces polymères sont sensibles à la dégradation microbienne, qui s'accompagne généralement d'une perte de viscosité apparente (Beeder, et al., 2018).

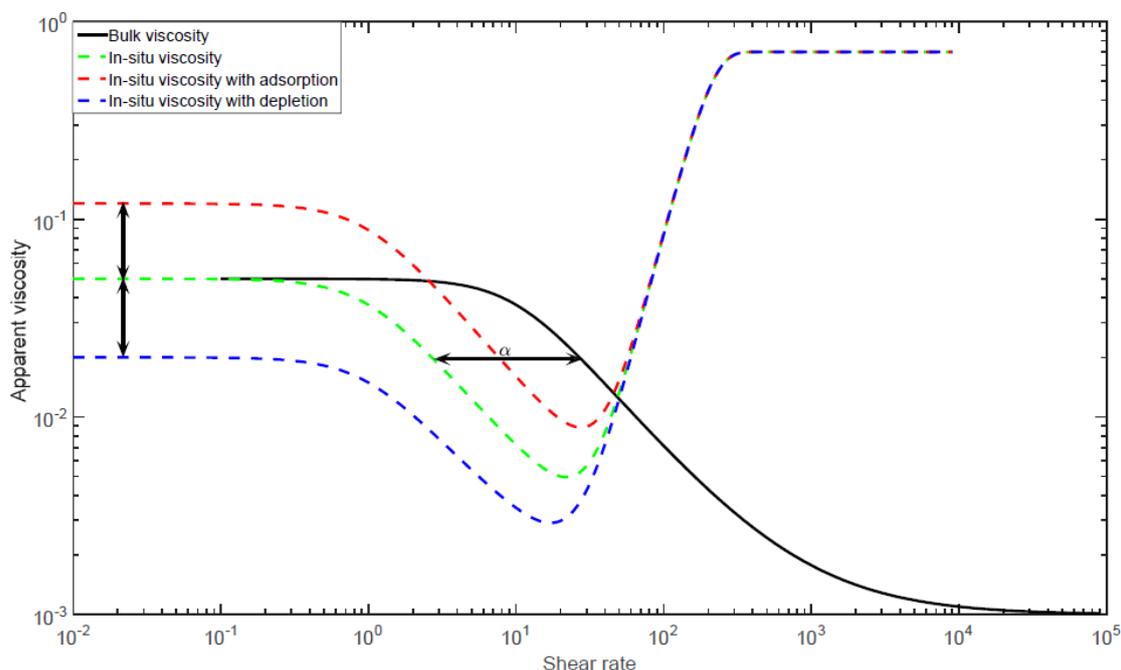
Le polyacrylamide est obtenu par polymérisation de l'acrylamide (Juarez Morejon, 2017). Son poids molaire dépend donc de son degré de polymérisation, et différentes masses molaires peuvent être utilisées en fonction des caractéristiques physico-chimiques du gisement considérés ( $6-8 \cdot 10^6$  g/mol (Seright, et al., 2011),  $18 \cdot 10^6$  g/mol (Skauge, et al., 2018),  $25 \cdot 10^6$  g/mol (Zhang, et al., 2008)). En laboratoire, plusieurs études montrent un comportement rhéologique rhéofluidifiant en écoulement sous cisaillement (Juarez Morejon, 2017; Chauveteau, 1986; Lopes, et al., 2014). La viscosité apparente de la solution est alors intimement liée à la concentration de HPAM dilué (Chauveteau, 1986). Contrairement au xanthane, le HPAM est une chaîne flexible, c'est-à-dire que le polymère peut adopter de nombreuses configurations dans l'écoulement, et présente donc des caractéristiques viscoélastiques

(Azad & Trivedi, 2019; Zhang, et al., 2008). Ses propriétés viscosifiantes varient en fonction de la force ionique de la solution (Lopes, et al., 2014).

#### 4) Rhéologie des polymères *in situ*

Si les solutions de polymère démontrent globalement un comportement rhéofluidifiant en laboratoire (Figure II-11), le comportement réel des solutions de polymère au sein d'un milieu poreux pour les différents niveaux de descriptions énoncés en introduction est encore un domaine de recherche très actif aujourd'hui. Bien que les structures moléculaires des polymères soient déterminantes dans la rhéologie de la solution injectée, la combinaison de ces paramètres chimiques avec la structure microscopique du milieu poreux et ses propriétés joue un rôle tout aussi important dans la récupération améliorée du pétrole (Sorbie, 1991; Skauge, et al., 2018). Qualitativement, l'écart entre la viscosité mesurée en laboratoire et la viscosité apparente dans le milieu poreux est représenté sur la Figure II-11.

Une des principales raisons de cet écart de comportement rhéologique provient des interactions entre les molécules de polymères et les surfaces solides du milieu poreux, qui peut se faire par le biais de plusieurs mécanismes attractifs ou répulsifs (Chauveteau, 1986; Zami-Pierre, et al., 2017; de Gennes, 1981). L'adsorption décrit l'attraction des polymères sur les parois du pore. De par cet effet, la concentration de polymère en solution décroît au travers du milieu poreux, entraînant une diminution de la viscosité apparente du fluide injecté. La réduction de viscosité est cependant mitigée par le colmatage des plus petits pores suite à l'adsorption des polymères, qui bloquent l'écoulement (Sorbie, 1991). Une diminution de la perméabilité locale peut en découler, ce qui macroscopiquement, induit un accroissement de la viscosité.



**Figure II-11: Comparaison de la viscosité *in situ* et la viscosité mesurée en laboratoire d'après (Skauge, et al., 2018).**

La mesure de la viscosité apparente de la solution à l'échelle de Darcy se fait généralement en mesurant la perte de charge du fluide au sein d'un milieu poreux de propriétés (porosité, tortuosité...) connu.

Inversement, des forces de répulsion entre le polymère et les surfaces solides du milieu poreux peuvent entraîner l'apparition d'une couche de déplétion à proximité des parois du pore. Une pellicule de solvant contenant moins de polymères (et donc de moindre viscosité) agit alors comme un film lubrifiant entre la paroi et le reste de la solution, induisant un effet de glissement et réduisant la viscosité

apparente de la solution injectée avec l'augmentation de la vitesse à la paroi (Zami-Pierre, et al., 2017).

Les interactions précédentes entre polymères et la matrice solide entraînent macroscopiquement une modification des propriétés rhéologiques du fluide en milieux poreux. Pour autant, ces effets ne résultent pas d'une modification des propriétés chimiques des éléments en solutions ; ceux-ci présentent théoriquement les mêmes propriétés qu'en laboratoire. En plus des considérations précédentes, il faut donc prendre en compte la sensibilité des chaînes de polymères utilisées aux différentes propriétés physico-chimique de leur environnement. Le HPAM peut être produit à relativement faible coût et présente des propriétés de viscosification ainsi que de réduction de la perméabilité par colmatage de pores intéressantes pour les applications de récupération améliorée du pétrole. Cependant, ces mêmes propriétés se dégradent sous l'action de la salinité du solvant et du taux de cisaillement de l'écoulement (dû à la flexibilité de la chaîne polymérique) (Needham & Doe, 1987). La rigidité des biopolymères leur permet de résister à la dégradation par des taux de cisaillement importants, et ces espèces chimiques se comportent bien en eaux salées. Cependant, elles sont sensibles aux paramètres thermiques du réservoir et à l'activité microbienne (Beeder, et al., 2018).

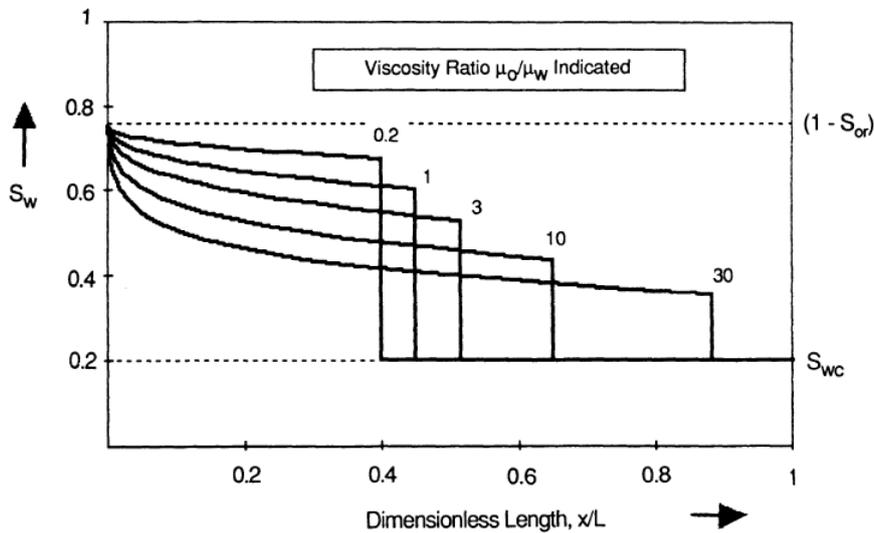
Enfin, le rôle de la microstructure du milieu poreux peut avoir une conséquence supplémentaire sur les chaînes de polymères flexibles (présentant des propriétés viscoélastiques). De par l'aspect tortueux du milieu poreux, la solution de polymère est soumise à un large spectre de cisaillement qui pourrait amener à des effets élastiques supplémentaires lors d'écoulements élongationnels (Azad & Trivedi, 2019; Skauge, et al., 2018). Dans ces configurations, de nombreuses études ont montré que les solutions de polymère adoptaient alors un comportement plutôt rhéoépaississant (Azad & Trivedi, 2019; Chauveteau, 1986; Clarke, et al., 2016) à des taux de cisaillement intermédiaires (Figure II-11). Un tel changement de comportement est souvent attribué à une augmentation des contraintes élastique due à la déformation des chaînes de polymère de HPAM. Afin de vérifier cette hypothèse, il est possible de procéder à une évaluation des forces physiques pilotant l'écoulement de polymère par le nombre de Deborah  $De$  que nous avons introduit précédemment (Sorbie, 1991) (même si nous devrions plutôt parler du nombre de Weissenberg dans ce cas précis). Le calcul du taux de cisaillement microscopique pour tout le milieu poreux est cependant impossible à réaliser du fait de la structure complexe de la géométrie à l'échelle du pore. Des définitions macroscopique du nombre de Deborah existent alors afin d'essayer de quantifier l'effet des contraintes élastiques du polymère sur la viscosité de l'écoulement (Durst, et al., 1982; Gupta & Sridahar, 1985). En particulier, le taux d'élongation au travers du milieu poreux peut être préféré au taux de cisaillement utilisé précédemment, les contraintes élastiques étant surtout fonction des écoulements élongationnels (Chauveteau, 1986). L'apparition d'effets propres à l'élasticité des chaînes de polymères flexibles entraîne une augmentation de la viscosité apparente de la solution au travers le milieu poreux, et donc un rapport de mobilité plus favorable à une bonne récupération.

### ii) Conséquence sur la récupération du pétrole

Industriellement, l'emploi de polymères hydrosolubles pour la récupération améliorée du pétrole a été reconnu comme efficace (Sheng, et al., 2015). On associe le gain entraîné à plusieurs phénomènes, le principal étant la réduction du rapport de mobilité entre les phases (Needham & Doe, 1987), décrit par Eq II-47. Malgré le caractère rhéofluidifiant des solutions de polymères, leur viscosité reste supérieure à celle de l'eau habituellement utilisée lors de la récupération secondaire et le colmatage des pores par les molécules diluées tend à diminuer leur perméabilité, ce qui abaisse la mobilité de la phase injectée dans le milieu poreux. À l'échelle macroscopique, l'influence du rapport de mobilité peut être qualitativement mesurée par l'approximation de Buckley-Leverett (Sorbie, 1991; Buckley & Leverett, 1942) (obtenue à partir du système Eq II-26) qui permet de calculer analytiquement les profils de saturation

d'un écoulement multiphasique en milieux poreux dans le cas de forces capillaires et gravitationnelles négligeables.

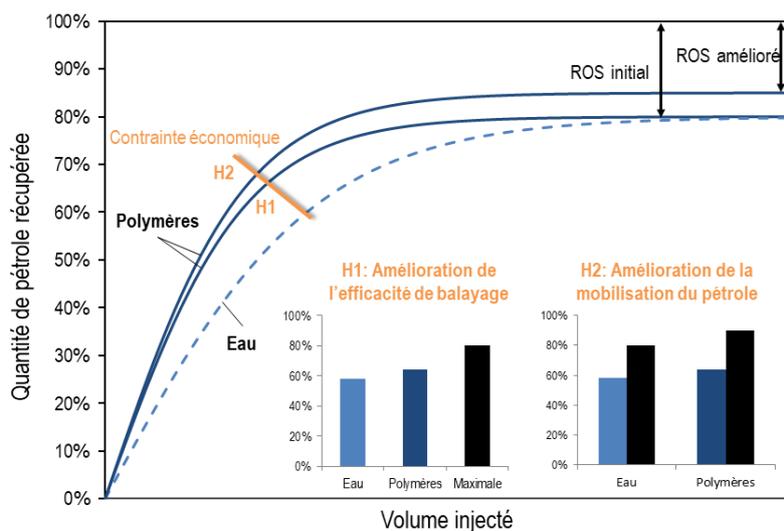
Comme on peut le voir sur la Figure II-12, une réduction de la mobilité permet une saturation plus rapide de la phase injectée, et donc localement une meilleure récupération de l'huile. Le profil de saturation idéal étant celui correspondant à un déplacement en « piston », qui permet de récupérer l'huile de façon optimale par rapport à la quantité de fluide injecté.



**Figure II-12: Solution de l'équation de Buckley-Leverett pour différente valeur du rapport de mobilité d'après (Sorbie, 1991).**

Les profils de saturation sont obtenus après une injection de 20% du volume poral de fluide mouillant.

Ces observations montrent comment l'emploi d'une solution de polymère permet une récupération plus économique du pétrole. Cependant, à la fin des opérations de récupération secondaire, quelle que soit la nature du fluide injecté, le pétrole encore en place est piégé par les forces capillaires qui le retiennent au milieu poreux. Azad et Trivedi (Azad & Trivedi, 2019) expliquent qualitativement que la viscosification de la solution suite à l'utilisation de polymères hydrosolubles en solution n'est pas suffisante par rapport aux forces capillaires de piégeage pour entraîner une mobilisation du pétrole résiduel en place (contrairement à d'autres procédés comme l'utilisation de surfactant).

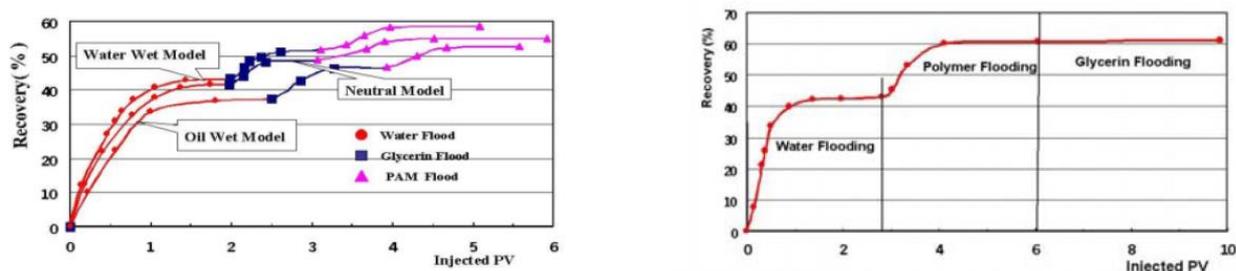


**Figure II-13: Principe de l'utilisation de polymère pour la récupération améliorée du pétrole. Insertion gauche (H1) : récupération améliorée sans diminution de la saturation résiduelle finale de pétrole. Insertion de droite (H2) : hypothèse d'une mobilisation supplémentaire par la présence des polymères, et donc d'une plus grande récupération à la fin des opérations. D'après (Sorbie, 1991)**

Dans cette configuration, l'utilisation de polymères en solution permet uniquement d'augmenter l'efficacité du balayage par un écoulement en piston (notamment en retardant la percée de fluide injectée dans le milieu poreux saturé d'huile (Juarez Morejon, 2017)). Un résultat similaire en saturation résiduel pourrait être hypothétiquement obtenu sur un temps long en injectant un fluide Newtonien (Hypothèse H1 sur la Figure II-13). Sans prendre en compte l'argument économique, la récupération secondaire et assistée pourraient alors amener aux mêmes performances en termes de récupération finale.

Des utilisations industrielles récentes en Chine sur le site de Daqing (Wang, et al., 2001; Wang, et al., 2010) ont amené à des résultats supérieurs aux estimations attendues, qui ont appuyé l'hypothèse que l'utilisation de solution de polymère pour la récupération améliorée pouvait permettre de mobiliser davantage de pétrole que les fluides Newtoniens. La nature de ces performances est attribuée en majeure partie au caractère élastique des solutions de HPAM employées. La question ne serait donc plus de savoir si l'emploi des méthodes dites « améliorées » permet d'accroître les performances de la récupération, mais si il permet en plus de mobiliser davantage d'huile que les méthodes usuelles (ce qui correspondrait à l'hypothèse H2 de la Figure II-13).

Expérimentalement, la reproduction de ces résultats a rencontré un succès mitigé (Juarez Morejon, 2017; Seright, et al., 2011; Clarke, et al., 2016), notamment parce que la rhéologie *in situ* des polymères en solution est difficile à prédire (Azad & Trivedi, 2019; Skauge, et al., 2018; Clarke, et al., 2016), rendant difficile la confirmation des phénomènes observés en laboratoire. Dans de nombreux travaux, les effets des propriétés élastiques sont souvent obscurcis par les variations de paramètres plus influents tels que la mouillabilité (Juarez Morejon, 2017), ou par des effets de dégradation et d'adsorption (Seright, et al., 2011). Sur les courbes ci-dessous, les travaux expérimentaux (Wang, et al., 2001) ont comparé la récupération de pétrole entraînée par l'injection d'un fluide Newtonien très visqueux (glycérine) et une solution viscoélastique de viscosité apparente similaire. Il a été démontré que l'emploi de la solution de polymère entraînait une récupération supplémentaire, supportant l'hypothèse d'une récupération améliorée, alors que la séquence inverse (polymères-glycérine) ne montrait aucun changement sur le volume de pétrole résiduel, comme montré Figure II-14. Des résultats similaires ont été obtenus dans (Qi, et al., 2017).



**Figure II-14: Démonstration de la mobilisation supplémentaire induite par injection de polymère d'après (Wang, et al., 2001).**

L'utilisation d'une solution de polymère après une injection de glycérine montre que la rhéologie de la solution permet de récupérer un incrément de production supplémentaire, ce qui n'est pas observé si les solutions sont utilisées dans l'ordre inverse.

### iii) Écoulements microscopiques de solutions de polymère dans un milieu poreux

Dès lors, comment expliquer la récupération supplémentaire qu'induit l'emploi de solution de polymère par rapport à des fluides newtoniens de viscosité apparente *a priori* similaire ? La majeure différence de comportement rhéologique entre ces solutions est le caractère élastique qu'exhibent les chaînes polymériques dans les écoulements élongationnels. Plusieurs processus de récupération supplémentaires dus à la nature élastique des fluides injectés ont été envisagés afin d'expliquer microscopiquement comment ils pouvaient mobiliser davantage de pétrole (Sheng, et al., 2015). Les études basées sur les expériences de Daqing (Wang, et al., 2001; Wang, et al., 2010; Bing, et al., 2013) suggè-

rent qu'en plus de la modification de la viscosité apparente des solutions de polymère à l'intérieur du milieu poreux, les chaînes polymériques pourraient exhiber des forces anisotropiques, en particulier à cause des différences de contraintes normales qui peuvent émerger lors d'écoulements favorables à la récupération du pétrole en place. Cependant, il reste à élucider précisément le rôle de ces contributions élastiques dans la récupération à l'échelle du pore ; d'une part parce que la physique invoquée est grandement qualitative et ne permet pas de quantifier la mobilisation de pétrole supplémentaire (Sheng, et al., 2015), d'autre part parce que d'autres mécanismes sont envisagés pour expliquer cette réduction de pétrole résiduel (Azad & Trivedi, 2019). La combinaison des forces élastiques, de la dégradation des propriétés élastiques des polymères (Needham & Doe, 1987; Seright, et al., 2011), l'importance de l'adsorption (Zami-Pierre, et al., 2017), et les propriétés d'instabilité à faible vitesse des fluides considérés (Clarke, et al., 2016) rendent difficile d'évaluer précisément la dynamique complexe des écoulements de fluides viscoélastiques dans les milieux poreux.

Pour quantifier la contribution de chaque phénomène à la récupération du pétrole, il semble alors nécessaire de découpler les différentes propriétés des solutions de polymères pour les étudier individuellement. Pour cela, le recours à la modélisation numérique représente un outil intéressant pour permettre d'isoler les effets d'intérêt. Dans ces travaux de thèse, nous proposons d'étudier à l'échelle microscopique l'écoulement multiphasique de fluide viscoélastique afin de pouvoir quantifier l'apport des propriétés élastiques des modèles rhéologiques des solutions de polymères à la récupération du pétrole. Nous allons également étudier comment les caractéristiques microstructurales du milieu poreux peuvent favoriser (ou non) l'efficacité des propriétés viscoélastiques. Les effets supplémentaires d'adsorption, dégradation et de forces ioniques seront ignorés, et seul l'aspect mécanique sera envisagé. Ainsi, il sera possible de statuer sur le rôle des forces élastiques dans des configurations simples, et donner un aperçu du rôle de la viscoélasticité dans la récupération améliorée du pétrole.

## 2. Étude de la Croissance Tumorale

Parallèlement à cet emploi historique de l'application directe des théories des milieux poreux et de la rhéologie à la RAP, les dernières années ont vu une utilisation croissante de ces modèles pour la recherche en biomécanique notamment pour la simulation de la croissance tumorale. Le terme « tumeur » désigne en toute généralité la croissance anormale d'un tissu biologique sans connaissance particulière de la cause de cette singularité. L'organisation mondiale de la santé (OMS) estime que cette maladie, dans sa forme maligne (c'est-à-dire non contrôlée) est la seconde cause de mortalité dans le monde, avec 9,6 millions de morts en 2018 (World Health Organization, 2014).

Les causes exactes qui conduisent une population cellulaire à se différencier et former une tumeur sont encore l'objet de nombreuses recherches aujourd'hui. Cependant, il est reconnu que l'origine de ce comportement est d'origine génétique (Hanahan & Weinberg, 2000), et que les cellules tumorales se distinguent des populations cellulaires saines par un ensemble de propriétés (appelé phénotype en biologie) différentes et développées par des mutations successives. Les cellules qui composent les tissus tumoraux sont particulièrement résistantes et prolifératives (elles stimulent elles-mêmes leur croissance et ne réagissent pas aux signaux extérieurs inhibitifs), avec un potentiel de réplication (nombre de division cellulaire possible) bien supérieur à celui des cellules saines. Les cellules tumorales peuvent stimuler l'apparition de nouveaux vaisseaux sanguins pour permettre l'augmentation de l'apport de nutriments (glucose, oxygène ...) afin de nourrir leur propre croissance. Ce stade de développement est nommé « angiogenèse ». De nombreux arguments dans la littérature montrent que les tumeurs parviennent à stimuler les producteurs et déréguler l'expression des inhibiteurs de l'angiogenèse. Enfin, les cellules tumorales montrent des capacités de migration (invasion et métastase) qui augmentent leur dangerosité.

i) D'une Description Biologique aux Écoulements Multiphasiques en Milieux Poreux

Dans le domaine de l'ingénierie médicale, une description précise de la croissance tumorale est une problématique émergente qui suscite une attention particulière de nombreux domaines de recherches. Une caractérisation précise de la dynamique d'une tumeur pourrait améliorer la prise en charge des patients en prédisant la malignité du cancer et en adaptant le traitement aux données spécifiques du malade (on parle de plus en plus de médecine personnalisée en oncologie) (Yankeelov, et al., 2016).

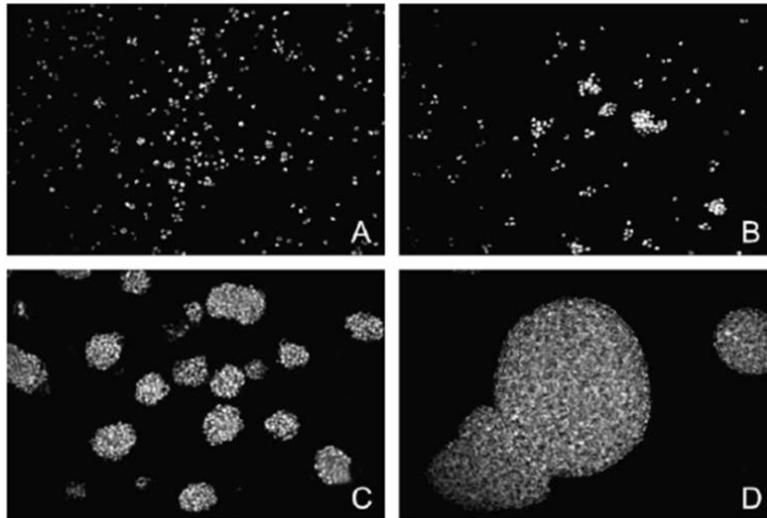


Figure II-15: Agrégation des cellules en sphéroïde sous l'effet de différentes concentration de cadhérine d'après (Foty & Steinberg, 2005)

Bien que la croissance tumorale soit aujourd'hui très bien documentée d'un point de vue biologique et biochimique, une description mathématique applicable dans le cas clinique n'existe pas encore de nos jours (Yankeelov, et al., 2014), et ce pour plusieurs raisons. Tout d'abord, la modélisation mathématique se heurte à la complexité de la croissance tumorale, qui concerne une large gamme d'échelles spatiale et temporelle (depuis les signaux moléculaires aux phénotypes cellulaires à l'invasion d'organes), et fait intervenir une multitude de réactions biologiques (croissance, angiogenèse, invasion etc...), parfois non-linéaires (Hanahan & Weinberg, 2000; Yankeelov, et al., 2016; Hanahan & Weinberg, 2011). De plus, l'adaptation de ces modèles pour l'utilisation en clinique est souvent difficile : les données nécessaires aux modèles mathématiques peuvent être coûteuses à mesurer pour chaque patient, la lecture des résultats reste obscure aux non-initiés, et la complexité mathématique se traduit souvent par des temps de calcul prohibitifs à un usage systématique (Yankeelov, et al., 2014).

ii) Une Modélisation Continue des Tissus Biologiques

Une solution à cette problématique consiste à chercher une manière alternative plus synthétique de décrire la croissance de tumeurs en utilisant des modèles mécanistiques continus (Jonietz, 2012). Ce changement de paradigme, qui cherche à en premier lieu caractériser la contribution des effets biophysiques et biomécaniques dans l'agressivité des cancers, s'insère dans une stratégie globale de décrire les tissus tumoraux comme un système physique complexe (Dusheck, 2012; Michor, et al., 2013), et non uniquement à partir de la biologie des cellules qui le composent.

En se basant sur l'observation que sous certaines conditions, les populations de cellules pouvaient adopter des comportements imitant des fluides viscoélastiques (Foty, et al., 1996; Douezan, et al., 2011; Gonzalez-Rodriguez, et al., 2012; Foty & Steinberg, 2005), un point de vue mécanique a largement été adopté pour décrire mathématiquement la dynamique des tissus biologiques. Ce postulat, baptisé « hypothèse d'adhésion différentielle », repose en majeure partie sur l'existence d'une tension de surface des agrégats cellulaires, qui est la manifestation macroscopique de forces cohésives intercellulaires, elles-mêmes dépendantes du niveau de protéines présentes dans le milieu (Steinberg,

2007), Figure II-15). Ainsi, par les niveaux d'expression des cadhérines (forces intercellulaires) ou des intégrines (force cellules/substrat), à la surface des membranes cellulaires, les tissus biologiques montrent des propriétés d'adhésion (mouillabilité (Figure II-16), agrégation, tension de surface, forces interfaciales ...) qui peuvent être modélisés en utilisant le formalisme de la mécanique des fluides. Il peut être intéressant de faire le lien entre cette propriété macroscopique et les phénotypes des cellules tumorales vus précédemment, acquis au cours des mutations successives. En effet, l'un des traits caractéristiques des cellules tumorales est leur capacité d'évasion pour former des métastases, parfois dans des organes éloignés du siège initial de la tumeur. Cette propriété vient justement de l'inhibition des protéines de cadhérine par les cellules tumorales (Hanahan & Weinberg, 2011), qui peut être alors vue macroscopiquement comme une diminution de la tension de surface dans un modèle continu, pouvant mener à des changements de régimes d'écoulement et de mouillabilité (Douezan, et al., 2011). La cohérence des phénotypes observés avec les propriétés connues des fluides viscoélastiques vient apporter une justification supplémentaire à l'emploi de cette description mathématique dans cette problématique.

Notons cependant que ce point de vue n'apporte que peu d'information sur la biologie à l'échelle de la cellule. À la manière de la mécanique des milieux continus, ce niveau de description permet une modélisation qualitative de la dynamique des tissus tumoraux, mais filtre les phénomènes sous-jacents par la définition de variables macroscopiques (tension de surface, propriété de mouillabilité, potentiel chimique...), notamment concernant la génétique des cellules, qui joue pourtant un rôle essentiel dans le développement de la maladie. Il peut alors être difficile de faire le lien entre une propriété physique et les quantités biologiques associées (*e.g.* la tension de surface avec l'expression de cadhérine), et leur évolution dynamique. Ce choix de description présente le risque de minimiser l'aspect biologique dans la croissance tumorale, tout comme le caractère « actif » des propriétés cellulaires, éloignant les modèles de leur utilisation clinique (Yankeelov, et al., 2016; Gonzalez-Rodriguez, et al., 2012), ce qui explique en partie la difficulté de les adapter. La réconciliation des deux points de vue est un des enjeux majeurs de l'oncologie physique aujourd'hui.

### iii) Interaction des Cellules Tumorales avec leur Environnement

À une échelle suffisamment grande (*i.e.* avec des volumes représentatifs constitués par plusieurs centaines de cellules), les populations cellulaires peuvent être pertinemment décrites du point de vue de la mécanique des fluides. Dans la modélisation de la croissance tumorale, l'environnement extérieur joue un rôle de premier ordre sur le comportement invasif ou non des cellules cancéreuses (Hanahan & Weinberg, 2011). Il faut donc prendre en compte les interactions des cellules tumorales avec les autres populations cellulaires. Comme décrit précédemment, les populations tumorales se distinguent des autres populations cellulaires par des séries de mutations qui ont modifié leur phénotype par rapport à celui des individus composants les tissus sains. Dans les modèles continus, la distinction des différents phénotypes se fait par l'introduction de propriétés physiques différentes qui permettent de reproduire au mieux ces comportements. Ainsi, les différentes cellules en présence sont modélisées par des phases fluides différentes qui ne partagent pas les mêmes propriétés (tension de surface, viscosité, masse etc...), ce qui encore une fois est une mesure continue de la biochimie entre cellules.

Au sein des tissus biologiques, les cellules s'agglomèrent entre elles et adhèrent à la matrice extracellulaire, qui est un support biologique pour les cellules, composé d'un ensemble de biopolymères (protéoglycanes et protéines) constituant un réseau fibreux comme montré Figure II-17, assimilable à un milieu poreux (Frantz, et al., 2010; Fischer, et al., 2019). Ce matériau donne aux tissus biologiques leur rigidité et détermine en grande partie leurs propriétés mécaniques. On sait de plus qu'il entretient de nombreuses interactions avec les cellules tumorales (Hanahan & Weinberg, 2011; Frantz, et al., 2010). Lors de la progression de la tumeur, en fonction de la rigidité de la matrice, les cellules tumo-

rales peuvent subir des contraintes plus ou moins grandes lors du développement du cancer, et cela influe la vitesse de croissance de la tumeur (Helmlinger, et al., 1997).

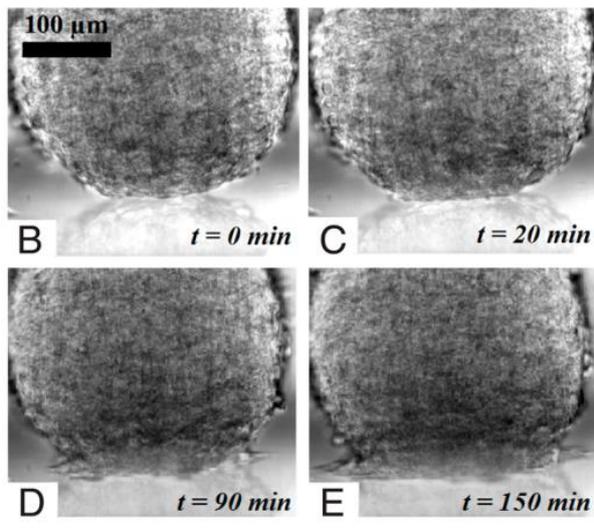


Figure II-16: Dynamique de mouillabilité d'un agrégat cellulaire, d'après (Douezan, et al., 2011).

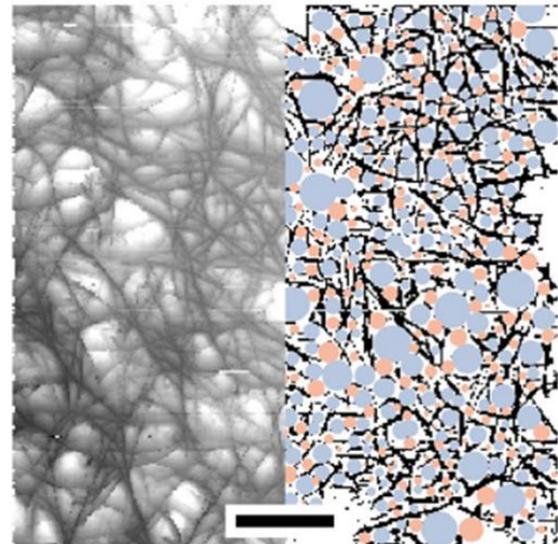
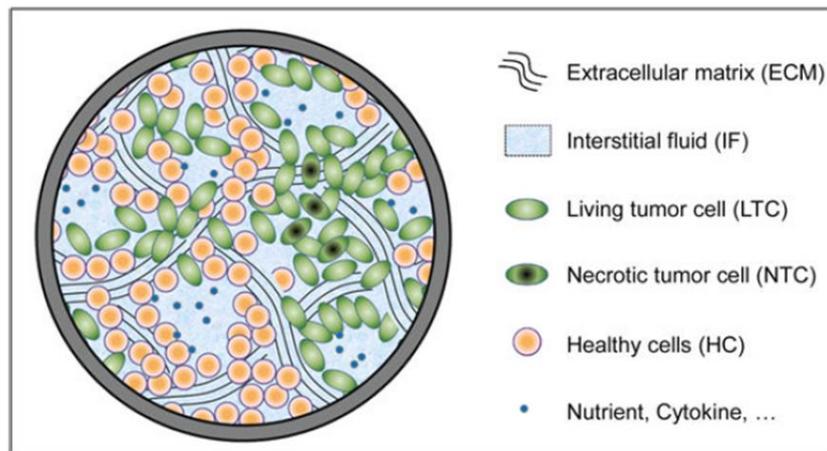


Figure II-17: Segmentation d'une coupe 2D obtenue par microscopie électronique d'un réseau de collagène constituant la matrice extracellulaire (Fischer, et al., 2019).

On peut voir que le caractère fibreux des structures peut être modélisé comme un milieu poreux. Échelle 20µm.

Par ces observations, la croissance tumorale *in vivo* peut être modélisée en décrivant les transferts de masses et de forces entre plusieurs phases fluides au sein d'un milieu poreux déformables (Sciumè, et al., 2013). Le nombre de phases en présence dépend du choix de la complexité désirée à l'échelle du VER. Un exemple de modélisation est illustré Figure II-18. Afin de modéliser l'invasion d'un tissu sain par les cellules cancéreuses il faut considérer au moins l'existence de trois phases (les cellules cancéreuses, les cellules saines et la matrice extracellulaire) pour pouvoir fournir une représentation minimale de la phénoménologie du microenvironnement tumorale avant sa vascularisation. Certains modèles prennent également en compte le liquide interstitiel comme une phase fluide caractérisée par sa propre pression et fraction volumétrique (Sciumè, et al., 2014).

Plus le nombre de phases coexistant au sein du milieu poreux sera élevé, plus la fermeture du système d'équation développé à l'aide des méthodes de changement d'échelle sera difficile à obtenir. En contrepartie, le modèle mathématique sera éventuellement capable de représenter physiquement les différents stades de croissance de la tumeur (croissance avasculaire, angiogenèse, métastase ...). Cet exemple de description mathématique fait partie d'une classe de modèle dit « basé sur la physique » et est aujourd'hui beaucoup utilisé (Bresch, et al., 2010; Cristini, et al., 2009; Byrne & Preziosi, 2003; Chatelin, et al., 2011).



**Figure II-18: VER utilisé dans (Sciumè, et al., 2013) pour la description de la croissance tumorale un modèle multiphasique en milieux poreux.**

Dans cette modélisation, quatre phases coexistent (matrice extracellulaire, cellule tumorale, cellule saine et liquide interstitiel) avec en plus des interactions entre espèce appartenant à une même phase (cellules tumorales vivantes et nécrosées).

De nombreux travaux restent à mener afin de compléter le modèle précédent et aboutir à une description entièrement satisfaisante de la croissance tumorale. En particulier, l'établissement des relations constitutives sur les perméabilités des phases en présence et la pression capillaire sont très floues dans le domaine biologique, et des analogies empiriques sont généralement utilisées pour réduire le nombre d'inconnue (Sciumè, et al., 2014), au risque d'imposer des hypothèses qui ne s'appliquent pas au milieu étudié.

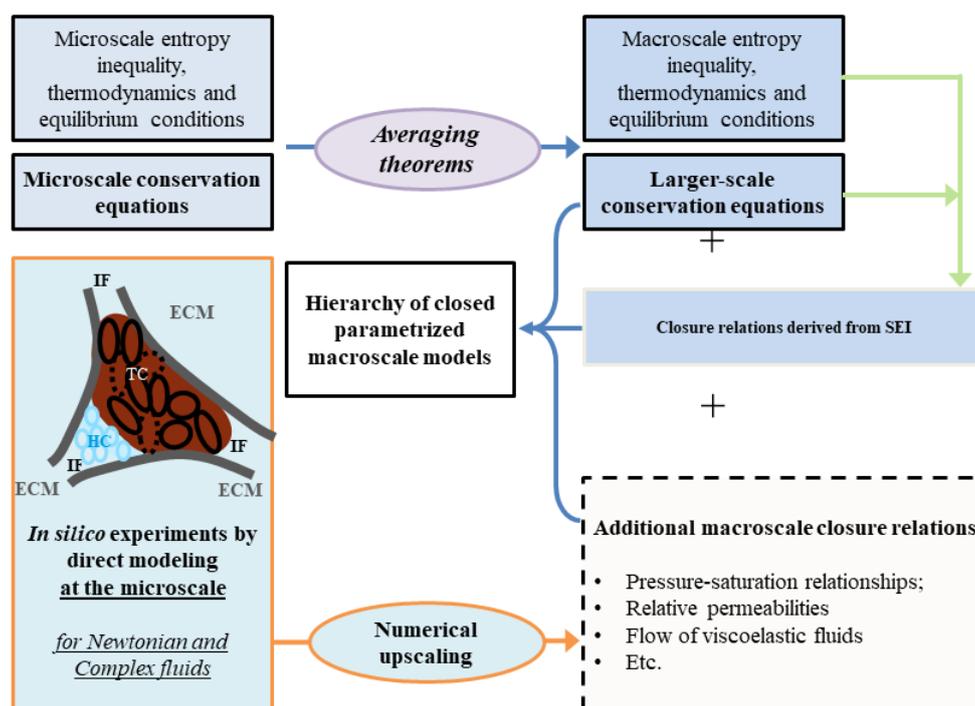
#### iv) Utilité d'une description microscopique

L'intérêt d'apporter une meilleure connaissance des phénomènes à l'échelle du pore (toujours décrits par la mécanique des milieux continus) est double dans cette application.

Tout d'abord, l'établissement d'un modèle à cette échelle permettrait d'accéder à des informations intéressantes sur la physique sous-jacente au modèle macroscopique. La justification d'une modélisation à l'échelle macroscopique repose sur l'invariance des propriétés physiques d'un système à l'intérieur du VER. Or, dans le cas précis de la modélisation de croissance tumorale, l'instabilité génétique des cellules entraînent la modification des phénotypes, et donc des propriétés physiques des tissus biologiques d'un point à l'autre. L'analyse de la dynamique des cellules tumorales avec une forte résolution spatiale pourrait apporter des éclairages sur les phénotypes des populations cellulaires, difficile à rendre compte à l'échelle de Darcy. De plus, les phénomènes biomécaniques liés à la croissance d'agrégats tumoraux sont encore peu renseignés d'un point de vue purement biophysique alors que des données expérimentales font état de l'importance de ces paramètres (Broders-Bondon, et al., 2018; Barriga & Mayor, 2018; West, et al., 2017). Les propriétés de mobilités, multiplication, et contraintes subies sont en effet directement mesurables lors d'expériences microfluidiques (voir par exemple Alessandri, et al., 2013), ce qui permet une comparaison explicite entre les résultats *in vitro* et *in silico*. Une modélisation sur une échelle spatiale restreinte permettrait de prendre en compte la complexité des échelles microscopiques et de quantifier les interactions entre les phases du VER, afin de guider les modélisations numériques des échelles supérieures.

À côté de cet objectif de caractérisation de la biophysique à l'échelle du pore (similaire à l'étude de l'apport de la viscoélasticité pour la récupération améliorée du pétrole), il est envisagé dans un futur proche d'utiliser les résultats des simulations microscopiques afin d'obtenir les relations manquantes pour fermer le système d'équation provenant du changement d'échelle. Nous avons vu dans l'étude des écoulements multiphasiques en milieu poreux qu'un certain nombre de grandeurs (en particulier la pression capillaire et les tenseurs de perméabilité relative) était calculé à l'aide de relations expérimentales.

tales/empiriques afin d'obtenir un système d'équation bien posé (*i.e.* même nombre d'équations que d'inconnues). Un raffinement envisagé serait de caractériser plus précisément ces relations en utilisant un modèle microscopique associé au modèle macroscopique (dans la philosophie de (Luévano-Rivas & Valdés-Parada, 2015)). Le modèle microscopique, résolu numériquement sur un VER, donnerait les informations manquantes au modèle macroscopique pour résoudre le système d'équations sans recourir aux approximations usuelles. Avec l'augmentation des moyens numériques, cette stratégie est de plus en plus envisagée pour déterminer numériquement les caractéristiques d'un milieu poreux (Blunt, et al., 2013). Pour la modélisation de la croissance tumorale, cette stratégie est d'autant plus pertinente que peu de données existent sur les propriétés physiques des matériaux considérés. Le couplage multi-échelle permettrait donc de remédier à cela en modélisant explicitement la physique des échelles inférieures, comme montré Figure II-19.



**Figure II-19: Stratégie multi-échelle pour la simulation d'écoulement multiphasique en milieux poreux en utilisant le TCAT.**

L'utilisation d'une telle approche, bien que coûteuse numériquement, permettrait de réduire le nombre d'hypothèses nécessaires pour l'établissement du modèle mathématique et assurerait la pertinence des relations de fermeture microscopique (prise en compte des forces capillaires, perméabilité) pour des applications plus générales (notamment pour l'emploi de fluides non-Newtonien).

### III. Modélisations Numériques des Écoulements Multiphasiques de Fluides Viscoélastiques en Milieux Poreux

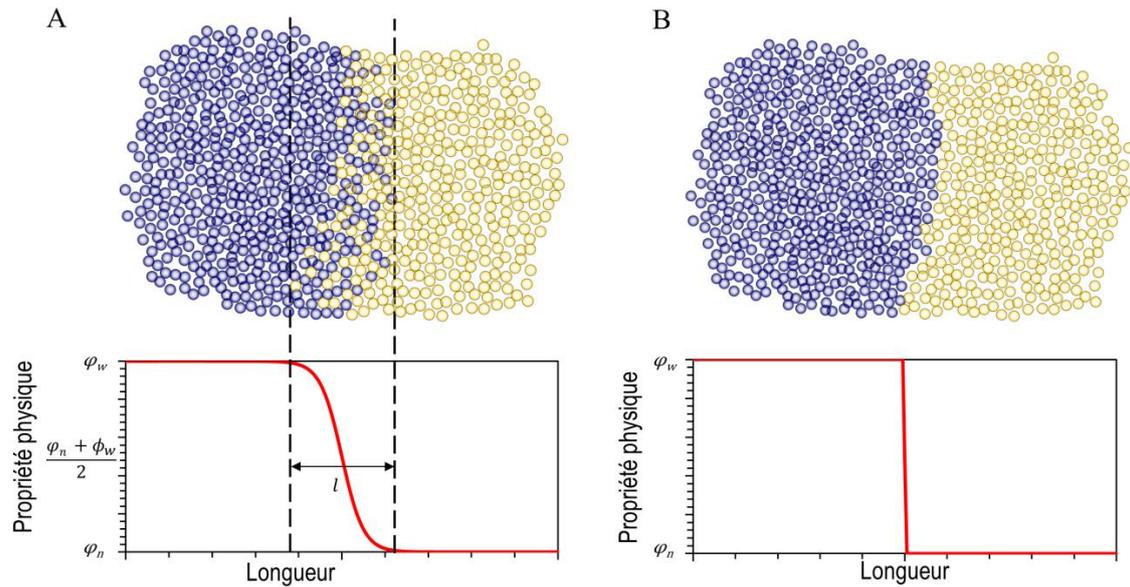
#### A. Introduction

Dans ce chapitre, le système d'équations général utilisé pour modéliser numériquement les écoulements microscopiques d'intérêt est dérivé. Il repose en grande partie sur les notions vues en introduction, notamment pour la modélisation des fluides non-Newtoniens. À l'échelle microscopique, la simulation de la dynamique des zones de contact entre fluides est traitée par une méthode d'interface diffuse (Alpak, et al., 2016; Wörner, 2012) qui est une formulation de plus en plus utilisée pour modéliser les écoulements multiphasiques. Cette méthode suppose que l'interface entre les deux fluides présents dans le système n'est pas une surface mais un volume, où les deux fluides, bien qu'immiscibles, s'interpénètrent sur de courtes distances (quelques molécules en théorie). En procédant ainsi, la dynamique de la zone de mélange peut être numériquement calculée à partir des lois de conservations des grandeurs extensives (masse, moment cinétique...) d'un mélange d'espèces chimiques. En particulier, la dérivation d'une énergie libre d'Helmholtz à l'interface permet généralement de retrouver le système de Cahn-Hilliard (Cahn & Hilliard, 1958), qui modélise mathématiquement en chaque temps la position de l'interface. A ces équations se rajoutent les considérations rhéologiques des fluides étudiés, modélisés ici par une loi d'Oldroyd-B. La stratégie de résolution numérique du système non-linéaire d'équations résultant consiste en une approche éléments finis par le logiciel FEniCS (Alnaes, et al., 2015). Enfin quelques exemples d'applications permettront de tester la robustesse de notre discrétisation, les capacités et les limites du modèle considéré, et d'envisager quelques pistes d'améliorations.

#### B. Généralité sur les méthodes d'interface diffuse

Dans ces travaux, une méthode d'interphase diffuse est utilisée pour dériver les équations de la dynamique des fluides et de l'interface à l'échelle microscopique. Si de nombreuses stratégies mathématiques existent dans la littérature pour modéliser l'écoulement multiphasique de fluides immiscibles (Wörner, 2012), leur utilisation n'est pas toujours très bien adaptée à la topologie complexe des milieux poreux.

Brièvement, on distingue deux types de méthodes numériques pour les écoulements de plusieurs fluides (voir Figure III-1 A, B): les méthodes « fines » (*sharp* en anglais) et les méthodes diffuses (ou continues). Pour les méthodes fines, les propriétés physiques de part et d'autre de l'interface sont traitées par des discontinuités, alors qu'elles varient de façon rapide mais continue pour les méthodes diffuses. Si numériquement, le choix des méthodes revêt une importance particulière dans le processus de modélisation, il repose physiquement sur peu d'arguments et ce choix est surtout guidé par des intérêts numériques ou mathématiques. En effet, à cause de l'agitation thermique des molécules sur la zone de contact, il est peu probable que les interfaces entre fluides immiscibles soient réellement identifiables à l'échelle moléculaire, et donc de nature discontinue (Cahn & Hilliard, 1958). Cependant, même si l'hypothèse d'une zone de mélange est thermodynamiquement justifiable sur une épaisseur de quelques angströms, les méthodes d'interfaces diffuses sont utilisées dans des cas éloignés de leur dérivation d'origine, et calculent ainsi des interfaces bien plus larges que celles des systèmes réels. Il peut être noté que le comportement des méthodes d'interfaces diffuses tend asymptotiquement vers les méthodes fines lorsque la taille choisie pour la zone de mélange tend vers 0 (Anderson, et al., 1998; Jacqmin, 1999) : sur un maillage infiniment précis, les solutions obtenues par chacune des méthodes sont équivalentes, et la physique simulée est donc la même.



**Figure III-1: Stratégie numérique pour modéliser l'interface entre deux fluides.**

(A) Les méthodes diffuses supposent une interface de longueur arbitraire  $l$ , de façon à ce que les propriétés physiques des fluides évoluent de façon continue. (B) Au contraire, les méthodes fines supposent une discontinuité entre chaque phase, marquée par un saut de propriétés physiques.

Pour l'étude des écoulements en milieu poreux, les méthodes d'interfaces diffuses semblent cependant présenter plusieurs avantages par rapport à d'autres méthodes. Tout d'abord, ces méthodes présentent naturellement une bonne propriété de conservation de la masse (contrairement aux méthodes *level-set*), et, contrairement aux méthodes *volume of fluids*, calculent explicitement la géométrie de l'interface, afin de capturer les forces capillaires (Wörner, 2012). Le traitement thermodynamique de l'interface et la présence de flux diffusifs dans cette zone permettent de modéliser sans traitement supplémentaire les phénomènes de changements topologiques (coalescence, fragmentation) auxquels sont soumis les fluides à travers les géométries complexes du milieu poreux à l'échelle microscopique (Alpak, et al., 2016). La prise en compte naturelle de ces comportements difficiles à traiter avec des méthodes d'interfaces fines s'explique par la considération d'arguments moléculaires dans la définition de l'énergie du système (Anderson, et al., 1998). La dynamique de tels phénomènes doit cependant être traitée avec prudence car l'utilisation du système de Cahn-Hilliard en hydrodynamique est éloignée du cadre original de dérivation fondée sur des arguments énergétiques qui caractérisent un système proche de sa température critique (température d'arrêt de la courbe d'équilibre liquide/gaz). Pour cette raison, des adaptations du cadre théorique et un paramétrage rigoureux seront nécessaires. Une telle observation survient dans les écoulements microscopiques en milieux poreux, où les méthodes d'interfaces diffuses considèrent des forces de diffusion permettant l'avancée du point de contact fluide-fluide/solide sans avoir à appliquer une condition de glissement au point triple (Jacqmin, 2000; Pinilla, et al., 2016).

Notons enfin qu'en recourant à une méthode d'interface diffuse, nous proposons un traitement des interfaces alternatif à celui proposé par la méthode du TCAT, où les zones de contact sont traitées avec des lois de conservation dédiées (Gray & Miller, 2014). Les interfaces modélisées par la suite seront de taille très réduite, de sorte à ce que les solutions obtenues ne varient plus en fonction de l'épaisseur de la zone de mélange.

### C. Dérivation des équations de conservation

Comme indiqué précédemment, la dérivation formelle des équations de la dynamique relatives aux écoulements multiphasiques dans le cadre des méthodes d'interfaces diffuses nécessite des arrange-

ments par rapport au traitement traditionnel des lois de conservation des variables extensives, notamment celui fait dans (Gray & Miller, 2014). L'origine de ces différences vient du fait que l'interface est considérée comme une zone de variation continue des propriétés de l'écoulement, et que les deux phases, normalement considérées distinctement, sont mélangées dans cette zone. Il convient alors de s'interroger sur les effets de ce choix sur le découpage du domaine (Figure III-2). Dans la vision traditionnelle, les deux phases fluides n'interagissent qu'au travers de la surface de contact, ce qui permet l'écriture des lois de conservation sur chaque domaine respectivement. L'utilisation des méthodes d'interphase diffuse ne rend pas possible un tel traitement : la géométrie de l'interface est régie par des flux diffusifs localisés sur la zone de mélange, ce qui sous-entend l'existence d'un terme diffusif dans le domaine entier, même pour des fluides immiscibles.

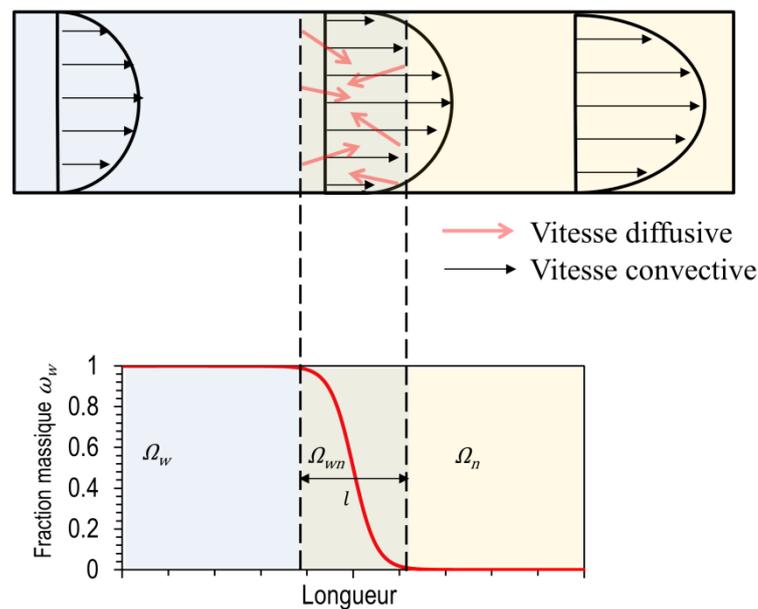


Figure III-2: Découpage de l'écoulement en zone de composition chimique distincte

Le parti choisi dans ces travaux a été d'utiliser une stratégie de modélisation alternative ; plutôt que de considérer deux phases immiscibles dans le domaine d'intérêt, il a été choisi de considérer au contraire un mélange de deux espèces chimiques au sein d'une même phase, mais dont les fractions massiques peuvent présenter des gradients très élevés au sein du domaine. Par ce principe, le système est partitionné en trois zones facilement identifiables : les zones chimiquement homogènes situées loin des gradients de fractions massiques d'espèce (qui tiennent le rôle de *phase* dans la TCAT) et la zone de mélange (qui correspond à la surface entre les fluides dans le TCAT). Un exemple de choix par la délimitation de l'interface est de contenir 90% des variations de fractions massiques des espèces chimiques dans le domaine (Jacqmin, 1999), de sorte que les variations de fraction massique à l'intérieur des phases soient négligeables. La dérivation qui en résulte pourra sembler artificielle, mais respectera autant que possible les principes de la mécanique des fluides en milieux poreux.

Le système considéré dans un premier temps est uniquement composé de deux entités chimiques dénotées par  $w$  et  $n$ . Lorsque la fraction massique de l'espèce  $w$  (respectivement  $n$ ) est de 1, il sera considéré que le point d'observation se situe dans le fluide mouillant, dénoté par  $\Omega_w$  (respectivement non-mouillants, noté  $\Omega_n$ ). Au sein du domaine, les espèces chimiques s'interpénètrent sur un volume caractérisé par une longueur caractéristique de mélange  $l$ , très faible devant la taille du système et notée  $\Omega_{wn}$ . Un exemple d'un tel domaine est donné Figure III-2. Lorsqu'aucun domaine de définition n'est précisé, l'équation est valable sur la totalité du système, *i.e.*  $\Omega = \Omega_w \cup \Omega_n \cup \Omega_{wn}$ .

## 1. Équations de conservation de la masse dans le système

La masse du système s'écrit comme la somme de la masse de chacune des espèces en solution:

$$\rho = \rho_w + \rho_n \quad \text{Eq III-1}$$

La fraction massique d'une espèce est alors définie comme le rapport entre la masse de l'espèce chimique considérée et la masse totale du système :

$$\omega_w = \frac{\rho_w}{\rho}; \left( \text{resp. } \omega_n = \frac{\rho_n}{\rho} \right) \quad \text{Eq III-2}$$

Des deux expressions précédentes (Eq III-1 et Eq III-2), la contrainte suivante apparaît naturellement :

$$\omega_w + \omega_n = 1 \quad \text{Eq III-3}$$

La relation Eq III-3 est particulièrement utile car elle permet de réduire le nombre de variables du système : connaître la fraction massique d'une espèce en un point permet, pour les systèmes diphasiques à l'étude, de connaître implicitement la fraction massique de l'autre espèce.

Loin des interfaces, le système étant isotherme, les masses volumiques de chacune des espèces chimiques sont considérées constantes. Il est donc possible d'écrire :

$$\rho(\omega_w = 1) = \bar{\rho}_w \quad \text{Eq III-4}$$

$$\rho(\omega_w = 0) = \bar{\rho}_n \quad \text{Eq III-5}$$

À partir de ce point, une relation linéaire est supposée entre la contribution de chaque espèce à la masse du système et les fractions massiques individuelles des espèces considérées (Alpak, et al., 2016; Ding, et al., 2007) :

$$\rho_w = \bar{\rho}_w \omega_w \quad \text{Eq III-6}$$

$$\rho_n = \bar{\rho}_n (1 - \omega_w) \quad \text{Eq III-7}$$

En combinant les expressions Eq III-6 et Eq III-7 dans la relation Eq III-1, les égalités suivantes sont vérifiées:

$$\rho = \omega_n \bar{\rho}_n + \omega_w \bar{\rho}_w = \bar{\rho}_n + \omega_w (\bar{\rho}_w - \bar{\rho}_n) \quad \text{Eq III-8}$$

Notons que l'Eq III-8 est vérifiée en chaque point du domaine, en particulier loin de l'interface. Si par exemple, l'observateur se place en un point de la phase  $w$  (respectivement  $n$ ), alors  $\omega_n$  (respectivement  $\omega_w$ ) est nulle et la densité du système vaut  $\rho_w$  (respectivement  $\rho_n$ ).

Il est vérifié également que la vitesse des espèces chimiques obéit à la loi de vitesse suivante :

$$\omega_w \mathbf{v}_w + \omega_n \mathbf{v}_n = \mathbf{v} \quad \text{Eq III-9}$$

Où  $\mathbf{v}$  est la vitesse totale du système. Ainsi, les vitesses des espèces chimiques loin de l'interface sont indiscernables de la vitesse totale du système. Sur le volume de mélange, la déviation entre la vitesse de l'espèce chimique et de la vitesse du système est appelée vitesse de diffusion  $\mathbf{u}$  :

$$\mathbf{u}_j = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}, \forall j \in \{w, n\} \quad \text{Eq III-10}$$

L'utilisation de Eq III-2 avec la définition Eq III-10 permet de trouver la propriété suivante :

$$\sum_{j \in \{w, n\}} \omega_j \mathbf{u}_j = \mathbf{0} \quad \text{Eq III-11}$$

L'emploi de l'équation Eq III-11 pour la dérivation du système de Cahn-Hilliard fait l'objet de discussions (Ding, et al., 2007). Dans cet article, seules les vitesses de diffusions sont supposées s'annuler de

sorte que  $\mathbf{u}_n = -\mathbf{u}_w$  à l'interface, et ce afin de forcer l'hypothèse d'incompressibilité du système même dans le cas de fluides à densité très différentes. En effet, sous cette forme, le système ne permet pas de retrouver systématiquement la forme usuelle de Navier-Stokes. Cependant, la relation utilisée dans (Ding, et al., 2007) est en contradiction avec les origines physiques des grandeurs utilisées dans (Gray & Miller, 2014) et reprises dans ces travaux. Les conséquences de cette formulation seront illustrées dans la suite. La conservation de la masse de chaque espèce chimique au cours du temps impose les relations suivantes :

$$\frac{\partial(\rho\omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_w\mathbf{v}_w) - r_w = 0 \text{ sur } \Omega \quad \text{Eq III-12}$$

$$\frac{\partial(\rho\omega_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_n\mathbf{v}_n) - r_n = 0 \text{ sur } \Omega \quad \text{Eq III-13}$$

Où les termes  $r_j$  sont des termes de réactions chimiques entre espèces présentes en solution. La conservation de la masse au cours du temps Eq III-3 assure que :

$$\sum_{j \in \{w,n\}} r_j = 0, \forall j \in \{w,n\} \quad \text{Eq III-14}$$

La répartition de la masse de chaque espèce massique dans le système est donc gouvernée par les équations Eq III-12 et Eq III-13. En utilisant la relation Eq III-2, il n'est cependant pas nécessaire de résoudre les deux équations, mais simplement de suivre l'évolution de la fraction massique d'une des deux espèces composant le mélange afin de résoudre le système. La suite de ces travaux se focalisera ainsi spécifiquement sur les variations de concentrations de la phase  $w$  au cours du temps définies par l'Eq III-12. En introduisant la définition de la vitesse diffusive pour l'espèce  $w$   $\mathbf{u}_w$ , l'équation Eq III-12 se développe sous la forme :

$$\frac{\partial(\rho\omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_w\mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\omega_w\mathbf{u}_w) - r_w = 0 \quad \text{Eq III-15}$$

Également, il est possible de sommer les équations Eq III-12 et Eq III-13 pour trouver la variation globale de la masse dans l'interface en utilisant la définition Eq III-1 et Eq III-14 :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0 \quad \text{Eq III-16}$$

L'expression Eq III-16 permet de calculer la variation de masse volumique dans le système étudié, composé de deux espèces chimiques. Il est important de noter que cette dernière n'est *a priori* pas nulle : les évolutions de fraction massique de chaque espèce au cours du temps entraînent des variations locales de la masse de la solution, notamment à l'interface. Cette remarque est davantage mise en avant par l'introduction de l'expression de la masse volumique du mélange définie Eq III-8 dans l'équation de conservation de la masse globale du système (Eq III-16), qui permet de dériver la relation suivante :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}_n + \omega_w(\bar{\rho}_w - \bar{\rho}_n))}{\partial t} + \nabla \cdot ((\bar{\rho}_n + \omega_w(\bar{\rho}_w - \bar{\rho}_n))\mathbf{v}) = 0 \quad \text{Eq III-17}$$

En particulier, si la masse volumique de chaque espèce en solution est constante dans le temps comme nous l'avons supposé précédemment, l'équation Eq III-17 devient :

$$(\bar{\rho}_w - \bar{\rho}_n) \frac{\partial\omega_w}{\partial t} + (\bar{\rho}_w - \bar{\rho}_n) \nabla \cdot (\omega_w\mathbf{v}) = 0 \quad \text{Eq III-18}$$

Ainsi, bien que conservée à l'échelle du système, la masse de la solution peut varier localement (à l'interface) en fonction de la fraction massique des espèces présentes.

**Table III-1: Synthèse des lois de conservation des espèces opérées sur chaque domaine**

Domaine	$\Omega_w$	$\Omega_{wn}$	$\Omega_n$
Propriétés du domaine	$\omega_w = 1$ $\mathbf{v}_w = \mathbf{v}$ $\mathbf{u}_w = \mathbf{0}$	$\omega_w + \omega_n = 1$ $\mathbf{v}_n + \mathbf{v}_w = \mathbf{v}$ $\omega_w \mathbf{u}_w + \omega_n \mathbf{u}_n = \mathbf{0}$	$\omega_w = 0$ $\mathbf{v}_w = \mathbf{0}$ $\mathbf{u}_w = \mathbf{0}$
Conservation dans de la masse dans la phase	$\frac{\partial(\bar{\rho}_w \omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_w \omega_w \mathbf{v}_w) = 0$	$\frac{\partial(\rho \omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{v}_w) - r_w = 0$ $\frac{\partial(\rho \omega_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_n \mathbf{v}_n) - r_n = 0$	$\frac{\partial(\bar{\rho}_n \omega_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_n \omega_n \mathbf{v}_n) = 0$
Conservation globale de la masse	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$		

## 2. Équations de conservation de la quantité de mouvement dans le système

Les considérations sur la composition du système sont à présent utilisées pour écrire les équations de conservation de la quantité de mouvement au sein du domaine. Pour chacune des espèces présentes, les lois usuelles de variation de la vitesse dans un domaine Eulérien s'appliquent (Gray & Miller, 2014). Si aucun transfert n'intervient lors de réactions chimiques entre espèce, la loi de conservation du moment cinétique s'écrit:

$$\frac{\partial(\rho \omega_w \mathbf{v}_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{v}_w \mathbf{v}_w) - \rho \omega_w \mathbf{g}_w - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}}_w = 0 \quad \text{Eq III-19}$$

$$\frac{\partial(\rho \omega_n \mathbf{v}_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) - \rho \omega_n \mathbf{g}_n - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}}_n = 0 \quad \text{Eq III-20}$$

Où  $\mathbf{g}$  et  $\underline{\mathbf{t}}$  représentent respectivement les forces volumiques et le tenseur de contraintes internes associées à chacune des espèces. En sommant les équations de conservation des vitesses relatives de chaque espèce (Eq III-19 et Eq III-20), une loi de conservation sur la vitesse globale du système peut être dérivée :

$$\frac{\partial(\rho(\omega_w \mathbf{v}_w + \omega_n \mathbf{v}_n))}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\omega_w \mathbf{v}_w \mathbf{v}_w + \omega_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n)) - \rho(\omega_w \mathbf{g}_w + \omega_n \mathbf{g}_n) - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}} = 0 \quad \text{Eq III-21}$$

Comme précédemment, il est possible de sommer les relations Eq III-2 et Eq III-9 afin d'obtenir une relation faisant uniquement apparaître la vitesse globale du système, sans distinction d'espèce chimique :

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho(\omega_w \mathbf{g}_w + \omega_n \mathbf{g}_n) - \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}} = 0 \quad \text{Eq III-22}$$

Les mêmes observations que précédemment sur la variation de la masse volumique s'appliquent aussi dans Eq III-22. À l'interface, ce paramètre devient une variable du problème, et on ne peut sortir  $\rho$  des opérateurs de dérivation. Une synthèse des lois de conservation dans les différents domaines est donnée Table III-2. Les inconnues recherchées sont la fraction massique de l'espèce  $w$  et la vitesse globale de la solution  $\{\omega_w; \mathbf{v}\}$ , associées au système formé des équations Eq III-9, Eq III-16 et Eq III-22 regroupées dans Eq III-23:

$$\frac{\partial(\rho \omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{u}_w) - r_w = 0 \quad \text{Eq III-23}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho (\omega_w \mathbf{g}_w + \omega_n \mathbf{g}_n) - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}} = 0$$

Dans l'état, le système Eq III-23 n'est pas fermé car le nombre d'inconnues est supérieur au nombre d'équations. En particulier, il est nécessaire de caractériser les flux diffusifs de chaque espèce chimiques à l'interface, les forces volumiques et les contraintes internes. La prochaine partie de ce chapitre est dédiée à l'établissement des lois de fermeture pour caractériser ces termes manquants, et augmenter le nombre d'équation au système Eq III-23 ou diminuer le nombre de variables d'intérêt.

**Table III-2: Synthèse des équations de conservation de la quantité de mouvement valable sur chaque domaine**

Domaine	$\Omega_w$	$\Omega_{wn}$	$\Omega_n$
Propriétés du domaine	$\omega_w = 1$ $\mathbf{v}_w = \mathbf{v}$ $\mathbf{u}_w = \mathbf{0}$	$\omega_w + \omega_n = 1$ $\mathbf{v}_n + \mathbf{v}_w = \mathbf{v}$ $\omega_w \mathbf{u}_w + \omega_n \mathbf{u}_n = \mathbf{0}$	$\omega_w = 0$ $\mathbf{v}_w = \mathbf{0}$ $\mathbf{u}_w = \mathbf{0}$
Conservation dans de la quantité de mouvement des espèces	$\frac{\partial (\bar{\rho}_w \mathbf{v}_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_w \mathbf{v}_w \mathbf{v}_w) - \bar{\rho}_w \mathbf{g}_w - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}}_w = 0$	$\frac{\partial (\rho \omega_w \mathbf{v}_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{v}_w \mathbf{v}_w) - \rho \omega_w \mathbf{g}_w - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}}_w = 0$ $\frac{\partial (\rho \omega_n \mathbf{v}_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) - \rho \omega_n \mathbf{g}_n - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}}_n = 0$	$\frac{\partial (\bar{\rho}_n \mathbf{v}_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_n \mathbf{v}_n \mathbf{v}_n) - \bar{\rho}_n \mathbf{g}_n - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}}_n = 0$
Conservation globale de la quantité de mouvement	$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho (\omega_w \mathbf{g}_w + \omega_n \mathbf{g}_n) - \nabla \cdot \underline{\underline{\mathbf{t}}} = 0$		

### 3. Relations de fermeture

#### i) Caractérisation des flux diffusifs

La caractérisation de la diffusion des espèces à l'interface est nécessaire afin de résoudre les équations de conservation de la fraction massique de l'espèce  $w$  dans le domaine. Les méthodes d'interface diffuses relient ces flux de diffusion à la variation de potentiel chimique des espèces concernées dans le domaine (Alpak, et al., 2016; Anderson, et al., 1998; Ding, et al., 2007). Cette définition est de plus compatible avec les relations de fermeture définies dans la TCAT (Gray & Miller, 2014):

$$\omega_w \mathbf{u}_w = -M \nabla \mu_w \quad \text{Eq III-24}$$

$M$  est appelée coefficient de mobilité de l'interface. Il peut varier en fonction de la fraction massique des espèces (Alpak, et al., 2016) ou être considéré constant (Jacqmin, 2000). Le potentiel chimique  $\mu_w$  peut être déterminé à partir de la variation de l'énergie d'Helmholtz  $\mathcal{H}$  dans le domaine par rapport aux variations de fraction massique (Alpak, et al., 2016; Lee, et al., 2014):

$$\mu_w = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \omega_w} = \frac{\partial}{\partial \omega_w} \int_{\Omega} h \, dV \quad \text{Eq III-25}$$

Avec toujours  $\Omega = \Omega_w \cup \Omega_{wn} \cup \Omega_n$  et où  $h$  est la densité massique d'énergie libre dans le système. La dérivation du système de Cahn-Hilliard (Cahn & Hilliard, 1958) consiste à supposer que l'énergie libre d'un système hors équilibre est une fonction de la composition locale du mélange, mais aussi de la

variation de composition dans un voisinage proche en chaque point observable. On peut alors écrire  $h(\mathbf{x})=h(\omega_w, \nabla \omega_w, \nabla^2 \omega_w, \dots)$ . En écrivant un développement limité de l'énergie libre d'Helmholtz à partir de l'énergie d'un mélange homogène à l'équilibre  $h^0(\omega_w, 0, 0, \dots) = h^0(\omega_w)$ , on obtient :

$$h(\omega_w, \nabla \omega_w, \nabla^2 \omega_w, \dots) = h^0(\omega_w) + \frac{\partial h}{\partial \nabla \omega_w} \nabla \omega_w + \frac{\partial h}{\partial \nabla^2 \omega_w} \nabla^2 \omega_w + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial (\nabla \omega_w)^2} \nabla \omega_w : \nabla \omega_w + \dots \quad \text{Eq III-26}$$

La densité d'énergie libre d'Helmholtz  $h^0$  pour un mélange homogène est thermodynamiquement définie en fonction de la différence d'énergie interne  $\Delta U$  et de l'entropie  $\Delta S$  du mélange par rapport aux espèces prises collectivement mais sans interactions. Pour un système à la température  $T$ , cette relation peut s'écrire (Gray & Miller, 2014; Lee, et al., 2014):

$$h^0(\omega_w) = \Delta U - T \Delta S \quad \text{Eq III-27}$$

Une dérivation précise de chacun des termes de Eq III-27 est donnée dans (Cahn & Hilliard, 1958; Lee, et al., 2014). L'entropie d'un mélange est définie par la relation de Boltzmann en physique statistique comme le logarithme du rapport entre le nombre de configurations possibles des molécules de chacune des espèces chimiques à l'interface. Ramenée à des grandeurs massiques, on trouve la relation sous la forme :

$$\Delta S = -kv \left( \omega_w \ln(\omega_w) + (1 - \omega_w) \ln((1 - \omega_w)) \right) \quad \text{Eq III-28}$$

Où  $k$  est la constante de Boltzmann et  $v$  une constante multiplicative permettant de passer des grandeurs molaires à des variables massiques. De même, l'énergie interne du mélange peut être calculée à partir du potentiel d'interaction des molécules, en utilisant la théorie des champs moyens (seul un nombre limité de particules dans le voisinage immédiat de la molécule considérée interagit avec elle). En notant  $E$  le potentiel d'interaction des particules par unité de masse, l'énergie libre du système prend la forme (Lee, et al., 2014) :

$$\Delta U = E \omega_w (1 - \omega_w) \quad \text{Eq III-29}$$

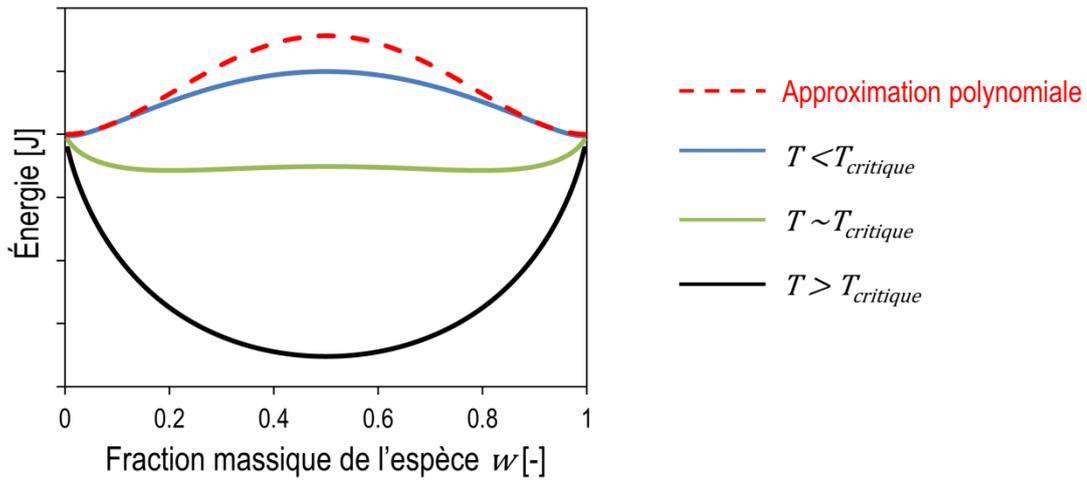
En combinant les expressions Eq III-28 et Eq III-29, il est possible de réécrire Eq III-27 l'expression de l'énergie libre d'Helmholtz du mélange:

$$h^0(\omega_w) = E \omega_w (1 - \omega_w) + Tkv \left( \omega_w \ln(\omega_w) + (1 - \omega_w) \ln((1 - \omega_w)) \right) \quad \text{Eq III-30}$$

L'expression Eq III-30 est tracée en fonction de la fraction massique de l'espèce  $w$  sur la Figure III-3, et ce pour des valeurs différentes de la température  $T$ . Pour des températures élevées (*i.e.* proche ou supérieure à la température critique du système), l'énergie du système présente un minimum très stable en fonction des variations de fraction massique (voir Figure III-3 courbe pleine noire). Pour des systèmes plus éloignés de cette température (inférieure à la température critique du système  $T_{critique}$ ), on voit que le système devient instable pour des valeurs de fraction massique intermédiaire. Deux points d'équilibre émergent autour de concentrations proches de 0 et 1, correspondant au maximum et minimum de  $\omega_w$ .

Fréquemment, lors de l'utilisation des méthodes d'interfaces diffuses, l'énergie libre d'Helmholtz d'un mélange homogène donné par Eq III-30 est approchée par une expression polynomiale possédant les mêmes minimums (Alpak, et al., 2016). L'utilisation d'une fonction polynomiale permet d'accentuer les zones de stabilité de l'énergie libre du système autour des concentration d'équilibre, tout en appuyant le caractère instable des concentrations intermédiaires (pente plus forte pour  $\omega_w \in [0.2; 0.8]$ ), ce qui est avant tout recherché lors de la modélisation d'écoulements multiphasiques. L'expression suivante est choisie :

$$h^0(\omega_w) \approx \frac{1}{4} \omega_w^2 (1 - \omega_w)^2 \quad \text{Eq III-31}$$



**Figure III-3: Expression de l'énergie libre d'Helmholtz d'un mélange homogène en fonction de la fraction massique  $\omega_w$ .**

Pour des températures  $\theta < \theta_{critique}$ , l'utilisation d'une fonction polynomiale capture les zones d'équilibre et accentue le caractère instable des concentrations intermédiaires.

L'équation Eq III-31 est insérée dans l'équation Eq III-26. Par des arguments d'isotropie du système, la dérivation de l'énergie libre d'Helmholtz  $h$  par les gradients de fraction molaire doit obéir à des propriétés d'invariance par symétrie et rotation. Les termes de dérivations d'ordre 1 et les termes croisés sont alors nuls, tandis que les termes restant sont constants. On notera  $\kappa_1 = \partial h / \partial (\nabla \omega_w)$ ,  $\kappa_2 = \partial h / \partial (|\nabla \omega_w|^2)$  etc... La relation Eq III-26 peut alors s'écrire :

$$h(\omega_w, \nabla \omega_w) = h^0(\omega_w) + \kappa_1 \nabla^2 \omega_w + \kappa_2 |\nabla \omega_w|^2 + \dots \quad \text{Eq III-32}$$

De plus, seuls les termes de dérivation d'ordre inférieur ou égaux à 2 sont conservés. L'énergie libre d'Helmholtz du système s'écrit :

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} h^0(\omega_w) + \kappa_1 \nabla^2 \omega_w + \kappa_2 |\nabla \omega_w|^2 dV \quad \text{Eq III-33}$$

Il est possible de simplifier cette expression en intégrant par partie le second terme et en supposant que le gradient de fraction massique soit nul au bord. Ainsi, les termes de dérivées secondes sont éliminés, et le système s'écrit plus simplement :

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} h^0(\omega_w) + \bar{\kappa} |\nabla \omega_w|^2 dV \quad \text{Eq III-34}$$

Avec  $\bar{\kappa} = \kappa_2 - \partial \kappa_1 / \partial \omega_w$ . Il ne reste alors plus qu'à dériver l'expression Eq III-34 par rapport à la fraction massique de l'espèce  $w$  afin d'obtenir l'expression du potentiel chimique, conformément à la relation Eq III-25. L'équation précédente Eq III-34 est celle initialement dérivée par Cahn et Hilliard (Cahn & Hilliard, 1958). Il peut alors être montré que la variable  $\bar{\kappa}$  est fortement liée à la taille de l'interface  $l$ .

L'utilisation des méthodes d'interfaces diffuses dans le domaine de la mécanique des fluides provient des travaux fondateurs de Van der Waals sur la capillarité. Sur des arguments de nature thermodynamique, il est possible de définir la tension de surface d'un fluide par rapport au profil de composition d'équilibre de son interface pour des fluides à une température donnée (Van der Waals, 1979). Cette approche fournit une justification à l'emploi des méthodes de champs de phase dans une description purement macroscopique à l'échelle du continu des systèmes multiphasiques, qui s'éloigne des applications initiales du système de Cahn-Hilliard. Dans ce contexte, l'étude des paramètres du système d'équation a été rigoureusement menée (Jacqmin, 1999; Jacqmin, 2000; Anderson, et al., 1998) afin d'assurer la pertinence des résultats observés, et le bon comportement de ces méthodes. Des améliora-

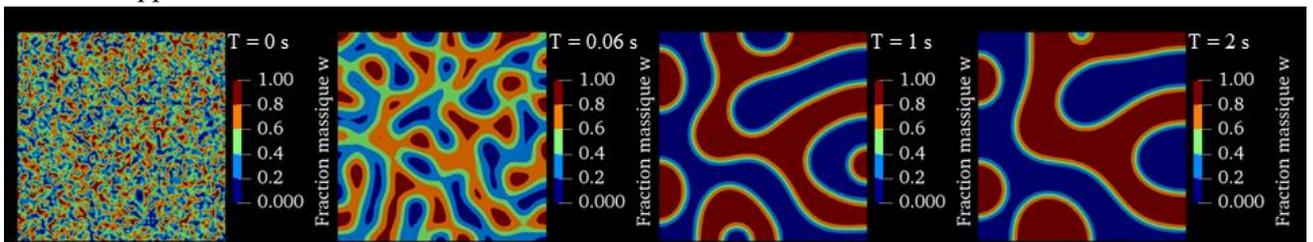
tions successives des équations surviennent dans la littérature afin d'adapter les équations initiales à une gamme de plus en plus étendue de problèmes (Ding, et al., 2007; Alpak, et al., 2016).

Pour correspondre aux observations de Van Der Walls, qui définit la tension de surface comme provenant d'une minimisation de l'énergie d'Helmholtz du système, il convient de réécrire l'expression Eq III-34 afin de faire apparaître les forces capillaires dans l'expression de l'énergie du système :

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} \kappa \sigma \left( \epsilon^{-1} h^0(\omega_w) + \frac{\epsilon}{2} |\nabla \omega_w|^2 \right) dV \quad \text{Eq III-35}$$

Où le paramètre  $\kappa$  est un terme de normalisation afin de vérifier la loi de Young-Laplace et  $\epsilon$  une mesure de l'épaisseur de l'interface (*i.e.* corrélée de façon non linéaire à  $l$ ). En utilisant l'expression de l'énergie libre d'Helmholtz donnée par Eq III-35, il est remarqué que :

- Loin des zones de mélange,  $\omega_w$  vaut 1 ou 0, qui sont les minimums de la fonction polynomiale définie par Eq III-31. Par conséquent, la contribution des gradients est nulle, et l'énergie libre  $\mathcal{H}$  vaut 0 loin de l'interface. C'est une propriété recherchée étant donné qu'aucune vitesse de diffusion ne doit exister au sein des phases. L'expression Eq III-35 est donc compatible avec les conditions énoncées précédemment.
- L'énergie libre telle que nous l'avons définie Eq III-35 est la somme de deux termes : un terme d'interaction à longue distance piloté par  $h^0$  et un terme d'interaction à courte portée, piloté par les gradients de fractions massiques autour du point considéré. Les interactions à longue distance régularisent la solution sur des temps longs : ce terme tend à faire évoluer le système vers une configuration similaire à un mélange homogène où deux phases distinctes émergent et interagissent le moins possible (minimisant le nombre et la longueur des interfaces). Le second terme quant à lui régit les processus courts et sépare les particules fluides appartenant à deux espèces différentes sur de petites zones de tailles proportionnelles à  $\epsilon$ . La dynamique de la diffusion décrite par l'équation Eq III-35 est donc la suivante : pour un mélange aléatoire, les particules appartenant à la même espèce chimique vont s'agréger jusqu'à former une multitude de petites structures de tailles similaires (Figure III-4). Une fois les gradients de concentration plus faibles dans le système, ces structures vont diffuser sur une dynamique plus lente pilotée par le terme d'interaction non-local. Cette dynamique est très recherchée pour la description de la décomposition spinodale dans les alliages (Cahn & Hilliard, 1958; Lee, et al., 2014) et récemment la croissance tumorale (Chatelin, et al., 2011). En imposant un coefficient de mobilité non-constant, il est possible de faire perdurer les petites structures sur des temps plus longs. Cependant, en mécanique des fluides, la dynamique de la décomposition pour un système composé de deux phases présente peu d'intérêt : il est peu probable que les espèces soient aléatoirement disposées dans le système à l'instant initial. Ainsi, seule une mobilité d'interface  $M$  constante sera utilisée. La répartition des phases dans le système sera initialement proche de la solution de Eq III-35, et on utilisera cette équation dans une approche « quasi-statique » pour fournir à l'interface une tension de surface qui s'opposera aux forces convectives.



**Figure III-4: Séparation spontanée de deux espèces chimiques initialement mélangées de façon aléatoire.**

Les images montrent les temps  $T = 0$  (état initial),  $T = 0.06$  (formation rapide des structures intermédiaires),  $T = 1$  et  $T = 2$  (dynamique plus lente de séparation jusqu'à l'obtention de deux phases distinctes séparées par une fine interface)

- Comme énoncé précédemment, l'introduction de la tension de surface dans l'expression de l'énergie libre d'Helmholtz dans la forme donnée par Eq III-35 permet de lier directement les forces capillaires à l'énergie du système. L'énergie libre d'Helmholtz (Eq III-35) est défini comme l'excès d'énergie libre par unité de surface pour qu'une interface soit à l'équilibre (Jacqmin, 1999; Ding, et al., 2007). En dimension 1, pour une interface à l'équilibre entre deux phases le long d'une droite, la tension de surface obéit à la loi :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa \sigma \epsilon \left( \frac{\partial \omega_w}{\partial x} \right)^2 dV \quad \text{Eq III-36}$$

Cette relation permet alors de caractériser le paramètre constant  $\kappa$  à partir du profil de composition d'équilibre analytique correspondant (Jacqmin, 2000; Ding, et al., 2007). Soit  $\omega_w^*(\mathbf{x})$  le profil de composition qui minimise l'énergie libre d'Helmholtz  $\mathcal{H}$ . Il faut alors résoudre (Ding, et al., 2007):

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \omega_w^*} = \kappa \sigma (\epsilon^{-1} h^0 (\omega_w^*)' - \epsilon \Delta \omega_w^*) = 0 \quad \text{Eq III-37}$$

En utilisant la forme polynomiale de  $h^0$  définie par Eq III-31, on trouve que le profil de fraction massique  $\omega_w^*(\mathbf{x})$  est caractérisé par la fonction suivante :

$$\omega_w^*(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left( \frac{\mathbf{x}}{2\sqrt{2}\epsilon} \right) \quad \text{Eq III-38}$$

En remplaçant l'expression de la fraction massique obtenue Eq III-38 dans l'expression de la tension de surface Eq III-36, il vient que cette expression est vérifiée si et seulement si  $\kappa = 6\sqrt{2}$  (Alpak, et al., 2016; Jacqmin, 1999; Ding, et al., 2007).

Ces dernières considérations permettent de déterminer entièrement les flux de diffusion dans l'équation d'évolution de la fraction massique de l'espèce  $w$  dans le domaine et au cours du temps. En rappelant que le potentiel chimique à l'interface de deux espèces chimiques est calculé comme la variation d'énergie libre d'Helmholtz par rapport aux variations de concentrations massique des espèces, il vient le système de Cahn-Hilliard convectif :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega_w \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\rho M \nabla \mu_w) - r_w &= 0 \\ \mu_w = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \omega_w} &= 6\sqrt{2}\sigma (\epsilon^{-1} h^0 (\omega_w)' + \epsilon \Delta \omega_w) \end{aligned} \quad \text{Eq III-39}$$

#### ii) Forces volumiques présentes dans le système

L'expression des forces de volume  $\mathbf{g}$  est à présent recherchée dans les lois de conservation de la quantité de mouvement. Il serait envisageable de considérer les effets gravitaires sur les fluides présents dans le système. Cependant, à moins que le contraire ne soit indiqué, la plupart des simulations seront effectuées sans considération de ces effets, soit parce qu'il est supposé qu'ils n'influent pas sur l'écoulement, soit parce que nous considéreront des simulations en deux dimensions sur une surface de milieux poreux perpendiculaire à la direction d'application des effets gravitaires.

L'utilisation des méthodes d'interface diffuse permet plusieurs traitements des forces capillaires sur le système. Une approche consiste à ajouter des termes de contraintes capillaires dans le tenseur de contrainte du système (Anderson, et al., 1998; Jacqmin, 2000). Une autre méthode prend en compte ces interactions par l'introduction d'une force volumique (Alpak, et al., 2016) sur l'ensemble du domaine. Dans ces travaux, la seconde méthode a été utilisée. Il est possible de noter que la définition du terme source le plus adapté pour rendre compte des effets de tensions de surface est abondamment discutée dans la littérature (Jacqmin, 2000; Kim, 2005). Généralement, pour des fluides incompressibles, l'expression suivante reste cependant privilégiée :

$$\rho(\omega_w \mathbf{g}_w + \omega_n \mathbf{g}_n) = \rho \mathbf{g} = \mu_w \nabla \omega_w \quad \text{Eq III-40}$$

## Dérivation des équations de conservation

Jaqmin (Jacqmin, 1999) a montré que l'utilisation de l'expression Eq III-40 entraîne une redéfinition de la contrainte hydrostatique qui est alors la somme de la composante usuelle (pression) et d'un terme supplémentaire dépendant de la fraction massique  $\omega_w$  qui correspond à la pression capillaire.

### iii) Caractérisation rhéologique du système

Il reste à présent à déterminer la contrainte interne du mélange pour la loi de conservation de la quantité de mouvement (l'Eq III-23). Le système est composé de deux espèces chimiques : l'espèce  $w$ , supposée viscoélastique selon une loi d'Oldroyd-B, et l'espèce  $n$ , supposée Newtonienne. La contrainte interne de l'écoulement en un point d'observation s'écrit comme une combinaison des contraintes de chaque espèce (aucun transfert de contrainte n'est considéré entre entités chimiques) selon la loi suivante (Gray & Miller, 2014):

$$\underline{\mathbf{t}} = -p\underline{\mathbf{I}} + \underline{\boldsymbol{\tau}} \quad \text{Eq III-41}$$

Le tenseur des extra-contraintes est décomposé selon la somme des contributions de la rhéologie de chaque espèce. Ainsi, pour l'espèce  $w$ , on obtient :

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}_w = \omega_w \eta_{s,w} \underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_{v,w} \quad \text{Eq III-42}$$

$$\omega_w \lambda_w \overset{\nabla}{\underline{\boldsymbol{\tau}}}_{v,w} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_{v,w} = \omega_w \eta_{p,w} \underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}}$$

Où  $\lambda_w$  est le temps de relaxation des polymères,  $\eta_{p,w}$  leur viscosité tandis que  $\eta_{s,w}$  est la viscosité newtonienne du solvant et  $\underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}} = (\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v})$  est le taux de déformation du fluide. Le tenseur des extra-contraintes pour l'espèce  $n$  est quant à lui uniquement Newtonien :

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}_n = \omega_n \eta_n \underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}} \quad \text{Eq III-43}$$

En injectant Eq III-42 et Eq III-43 dans Eq III-41 et en utilisant Eq III-2, les contraintes agissant sur l'écoulement sont entièrement déterminées par le système suivant :

$$\underline{\mathbf{t}} = -p\underline{\mathbf{I}} + (\omega_w \eta_{s,w} + \omega_n \eta_n) \underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_{v,w} \quad \text{Eq III-44}$$

$$\omega_w \lambda_w \overset{\nabla}{\underline{\boldsymbol{\tau}}}_{v,w} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_{v,w} = \omega_w \eta_{p,w} \underline{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}}$$

### iv) Termes de réactions chimiques

La résolution de l'équation de conservation de la fraction massique de l'espèce  $w$  nécessite de caractériser le terme de réaction chimique  $r_w$ . Dans le cas des systèmes solution de polymère/huile pour la récupération améliorée du pétrole, il est nul ; aucune réaction chimique n'ayant lieu entre les deux fluides, même à l'interface.

Pour la simulation numérique de la croissance tumorale en revanche, ce terme de réaction pilote la dynamique du système, et il est caractérisé à partir d'observations expérimentales. Il fera l'objet de plus amples discussions dans le chapitre dédié. Par souci de généralité de notre modèle, le terme  $r_w$  sera conservé par la suite dans le système d'équation, et il sera supposé dépendre uniquement des variables primaires pour être totalement déterminé.

### v) Hypothèses simplificatrices et système final

L'introduction des relations de fermeture dans le système dérivé à partir des lois de conservations Eq III-23 permet de trouver le système d'équation suivant pour les 4 variables primaires et 1 variable interne :  $\{\omega_w; \mu_w; \mathbf{v}; p; \underline{\boldsymbol{\tau}}_{v,w}\}$ :

$$\frac{\partial(\rho\omega_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_w \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\rho M \nabla \mu_w) - r_w = 0 \quad \text{Eq III-45}$$

$$\mu_w = 6\sqrt{2}\sigma(\epsilon^{-1}h^0(\omega_w)') + \epsilon\Delta\omega_w$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) - \mu_w\nabla\omega_w + \nabla p - \nabla \cdot \left( (\omega_w\eta_{s,w} + \omega_n\eta_n)(\nabla\mathbf{v} + \nabla^T\mathbf{v}) \right) - \nabla \cdot \underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} = 0$$

$$\omega_w\lambda_w\underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} + \underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} = \omega_w\eta_{p,w}(\nabla\mathbf{v} + \nabla^T\mathbf{v})$$

Dans Eq III-45, il est notable que le potentiel chimique de l'espèce  $w$  est en vérité une variable interne du système, qui est entièrement déterminée par la variable  $\omega_w$ ; néanmoins, il est numériquement avantageux de traiter la formulation mathématique sous cette forme afin de réduire l'ordre de dérivation des opérateurs apparaissant dans l'équation de conservation de la fraction massique de  $w$  (Alpak, et al., 2016).

Le système d'équation Eq III-45 forme le système d'équation complet lié à la modélisation du problème d'intérêt. Il est possible de le simplifier en remarquant que dans les applications présentées en introduction les masses volumiques des espèces chimiques formant le système présentent peu de variations :  $\bar{\rho}_w \approx \bar{\rho}_n = \bar{\rho}$ . En utilisant cette hypothèse, la masse volumique de l'écoulement définie par Eq III-8 devient constante, à la fois spatialement et temporellement. L'introduction de cette hypothèse dans le système Eq III-45 permet d'écrire :

$$\frac{\partial\omega_w}{\partial t} + \omega_w\nabla \cdot \mathbf{v} - M\Delta\mu_w - \frac{r_w}{\bar{\rho}} = 0$$

$$\mu_w = 6\sqrt{2}\sigma(\epsilon^{-1}h^0(\omega_w)') + \epsilon\Delta\omega_w$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

Eq III-46

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v} - \mu_w\nabla\omega_w + \nabla p - \nabla \cdot \left( (\omega_w\eta_{s,w} + \omega_n\eta_n)(\nabla\mathbf{v} + \nabla^T\mathbf{v}) \right) - \nabla \cdot \underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} = 0$$

$$\omega_w\lambda_w\underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} + \underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{v},w} = \omega_w\eta_{p,w}(\nabla\mathbf{v} + \nabla^T\mathbf{v})$$

Ce qui permet, entre autre, de retrouver l'hypothèse d'un écoulement incompressible.

#### 4. Mise sous forme adimensionnelle du système d'équations

Afin d'évaluer les effets relatifs de chaque phénomène physique introduit dans le système Eq III-45, le système est mis sous forme adimensionnelle. Les variables sont décomposées selon le produit d'une grandeur dimensionnée constante pour un type d'application (désigné par l'indice  $c$ ) et une variable sans unité durant la simulation libre d'évoluer (désigné par l'exposant '\*'). Il est désigné par  $d_c$  la distance caractéristique du domaine et  $v_c$  la vitesse moyenne de l'écoulement. Le temps caractéristique est alors donné par  $t_c = d_c/v_c$ . La contrainte moyenne du système est donnée par  $p_c = \underline{\mathbf{\tau}}_{\mathbf{c}\mathbf{v},w} = \bar{\rho}(v_c)^2$ .

La liste des nombres adimensionnels résultant de cette opération ainsi que leur expression est donnée Table III-3. Une évaluation générale de ces nombres est également précisée afin d'évaluer le régime général des écoulements étudiés. Des caractérisations plus approfondies de ces grandeurs seront développées pour chaque application d'intérêt.

Il peut être intéressant de justifier certaines des valeurs présentes dans la Table III-3. Tout d'abord, la définition du nombre de Péclet employée ici n'est pas celle habituellement adoptée dans l'étude des milieux poreux. Cette définition (propre aux systèmes de Cahn-Hilliard (Alpak, et al., 2016)) mesure en réalité le rapport entre la convection de l'interface et sa rigidité, donnée par les flux de masse dans la zone de mélange.

**Table III-3 : Liste des nombres sans dimensions**

Symboles	Significations physique	Définition	Évaluation
Re	Inertie/Viscosité	$\frac{\bar{\rho} v_c d_c}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}}$	$o(10^{-5})$
Ca	Viscosité/Capillarité	$\frac{(\eta_{s,w} + \eta_{p,w}) v_c}{\sigma}$	$O(10^{-4})$
Pe	Inertie/force interfaciale	$\frac{v_c d_c \epsilon}{M \sigma}$	$O(1)$
$\beta$	Contribution élastique dans la viscosité	$\frac{\eta_{p,w}}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}}$	$[0 ; 1]$
Wi	Force élastique/inertie	$\frac{\lambda v_c}{d_c}$	$O(10)$
$\delta$	Épaisseur interface/taille du système	$\frac{\epsilon}{d_c}$	$o(10^{-2})$

Lorsque les deux fluides considérés seront supposés complètement immiscibles, le nombre de Péclet se doit d'être élevé : seul le champ de vitesse pilotera la vitesse de l'interface. Le paramètre  $\delta$  sera constant tout au long des simulations. Idéalement, l'indépendance de ce paramètre dans le comportement du système sera recherchée. L'influence des forces élastiques données par le nombre de Weissenberg (Wi) est choisie de façon à être non négligeable sur le système. Ces valeurs peuvent être supérieures à celles observées dans les applications d'intérêt : afin de mesurer l'influence des forces élastiques, il est possible que leurs effets soient exacerbés par rapport à la réalité.

Le système Eq III-45 peut alors se réécrire sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* &= 0 \\
 \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* - \frac{1}{\text{Re}} \nabla^* \cdot \left( \left( \omega_w (1 - \beta) + \omega_n \frac{\eta_n}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}} \right) (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) \right) \\
 - \frac{1}{\text{ReCa}\delta} \mu_w^* \nabla^* \omega_w + \nabla^* p^* - \nabla^* \cdot \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* &= 0 \\
 \omega_w \text{Wi} \frac{\nabla}{\text{Re}} \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* + \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* &= \frac{\omega_w \beta}{\text{Re}} (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) \\
 \frac{\partial \omega_w}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \omega_w - \frac{1}{\text{Pe}} \Delta \mu_w^* - \frac{v_c r_w}{d_c \bar{\rho}} &= 0 \\
 \mu_w^* = \frac{\mu_w \epsilon}{\sigma} = 6\sqrt{2} (h^0(\omega_w)' + \delta^2 \Delta^* \omega_w) &
 \end{aligned}
 \tag{Eq III-47}$$

Des considérations effectuées Table III-3, on peut considérer que les forces inertielles mises en jeu sont particulièrement faibles. Une approximation possible du système Eq III-47 consiste alors à négliger les termes d'inertie afin de se ramener aux équations de Stokes pour la conservation de la quantité de mouvement du système. Ainsi, les équations peuvent s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* &= 0 \\
 \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} - \frac{1}{\text{Re}} \nabla^* \cdot \left( \left( \omega_w (1 - \beta) + \omega_n \frac{\eta_n}{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}} \right) (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) \right) \\
 - \frac{1}{\text{ReCa}\delta} \mu_w^* \nabla^* \omega_w + \nabla^* p^* - \nabla^* \cdot \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* &= \mathbf{0} \\
 \omega_w \text{Wi} \frac{\nabla}{\text{Re}} \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* + \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* &= \frac{\omega_w \beta}{\text{Re}} (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*)
 \end{aligned}
 \tag{Eq III-48}$$

$$\frac{\partial \omega_w}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \omega_w - \frac{1}{\text{Pe}} \Delta \mu_w^* - \frac{v_c r_w}{d_c \bar{\rho}} = 0$$

$$\mu_w^* = 6\sqrt{2}(h^0(\omega_w))' + \delta^2 \Delta^* \omega_w$$

## 5. Conditions aux limites

Il reste à compléter le système Eq III-48 avec des conditions de bord afin de pouvoir résoudre le système. Les limites du domaine sont dénotées par  $\Gamma$ . La force motrice de l'écoulement est soit un gradient de pression entre l'entrée et la sortie du système, soit une vitesse d'entrée de l'écoulement imposée. Dans ce dernier cas, une condition de traction nulle en sortie est prescrite. Ces conditions se traduisent alors par :

$$p = p_{in} \text{ sur } \Gamma_{inlet} \text{ et } p = p_{out} \text{ sur } \Gamma_{outlet} \quad \text{Eq III-49}$$

Ou bien :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in} \text{ sur } \Gamma_{inlet} \text{ et } \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_{outlet} \quad \text{Eq III-50}$$

Sur les parois du système, une condition de non-glissement est imposée :

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_{walls} \quad \text{Eq III-51}$$

Il peut être noté que cette condition est compatible avec une vitesse non-nulle du point triple dans les méthodes d'interfaces diffuses (Jacqmin, 1999). La dynamique de ce point particulier sera étudiée plus en détail par la suite.

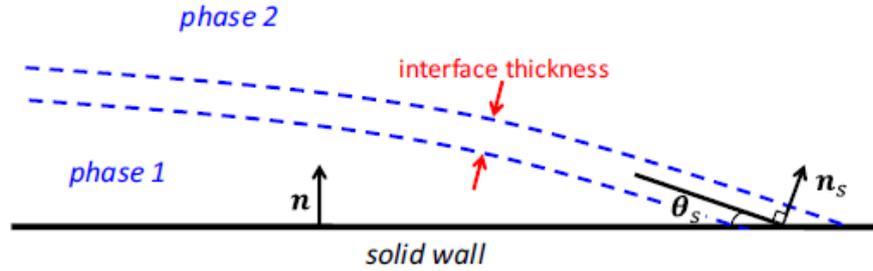


Figure III-5: Condition de mouillabilité pour les méthodes d'interface diffuse (Alpak, et al., 2016).

Afin de vérifier la conservation de la masse, aucun flux diffusif venant de l'extérieur du domaine n'est considéré. Par conséquent, la condition suivante est vérifiée pour l'ensemble des bords :

$$\frac{\partial \mu_w}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ sur } \Gamma \quad \text{Eq III-52}$$

Une condition de mouillabilité est utilisée pour la fraction massique de l'espèce  $w$  sur les parois liquides/solides (Alpak, et al., 2016). En notant  $\mathbf{n}_{wn}$  la normale de l'interface, elle est orientée de la phase  $w$  vers la phase  $n$  suivant la loi :

$$\mathbf{n}_{wn} = \frac{\nabla \omega_w}{|\nabla \omega_w|} \quad \text{Eq III-53}$$

Il est cependant possible de prescrire directement  $\mathbf{n}_{wn}$  d'après les axes du repère cartésien  $(O, \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$  sur lequel est défini le système en connaissance de l'angle de contact  $\theta_s$  d'après la loi de Young. En effet, l'angle entre la paroi solide et la normale  $\mathbf{n}_{wn}$  est donné par une mesure  $\pi/2 - \theta_s$  (voir Figure III-5). On obtient alors la relation :

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_s\right) = \frac{\nabla \omega_w \cdot \mathbf{n}}{|\nabla \omega_w - (\mathbf{n} \cdot \nabla \omega_w) \cdot \mathbf{n}|} \quad \text{Eq III-54}$$

En prescrivant ensuite la dérivée sortante de la fraction massique de l'espèce  $w$  sur les bords, une condition de mouillabilité est obtenue :

$$\frac{\partial \omega_w}{\partial \mathbf{n}} = \nabla \omega_w \cdot \mathbf{n} = \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_s\right) |\nabla \omega_w - (\mathbf{n} \cdot \nabla \omega_w) \cdot \mathbf{n}| \text{ sur } \Gamma_{\text{walls}} \quad \text{Eq III-55}$$

Dans le cas d'un problème dynamique, l'angle  $\theta_s$  sera supposé être l'angle d'avancée (constant) plutôt que l'angle de contact statique. En utilisant la relation donnée en Eq III-55, imposer une condition de flux nul sur la fraction massique revient à imposer un angle de contact de  $90^\circ$ . La prise en compte d'une variation dynamique de l'angle  $\theta_s$  suite à une modification des propriétés physico-chimiques ou topologiques du milieu a été discutée dans (Alpak, et al., 2016). Il est possible de modifier Eq III-55 en ajoutant un terme temporel :

$$\frac{\partial \omega_w}{\partial \mathbf{n}} = \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_s\right) |\nabla \omega_w - (\mathbf{n} \cdot \nabla \omega_w) \cdot \mathbf{n}| - \nu_{fr} \frac{\partial \omega_w}{\partial t} \text{ sur } \Gamma_{\text{walls}} \quad \text{Eq III-56}$$

Où  $\nu_{fr}$  est un terme de friction. La prise en compte de la dynamique de l'angle de contact reste malgré tout difficile à prendre en compte, d'autant plus que peu de caractérisations expérimentales de  $\nu_{fr}$  existent dans la littérature. Ainsi, à moins que le contraire ne soit précisé, des conditions d'angle constantes seront prescrites.

Pour les surfaces non-mouillantes, des conditions de Dirichlet sur la fraction massique de l'espèce  $w$  sont prescrites à la place de l'équation Eq III-55.

$$\omega_w = 0 \text{ sur } \Gamma_{\text{walls}} \quad \text{Eq III-57}$$

En entrée et en sortie du domaine, des conditions de non flux sont utilisées :

$$\frac{\partial \omega_w}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ sur } \Gamma_{\text{inlet}} \text{ et } \Gamma_{\text{outlet}} \quad \text{Eq III-58}$$

## D. Résolution numérique

Dans cette partie, nous détaillons la stratégie numérique utilisée afin de simuler numériquement le système d'équation Eq III-48 muni des conditions de bord décrites dans la partie précédente. Nous verrons tout d'abord brièvement comment la méthode des éléments finis est mise en œuvre afin de modéliser les écoulements d'intérêt. Afin de garantir le couplage entre les phénomènes physiques étudiés (capillarité, rhéologie ...), le problème est résolu de façon monolithique : une fois discrétisées spatialement et temporellement, les équations sont assemblées dans un unique système linéaire et résolues itérativement. Des discussions sur la stratégie numérique employée suivront. Enfin, quelques cas tests seront étudiés préliminairement avant d'employer le modèle pour les applications visées durant ces travaux.

### 1. Discrétisation du système d'équation

La méthode des éléments finis continus classique cherche à approximer la solution d'une équation (ou d'un système) différentiel par une fonction continue par morceau, dont la restriction à un domaine de l'espace est un polynôme d'un degré arbitraire. Cette méthode est souvent employée en science de l'ingénieur du fait de liens forts avec l'analyse fonctionnelle, et le contrôle relatif des erreurs commises lors de la discrétisation des équations en ajustant l'ordre des polynômes qui approchent la solution.

Le recours à la méthode des éléments finis requiert tout d'abord la mise sous forme variationnelle faible des équations de conservations précédentes. Pour un système d'équation, cela consiste à multiplier chaque relation par une fonction continue infiniment dérivable, puis d'intégrer le produit sur l'ensemble du système  $\Omega$ . On obtient la formulation faible suivante: trouver  $\{p, v^*, \underline{\mathbf{v}}_{w}, \omega_w, \mu_w^*\} \in (Q \times N \times S \times P \times X)$  tel que  $\forall \{q, \mathbf{v}, \underline{\mathbf{g}}, \psi, \chi\} \in (Q \times N \times S \times P \times X)$ , le système suivant soit vérifié :

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* q \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\text{ReCa}\delta} \mu_w^* \nabla^* \omega_w \cdot \mathbf{v} \, dV + \int_{\Omega} \nabla^* p^* \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} \nabla^* \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* \cdot \mathbf{v} \, dV \\
 & \quad - \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Re}} \nabla^* \cdot \left( \left( \omega_w (1 - \beta) + \omega_n \frac{\eta_n}{\eta_{s,w}} \right) (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) \right) \cdot \mathbf{v} \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \omega_w \text{Wi} \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV + \int_{\Omega} \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV = \int_{\Omega} \frac{\omega_w \beta}{\text{Re}} (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV \\
 & \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_w}{\partial t^*} \chi \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \omega_w \chi \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Pe}} \Delta \mu_w^* \chi \, dV - \int_{\Omega} \frac{v_c r_w}{d_c \bar{\rho}} \chi \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \mu_w^* \psi \, dV - \int_{\Omega} 6\sqrt{2} (h^0(\omega_w)' + \delta^2 \Delta^* \omega_w) \psi \, dV = 0
 \end{aligned} \tag{Eq III-59}$$

En utilisant l'intégration par partie, puis le théorème de Green-Ostrogradski, il est possible de faire disparaître les dérivées d'ordre 2 dans le système variationnel Eq III-59. Les intégrales de surfaces permettent alors d'intégrer les conditions aux limites discutées précédemment. En particulier, la formulation variationnelle pour le potentiel chimique permet d'incorporer les conditions de mouillabilité. En notant  $\mathbf{n}$  la normale sortante des mailles du domaine :

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* q \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\text{ReCa}\delta} \mu_w^* \nabla^* \omega_w \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\Omega} p^* \underline{\mathbf{1}} \cdot \nabla^* \mathbf{v} \, dV + \int_{\Omega} \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v} \, dV \\
 & \quad + \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Re}} \left( \omega_w (1 - \beta) + \omega_n \frac{\eta_n}{\eta_{s,w}} \right) (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) \cdot \nabla^* \mathbf{v} \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \omega_w \text{Wi} \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV + \int_{\Omega} \underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV - \int_{\Omega} \frac{\omega_w \beta}{\text{Re}} (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_w}{\partial t^*} \chi \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \omega_w \chi \, dV - \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Pe}} \nabla^* \mu_w^* \nabla^* \chi \, dV - \int_{\Omega} \frac{v_c r_w}{d_c \bar{\rho}} \chi \, dV = 0 \\
 & \int_{\Omega} \mu_w^* \psi \, dV - \int_{\Omega} 6\sqrt{2} h^0(\omega_w)' \psi \, dV - \int_{\Omega} 6\sqrt{2} \delta^2 \nabla^* \omega_w \cdot \nabla^* \psi \, dV \\
 & \quad + \int_{\Gamma_{\text{walls}}} 6\sqrt{2} \delta^2 \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_s\right) |\nabla \omega_w - (\mathbf{n} \cdot \nabla \omega_w) \cdot \mathbf{n}| \psi \, dS = 0
 \end{aligned} \tag{Eq III-60}$$

En utilisant la méthode des éléments finis, les espaces de solutions Q, N, S, P, X sont choisis comme les sous-espaces des fonctions polynomiales par morceaux. Pour les systèmes d'équations, aussi appelés éléments finis mixtes, le choix des fonctions polynomiales à un impact déterminant sur le bon comportement numérique du modèle, notamment pour la modélisation des fluides viscoélastiques (Fortin & Pierre, 1989; Fortin & Guénette, 1995). Ces considérations ne seront pas abordées ici, et les espaces discrétisés considérés seront les éléments de Lagrange de degré 1 pour Q, P et X ; les éléments-vecteurs de Lagrange de degré 2 pour l'espace de la vitesse N et les éléments-tenseurs symétriques de degré 2 pour les contraintes viscoélastiques S, de façon à correspondre aux systèmes décrits dans (Hulsen, et al., 2005; Baaijens, 1998) en ce qui concerne la viscoélasticité.

Le calcul des intégrales se fait par une méthode de Gauss. Les espaces d'approximation choisis pour les variables d'intérêt étant polynomiaux, une estimation quasiment exacte de l'intégrale résultante est attendue. La variation temporelle du tenseur des contraintes viscoélastiques ainsi que de la fraction massique de l'espèce  $w$  se fait par la méthode d'Euler implicite. Le système obtenu est alors non-linéaire, à cause de l'expression de  $h^0(\omega_w)'$  qui est un polynôme de degré 3 en  $\omega_w$ , ainsi que l'apparition de la multiplication de deux variables inconnues,  $\mathbf{v}^*$  et  $\underline{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{v},w}^*$  dans l'expression de la dérivée convective supérieure du tenseur des extras contraintes. La résolution monolithique du problème emploie donc une approche itérative de Newton. Soit  $\underline{\mathcal{L}}$  l'opérateur différentiel discrétisé décrit par le sys-

tème Eq III-60, appliqué sur le vecteur solution  $U=(p, v^*, \underline{v}_w, \omega_w, \mu_w^*)$ . Sa jacobienne  $\underline{J}$  est calculée symboliquement à partir de la formulation faible (Alnaes, et al., 2015).

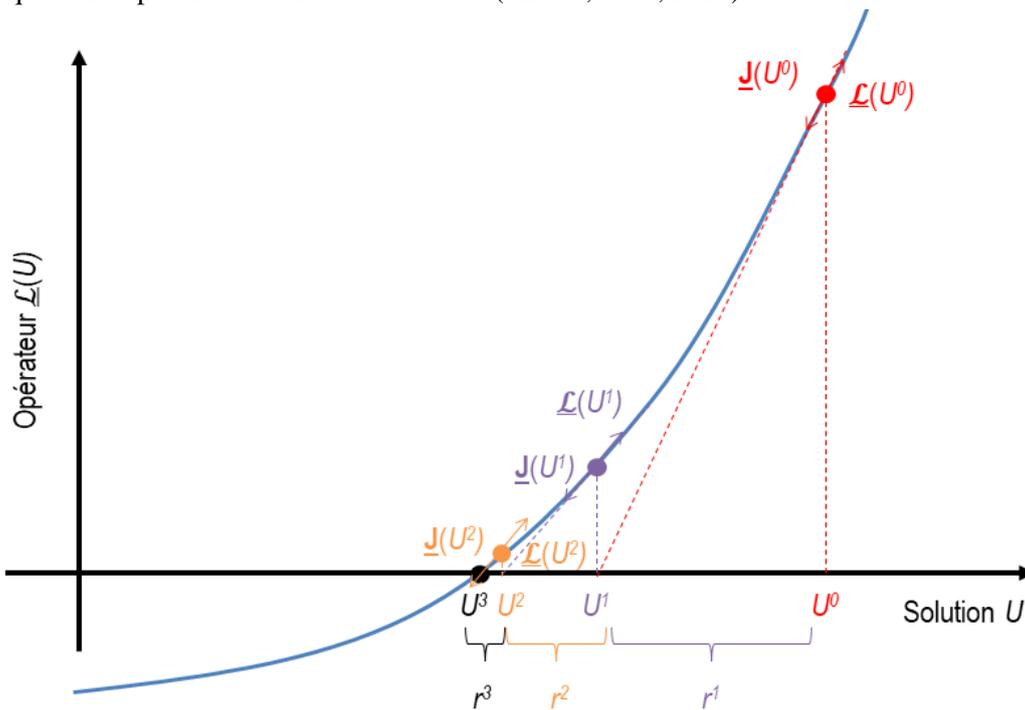


Figure III-6: Méthode de Newton pour rechercher le 0 d'une fonctionnelle non linéaire.

À chaque pas de temps, la  $k+1^{\text{ème}}$  approximation de la solution du problème est écrite sous la forme d'une somme entre une solution  $U^k$  (proche de la solution au temps recherché) et d'une perturbation  $r^k$

$$U^{k+1}(t) = U^k(t) + r^k \quad \text{Eq III-61}$$

En appliquant l'opérateur  $\underline{L}$  sur l'approximation précédente Eq III-61, il est possible d'écrire :

$$\underline{L}(U^{k+1}(t)) = \underline{L}(U^k(t) + r^k) = \underline{L}(U^k(t)) - \underline{J}(U(t))r^k \quad \text{Eq III-62}$$

Afin de converger itérativement vers la solution, le résidu  $r^k$  est calculé en recherchant  $\underline{L}(U^{k+1}(t))=0$ . Une illustration des itérations successives est illustrée Figure III-6. Algébriquement, cela revient à résoudre le système linéaire :

$$\underline{J}(U(t))r^k = -\underline{L}(U^k(t)) \quad \text{Eq III-63}$$

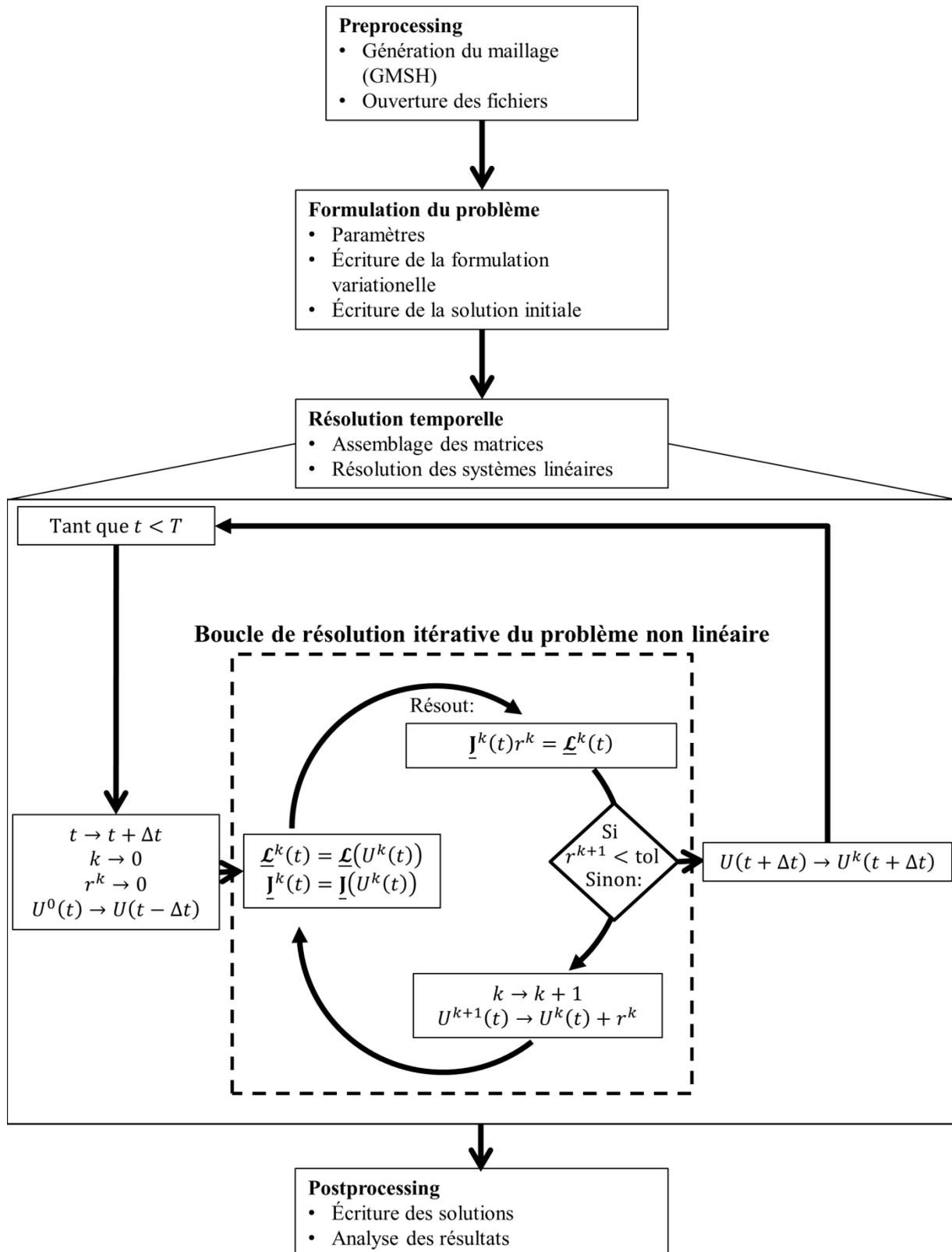


Figure III-7: Description schématique de l'algorithme numérique utilisé pour la résolution du problème Eq III-60

Le vecteur solution est ensuite mis à jour  $U^{k+1}(t) = U^k(t) + r^k$ . Par linéarisation successive du système Eq III-60, le résidu  $r^k$  diminue, ce qui signifie que la solution au temps suivant est de mieux en mieux approchée (Figure III-6). Lorsque le résidu est inférieur à une tolérance fixée, le système non linéaire est supposé converger, et l'algorithme passe au pas de temps suivant (Figure III-7). Chaque système

linéaire Eq III-63 est non-symétrique, et est par conséquent résolu par une méthode d'inversion directe. Le comportement numérique résultant est numériquement coûteux, mais est relativement robuste pour une large gamme de combinaisons des paramètres fournis Table III-3. La totalité de la discrétisation éléments-finis est effectué avec l'interface FEniCs (Alnaes, et al., 2015).

## 2. Discussion sur l'algorithme de résolution

L'algorithme de Newton permet de trouver la solution du système non-linéaire Eq III-60. Le choix d'une méthode monolithique (au contraire des méthodes itératives) permet d'assurer un fort couplage des équations précédentes tout en exploitant le schéma implicite d'Euler en conservant ainsi des pas de temps relativement élevés. En utilisant une mobilité d'interface constante, la non-linéarité ne semble pas poser de problème, et l'algorithme de Newton converge rapidement entre deux pas de temps suffisamment proches. L'utilisation de la méthode des éléments-finis permet d'assurer une très bonne prise en compte des conditions de bord, notamment la mouillabilité des phases, même pour des géométries complexes. Néanmoins, l'écriture d'un système monolithique suppose la résolution d'un système linéaire très grand (car il englobe la discrétisation de chaque variable sur le domaine) plusieurs fois par pas de temps, et entraîne ainsi des coûts numériques prohibitifs pour l'étude de domaines à résolution spatiale élevée.

Du point de vue du comportement du système discrétisé, des adaptations à la méthode des éléments finis sont nécessaires afin d'assurer le bon comportement de la méthode numérique. En particulier, les termes convectifs sont inconditionnellement instables pour des discrétisations de type Galerkin continu. Il convient de les stabiliser par des méthodes de décentrement.

Deux termes de convections apparaissent dans le système Eq III-48 : un terme dans la conservation de la masse de la fraction massique de l'espèce  $w$  et dans la dérivée tensorielle convective supérieure des contraintes viscoélastiques. La présence d'un terme de diffusion à l'interface dans la première équation stabilise naturellement le terme de convection pour les nombre de Péclet considérés. En revanche, pour le tenseur des contraintes viscoélastiques, aucune diffusion ne peut décentrer le terme de convection. À nombre de Weissenberg modéré, ce dernier devient prépondérant, et le schéma instable. Afin de corriger ce problème, une méthode de diffusion artificielle est introduite dans la formulation variationnelle de l'équation d'Oldroyd-B. Un terme de décentrement est appliqué uniquement sur le terme convectif (Baaijens, 1998), et la formulation variationnelle devient alors :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \omega_w W i \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV + \int_{\Omega} (\mathbf{u}_{\mathbf{v}}^* \cdot \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^*) \cdot (\xi \mathbf{v}_{\mathbf{v}}^* \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}) + \int_{\Omega} \underline{\mathbf{v}}_{v,w}^* : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV \\ = \int_{\Omega} \frac{\omega_w \beta}{\text{Re}} (\nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^{T,*} \mathbf{v}^*) : \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dV \end{aligned} \quad \text{Eq III-64}$$

Où  $\xi$  est une constante calculée en fonction de la taille moyenne du maillage et de la vitesse caractéristique  $v_c$ . Numériquement, on observe une bonne stabilisation du terme convectif en choisissant un terme qui décroît avec la taille du maillage. Soit  $h_c$  la taille caractéristique des mailles du domaine:

$$\xi = \frac{h_c}{2v_c} \quad \text{Eq III-65}$$

Lorsque la discrétisation spatiale du domaine est suffisamment fine, le terme  $h_c$  tend vers 0 et l'erreur numérique supplémentaire introduite par le terme de décentrement tend vers 0.

Pour autant, la convergence du modèle numérique n'est pas assurée pour tout nombre de Weissenberg. Une difficulté liée à la modélisation des fluides viscoélastiques est la divergence des solutions numériques obtenues pour des nombres de Weissenberg élevés (et donc des régimes très élastiques). Ce problème, souvent dénommé High Weissenberg Numerical Problem (HWNP) (Hulsen, et al., 2005; Spagnolie, 2015) est connu dans la littérature, et de nombreuses études ont cherché un moyen de le circonvenir. Parmi celles-ci, l'utilisation d'une formulation logarithmique pour l'équation d'Oldroyd-B permet de diminuer l'amplitude des variations du terme viscoélastique injectée dans l'équation de

Navier-Stokes, ce qui stabilise la solution. Cela représente une piste intéressante d'amélioration du schéma numérique pour des nombres de Weissenberg plus élevés que ceux considérés dans notre étude. Cependant, la mise en place d'une telle stratégie de résolution comporte certaines difficultés techniques liées à son implémentation dans FEniCs.

Enfin, il a été remarqué qu'en fonction du nombre de Péclet  $Pe$ , l'algorithme de résolution pouvait présenter des problèmes de stabilité dans la forme où il est présenté Figure III-7. Il a été montré que l'algorithme de Newton utilisé nécessite de fournir une solution initiale approchée de la solution du système afin de converger (voir Figure III-6). Or, pour les premiers pas de temps, la morphologie de l'interface est difficile à initialiser, notamment dans le cas de domaines complexes avec une mouillabilité faible ou très élevée. Si  $Pe \ll 1$ , les forces diffusives à l'interface sont largement dominantes par rapport aux forces convectives, et l'interface résiste à la mise en mouvement. Il peut en résulter des forces capillaires et des vitesses aberrantes sur les premières résolutions, le temps que l'interface trouve sa forme d'équilibre, avant d'être transportée. Pour résoudre ce problème, le système de Cahn-Hilliard seul peut être résolu au préalable, le temps de régulariser le profil initial de concentration de  $w$ . Une fois la forme de l'interface déterminée, celle-ci est passée en condition initiale du problème classique, et l'algorithme Figure III-7 suffit à résoudre le problème temporel.

### 3. Simulations numériques

Dans cette partie, plusieurs configurations numériques sont considérées afin d'étudier les propriétés du système d'équations Eq III-48. Tout d'abord, les bonnes prises en compte des effets capillaires et viscoélastiques seront évaluées indépendamment afin de s'assurer que chaque phénomène est correctement implémenté. Dans un second temps, l'étude des paramètres couplés sera considérée. Peu de solutions analytiques sur l'étude du problème complet existent dans les régimes d'écoulement qui nous intéressent. Les solutions obtenues seront donc analysées par rapport à quelques données expérimentales, et une étude de l'influence des paramètres sera menée.

#### i) Modélisation des forces capillaires

La première condition à vérifier lors de la simulation d'un écoulement multiphasique est l'implémentation correcte des forces capillaires discutées dans la première partie. Dans le cas statique, ces effets sont facilement vérifiables grâce à la loi de Young-Laplace.

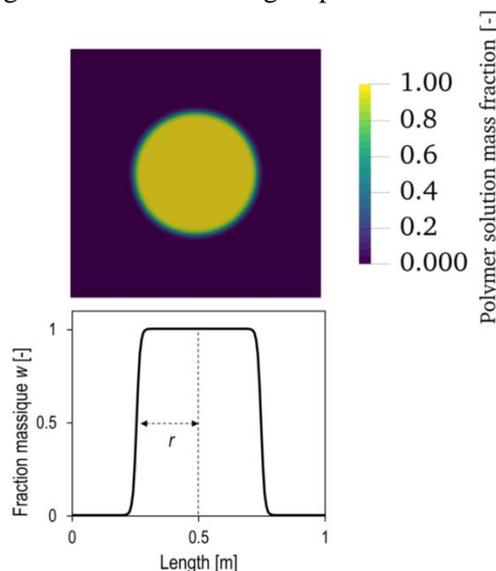
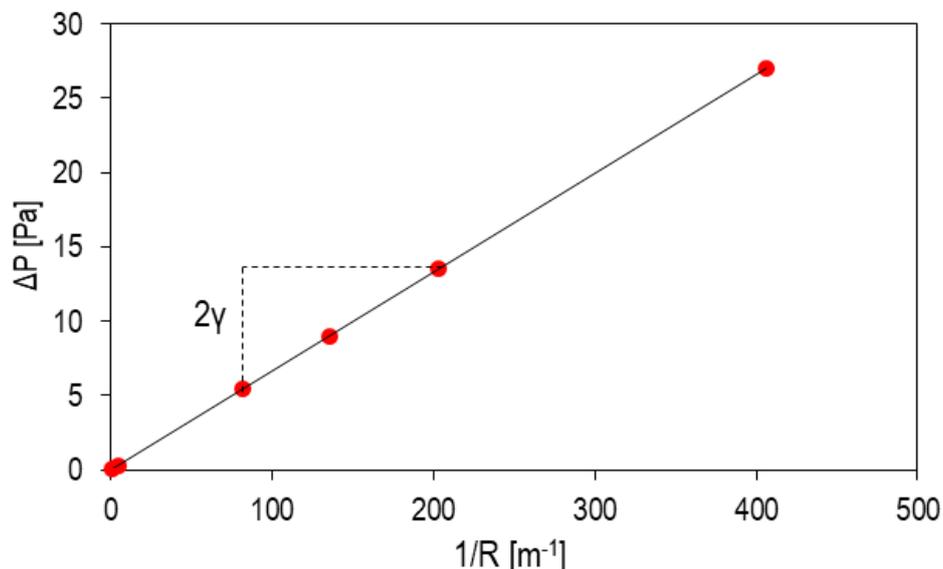


Figure III-8: Modélisation d'une goutte de fluide  $w$  en suspension dans la phase  $n$ .

La viscoélasticité de l'espèce chimique  $w$  est ignorée dans un premier temps. La configuration choisie et modélisée ici consiste à simuler une goutte en deux dimensions, de taille variable, en suspension

dans un autre fluide, similaire aux résultats montrés Figure III-8. Dans cette configuration, la goutte est tout d'abord initialisée comme un cercle plein de concentration  $\omega_w = 1$ . Ainsi, sur les premiers pas de temps, le système de Cahn-Hilliard passe d'une configuration à interface fine à une interface continue comme présentée Figure III-8. Cette opération est rapide, et une forme parfaitement circulaire avec une transition continue de concentration d'une phase à l'autre est obtenue. Il est possible de partir de configurations plus instables initialement, (tel un carré) ; la forme est alors régularisée rapidement suivant la dynamique décrite précédemment jusqu'à ce qu'une forme circulaire soit obtenue. Une fois la solution du système de Cahn-Hilliard obtenue, les forces de pression dans le domaine se stabilisent. La géométrie de la goutte reste constante dans le temps, et son rayon peut alors être calculé numériquement à partir du profil de concentration.

Une correspondance entre la pression à l'intérieur de la goutte et sa taille est recherchée. Sur la Figure III-9, une relation linéaire est retrouvée entre la différence de pression entre les deux fluides et l'inverse du rayon de la goutte. Le coefficient directeur de cette droite peut alors être caractérisé comme étant deux fois la tension de surface. Cette vérification permet de s'assurer que dans le cas statique, les forces capillaires sont correctement prises en compte par le modèle numérique dérivé précédemment. En revanche, la dynamique de l'interface n'est pas vérifiée par ce cas test.



**Figure III-9: Modélisation de la loi de Laplace par la méthode des interfaces diffuses.**

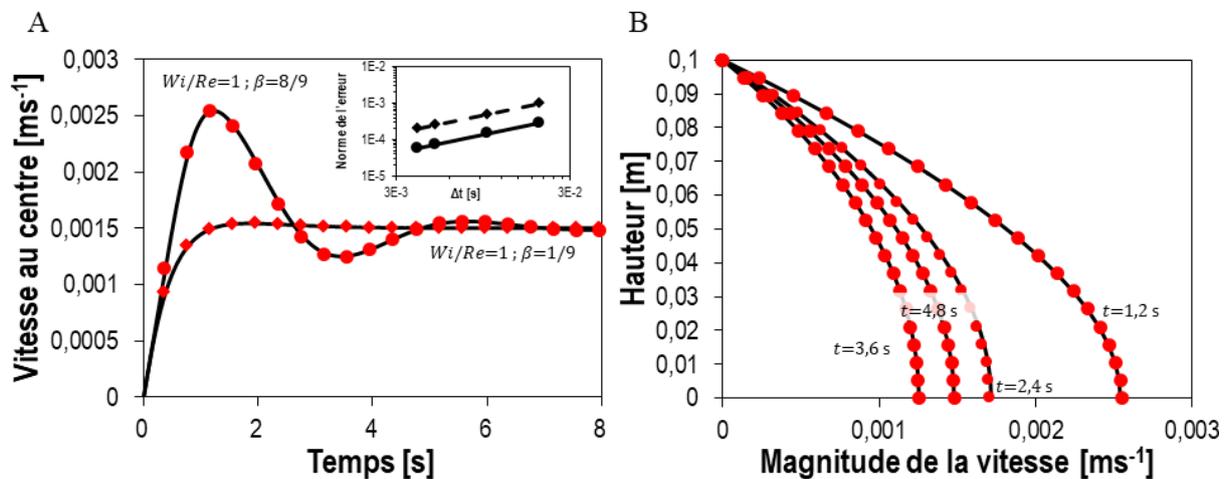
#### ii) Modélisation de la viscoélasticité

La bonne implémentation des contraintes viscoélastiques est ensuite étudiée grâce aux solutions analytiques existant pour le système Stokes-Oldroyd-B dans des géométries simples (voir par exemple (Pinilla, et al., 2016; Duarte, et al., 2008)). Le caractère multiphasique est ignoré ici. La solution analytique est développée dans le cas d'un fluide viscoélastique mis en mouvement par l'application soudaine d'un différentiel de pression entre l'entrée et la sortie d'un canal rectiligne. En fonction du rapport des forces élastiques et des forces inertielles, la vitesse du fluide présente un caractère transitoire sur des temps de l'ordre du temps de relaxation  $\lambda$  de l'équation d'Oldroyd-B (Figure III-10). Sur des temps plus longs, le fluide se comporte comme un fluide Newtonien de viscosité  $\eta_w = \eta_{s,w} + \eta_{p,w}$ , sans variation temporelle.

L'implémentation du système d'équations Eq III-60 dans ce cas permet d'obtenir les résultats montrés Figure III-10. On voit que pour les paramètres choisis, une bonne correspondance entre la solution analytique et la solution numérique est trouvée. De plus, une étude de la convergence temporelle du schéma montre qu'il est d'ordre 1 pour des élasticités modérées (conformément à ce qui est attendu par la méthode d'Euler). Pour des élasticités plus élevées, une telle analyse est difficile car le calcul de

la solution analytique requiert des opérations sur des flottants très grands, qui sont numériquement inaccessibles. Cependant, un bon comportement numérique est observable, et une diminution de l'erreur diminue avec le pas de temps et le maillage.

Il est possible de mesurer la relative importance des nombres de Weissenberg et d'Oldroyd à partir de la solution analytique présentée Figure III-10-A. Sur ces courbes, l'importance du nombre d'Oldroyd est démontrée : le profil de vitesse passe d'un régime dynamique proche de celui d'un fluide Newtonien à un régime purement élastique, où la vitesse oscille autour de son amplitude finale sur un temps non-négligeable. Le nombre d'Oldroyd exacerbe donc les propriétés élastiques du fluide provoqué par le nombre de Weissenberg. Si ce dernier est très faible, le nombre d'Oldroyd n'a que peu d'influence sur la dynamique du système qui reste alors proche de celle d'un fluide Newtonien. Cette observation est conforme à la définition de ce nombre : il mesure la part de viscosité due à l'introduction des polymères en solution sur la viscosité apparente du fluide. Ainsi, cette quantité ne renseigne pas sur l'élasticité, qui est entièrement mesurée par le nombre de Weissenberg : il renseigne sur l'importance des forces élastiques dans la solution, en partie à partir de l'élasticité des polymères, mais aussi par rapport à la vitesse et à la taille (structure) du milieu.



**Figure III-10: Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour un fluide viscoélastique soumis à un soudain gradient de pression.**

(A) Évolution temporelle de la magnitude de la vitesse sur l'axe de symétrie du domaine. Une étude de convergence temporelle est montrée dans l'insert supérieur à droite pour les faibles nombres élastiques. L'ordre du schéma déterminé ainsi est de 1. (B) Comparaison des profils de vitesse à différents temps entre la solution analytique et la solution numérique pour  $Wi/Re = 1$  and  $\beta=0.889$ .

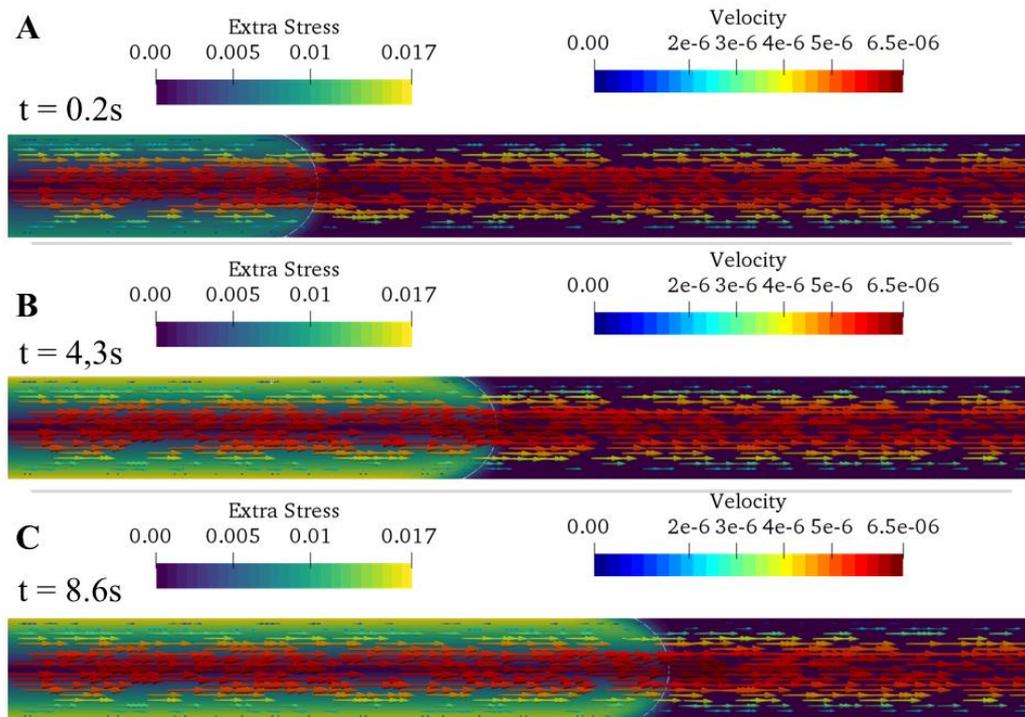
### iii) Écoulement de Poiseuille d'un fluide viscoélastique poussant un fluide Newtonien

Il reste à étudier les effets combinés de la viscoélasticité et de la capillarité dans une géométrie simple afin d'étudier le comportement du système complet. Pour cela, un débit entrant est imposé à l'entrée d'un domaine rectangulaire similaire aux géométries étudiées précédemment. Un exemple de simulation est détaillé sur la Figure III-11. Sur cette simulation, on remarque :

- L'interface (courbe blanche Figure III-11-A, B, C), mouillable avec  $\theta_s = 30^\circ$  est transportée bien qu'aucune condition n'ait été précisée pour le point de contact entre les deux fluides et la surface solide. La vitesse d'avancée de la zone de contact calculée est  $4.10^{-6} \text{ m.s}^{-1}$ , ce qui correspond à la vitesse moyenne dans le domaine. Dans ce modèle, cette vitesse est indépendante de l'angle de contact et du nombre capillaire, contrairement à d'autres points de l'interface, comme il sera vu par la suite.
- Le débit entrant étant imposé, la conservation de la quantité de mouvement impose que le débit reste identique tout le long du domaine, conformément à la Figure III-11 (flèches colorés). Par conséquent, dans cette configuration, l'aspect multiphasique est dissimulé par les propriétés de conservation. Il est cependant à noter que cette remarque confirme la conservation du volume comme décrit précédemment. Notons que numériquement, en fonction du nombre de

Péclet, une variation de la vitesse apparaît au niveau de l'interface, ou les vitesses de diffusion de chaque espèce se superposent à la vitesse convective.

- Les forces élastiques n'agissent que sur la phase mouillante. Le tenseur des extra-contraintes varie de façon continue au niveau de la zone de mélange. Pour une interface régulière ( $Pe \ll 1$ ), l'angle de mouillage ne semble pas influencer sur les forces viscoélastiques. L'aspect multiphasique semble de plus présenter un caractère stabilisant pour la simulation de la viscoélasticité, mais aucune étude numérique pouvant expliquer cette observation n'a été menée plus en avant durant ces travaux.



**Figure III-11: Simulation numérique d'un écoulement de Poiseuille multiphasique dont la phase entrante est viscoélastique.**

L'interface (ligne blanche) est déplacée par le champ de vitesse (flèches colorées). Dans la phase mouillante, les contraintes viscoélastiques émergent (isosurface en arrière-plan). Temps affichés :  $t = 0.2s$ ,  $t = 4.3s$  et  $t = 8.6s$ . Paramètres  $Re = 2.4e-05$  ;  $Pe = 0.0072$  ;  $Ca = 0.24$  ;  $\delta = 0.03$  ;  $Wi = 0.48$  ;  $\beta = 9.00e-01$

- Enfin, il est remarquable que les variations de la pression le long du domaine peuvent se découper suivant trois domaines (Figure II-12). À vitesse imposée, une observation de la viscosité des fluides introduits est la perte de charge durant l'écoulement, visible en traçant la variation de pression dans le domaine. Une fois le régime stationnaire établi (*i.e.* les contraintes viscoélastiques établies) une perte de charge constante est observée dans la phase  $w$ . La pression décroît linéairement, d'un facteur proportionnel à la viscosité totale du fluide  $\eta_{w,s} + \eta_{w,p}$ . La même observation est remarquable dans la phase non mouillante  $n$ , dont la viscosité  $\eta_n$  ici a été choisie plus élevée. Entre les deux, sur l'interface, un saut de pression est clairement identifiable. L'amplitude de ce saut est régie en partie par les forces capillaires introduites, mais aussi par l'angle d'avancée du fluide.

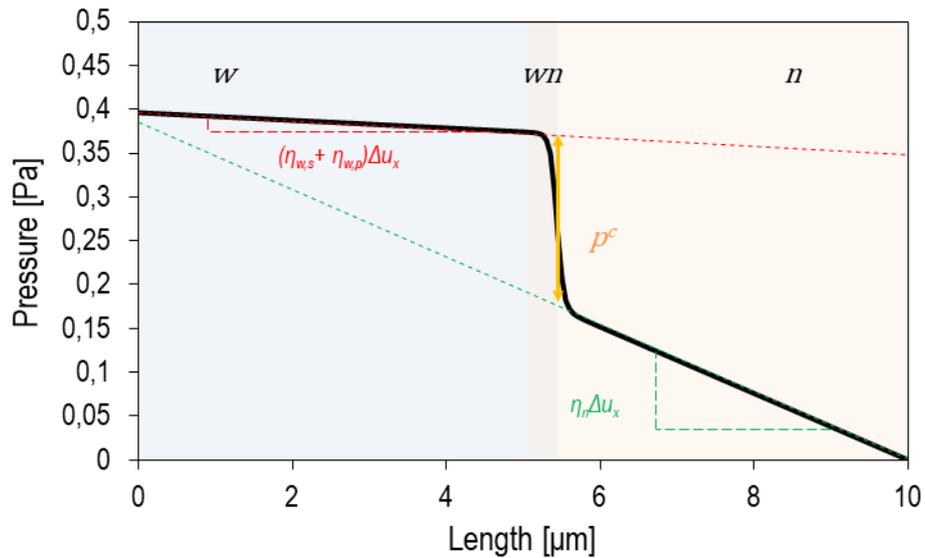


Figure III-12: Variation de la pression le long de l'axe de symétrie d'un tube capillaire en dimension 2.

En modifiant la mouillabilité de l'interface, il est possible d'inverser le sens du saut de pression à l'interface. Dans le cas de la Figure III-12, l'interface était non-mouillante. Le saut de pression était négatif ; il aurait été possible de bloquer l'avancée de la phase  $w$  si un gradient de pression avait été imposé dans le domaine au lieu d'une vitesse d'injection. La différence de la condition de mouillabilité sur la solution du système numérique est illustrée sur la Figure III-12.

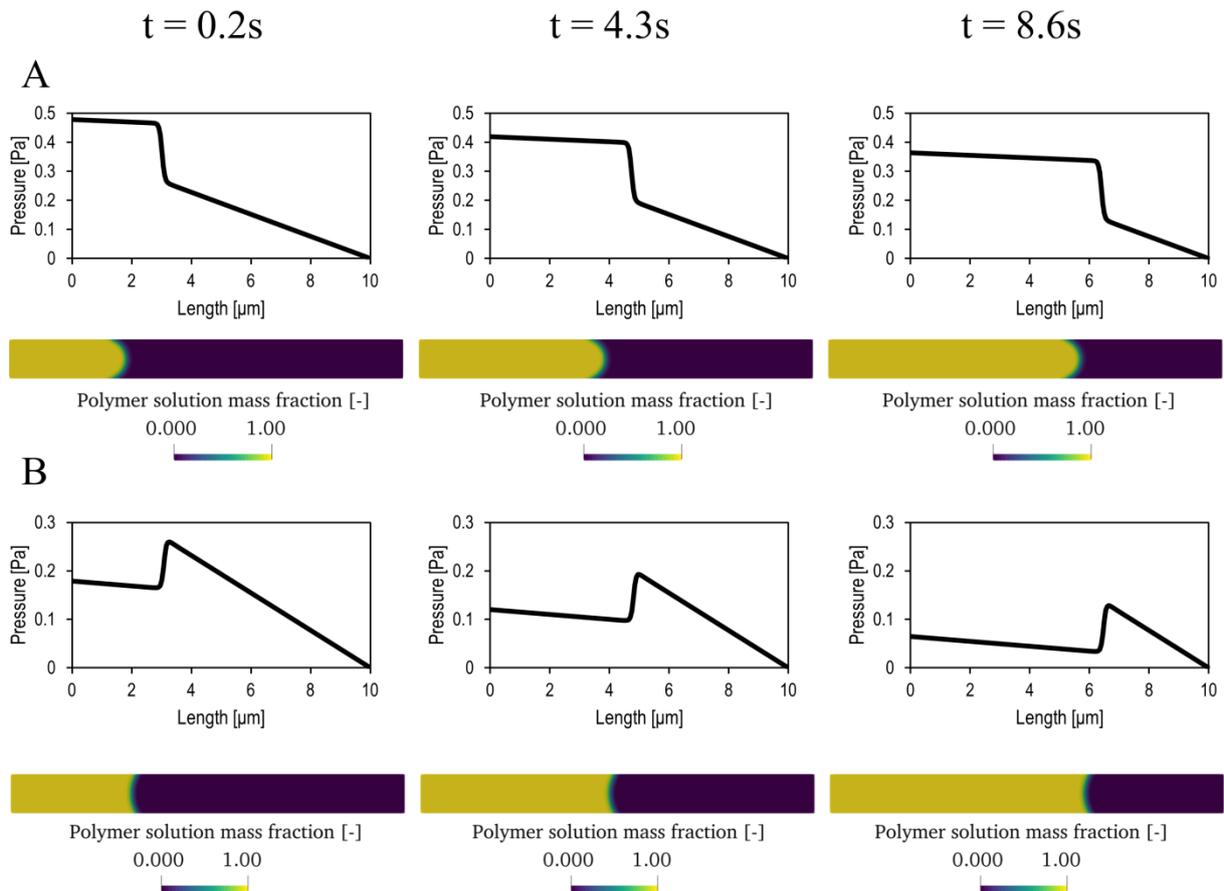
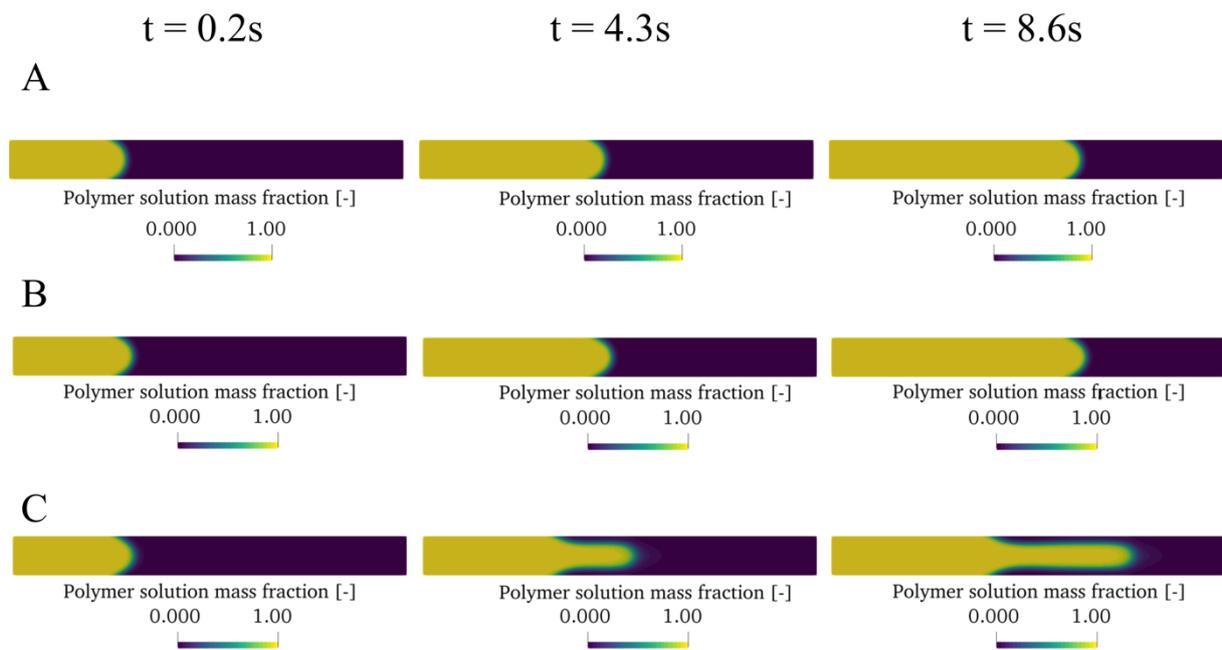


Figure III-13: Effet de la mouillabilité sur la pression dans le domaine (profil) et la fraction massique de l'espèce  $w$ : (A) Interface non mouillante ( $\theta_s = 30^\circ$ ) (B) Interface mouillante ( $\theta_s = 120^\circ$ ).

Les solutions sont données pour différents temps :  $t = 0.2s$ ,  $t = 4.3s$  et  $t = 8.6s$ .

Pour chaque angle d'avancée, la pression dans le domaine diminue au cours du temps (profils de pression Figure III-13-A, B). Cependant, il est visible que dans le cas d'une phase  $w$  mouillante, la pression au temps  $t=8,6s$  est bien plus faible que dans le cas d'une interface non mouillante ; le saut de pression négatif maintenant une pression élevée en entrée du domaine pour un débit d'injection identique. Les interfaces ont la même vitesse malgré la différence de mouillabilité des phases. C'est la vitesse moyenne du champ de vitesse imposé par le débit d'entrée. Sur Figure III-13, le point triple avance bien qu'aucune condition de glissement n'ait été prescrite contrairement à d'autres modèles de la littérature (e.g. modèle de Cox (Pinilla, et al., 2016)) ; ce dernier avance naturellement en fonction des paramètres du système de Cahn-Hilliard et des forces convectives agissant sur le système.

Il a été montré (Jacqmin, 2000) que ces méthodes donnaient quand même des résultats proches des méthodes d'interfaces fines comme la méthode de level-set avec glissement au point de contact à l'échelle continue. En fonction des systèmes à l'étude, un paramétrage de la vitesse d'avancée du point triple est possible : que ce soit la longueur de glissement dans les modèles explicites comme la mobilité de l'interface (ou nombre de Péclet dans le cas adimensionné) pour les modèles à interfaces diffuses afin de correspondre aux observations expérimentales. Dans cette étude, il a été plusieurs fois montré que si le nombre de Péclet était trop faible (i.e. lorsque les forces de diffusion à l'interface dominaient les forces convectives) alors l'interface pouvait se mouvoir sans qu'aucune force convective n'agisse dessus. Une caractérisation microscopique faite dans (Anderson, et al., 1998; Jacqmin, 2000) postule que pour une utilisation en hydrodynamique, les modèles d'interface diffuses doivent présenter des mobilités d'interface de l'ordre de  $10^{-15}$  pour être réaliste (ou  $O(\epsilon^2)$ ). Dans ces travaux, il sera assuré que le nombre de Péclet soit suffisamment grand pour inclure cette observation.



**Figure III-14: Influence du nombre de Peclet sur le transport de l'interface : (A)  $Pe = 7.2 \cdot 10^{-3}$  (B)  $Pe = 7.2$  (C)  $Pe = 7200$ .**

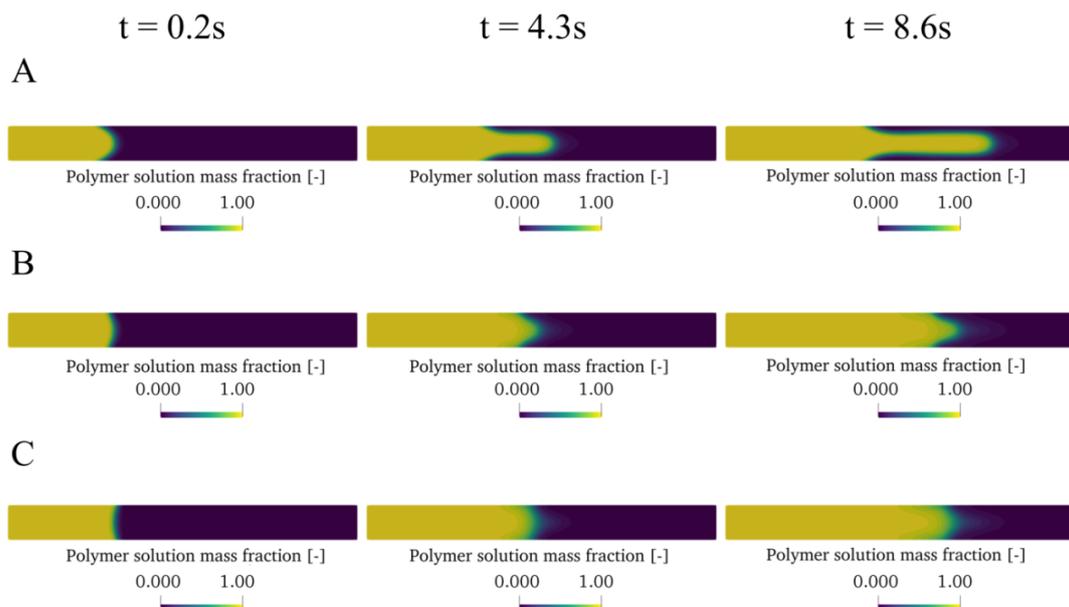
Lorsque les forces convectives sont dominantes sur les forces diffusives de l'interface, cette dernière se déforme et une instabilité apparaît.

On voit ainsi l'influence des différents paramètres dans cette configuration simple : le nombre de Reynolds régit la vitesse à l'intérieur du domaine ; le nombre capillaire agit sur la différence de pression entre les phases ; les nombres de Weissenberg et d'Oldroyd contrôlent l'apparition des forces viscoélastiques. Le nombre élastique, parfois défini comme le rapport entre le nombre de Reynolds et le nombre de Weissenberg (Duarte, et al., 2008) contrôle l'établissement du régime permanent dans le cas monophasique. Dans la configuration étudiée, où l'aspect multiphasique consiste principalement

en un transport de l'interface, le rôle de ces rapports reste pertinent, et un régime pseudo permanent est identifié lorsque la rigidité de l'interface est grande. Une grandeur plus difficile à appréhender est le nombre de Péclet, qui régit le rapport entre les forces convectives et les forces diffusives sur la zone de contact. Il a été discuté de l'importance de garder cette quantité élevée dans le domaine, afin d'assurer que les forces convectives étaient les seules responsables du transport de l'interface. Cependant, même dans une gamme élevée, les solutions du modèle présentent des comportements très différents en fonction du nombre de Péclet (exemples Figure III-14).

En faisant varier cette grandeur sans dimension, il apparaît qu'elle influe grandement sur la configuration des phases, surtout dans les temps longs. Pour des  $Pe < 10$ , peu de variations sont visibles (Figure III-14-A, B). L'interface se déplace en 'bloc', et semble avoir une certaine rigidité sous le cisaillement. En inspectant plus particulièrement la zone centrale, on voit qu'à  $Pe = 7,2$ , la courbure de l'interface est légèrement plus grande dans la zone centrale où la vitesse est la plus élevée. Les points de contacts avec la surface solide restent cependant proches d'une configuration à l'autre. A  $Pe = 7200$  (Figure III-14-C) en revanche, l'interface n'est plus rigide, mais se déforme sous l'action du champ de vitesse. En conséquence, le centre de l'interface avance plus vite que dans les cas précédents, alors que les points triples avancent plus lentement. Il en résulte un étirement de la phase non-mouillante, similaire aux configurations envisagées pour l'amorçage des phénomènes de snapp-off en milieu poreux. Cependant, dans nos simulations, aucun décrochement de la partie avant de l'interface n'a été observé, d'autant plus que ces instabilités sont associées à des difficultés de convergences numériques dues à la forte augmentation des forces capillaires dans les zones de courbures élevées.

Il est également possible d'interpréter ces instabilités comme des prémices aux phénomènes de digitations microscopiques qui interviennent parfois entre fluides de viscosité différentes, bien que l'origine convective des observations numériques soit différente de l'interprétation physique du phénomène. En particulier, l'angle d'avancée étant particulièrement faible dans chaque cas ( $\theta_s = 30^\circ$ ), il est possible d'imaginer que la géométrie de départ de l'interface soit une perturbation suffisamment importante par rapport à l'interface plane qui permet par la suite l'apparition d'une telle instabilité. Afin de tester cette hypothèse, l'expérience montrée sur la figure Figure III-14 est répétée pour un angle d'avancée plus faible, puis une phase mouillante, avec un Péclet = 7200 identique. Les résultats sont montrés sur la Figure III-15.



**Figure III-15: Étude de la mouillabilité sur la croissance de l'instabilité observée à l'interface pour des simulations à  $Pe = 7200 (>> 1)$  pour (A)  $\theta_s = 30$  ; (B)  $\theta_s = 70$  et  $\theta_s = 120$ .**

Comme prédit précédemment, la croissance de la digitation observée est amoindrie dans le cas où l'angle de contact ne forme pas une perturbation aussi importante que pour des fluides fortement non mouillant.

## Conclusion

Pour des angles de contact plus neutres, voire mouillants (Figure III-15–B, C), la croissance de l’instabilité est bien plus limitée que dans le cas initial. En particulier, la vitesse du point triple semble bien moins impactée : sa vitesse globale n’est que 8% inférieure à la vitesse moyenne du fluide dans le cas où  $\theta_s = 120^\circ$ , et de 10% inférieure si  $\theta_s = 70^\circ$ . De plus, les différences de configurations finales observées entre le cas  $\theta_s = 120^\circ$  et  $\theta_s = 70^\circ$  sont bien moins importantes que celles avec le cas  $\theta_s = 30^\circ$  : la différence s’accroît donc avec une diminution de l’angle de mouillage, ce qui conforte l’hypothèse que l’instabilité observée est une spécificité des fluides fortement non-mouillant.

Il est intéressant d’observer Figure III-15 que les simulations avec des angles de mouillage plus importants semblent moins justifiables physiquement que le phénomène initialement observé. En particulier, la zone de mélange entre les phases (zone de concentration  $w$  intermédiaire) semble s’étendre sur des temps longs, ce qui reste difficilement justifiable pour des fluides immiscibles. Ce comportement était en parti attendu : en cherchant à savoir si l’instabilité restait présente dans les cas moins favorables, la probabilité d’arriver à un système final instable est plus grande. Dans ces deux dernières configurations, le résultat obtenu numériquement semble donc être peu réaliste, et il faudra considérer des nombres de Péclet relativement bas ( $\sim \mathcal{O}(1)$ ) afin de garder une bonne représentativité des forces considérées. Pour les phases faiblement mouillantes, il est difficile de statuer si le comportement des simulations effectuées est bien représentatif d’une instabilité qui pourrait survenir à l’échelle microscopique dans les milieux poreux. Pour des phases immiscibles, cela paraît peu probable, et là encore, il faudra s’assurer que le nombre de Péclet choisi soit proche de l’unité. En revanche, pour des systèmes légèrement miscibles ou à très faible nombre capillaire, ce comportement pourrait être étudié plus en avant afin de savoir s’il est physiquement pertinent.

## E. Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle numérique utilisé a été présenté en détail. La dérivation des équations régissant le mouvement, ainsi que les hypothèses associées pour obtenir un système fermé, ont été présentées, tout comme la stratégie numérique choisie pour les résoudre. La formulation mathématique ainsi obtenue consiste en une formulation multiphasique des équations de Navier-Stokes, dont la répartition des phases est calculée grâce à une méthode d’interphase diffuse convective et les forces capillaires par un terme couplage volumique, injecté dans l’équation de conservation du moment. L’aspect viscoélastique est pris en compte par l’équation d’Oldroyd-B. Le modèle final est alors un système à trois équations scalaires, une équation vectorielle et une équation tensorielle dont les variables sont respectivement la concentration de la phase  $w$ , le potentiel chimique du système, la pression, la vitesse et les contraintes viscoélastiques.

Ce système a été étudié dans plusieurs configurations présentant un couplage faible afin de démontrer le bon comportement de chacun des composants du système. Ainsi, il a été montré que le modèle caractérisait correctement la pression capillaire entre deux fluides. De plus, la prise en compte de la viscoélasticité était conforme aux solutions analytiques connues. Enfin, une caractérisation des principaux paramètres a été effectuée dans une configuration de Poiseuille, et a montré l’importance du nombre adimensionnel de Péclet, propre à la formulation des interfaces diffuses.

Jusqu’à maintenant, peu d’hypothèses sur la nature des fluides considérés ont été formulées, et ce afin d’obtenir la formulation la plus générale possible. Dans l’état, le modèle permet une bonne caractérisation mécanique du phénomène de récupération améliorée du pétrole à l’échelle du pore. Pour une application en sciences de la vie, nous verrons que quelques adaptations seront nécessaires afin de capturer le caractère vivant du système modélisé ; et des hypothèses simplificatrices supplémentaires seront utilisées. Cependant, les forces introduites seront les mêmes que celles dérivées dans cette partie. Il reste à présent à étudier la mise en œuvre de ce modèle mathématique dans les applications d’intérêt. Ce sera l’objet des chapitres suivants.

## **IV. Modélisation de la Récupération Améliorée du Pétrole par Injection de Solution de Polymère**

### **A. Introduction**

Le modèle dérivé dans le chapitre précédent est à présent utilisé afin d'étudier l'écoulement multiphasique de fluides viscoélastiques en milieux poreux. L'objectif de ce chapitre est d'analyser numériquement comment la variation des propriétés élastiques de la solution injectée lors de la récupération secondaire modifie la mobilisation de la phase initialement en place à l'échelle du pore. L'étude de cette application directe du modèle s'inscrit dans la démarche de caractérisation du rôle de l'élasticité des chaînes polymériques utilisées industriellement dans la récupération du pétrole (Sheng, et al., 2015; Needham & Doe, 1987; Azad & Trivedi, 2019; Sorbie, 1991).

La première partie de ce chapitre se concentre sur les différences d'écoulement microscopique entre un fluide Newtonien et viscoélastique, modélisé ici par une loi d'Oldroyd-B. Ainsi, la simulation d'écoulements viscoélastiques à l'échelle du pore permettra de quantifier les effets élastiques à ce niveau de description. En fonction des caractéristiques des fluides utilisées, tout comme des configurations géométriques étudiées, l'étude de l'écoulement permettra d'identifier les effets attendus de l'élasticité sur la récupération du pétrole. Cependant, la considération d'un écoulement monophasique viscoélastique seul reste éloignée de l'application industrielle d'intérêt. Dans la seconde partie, le modèle complet sera donc utilisé. La prise en compte de l'aspect multiphasique amènera à considérer un nombre important de paramètres et de dépendances supplémentaires, qu'il conviendra de séparer des effets élastiques précédemment identifiés dans la première partie. À partir des résultats numériques obtenus, l'influence des paramètres de la loi constitutive d'Oldroyd-B montrera dans quelles mesures l'injection de solutions de polymère améliore la récupération de la phase initialement en place, et surtout dans quelles conditions elle s'avère efficace.

### **B. Écoulements monophasique de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore**

Comme expliqué au chapitre 2, l'emploi des solutions de polymère pour les applications de récupération du pétrole visait en premier lieu à augmenter le rapport de mobilité entre le fluide injecté et le pétrole en place. Si la caractérisation de la rhéologie des fluides viscoélastiques, en laboratoire et même *in situ*, est aujourd'hui renseignée (Skauge, et al., 2018; Chauveteau, 1986), leur prise en compte dans les formulations mathématiques d'écoulement macroscopique reste encore empirique, même dans le cas monophasique (Sorbie, 1991). Les polymères ont de nombreuses façons d'interagir avec le milieu, que ce soit par des interactions directes entre la chaîne et la matrice solide (adsorption (Sorbie, 1991), interactions à la paroi (Zami-Pierre, et al., 2017), dégradation mécanique (Needham & Doe, 1987)...) ou indirecte par les effets rhéologiques induits sur l'écoulement de la solution (Wang, et al., 2010; Clarke, et al., 2016). Pour pouvoir être explicitement pris en compte, ces effets doivent être étudiés à l'échelle du pore car ils dépendent fortement de la géométrie et de la composition locale du milieu poreux. Il se pose alors le problème de la considération macroscopique de ces effets : à l'échelle de Darcy, les variations de la microstructure sont ignorées, et une prise de moyenne des phénomènes évoqués précédemment est nécessaire pour pouvoir étudier leur impact sur des distances plus importantes.

#### **1. Justification d'une étude d'écoulement monophasique de fluide viscoélastique à l'échelle du pore**

Jusqu'à présent, la démarche adoptée dans de nombreuses études était d'utiliser une loi de Darcy avec une correction de certains termes utilisés (en particulier la viscosité de la solution employée) pour

prendre en compte les phénomènes filtrés par le point de vue macroscopique (Chauveteau, 1986; Sorbie, 1991; Zami-Pierre, et al., 2017). Cette approche permet alors de conserver la forme simple de la loi de Darcy, notamment dans le cas monophasique. Cependant, le terme de viscosité apparente - par opposition à la viscosité effective de la solution hors milieux poreux - doit prendre en compte tous les phénomènes sous-jacents. La caractérisation des lois constitutives pour ce paramètre doit alors être faite en fonction des propriétés du milieu poreux et des fluides injectés. Cette démarche de modélisation est généralement employée dans la prise en compte des effets élastiques des solutions non-Newtoniennes à l'échelle de Darcy (Berg & van Wunnik, 2017; Azad & Trivedi, 2019). Dans ce cas précis, deux obstacles surviennent à une modélisation purement macroscopique : la connaissance des critères susceptibles de solliciter suffisamment la chaîne de polymères pour que son élasticité ait un impact effectif, et la quantification de ces effets sur l'écoulement macroscopique.

Le premier point est la conséquence de l'impossibilité de caractériser la structure microscopique du milieu poreux avec une vision macroscopique. D'une part, le comportement des solutions de polymères (et pas seulement des fluides viscoélastiques) entretient une dépendance importante avec le taux de cisaillement du fluide (Spagnolie, 2015). Lors d'une simulation à l'échelle de Darcy, il faut alors d'abord relier le taux de cisaillement réel (*i.e.* de l'échelle microscopique) à la vitesse macroscopique du fluide pour ensuite la relier à une loi de viscosités apparentes (Berg & van Wunnik, 2017). Pour les fluides montrant également des propriétés élastiques, à cette dépendance s'ajoute un effet de mémoire, qui relie l'effet des chaînes polymériques à l'histoire de leur déformation. Les nombreux effets entrant alors en compte dans le comportement des solutions de polymère obligent à reconsidérer des définitions des nombres sans dimensions usuels, afin qu'ils puissent fournir des indications plus précises sur l'influence de l'agencement des pores sur la réponse rhéologique de la solution (Chauveteau, 1986; Azad & Trivedi, 2019). En particulier, la tortuosité présentée par le réseau de pore constituant le milieu considéré peut amener à redéfinir le temps caractéristique de réponse d'une solution de polymère, précédemment caractérisé par son taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ , par le taux d'élongation (Marshall & Metzner, 1967).

La seconde incertitude rencontrée dans une modélisation macroscopique est la quantification des effets viscoélastiques sur l'écoulement. Expérimentalement, l'écoulement de polymère en milieu poreux montre des comportements fluctuants selon la vitesse d'injection, allant d'une rhéologie globale rhéofluidifiante à rhéopaississante (Seright, et al., 2011; Skauge, et al., 2018). Dans de nombreux modèles, ce comportement est modélisé en faisant varier la viscosité apparente de la solution avec le nombre de Deborah (adapté des discussions précédentes, (Sorbie, 1991)). Cependant, d'un point de vue rhéologique, cette modélisation d'effets complexes par une perte de charge plus importante peut sembler insatisfaisante et non représentative de tous les effets élastiques. En particulier, cette approche ne permet pas de statuer sur les capacités des polymères à effectivement augmenter la récupération du pétrole lors de l'injection secondaire. L'étude des solutions de polymères en laboratoire montre des effets plus complexes (Weissenberg, 1947; Groisman & Steinberg, 2000; Sousa, et al., 2018) provoqués par l'élasticité des solutions utilisées. L'étude à l'échelle microscopique de solutions de polymères (Wang, et al., 2010; Clarke, et al., 2016) montre également une modification du champ des vitesses, et l'apparition de régimes d'écoulement transitoires non-isotropes dans le milieu poreux qui ne peuvent pas être pris en compte uniquement par une corrélation du type force élastique/perte de charge.

Afin de mieux caractériser les effets élastiques survenant à l'échelle du pore, cette partie est dédiée à la simulation numérique d'un fluide viscoélastique modélisé par une loi d'Oldroyd-B dans des géométries représentatives de la microstructure d'un milieu poreux. Ainsi, la séparation *in silico* des différentes interactions qu'entretiennent les polymères avec le milieu poreux permet de se concentrer sur les effets élastiques, et donnent un aperçu de leur influence dans une situation idéale (*e.g.* sans dégradation mécanique, couches de déplétion...). Des études numériques précédentes ont déjà permis de

mettre en évidence la capacité des modèle viscoélastique à capturer les comportements rhéofluidifiants et rhéoépaississant apparents trouvés expérimentalement (De, et al., 2017; De, et al., 2017). Ces travaux ont également permis de montrer l'influence des paramètres géométriques des domaines numériques modélisés, alors constitués de grains, sur la réponse du fluide viscoélastique. Également, l'emploi d'un modèle similaire dans des tubes capillaires présentant des contractions et expansions a été étudié dans (Yin, et al., 2012), qui reliait les capacités de mobilisation des solutions de polymères dans ces géométries aux vortex de recirculation obtenus pour les écoulements monophasiques, apparaissant dans les coins du domaine en fonction du nombre de Weissenberger.

Dans cette thèse, ces résultats sont repris et analysés dans deux nouvelles configurations, et ce pour des paramètres élastiques faibles à modérés. L'objectif de cette étude est de montrer que, même pour des paramètres viscoélastiques intermédiaires – pour lesquels il existe un état stationnaire stable, sans considération d'effets turbulents ou transitoires – l'interdépendance des paramètres géométriques avec les paramètres viscoélastiques nécessite de caractériser plus précisément les effets élastiques survenant dans les écoulements de fluides viscoélastiques en milieux poreux (correspondant au premier point évoqué plus haut). De plus, les effets viscoélastiques sur l'écoulement sont analysés à l'échelle du pore.

## 2. Cadre de l'étude

L'étude de l'influence de la géométrie de la microstructure est motivée par l'observation qu'un fluide viscoélastique injecté dans un milieu poreux assimilé, en première approximation par un réseau de capillaires droits, ne diffère pas de celle d'un fluide Newtonien de viscosité équivalente comme dérivée dans le cas d'un écoulement de Poiseuille (Figure III-10), contrairement à un fluide newtonien généralisé. Cette approximation montre que sans considérations géométriques, l'élasticité n'a aucune influence sur le comportement du système, et les résultats expérimentaux observés pour les chaînes de polymères souples comme le HPAM ne sont pas retrouvés (Chauveteau, 1986). L'élasticité des polymères est sensible aux écoulements élongationnels (Spagnolie, 2015), qui a pour conséquence de créer des contraintes anisotropes de par la différence des contraintes normales viscoélastiques. Dans les milieux poreux, différentes configurations sont susceptibles de provoquer ainsi la déformation des polymères. Dans ces travaux, deux d'entre elles seront considérées (voir Figure IV-1). La première géométrie, dénotée par **G1** par la suite, est illustrée Figure IV-1-A. Il s'agit d'une généralisation de l'approximation du milieu poreux à un faisceau de capillaires non rectilignes. De par les contractions et dilatations successives rencontrées par le fluide, un effet élastique est attendu, qui dépendra de la taille des oscillations de la paroi, mais aussi de leur fréquence.

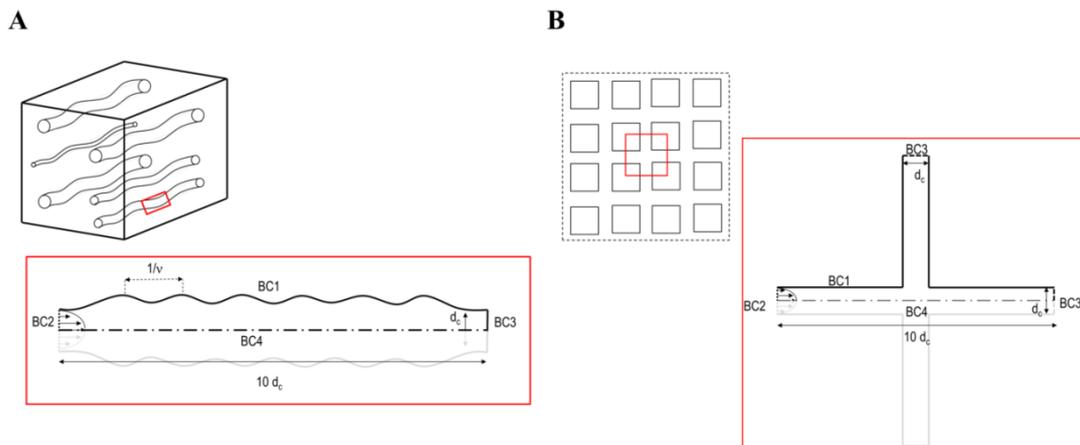


Figure IV-1: Géométries utilisées pour l'étude des effets élastiques d'une solution de polymère à l'échelle microscopique.

L'amplitude des oscillations dans **G1** est considérée constante ; ses variations serviraient à étudier l'effet de l'élongation de l'écoulement sur les effets élastiques, qui sera plus spécifiquement analysé dans un écoulement purement élongationnel (Figure IV-1-B). En revanche, on s'attend à ce que les contractions successives rencontrées par le fluide stimulent l'apparition de contraintes purement élastiques, du fait de la sollicitation périodique imposée au modèle rhéologique. La fréquence des oscillations est donnée par le paramètre  $\nu$ , dont la mesure dans ces travaux est donnée par :

$$\nu = \frac{\text{nombre de crêtes}}{10d_c} \quad \text{Eq IV-1}$$

Le fluide est injecté à un débit imposé sur la frontière BC2. Une condition de non glissement est imposée le long de la matrice solide BC1. Afin de réduire le coût numérique de la simulation, seule la moitié du domaine est considérée, et une condition de symétrie est prescrite sur BC4 (flux orthogonaux nuls). Enfin, une condition de contrainte libre est donnée sur BC3.

La géométrie **G2** est couramment utilisée comme approximation d'un milieu poreux qui résulterait de l'empilement périodique d'un motif d'obstacle. Pour l'étude des solutions de polymères, cette géométrie présente l'intérêt particulier d'imposer un très fort taux d'élongation au fluide de par les sorties orthogonales qu'elle présente. Cette géométrie a fait l'objet d'études dans des travaux antérieurs (De, et al., 2017; Sousa, et al., 2018) qui ont montré comment les forces élastiques se manifestaient lors d'injection d'un fluide par des entrées opposées, et pour un fluide injecté en BC1 et des conditions périodiques sur les sorties transversales (ce qui est parfois privilégié pour l'étude des écoulements dans les VER). Dans cette thèse, seul le débit entrant est imposé sur BC1. Toutes les autres sorties BC3 sont des conditions de contraintes libres, afin qu'un fluide Newtonien se répartisse de façon équivalente entre chaque sortie. L'influence de la viscoélasticité sera donc étudiée à la fois sur la variation de pression en entrée du domaine, mais aussi sur le champ de vitesse, qui est libre d'évoluer dans cette configuration contrairement à la géométrie **G1** où l'hypothèse d'incompressibilité impose un débit en sortie identique à celui en entrée. Dans **G2** également, une condition de symétrie est imposée sur BC4 afin de réduire le coût numérique de la simulation.

Dans chaque configuration d'étude, différentes valeurs des coefficients viscoélastiques sont étudiées. Ces valeurs sont synthétisées dans la Table IV-1.

Paramètres	Symboles	Unités	Valeurs de référence		
			F1	F2	F3
Distance caractéristique	$d_c$	m	10.10 <sup>-6</sup>		
Vitesse caractéristique	$v_c$	m.s <sup>-1</sup>	4.10 <sup>-6</sup>		
Densité	$\rho$	kg.m <sup>-3</sup>	1.10 <sup>3</sup>		
Temps de relaxation du polymère	$\lambda_{wp}$	s	0	1	1.6
Viscosité du polymère	$\eta_{wp}$	Pa.s	0	6.10 <sup>-3</sup>	9.10 <sup>-3</sup>
Viscosité du solvant	$\eta_{ws}$	Pa.s	1.10 <sup>-2</sup>	4.10 <sup>-3</sup>	1.10 <sup>-3</sup>
Viscosité apparente	$\eta_{app} (= \eta_{wp} + \eta_{ws})$	Pa.s	1.10 <sup>-2</sup>		
<b>Nombres sans dimension</b>					
Nombre de Reynolds	Re		4.10 <sup>-6</sup>		
Nombre de Weissenberg	Wi		0	0.4	0.64
Nombre d'Oldroyd	$\beta$		0	0.6	0.9

Table IV-1: table des paramètres du modèle monophasique viscoélastique

### 3. Écoulements dans des tubes capillaires de sections périodiquement variables

#### i) Influences des nombres viscoélastiques

La géométrie **G1** est tout d'abord étudiée à fréquence  $\nu = 30\ 000$  constante. L'écoulement d'un fluide viscoélastique modélisé par la loi d'Oldroyd-B est montré Figure IV-2 pour différentes valeurs des

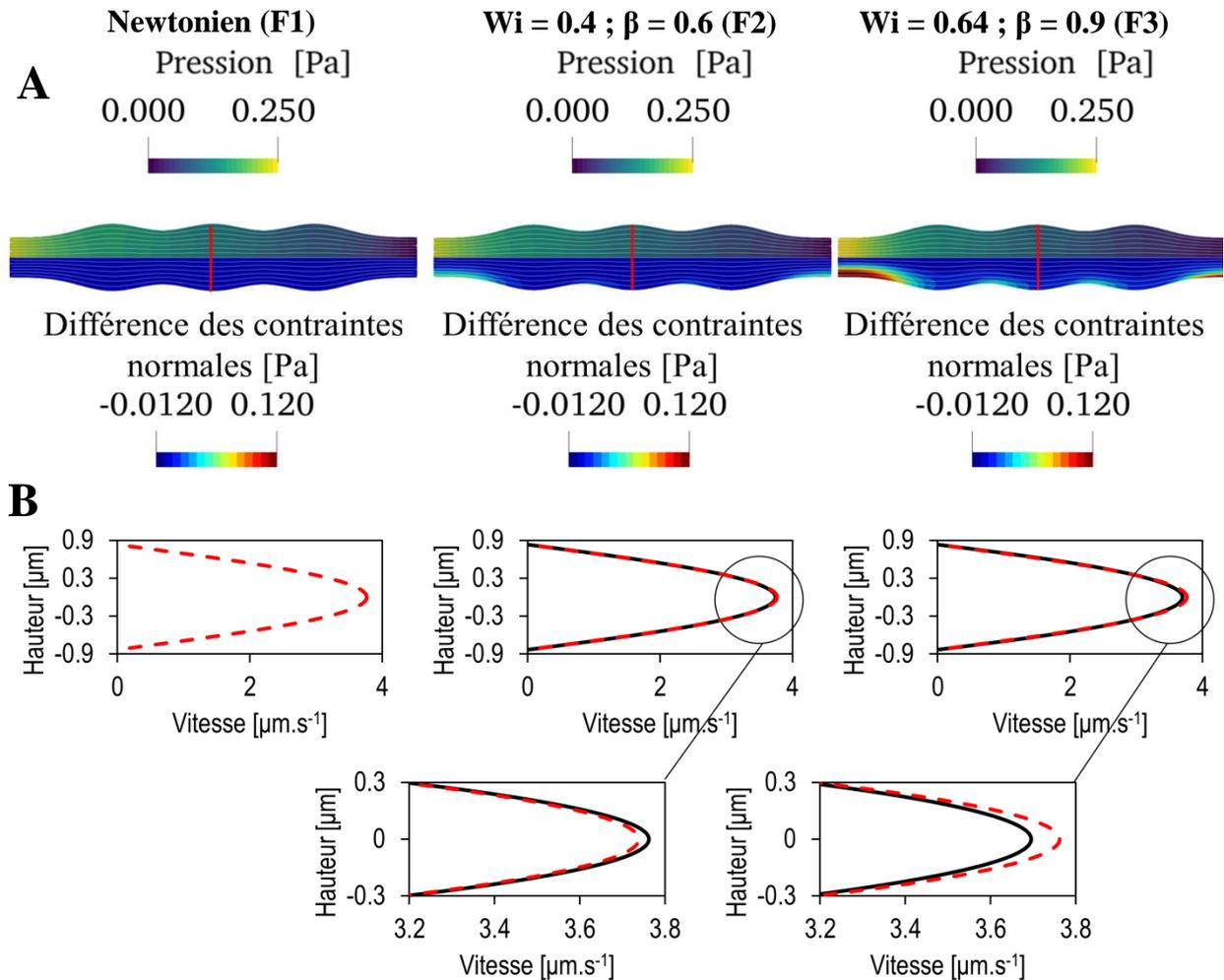
paramètres du polymère. Les simulations sont effectuées jusqu'à l'obtention d'un régime stationnaire dans chaque cas. D'après les résultats Figure IV-2-A, l'augmentation des paramètres viscoélastiques accentue la différence de contraintes normales, tout comme la pression à l'entrée du domaine, et ce malgré l'imposition du même débit d'entrée dans chaque cas. Peu de différences sont cependant observables pour les profils de vitesses Figure IV-2-B. Une inspection plus fine du profil autour du sommet de la parabole montre malgré tout des variations entre le champ de vitesses du fluide Newtonien et des fluides viscoélastiques. De façon intéressante, l'impact de la viscoélasticité sur le champ de vitesse n'est pas le même selon les paramètres viscoélastiques utilisés : si le champ de vitesse pour  $Wi = 0,4$  et  $\beta = 0,6$  est légèrement supérieur à celui du profil Newtonien, celui pour  $Wi = 0,64$  et  $\beta = 0,9$  est plus plat.

L'inspection de la pression à l'entrée du domaine fournit une donnée supplémentaire sur les effets de la viscoélasticité : la contrainte étant laissée libre sur BC2, elle s'adapte au profil de vitesse et aux contraintes viscoélastiques présentes sur BC1. On voit alors que la pression d'entrée du fluide F2 (modérément viscoélastique) est inférieure à celle du fluide F1 (fluide newtonien de référence), tandis que celle du fluide F3 (fortement viscoélastique) est fortement supérieure. Il est alors possible de définir un facteur de résistance  $R$  à l'échelle du pore par la formule suivante :

$$R = \frac{p|_{x=0}}{p_{F_1}|_{x=0}} - 1 \quad \text{Eq IV-2}$$

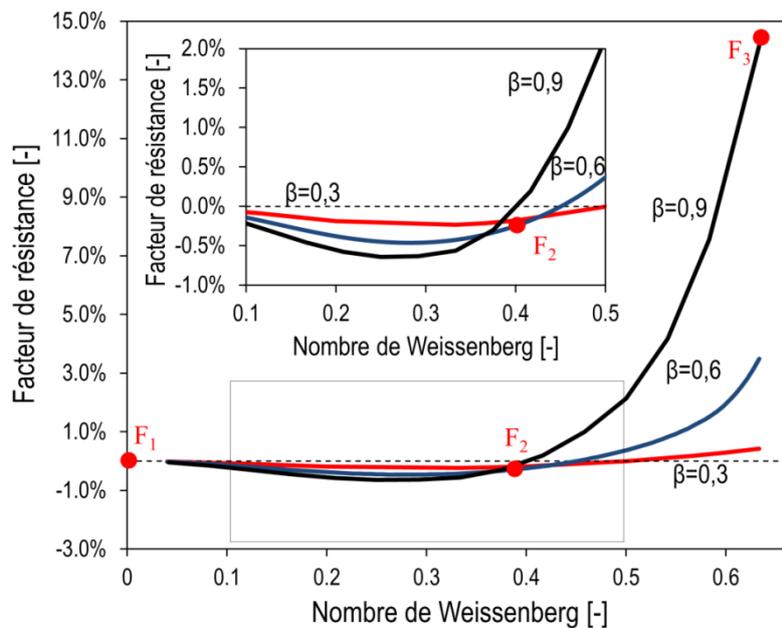
En traçant la variation de  $R$  défini par Eq IV-2 en fonction des paramètres viscoélastiques, le résultat illustré Figure IV-3 est obtenu.

Il est alors visible que le comportement des fluides viscoélastiques dans cette géométrie montre à l'échelle du pore les mêmes comportements que les observations expérimentales sur des échantillons complets de milieux poreux : un comportement global rhéofluidifiant sur des nombres de Weissenberg intermédiaires (*i.e.* des effets élastiques peu marqués), marqué par une diminution du facteur de résistance quasi-linéaire alors que pour des nombres de Weissenberg plus élevé, ce même facteur croît de façon exponentielle. La Figure IV-3 permet également d'apprécier les effets spécifiques de chacune des grandeurs adimensionnées. L'apparition du même profil de variation du facteur de résistance pour chaque nombre d'Oldroyd considéré suggère que cette quantité n'a qu'un effet d'amplification ou diminution des effets élastiques, entièrement contrôlé par le nombre de Weissenberger. Cependant, de la même façon que pour un écoulement de Poiseuille viscoélastique, ce nombre accentue les effets élastiques, et la transition d'un régime rhéofluidifiant à un régime rhéoépaississant est également influencée par le nombre d'Oldroyd. Les variations du nombre de Weissenberg montrent bien son influence sur le fluide : en fonction du régime (peu élastique, modérément élastique, très élastique), le facteur de résistance est soit diminué légèrement, soit augmenté fortement.



**Figure IV-2: Écoulements monophasique de fluides viscoélastiques dans G1.**

(A) Variation de pression et de la première différence de contrainte viscoélastique dans le domaine. Les lignes blanches montrent les lignes de courant. Sur chaque ligne rouge, le profil de vitesse est tracé dans (B).



**Figure IV-3: Variation du facteur de résistance  $R$  en fonction des paramètres viscoélastiques du fluide pour une géométrie G1 de fréquence  $\nu = 3$ .**

Rappelons enfin que dans tous les cas étudiés, le régime d'écoulement restait purement laminaire. Cela signifie que ces variations d'écoulement surviennent avant l'apparition d'une turbulence élastique, parfois décrite comme le processus de rhéoépaississement (Clarke, et al., 2016). Cependant, si aucune forme de turbulence n'est observée, l'hypothèse d'une différence de régime élastique pour les différents nombres de Weissenberg est plausible dans cette géométrie. Quelles sont alors les paramètres qui influent sur le passage d'un régime à l'autre ? Si le nombre de Weissenberg semble être un bon indicateur pour une géométrie donnée, ce dernier ne prend pas en compte les oscillations imposées sur la paroi BC1, qui a pourtant une influence importante sur le comportement de la solution, en sollicitant les polymères dilués de façons périodiques. Cette particularité des écoulements viscoélastiques en milieu poreux a été discutée théoriquement (Chauveteau, 1986), et il est attendu deux comportements différents en fonction de la distance caractéristique entre deux obstacles : si ce-dernier est long, le polymère a le temps de retrouver sa configuration d'origine entre deux sollicitations mécaniques, et l'effet viscoélastique est amoindri. En revanche, si le polymère n'a pas eu le temps de se relaxer entre deux déformations, il emmagasine davantage d'énergie élastique à chaque déformation, et son influence sur l'écoulement augmente progressivement. Nous nous proposons d'étudier numériquement ce phénomène.

ii) Influences de la géométrie

Le nombre d'oscillations de la paroi BC1 est augmenté progressivement et son influence sur l'écoulement est visible sur la Figure IV-4. La sinusoïde imposée sur la paroi est alors une façon de modéliser l'influence d'obstacles (identiques) sur l'écoulement. La fréquence de rencontre d'obstacles modélisée ici varie entre  $\nu = 10\ 000$  et  $\nu = 60\ 000$ .

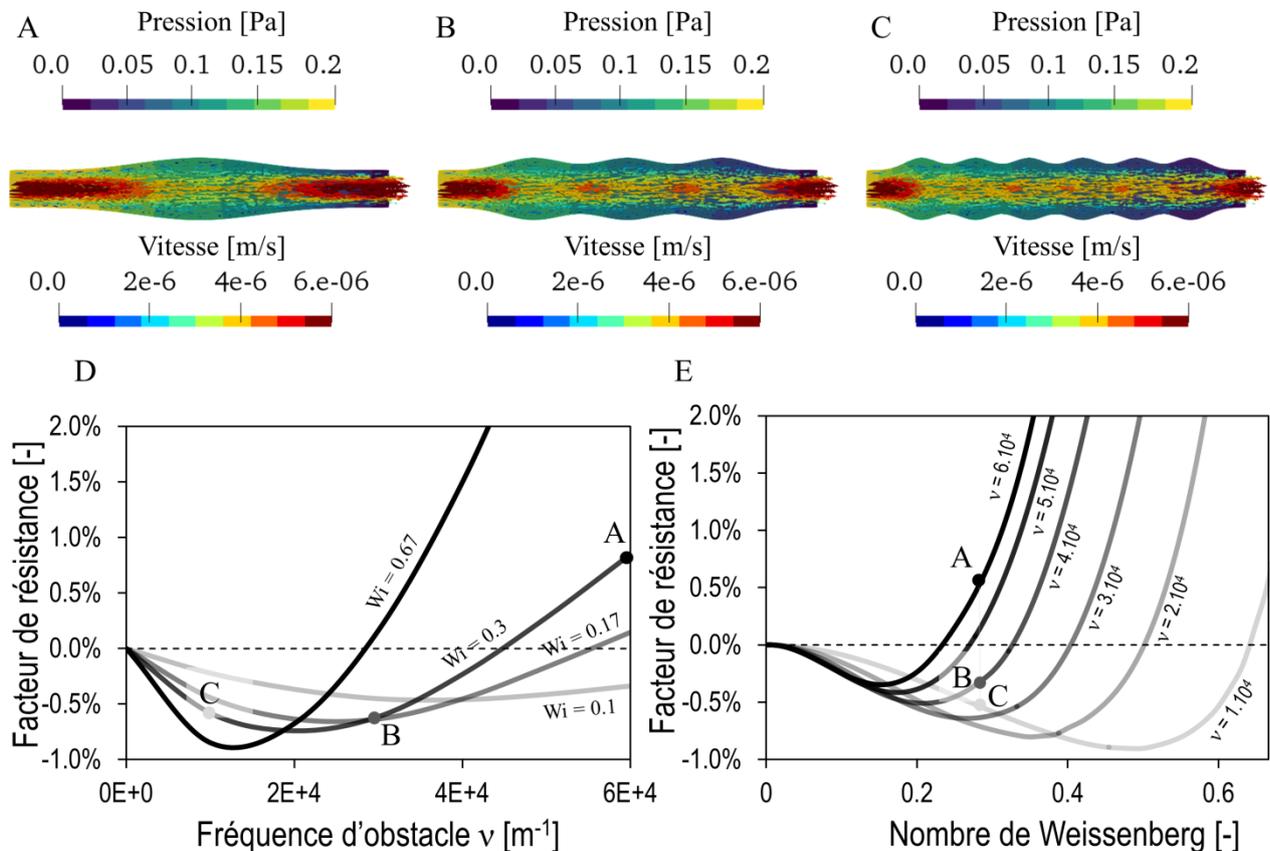
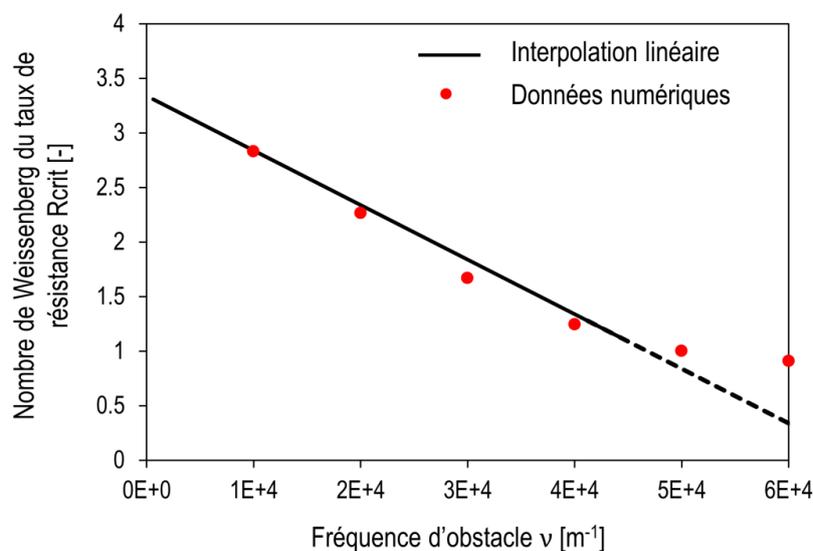


Figure IV-4: influence de la variation de la courbure de la géométrie sur l'écoulement d'un fluide viscoélastique.

(A)-(B)-(C) : Pression et vitesse dans le domaine pour de  $\nu = 60\,000$ ,  $\nu = 30\,000$ ,  $\nu = 10\,000$  respectivement. (D) Évolution du facteur de résistance  $R$  en fonction de la fréquence des obstacle. (E) Variation en fonction du nombre de Weissenberg pour les différentes géométries.

Les Figure IV-4-A, B et C montrent les solutions stationnaires obtenues pour 3 géométries à nombre viscoélastiques fixes ( $Wi = 0.3$  et  $\beta = 0.9$ ). La vitesse dans le domaine suit bien des variations périodiques. Le champ de pression en entrée est libre, et le facteur de résistance donné par Eq IV-2 peut être calculé pour chaque cas. Ces variations en fonction du nombre d'obstacles sont données sur Figure IV-4-D tandis que les variations de régimes en fonction du nombre de Weissenberg sont données pour chaque géométrie sur la Figure IV-4-E. On voit alors que l'influence de la fréquence des obstacles est au moins aussi importante que celle des nombres viscoélastiques. De plus, son influence semble identique : en fonction de la fréquence  $\nu$ , différents régimes élastiques sont identifiables, et ce quelle que soit la valeur du nombre de Weissenberg (même pour des valeurs de  $Wi$  pour lesquels aucune manifestation élastique n'était *a priori* observée dans le cas précédent, voir Figure IV-4-D). L'augmentation progressive de la fréquence montre une diminution du facteur de résistance  $R$  jusqu'à une valeur critique (notée par la suite  $R_{crit}$ ) puis une augmentation exponentielle, correspondant à la dynamique observée pour l'influence du nombre de Weissenberg, ce qui laisse supposer le même phénomène physique sous-jacent (à savoir la manifestation des forces élastiques). Il est également intéressant de remarquer que la variation des oscillations à la paroi combine les effets du nombre de Weissenberg et du nombre d'Oldroyd dans le sens où l'amplitude et la variation du facteur de résistance sont tous deux modifiées par  $\nu$ .

En traçant les variations du facteur de résistance  $R$  en fonction du nombre de Weissenberg pour chaque valeur de  $\nu$  (voir Figure IV-4-E), on cherche à caractériser la transition de régime rhéofluidifiant à rhéoépaississant en fonction des caractéristiques du domaine. Les observations faites jusqu'à maintenant correspondent à l'hypothèse énoncée précédemment, qui sous-entend une corrélation entre le temps de relaxation et la fréquence de sollicitation du polymère dans l'apparition des forces élastiques. Les courbes obtenues ont un profil très similaire, et semblent simplement translatées dans le plan d'une fréquence à une autre. La manifestation des forces élastiques intervient plus tôt avec l'augmentation de  $\nu$ . Un point de repère peut être défini sur la valeur minimale du facteur de résistance  $R_{crit}$  (minimum des courbes Figure IV-4-D, E). On voit que pour les fréquences faibles à modérées, ce minimum varie linéairement. Cette observation a motivé la recherche d'une corrélation plus précise entre ces paramètres, illustrée sur Figure IV-5.



**Figure IV-5: Variation du nombre de Weissenberg correspondant à la valeur critique du facteur de résistance  $R_{crit}$  en fonction du nombre d'obstacles.**

Une relation linéaire semble alors exister entre le nombre de Weissenberg pour lequel le régime élastique change et les faibles fréquences (interpolation linéaire Figure IV-5). Cependant, cette relation n'est pas générale, et pour des fréquences plus élevées, elle n'existe plus. Les variations de dynamique du régime élastique s'amenuisent donc avec l'augmentation de la fréquence (voir Figure IV-4-E, Figure IV-5), ce qui laisse penser que les forces élastiques convergent lentement vers un profil qui deviendrait insensible aux variations de la fréquence. Cette observation n'est pas incompatible avec les hypothèses avancées sur les origines des forces élastiques : à paramètres fixes, il peut être envisagé que les polymères dilués aient emmagasiné autant d'énergie mécanique qu'il leur était possible d'absorber (ressort du modèle rhéologique comprimé au maximum), et qu'ils agissent alors comme des filtres mécaniques pour toutes déformations supplémentaires.

Ainsi, dans cette géométrie, les variations de la microstructure (*i.e.* la fréquence des oscillations) ont un impact aussi comparable à celui des nombres élastiques, mais qui décroît avec les fréquences élevées. Il est alors possible de voir apparaître des manifestations élastiques à des nombres de Weissenberg et d'Oldroyd relativement bas, pourvu que la microstructure du milieu présente les conditions favorables.

Dans la prochaine partie, la géométrie **G2** est étudiée afin d'analyser l'influence des écoulements élongationnels.

## 4. Microstructure en croix

### i) Influence des nombres viscoélastiques

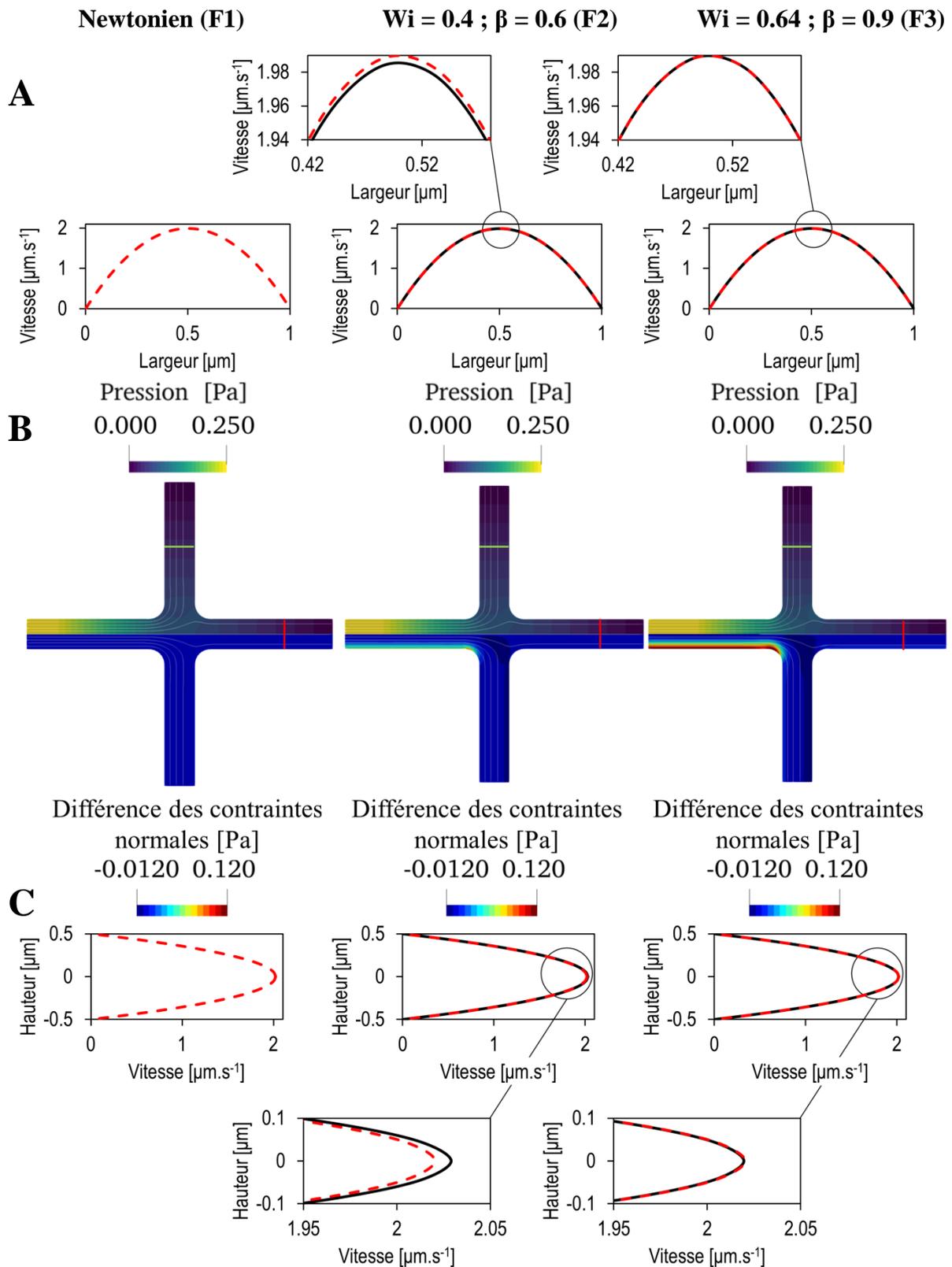
La variation des paramètres de l'équation d'Oldroyd-B sur l'écoulement de fluides viscoélastiques dans la géométrie **G2** est illustrée Figure IV-6. Comme pour la géométrie précédente, les profils de vitesse sont tracés sur les lignes vertes (sortie en haut) et rouges (sortie à droite).

La première observation de ces résultats montre la réduction des effets viscoélastiques sur le champ de vitesse et sur le taux de résistance pour les paramètres considérés par rapport au cas précédent **G1**. Pour des paramètres viscoélastiques modérés (F2), le champ de vitesse augmente sensiblement par rapport au cas Newtonien dans la sortie droite (voir Figure IV-6-C), tandis que la vitesse dans la sortie transversale diminue (voir Figure IV-6-A) comme l'impose la conservation du moment cinétique. A plus hauts nombres viscoélastiques (F3), ces différences disparaissent, mais les profils deviennent alors similaires à ceux d'un fluide Newtonien, contrairement à ce qui était attendu d'après les résultats précédents. En réalité, il faut examiner des paramètres viscoélastiques plus importants pour retrouver une solution stationnaire distincte du fluide F1.

L'étude de l'évolution de la pression dans le domaine montre une évolution différente de ce qui avait été précédemment observé pour **G1**. Le facteur de résistance (identique à la définition Eq IV-2), qui mesure la déviation relative de la pression en entrée du domaine par rapport au cas Newtonien, évolue dans cette géométrie selon une dynamique pseudo-linéaire (voir Figure IV-7) en fonction du nombre de Weissenberg, et ce quel que soit le nombre d'Oldroyd. On ne voit alors plus la phase intermédiaire de rhéofluidification pour des valeurs modérées des paramètres viscoélastiques.

Comment expliquer une telle déviation entre les deux cas ? La principale différence entre les deux configurations est la possibilité donnée au fluide de s'écouler dans les directions transverses. Par conséquent, l'augmentation de la viscoélasticité dans le domaine se traduit avant tout par une déviation du champ de vitesse dans le domaine. La Figure IV-8 montre l'évolution des débits relatifs de la sortie à droite (courbe rouge) des sorties transversales (courbe bleue). On voit alors que, lorsque les forces élastiques augmentent dans le domaine, le débit de sortie à droite augmente, ce qui avait déjà été remarqué sur la Figure IV-6-A pour le fluide F2. Cependant, ce que l'on remarque également, c'est qu'à forts nombres viscoélastiques ( $Wi > 0.8$ ), le régime élastique change, et les variations de vitesses s'inversent : le débit sortant par les parties transverses du domaine est supérieur à celui du débit de la

sortie à droite. Ainsi, alors que pour un fluide Newtonien (pointillés Figure IV-8), les débits sortants étaient équivalents autour de 33% ; pour des fluides viscoélastiques, il devient anisotrope, et la différence de contrainte normale pousse le fluide perpendiculairement à sa direction d'écoulement qui diminue alors aux alentours de 30%. La dynamique d'évolution des débits en sorties du domaine n'est pas sans rappeler celle du facteur de résistance dans la configuration **G1**, avec un régime intermédiaire contraire au régime élastique à fort nombre de Weissenberg, puis une solution qui varie de façon exponentielle.



**Figure IV-6: Écoulements monophasique de fluides viscoélastiques dans G2.**

(A) Profils de vitesse dans la sortie orthogonale (ligne verte en haut) du domaine pour les différents fluides étudiés (B) Variation de pression et de la première différence de contrainte viscoélastique dans le domaine. Les lignes blanches montrent les lignes de courant. (C) Profils de vitesse en sortie dans la direction d'injection (ligne rouge) pour chaque fluide.

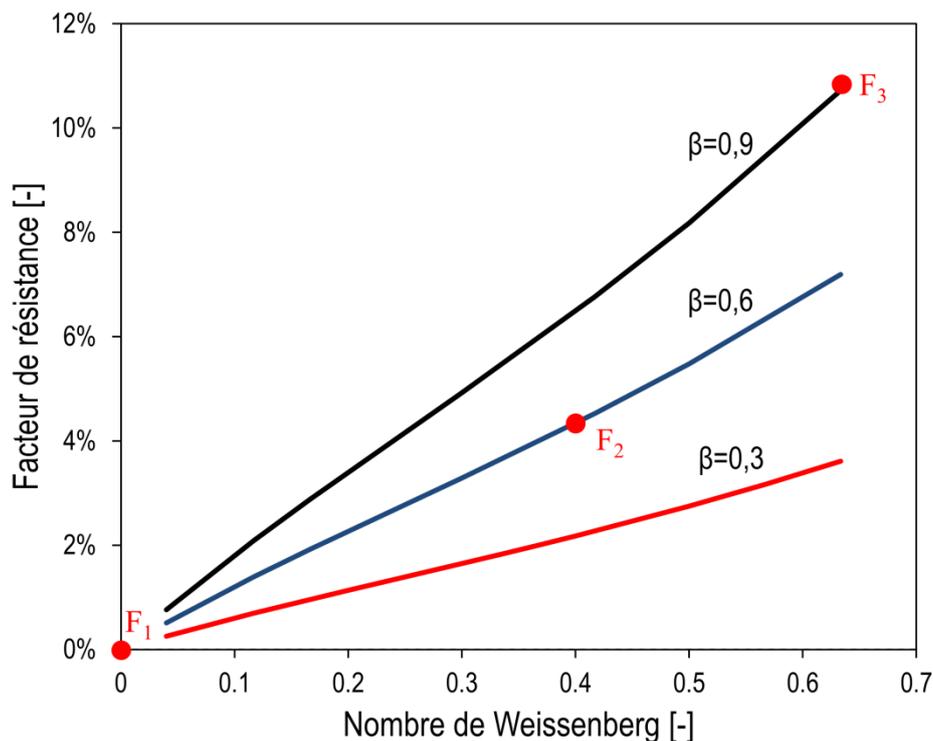


Figure IV-7: Évolution du facteur de résistance du fluide en fonction du nombre de Weissenberg

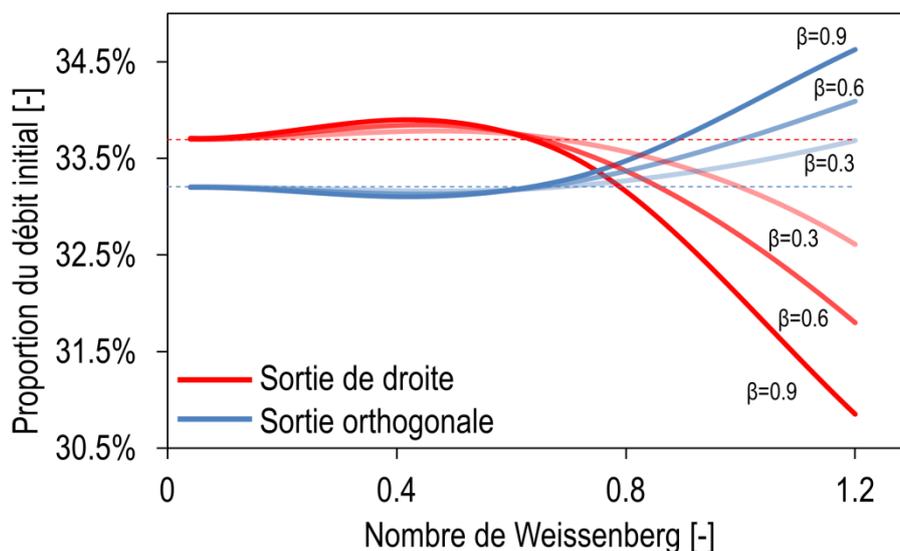


Figure IV-8: Variation des débits sortants à droite (ligne rouge) et en haut (ligne bleue) en fonction du nombre de Weissenberg.

ii) Paramètres géométriques

On s'intéresse à présent à l'influence des paramètres géométriques dans cette configuration. Deux paramètres influent directement sur l'écoulement : la taille de l'obstacle (*i.e* du motif élémentaire dessiné Figure IV-1-B) et la tortuosité du domaine, que l'on peut modifier en faisant varier les enchainements d'obstacles d'une colonne à l'autre. Dans le premier cas, seule la taille caractéristique du pore est modifiée, ce qui revient à décroître le nombre de Weissenberg, et donc les forces élastiques présentes dans le domaine. Cette hypothèse est vérifiée Figure IV-9 où l'on peut observer la décroissance du facteur de résistance Eq IV-2, qui est une manifestation des forces élastiques dans le domaine, avec l'augmentation de l'ouverture de la taille du pore pour le fluide F3.

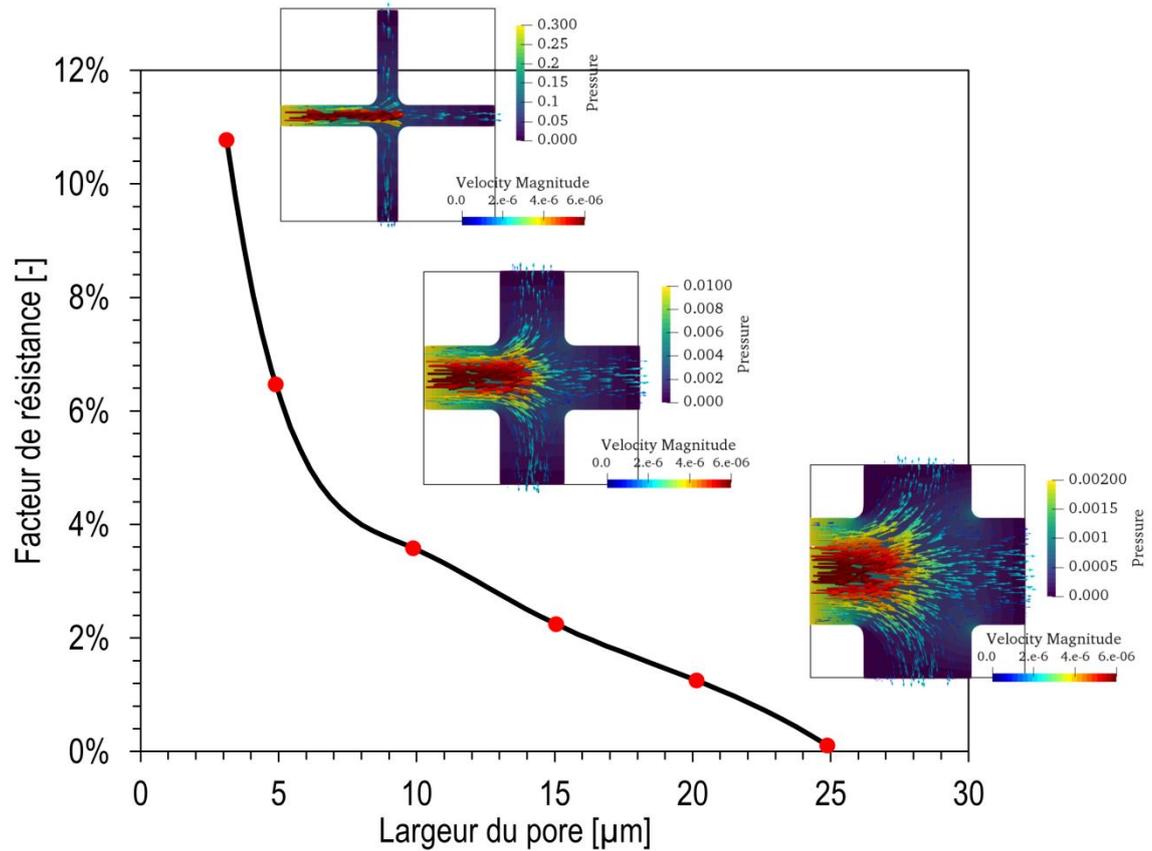


Figure IV-9: Influence de la taille caractéristique du pore sur le facteur de résistance.

Dans une configuration symétrique, on voit alors que la réponse élastique des polymères peut être anticipée en calculant le nombre de Weissenberg résultant.

Il reste alors à étudier l'influence de la disposition des obstacles d'une colonne à l'autre. Une mesure microscopique d'une tortuosité à l'échelle du pore est choisie sous la forme (Eq IV-3):

$$T = \frac{L_s}{10d_c} > 1 \quad \text{Eq IV-3}$$

Où  $L_s$  est la distance la plus courte parcourue par la solution de polymère entre la sortie gauche et la sortie droite de la géométrie **G2**. La configuration n'étant plus symétrique, seules les variations de débits à droite sont étudiées en fonction de la tortuosité du domaine Figure IV-10-A.

De façon générale la variation de tortuosité impacte négativement le débit de sortie à droite. Pour des valeurs faibles de tortuosité ( $T < 1.1$ ), une valeur intermédiaire du nombre de Weissenberg (ligne rouge) favorise la sortie à droite de la solution viscoélasticité, comme observés précédemment sur les Figure IV-10-B et Figure IV-8. Pour des valeurs supérieures en revanche, le débit passe en dessous du cas Newtonien, ce qui signifie que les forces viscoélastiques dévient l'écoulement vers les sorties transversales. Ce phénomène était présent dès les faibles valeurs de la tortuosité pour des nombres de Weissenberg plus élevés, qui reste toujours en dessous du cas Newtonien de référence (ligne pointillée). L'augmentation de la tortuosité accentue la déviation dans le cas des forts nombres de Weissenberg, excepté pour  $T \in [1.05 ; 1.15]$  où l'impact des forces viscoélastiques semble diminuer et l'écoulement se rapprocher du cas Newtonien.

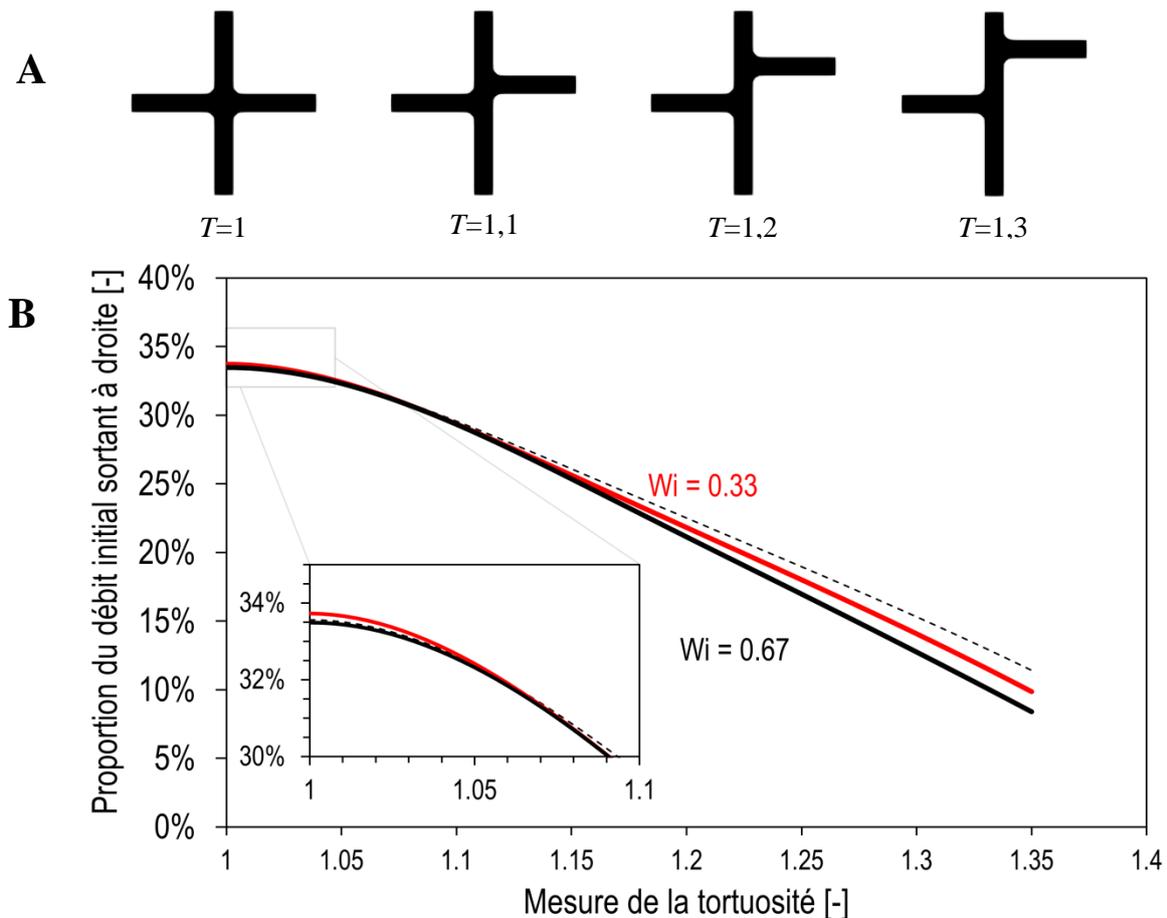


Figure IV-10: Effets de la tortuosité sur un écoulement viscoélastique. (A) Variation de la hauteur de la sortie de droite pour un introduire une tortuosité dans la géométrie. (B) Variation du débit sortant à droite en fonction de la tortuosité du domaine.

## 5. Discussion

Les écoulements de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore ont ainsi montré deux particularités par rapport au cas Newtonien. La première survient lorsque la solution de polymère traverse un milieu unidirectionnel présentant des variations de section. On observe alors une modification de la pression en entrée du domaine par rapport à la solution attendue d'un écoulement de Poiseuille viscoélastique dans un cas monodimensionnel. Ces spécificités des écoulements en régime élastique ne sont ainsi capturées qu'en dimension supérieure (deux ou trois), et proviennent d'une différence des contraintes viscoélastiques dans le domaine. En fonction des régimes élastiques, dépendants des paramètres de la loi constitutive d'Oldroyd-B, des effets antagonistes surviennent sur l'écoulement. Par exemple, un écoulement faiblement rhéofluidifiant est macroscopiquement observé pour des nombres élastiques modérés, alors que pour des valeurs plus élevées de ces indicateurs, une croissance exponentielle de la pression est observée pour un débit identique, similaire à un comportement rhéoépaississant. Ces manifestations des forces élastiques sont représentatives des observations expérimentales sur des échantillons de milieux poreux, et la loi d'Oldroyd-B semble alors capturer correctement les différents régimes à l'échelle du pore.

Pour des configurations où le fluide a la possibilité d'adapter son champ de vitesse aux contraintes viscoélastiques, le facteur de résistance des solutions de polymère est alors moindre, mais augmente tout de même significativement. Cependant, le champ de vitesse du fluide viscoélastique est modifié par rapport au cas Newtonien, et bien que le régime reste laminaire, une partie du débit injecté est déviée perpendiculairement à la direction d'injection. Répétée sur l'ensemble du milieu poreux, ces con-

sidérations pourraient modifier la conductivité hydraulique d'une solution de polymère, en introduisant notamment des anisotropies d'écoulement.

Dans chaque cas, l'influence des propriétés de la microstructure du milieu poreux a été discutée. De manière générale, plus la géométrie microscopique présente des propriétés qui l'éloignent du cas symétrique et rectiligne (*e.g.* canal plan de Poiseuille), plus les manifestations élastiques se montrent précoces et intenses. C'est ce qui a été observé en faisant varier la fréquence des changements de section dans un capillaire, ou encore en modifiant la tortuosité microscopique d'une section en forme de croix. Ces modifications de la structure n'ont cependant pas affecté la dynamique d'évolution des effets élastiques.

Cette partie s'est focalisée sur une étude microscopique. La physique à l'échelle du pore a montré la nécessité de mieux caractériser la prise en compte des effets élastiques lors de l'écoulement de solution de polymères à l'échelle de Darcy. En particulier, les deux points soulevés en introduction, à savoir une définition précise des indicateurs de la manifestation des forces élastiques ainsi que l'effet de l'élasticité sur l'écoulement, montre à l'échelle du pore certaines faiblesses : les forces élastiques, bien que sensible aux écoulements élongationnels, sont également influencés par leur fréquence (comme montré pour la géométrie **G1**). De plus, l'augmentation du facteur de résistance n'est pas la seule manifestation des régimes d'écoulements élastiques (comme il a été vu pour la géométrie **G2**), et l'anisotropie d'écoulement qui résulte des différences de contraintes élastiques pourrait avoir un impact important sur l'écoulement macroscopique.

Il reste cependant risqué d'affirmer la pertinence des observations précédentes en se basant uniquement sur des simulations à l'échelle du pore. Ainsi, une stratégie multi-échelle rigoureuse est nécessaire avant d'aller plus loin dans l'interprétation des résultats, et d'évaluer l'impact réel des forces élastiques sur un écoulement à l'échelle de Darcy.

### **C. Écoulements Multiphasiques de fluides viscoélastiques à l'échelle du pore**

On s'intéresse à présent à un écoulement multiphasique de fluides viscoélastiques afin de simuler numériquement la récupération d'une phase initialement en place par une solution de polymère à l'échelle du pore. Expérimentalement, l'efficacité de cette récupération est supposée être plus importante pour les solutions de chaînes polymériques souples (*i.e.* élastique) en comparaison de fluides newtoniens de viscosité apparente équivalente (Sheng, et al., 2015; Azad & Trivedi, 2019).

L'action des polymères, à l'échelle du pore, lors de la récupération d'hydrocarbures a fait l'objet de nombreux travaux (Wang, et al., 2001; Wang, et al., 2010; Wei, et al., 2013; Vermolen, et al., 2014). Les mécanismes de balayage améliorés des solutions de polymère, attribués à leur élasticité, ont été discutés dans ces études. Il en ressort que, bien qu'une amélioration soit théoriquement attendue, l'amplitude des forces élastiques est souvent trop faible par rapport aux forces capillaires pour effectivement observer une amélioration due à l'utilisation de chaînes polymériques élastiques. Ces résultats sont toujours discutés (Clarke, et al., 2016).

Peu d'études numériques existent sur les effets combinés d'un écoulement multiphasique et des propriétés viscoélastiques des fluides en présence dans les milieux poreux. Les études monophasiques seules ont déjà été discutées dans la partie précédente, et relient hypothétiquement une amélioration de la performance de la récupération aux amplitudes des zones recirculations des solutions viscoélastiques dans les géométries simulées, qui dépendent de leurs propriétés élastiques (Yin, et al., 2012). L'étude des capacités des solutions de polymères à mobiliser l'huile résiduelle piégée dans les pores « dead-end » a également été envisagée, toujours au travers d'une étude numérique monophasique (Zhang & Yue, 2008). Notons que dans ce cas particulier, une étude numérique moléculaire attribue les performances des polymères à des forces d'attraction d'origine électronique plutôt que mécanique

ou rhéologique (Fan, et al., 2018). Souvent, pour la récupération secondaire, l'aspect multiphasique est privilégié (Zhao & Dongsheng, 2017) car la mouillabilité de la solution injectée, tout comme les forces capillaires mises en jeux dans les écoulements microscopiques, pilotent avant tout la dynamique de récupération. Ce n'est que dans un second temps, en fonction des caractéristiques de l'écoulement, que la viscoélasticité est supposée jouer un rôle. Une démonstration de l'influence des paramètres viscoélastiques sur un écoulement multiphasique dans un réseau de pore a été étudiée dans (Pinilla, et al., 2016). L'influence de l'élasticité dans ces travaux montre clairement deux écoulements différents entre un fluide injecté Newtonien et viscoélastique. Cependant, le rôle joué par l'élasticité dans la mobilisation du pétrole en place n'a pas été discuté plus en avant.

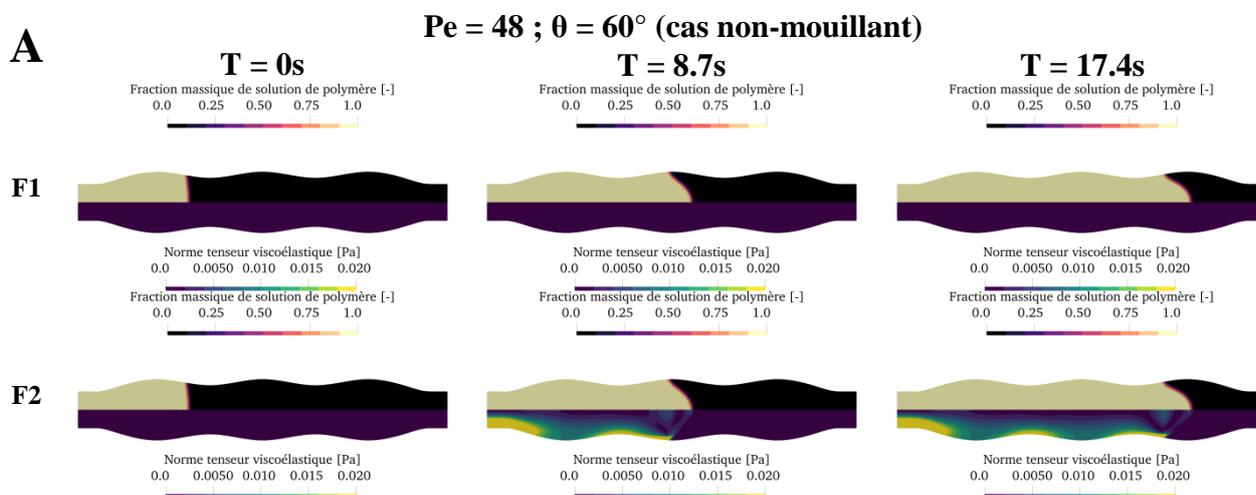
Dans ces travaux de thèse, le modèle numérique multiphasique est utilisé, dans un premier temps pour étudier la récupération du pétrole à l'échelle du pore. Plus spécifiquement, cette étude s'intéressera aux écoulements de plusieurs fluides dans les géométries étudiées précédemment dans le cas monophasique. Dans chaque cas, la déviation entre le comportement d'un fluide injecté Newtonien et un fluide injecté viscoélastique sera analysée. Les scénarios favorables à une meilleure récupération du pétrole seront enfin discutés.

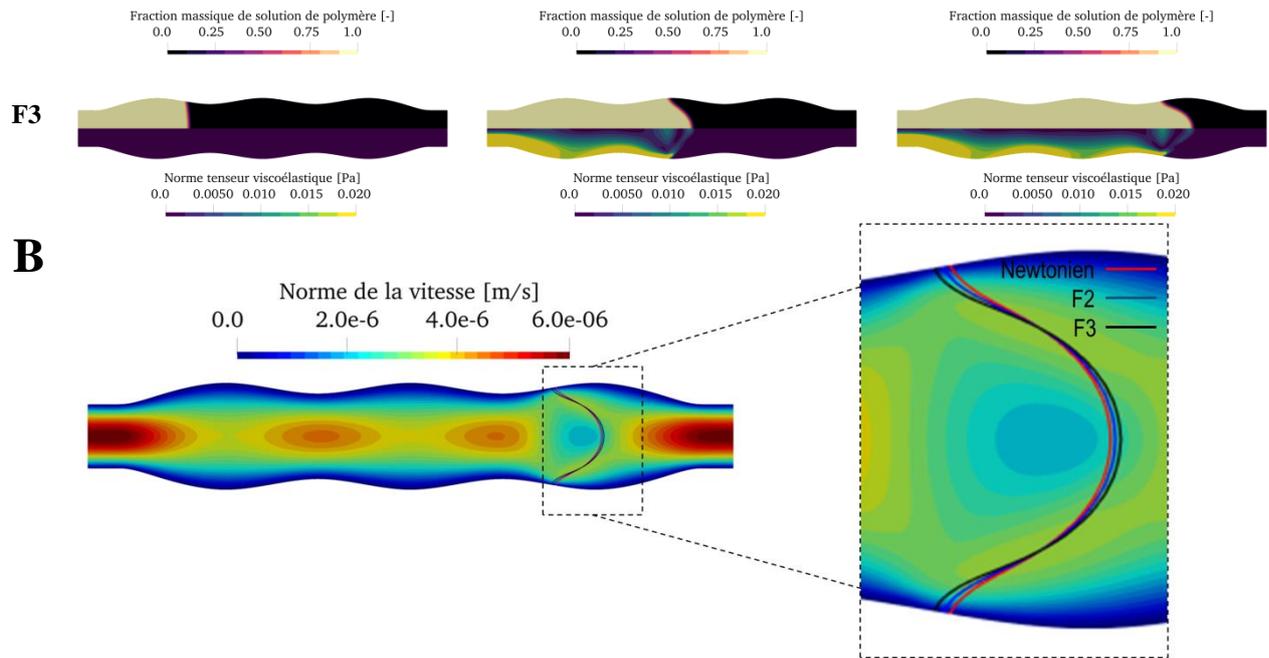
## 1. Écoulements multiphasiques dans des tubes capillaires de sections périodiquement variables

Tout d'abord, la première géométrie **G1** est considérée. Dans cette configuration, peu de déviations sont attendues entre les cas Newtoniens et viscoélastiques : la conservation de la masse impose que les débits d'entrées et sortants soient similaires. Cependant, nous avons vu dans la partie monophasique que lorsque le tube était composé d'une succession de convergents et divergents, l'élasticité de la solution de polymère était sollicitée, pouvant mener à des modifications du champ de vitesse et du facteur de résistance du fluide. De plus, l'approximation d'un milieu poreux par un faisceau de capillaires (tortueux ou non) reste largement rependue dans de nombreuses applications, et constitue donc un cas d'intérêt pour l'étude de la récupération du pétrole par une solution de polymères.

### i) Influence de la viscoélasticité de la solution

Les paramètres des fluides F1, F2 et F3 décrits dans l'étude monophasique sont repris ici afin de déplacer un fluide plus visqueux  $F_n$  de viscosité  $\eta_n=8\eta_{w,app}$  représentant le pétrole saturant le milieu poreux considéré. Les solutions obtenues par la résolution du modèle numérique sont tracées Figure IV-11.



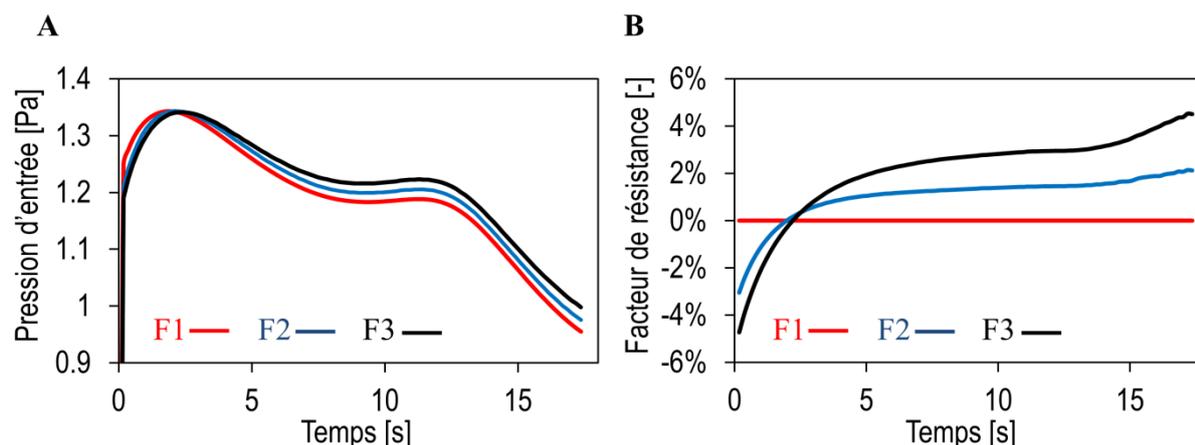


**Figure IV-11: Résultats des simulations multiphasiques viscoélastiques pour la géométrie G1.**

(A) Évolution de la fraction massique de la solution de polymère et des contraintes viscoélastiques dans le domaine pour les fluides à l'étude. (B) Champ de vitesse de la solution F3 au temps final et position des interfaces des fluides et superpositions des positions des interfaces pour différents paramètres viscoélastiques.

Les résultats présentés Figure IV-11 montre l'influence de la viscoélasticité sur l'écoulement, et particulièrement sur la forme de l'interface. Ces hypothèses avaient déjà été énoncées par (Wang, et al., 2010) et étudiées expérimentalement dans (Avenida, et al., 2013). En fonction du nombre de Péclet, il a été vu dans l'étude du modèle mathématique que l'interface pouvait se déformer de façon plus ou moins conséquente lorsque les forces convectives étaient dominantes. Cependant, à nombre de Péclet identique, l'interface entre une solution viscoélastique et l'huile en place se déforme davantage au cours du temps qu'avec un fluide Newtonien (voir Figure IV-11-A, B, insertion Figure IV-11-B). L'augmentation des nombres viscoélastiques (nombre d'Oldroyd  $\beta$  et de Weissenberg  $Wi$ ) semble numériquement entraîner une diminution de la vitesse de l'interface aux parois tandis que son centre est plus avancé. En conséquence, l'accumulation de contraintes élastique près de l'interface tend à modifier le champ de vitesse du fluide par rapport à la solution Newtonienne, de sorte qu'une interface avec une solution fortement élastique aura un rayon de courbure plus élevé qu'une solution de moindre élasticité (interface Figure IV-11-B).

L'introduction de l'aspect multiphasique dans les simulations effectuées montre un effet direct de la viscoélasticité sur l'évolution de l'interface. Les effets viscoélastiques présentés dans l'étude monophasique sont-ils quant à eux toujours présents ? L'étude de la variation de la pression dans le système est illustrée sur la Figure IV-12.



**Figure IV-12: Facteur de résistance pour un écoulement diphasique viscoélastique.**

(A) Évolution temporelle du facteur de résistance pour les trois solutions étudiées. (B) Évolution temporelle du facteur de résistance pour des solutions d'élasticité différentes à nombre d'Oldroyd fixé  $\beta=0.9$ .

Dans la Figure IV-12 l'augmentation des paramètres viscoélastiques de la solution (nombre d'Oldroyd  $\beta$  et de Weissenberg  $Wi$ ) modifie la solution numérique obtenue selon les critères observés dans le cas monophasique : plus la solution employée pour la récupération est viscoélastique, plus la pression d'entrée du domaine augmente au-dessus du cas Newtonien (Figure IV-12-A) et le facteur de résistance mesuré (Eq IV-2) est élevé (Figure IV-12-B). La variation temporelle de la pression suit une dynamique comparable quelle que soit la rhéologie du fluide employée. Au fur et à mesure que le fluide injecté sature le milieu, la pression d'entrée du système décroît vers sa valeur déterminée dans le cas monophasique. Cette diminution progressive est cependant modulée par les contractions et expansions de la microstructure qui font varier la forme de l'interface, et donc la pression capillaire. Cette dépendance entre la pression du système et la position de l'interface entraîne, dans le cas d'écoulement multiphasique, une variation temporelle du taux de résistance (absente lors de l'étude monophasique). Sur la Figure IV-12-B, ce dernier varie selon une dynamique caractéristique des fluides viscoélastiques, puis augmente brusquement aux alentours de  $t = 12$  s, lorsque le fluide entre dans une nouvelle contraction. Cette variation s'explique par le fait qu'à partir de cet instant, l'interface des fluides viscoélastiques s'étire davantage que durant le reste de la simulation ; les contraintes viscoélastiques étant pleinement établies, le couplage entre la rhéologie et l'aspect multiphasique entraîne des déviations plus importantes entre les solutions que dans toute la première partie de la simulation numérique.

Il est remarquable que pour chaque fluide viscoélastique simulé, le facteur de résistance (Eq IV-2) obtenu soit positif une fois les contraintes viscoélastiques établies. En comparaison avec l'étude monophasique, le fluide F2 avait, dans cette géométrie, un comportement global rhéofluidifiant (avec un facteur de résistance négatif).

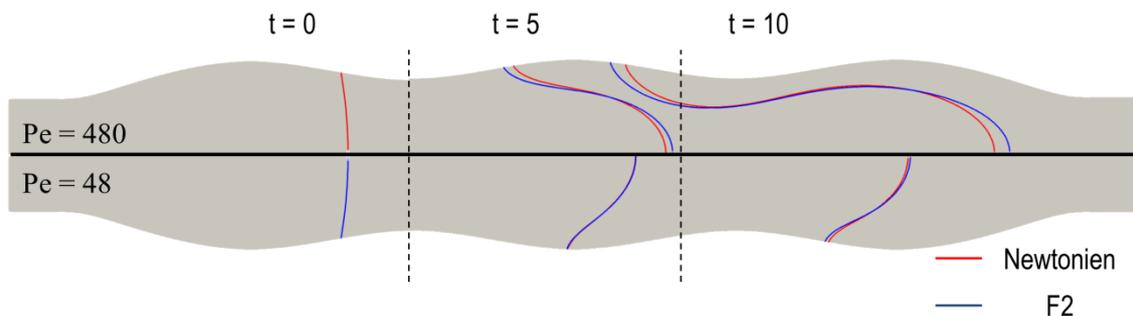
Une façon d'expliquer les différentes observations numériques avancées précédemment consiste à supposer un lien de dépendance entre la pression capillaire à l'échelle du pore et les paramètres viscoélastiques des solutions injectées. En effet, il a été montré que l'action des forces élastiques au niveau de la zone de contact entre les fluides avait tendance à étirer l'interface (Figure IV-11), ce qui entraîne une augmentation de sa courbure malgré des paramètres capillaires identiques entre les écoulements. Par cette action, l'augmentation des paramètres viscoélastiques dans le cas de l'injection d'un fluide non-mouillant entraîne une augmentation de la pression capillaire. Cette dernière rend le système plus sensible au changement topologique (*e.g.* contraction ou expansion Figure IV-12). Le facteur de résistance ainsi mesuré est la somme de deux contributions : l'effet des contraintes viscoélastiques, similaire à celles observées dans le cas monophasique, et l'augmentation de la pression capillaire due à une déformation supplémentaire de l'interface. Par cette explication, l'aspect rhéopais-

sant observé pour le fluide F2 proviendrait en réalité de l'augmentation du saut de pression à l'interface plutôt que de forces viscoélastiques supplémentaires par rapport au cas monophasique.

ii) Influence du régime d'écoulement sur la forme de l'interface

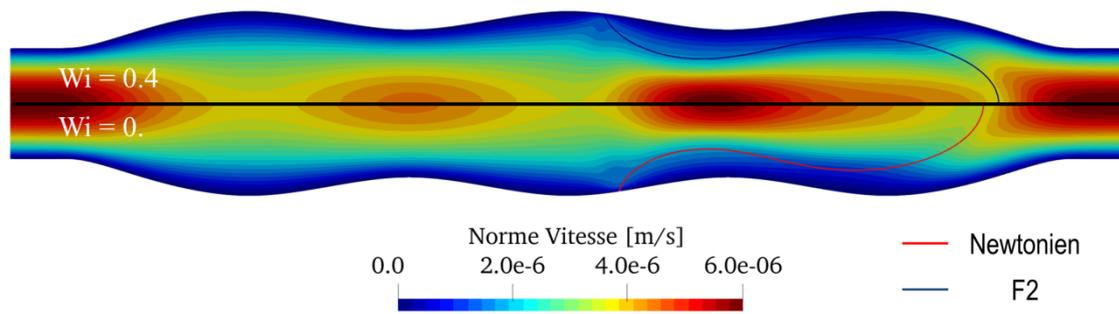
Les expériences numériques précédentes avaient montré que la forme de l'interface était contrôlée par le rapport entre les forces convectives et les forces diffusives, mesurées par le nombre de Peclet. Cependant, l'étude de l'influence des paramètres viscoélastiques de la solution injectée sur le système a montré l'impact des contraintes viscoélastiques, qui influent sur le champ de vitesse au travers de l'équation de Navier-Stokes, et qui entraînent une déformation supplémentaire de l'interface.

Comme l'influence des forces viscoélastiques s'expriment par l'intermédiaire d'une modification du champ de vitesse, il est attendu que leur impact soit lui-aussi modulé par le nombre de Peclet. Numériquement, cette tendance est retrouvée Figure IV-13. La variation du nombre de Peclet permet une déformation plus ou moins grande de l'interface par les forces élastiques : bien que le profil de vitesse d'entrée soit similaire dans chaque cas, la déviation entre les solutions newtoniennes et viscoélastiques sont plus grandes pour des régime convectif ( $Pe > 100$ ). Dans chaque cas, les observations faites précédemment sont vérifiées : l'accumulation des contraintes viscoélastiques près de la zone de contact modifie le champ de vitesse proche de l'interface, ce qui entraîne son étirement. La déformation varie en fonction du nombre de Peclet : comme il est Figure IV-13, si à  $Pe = 48$ , l'action des forces viscoélastiques sur l'interface peut paraître presque négligeable, elle possède une influence plus grande sur la forme de la solution à  $Pe = 480$ .



**Figure IV-13: Évolution des interfaces en fonction du nombre de Peclet pour différents fluides viscoélastiques**

En régime convectif ( $Pe > 100$ ), l'action des contraintes viscoélastiques sur le champ de vitesse est d'avantage visible (voir la Figure IV-14). Conformément aux observations effectuées dans le cas monophasique, la croissance des forces élastiques au sein l'écoulement entraîne une déviation des lignes de courant vers les parois et une augmentation des extremums locaux dans les divergents et les convergents. Au cours du temps, l'interface des fluides viscoélastiques subit davantage de déformations, et on observe globalement que son centre est situé en avance de celui d'un fluide Newtonien, alors que le point de contact avec la paroi est derrière. Il en résulte une augmentation courbure de l'interface avec l'augmentation de l'élasticité de la solution injectée, ce qui influe en retour sur les forces capillaires, comme observé précédemment.



**Figure IV-14: Influence directe de l'élasticité de la solution injectée sur la vitesse en fonction du nombre de Weissenberg à  $Pe = 480$  et pour un nombre d'Oldroyd  $\beta=0.6$ .**

On retrouve dans cette partie les considérations discutées en introduction sur l'importance relative des forces viscoélastiques et des forces capillaires (Azad & Trivedi, 2019). Si les forces capillaires (*i.e.* la rigidité de l'interface) est trop grande, les déviations entre forces viscoélastiques et Newtonienne sont négligeables. Par conséquent, les hypothèses de récupération améliorée basée sur les propriétés élastiques des polymères semblent peu justifiables pour des régimes peu convectifs ( $Pe < 100$ ). À cet égard, nous pourrions noter que c'est le nombre de Peclet  $Pe$  plutôt que le nombre capillaire  $Ca$  usuel qui permet de quantifier l'impact relatif des forces au niveau de l'interface. En effet, par sa définition, le nombre de Peclet définit dans notre système d'équation contient davantage de renseignements sur l'aspect diphasique de l'écoulement que le nombre capillaire, qui montre peu d'influence pour des simulations où le débit d'entrée est imposé.

### iii) Cas d'un fluide injecté mouillant

L'effet d'un changement de mouillabilité de la phase injectée est à présent étudié. Numériquement, imposer un angle de mouillabilité supérieur à  $90^\circ$  entraîne une détérioration de l'algorithme de résolution numérique dans le cas de solutions très élastiques. Ainsi, seuls les cas faiblement mouillables ( $\theta_s < 110^\circ$ ) sont comparables avec les mêmes paramètres que les cas précédents, et sont présentés ici (voir Figure IV-15).

D'après les paramètres utilisés pour cette simulation, deux forces semblent en concurrence : l'angle de contact non-mouillant a tendance à imposer une forme concave à la zone de contact entre les phases, alors que le profil de vitesse tend à en déformer le centre. Dans le régime d'écoulement imposé ( $Pe = 48$ ), les forces convectives finissent par l'emporter : le profil de fraction massique de la phase injectée se déforme dans le temps, et le centre de l'interface « dépasse » les points triples à  $t = 8.7$  s, et encore plus à  $t = 17.4$  s (Figure IV-15-A). La forme concave de l'interface est alors uniquement préservée sur les zones proches des parois. Pour les fluides viscoélastiques, les contraintes supplémentaires présentes à l'interface entraînent une déformation additionnelle. Bien que les amplitudes de ces déformations soient inférieures que dans le cas de fluides non-mouillants, l'analyse de la variation de la pression montre bien une différence de force capillaire (Figure IV-15-B). Durant les premiers temps de la simulation (Figure IV-15-B,  $t = 0$  s), la pression au sein du fluide injectée Newtonien (courbe rouge) est supérieure à celle du fluide viscoélastique (courbe bleue). Une fois les contraintes viscoélastiques établies ( $t > 8.7$  s), la pression dans le fluide viscoélastique devient supérieure à celle du fluide Newtonien du fait des forces élastiques présentes dans le système. De plus, on observe une légère augmentation du saut de pression de part et d'autre de l'interface pour le fluide F2, qui montre que la rhéologie viscoélastique influe sur le rayon de courbure de l'interface, comme il avait été observé dans le cas précédent. Notons cependant que cette différence est plus faible que dans le cas d'un fluide injecté non mouillant.

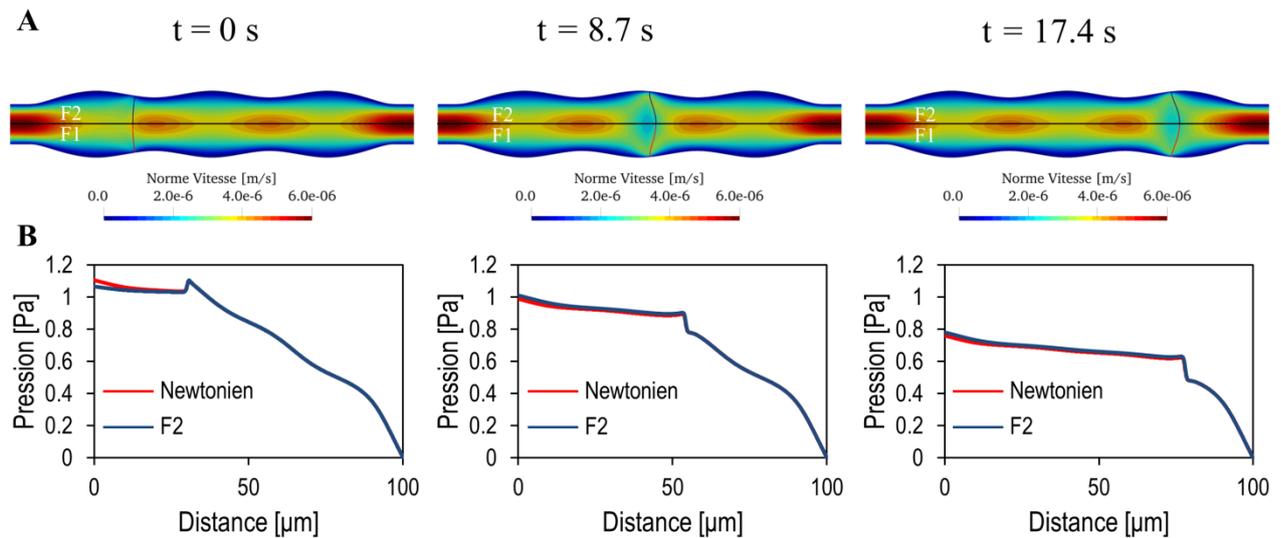


Figure IV-15: Écoulement multiphasique mouillant d'un fluide Viscoélastique (F2) et Newtonien (F1)

## 2. Écoulements multiphasiques dans des Microstructures en croix

L'influence des paramètres viscoélastiques est maintenant examinée pour la géométrie dite « en croix ». Dans les cas monophasiques, des modifications du champ des champs de vitesse avaient pu être observées du fait des forces élastiques émergentes pour des écoulements de solution de polymère.

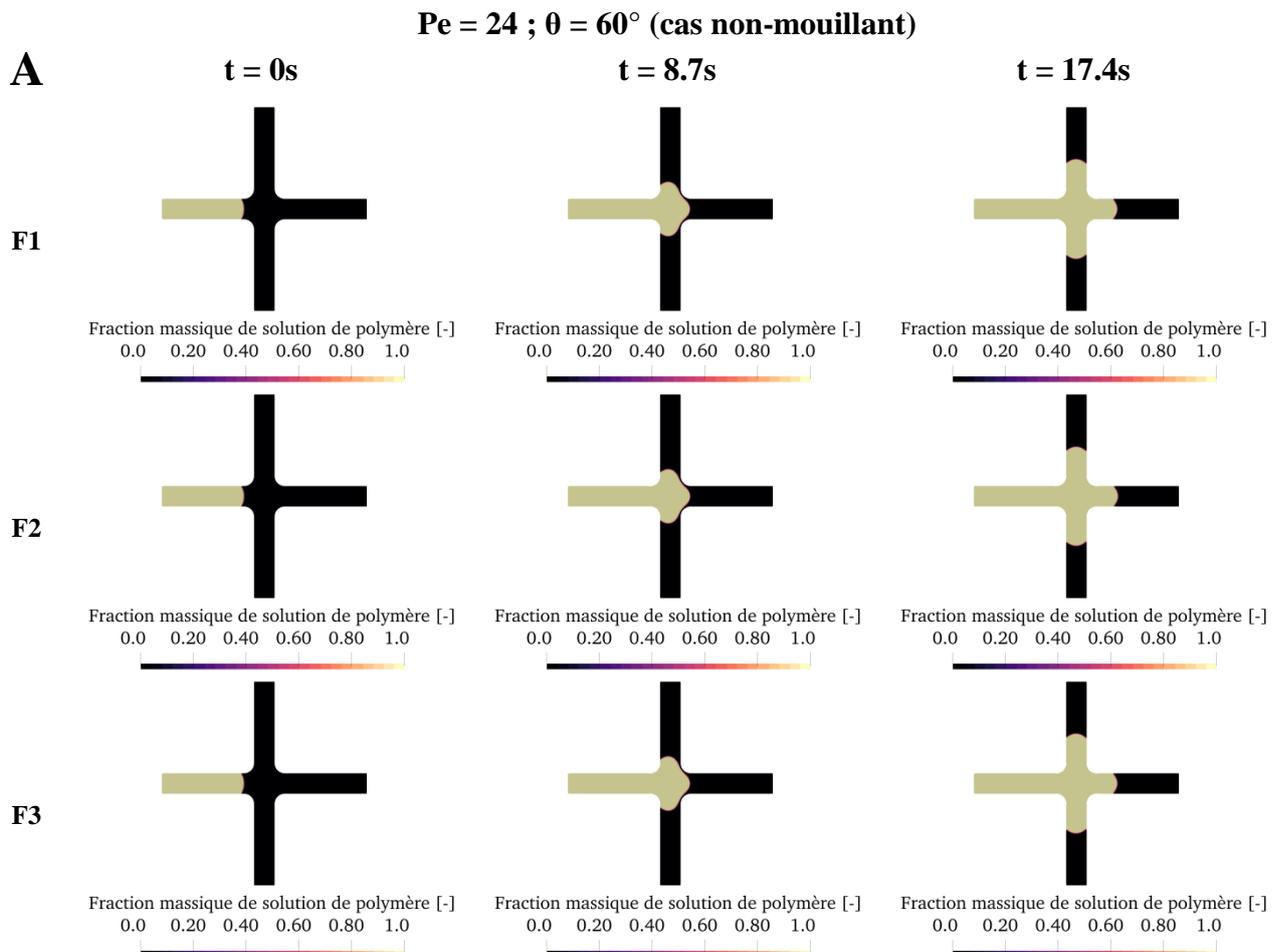


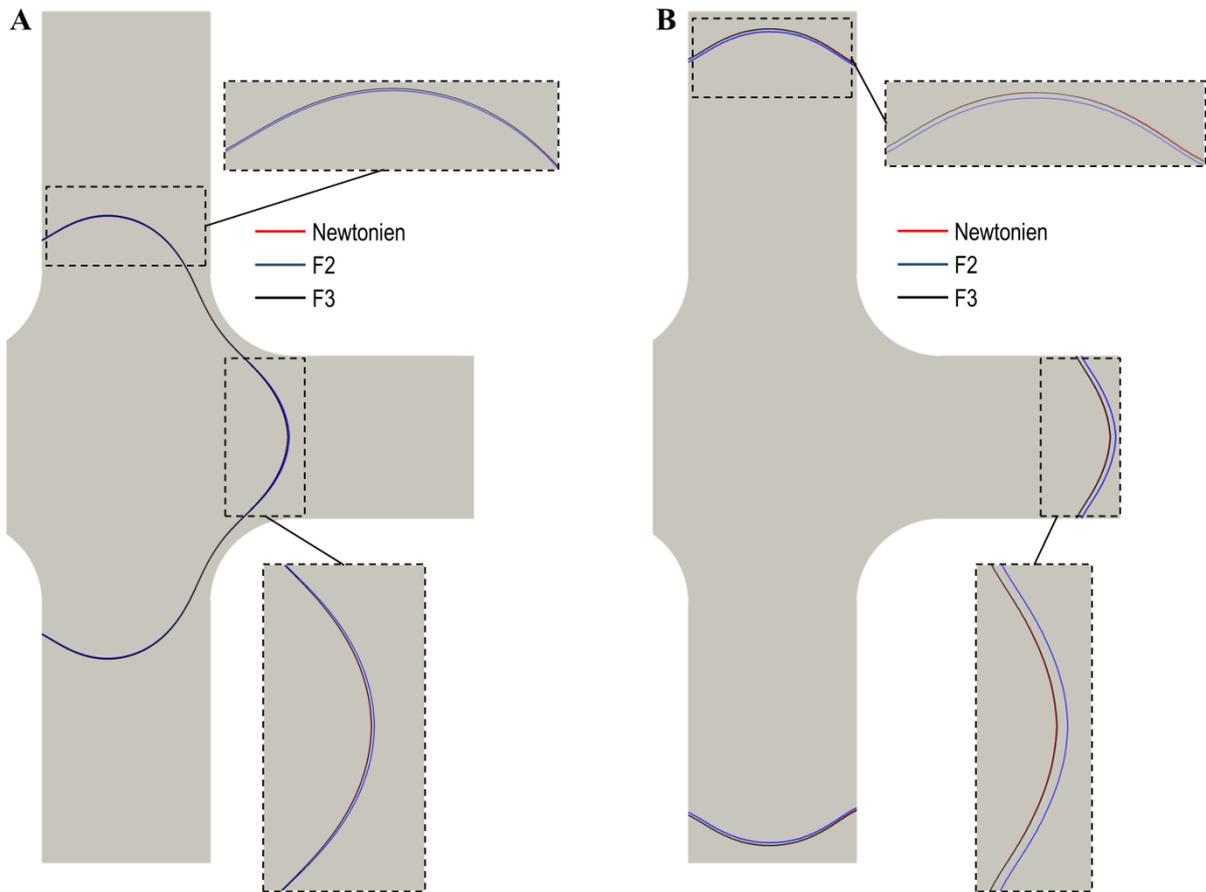
Figure IV-16: Résultats des simulations multiphasiques viscoélastiques pour la géométrie G2 pour un fluide injecté Newtonien (F1), légèrement viscoélastique (F2) et très viscoélastique (F3).

En particulier, il avait été vu que les contraintes viscoélastiques déviaient le champ de vitesse de la direction d'injection, et que le flux se répartissait préférentiellement dans les directions orthogonales de la géométrie.

La dynamique des écoulements multiphasiques dans cette nouvelle géométrie varie peu en fonction de la rhéologie des fluides injectés (voir Figure IV-16-A). L'influence de la viscoélasticité semble moins importante ici par rapport aux observations effectuées dans la géométrie précédente **G1**. Il peut être supposé que la division du débit d'injection selon les trois directions de sortie entraîne une diminution de la vitesse dans les branches secondaires, et ainsi un déplacement de l'interface plus faible.

Dans cette géométrie, la dynamique de l'écoulement suit les étapes suivantes :

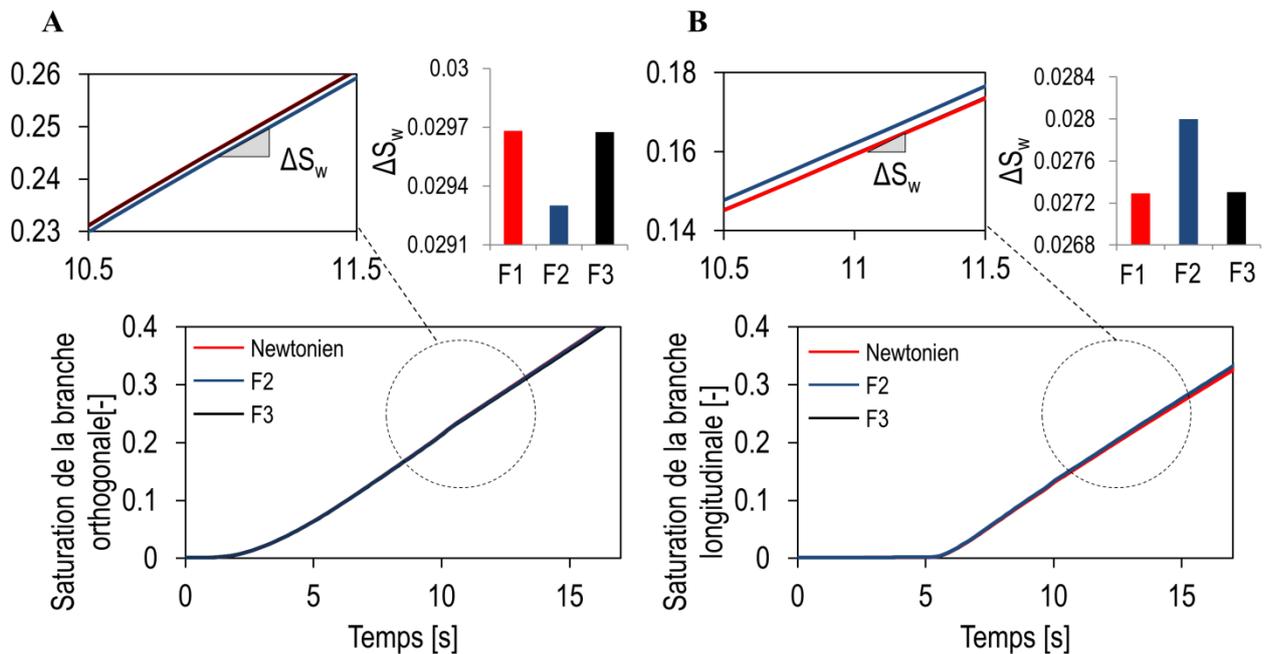
- i)* ( $t < 3$  s) L'écoulement multiphasique s'écoule tout d'abord dans le capillaire d'injection (entrée gauche de la microstructure) suivant un profil de Poiseuille. À la différence de la géométrie **G1**, l'absence de variations géométriques dans cette partie ne permet pas de modification du champ de vitesse par les forces élastiques, et les interfaces avancent avec le même profil quel que soit l'élasticité du fluide utilisé.
- ii)* ( $3 < t < 11$  s) Les premières différences d'écoulement apparaissent lors de l'entrée dans le divergent central de la géométrie. À partir de cet instant, l'intensité variable des forces viscoélastiques selon les paramètres rhéologiques des fluides influent sur la forme de l'interface qui obéit aux hypothèses énoncées dans le cas monophasique : l'action des forces élastiques sur le champ de vitesse, qui répartit le débit d'injection préférentiellement dans les branches orthogonales de la géométrie est ainsi retrouvée. En comparaison de l'interface avec un fluide Newtonien, les interfaces viscoélastiques (courbes bleue et noire Figure IV-17-A) ont déformé l'interface selon les directions préférentielles des écoulements observés dans le cas monophasique. Pour des fluides modérément viscoélastiques (fluide F2), l'interface avance d'avantage dans la direction d'injection. Dans la direction orthogonale à la direction d'injection, c'est le fluide F3 qui est le plus en avance.
- iii)* ( $t > 11$  s) Le centre de la géométrie est complètement saturée par le fluide injecté (voir Figure IV-16). Les interfaces se situent dans les branches de sortie de la géométrie, et les préférences de répartitions initialement observées dans (*ii*) et le cas monophasique sont vérifiés. Notons cependant que dans le régime d'écoulement étudié ( $Pe=24$ ), les branches orthogonales sont davantage saturées que la branche de droite, même pour les systèmes Newtonien dont la 'préférence' pour cette direction a pourtant été démontrée numériquement. Cela est particulièrement visible Figure IV-17-B où les écarts entre interface ont peu évolué par rapport à ceux observés Figure IV-17-A. Cette observation est la conséquence de l'entraînement de l'interface par l'angle de contact de la paroi de la microstructure. Ainsi, les effets viscoélastiques observés sont modulés par les effets capillaires (notamment par l'influence de l'angle de contact dans cette géométrie). À cet égard, on notera que les interfaces du fluide F1 (Newtonien) et F3 (très viscoélastique) sont quasiment indiscernables.



**Figure IV-17 : Position relative des interfaces aux temps  $t = 8.7$  s (A) et  $t = 17.6$  s (B) pour chacune des rhéologies étudiées.**

Il est possible de mesurer l'effet de la viscoélasticité du fluide injecté dans la vitesse de saturation de chaque branche Figure IV-18. En accord avec la discussion précédente, on retrouve une saturation légèrement supérieure pour le fluide F2 dans la branche de droite orientée à la direction d'injection (Figure IV-18-B), alors que dans les branches orthogonales, les saturations du fluide Newtonien et du fluide F3 sont supérieures (Figure IV-18-B). Comme pour le cas monophasique, on remarque que pour les coefficients viscoélastiques du fluide F3, la solution numérique est plus proche du cas Newtonien que pour la solution F2. On suppose donc que les paramètres de la loi d'Oldroyd-B pour le fluide F3 sont ceux qui amorcent le changement de régime viscoélastique étudié précédemment. Notons que l'étude de paramètres plus élastique ne permet pas toujours une bonne convergence de l'algorithme numérique.

Pour distinguer les effets viscoélastiques des effets capillaires, les vitesses de saturations  $\Delta S_w$  dans chaque cas sont représentées Figure IV-18-A, B. Au-delà de la position de l'interface (qui est, comme nous l'avons vu, fonction de nombreux paramètres viscoélastiques et capillaires), la variation de la saturation renseigne sur l'action de la rhéologie dans la répartition des fluides, et confirme alors les hypothèses précédentes.



**Figure IV-18: Variation de la saturation de chacune des branches de la géométrie G2. (A) Branche orthogonale et (B) branche de droite, dans la direction d'injection**

Il est intéressant de noter que l'évolution des débits dans les simulations effectuées Figure IV-18 semble toujours indiquer que la branche orthogonale se sature à une vitesse supérieure ( $\Delta S_w > 0.0290$ ) que la branche de droite dans la direction d'injection ( $\Delta S_w < 0.0280$ ), quelle que soit la rhéologie employée pour la solution injectée. Il est possible de voir ici une conséquence supplémentaire de l'entraînement de l'angle de contact à la paroi, discuté précédemment dans le point (iii) de la dynamique de saturation.

Afin de mieux visualiser les déviations des solutions numériques entre le fluide F3 et le cas Newtonien, il est préférable d'étudier les variations du facteur de résistance (voir Figure IV-19). Globalement, les manifestations viscoélastiques attendues sont retrouvées : la pression du fluide Newtonien atteint immédiatement son maximum, puis décroît avec le déplacement de l'interface. Au contraire, pour les fluides viscoélastiques, la pression (et le facteur de résistance) sont au départ plus faibles, et augmentent progressivement au-dessus du cas Newtonien au fur et à mesure que les contraintes élastiques s'établissent. À la différence des simulations dans la géométrie **G1**, le facteur de résistance du fluide F3 est similaire à celui du fluide F2, alors qu'on s'attendait à une évolution croissante de ce paramètre avec l'augmentation des grandeurs de la loi d'Oldroyd-B, conformément à l'étude monophasique. Une étude précise du saut de pression au niveau de l'interface montre que la pression capillaire dans la configuration peu viscoélastique (fluide F2) est supérieure à celle du fluide plus viscoélastique (fluide F3). Cette observation est cohérente avec les avancées relatives des interfaces en fonction de la rhéologie des fluides injectés Figure IV-17. Ainsi, par la déformation supplémentaire de l'interface dans la direction d'injection pour les fluides de viscoélasticité intermédiaires, le facteur de résistance présente une contribution de la pression capillaire plus élevée que pour les fluides plus viscoélastiques, qui ont tendance à davantage déformer l'interface dans les directions orthogonales.

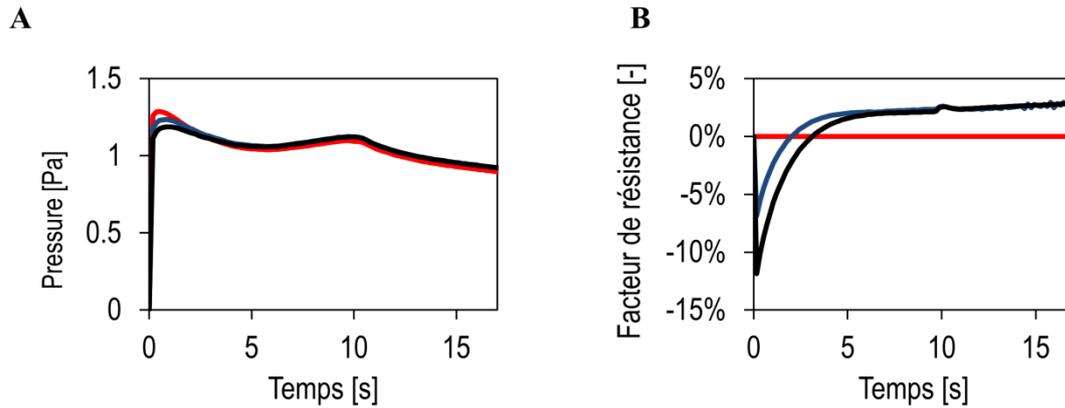


Figure IV-19: Influence de la viscoélasticité sur la pression d'entrée du domaine (A) et le facteur de résistance (B) mesuré.

### 3. Discussion sur la récupération améliorée à l'échelle du pore

L'utilisation historique des polymères visait en premier lieu à modifier le rapport de mobilité entre les phases du milieu poreux en augmentant la viscosité de la solution injectée (et éventuellement diminuer la perméabilité du milieu avec le colmatage des pores) (Needham & Doe, 1987). À l'échelle microscopique, ces considérations sont retrouvées en observant le comportement de la solution numérique pour différent rapport de viscosité entre la solution initialement en place et la solution injectée, à partir d'un ratio de mobilité microscopique  $\Pi_m$  défini comme :

$$\Pi_m = \frac{\eta_{s,w} + \eta_{p,w}}{\eta_n} \quad \text{Eq IV-4}$$

Il est possible d'observer, sans considération pour les forces élastiques, l'influence d'une augmentation numérique de la viscosité de la solution injectée. Sur la géométrie G1 par exemple, on trouve les résultats suivant :

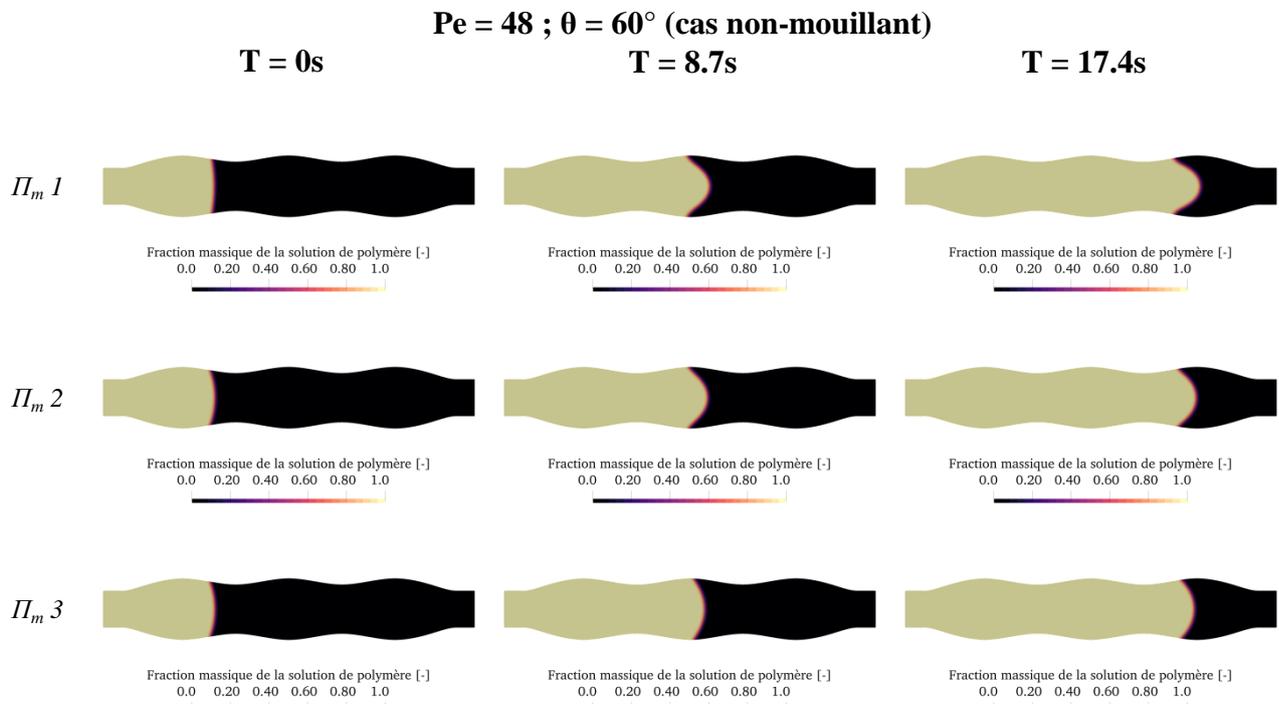


Figure IV-20: Influence du rapport de viscosité des solutions à l'échelle du pore pour une mobilité  $\Pi_m 1=8$  (cas de référence),  $\Pi_m 2=4$  et  $\Pi_m 3 = 1$ .

Sur la Figure IV-20, l'action de la rigidification de l'interface entraînée par la simple modification de la viscosité de la solution injectée (sans effet viscoélastique) est clairement visible. L'interface entre les phases dans le cas de rapport de mobilité faible est plus stable et se déforme moins sous l'action du profil de vitesse que pour des mobilités plus élevées (les simulations étant effectuées pour des nombres de Peclet  $Pe=48$  identiques). L'influence de la mobilité est notablement supérieure à celle observée pour les effets élastiques purs tels que décrit dans la partie précédente. Si expérimentalement, l'élasticité et la viscosification des solutions injectées interviennent simultanément (Wang, et al., 2010; Avendano, et al., 2013), la possibilité de séparer *in silico* la contribution de chaque effet dans le modèle d'Oldroyd-B/Navier-Stokes permet d'établir une hiérarchie à l'échelle du pore sur les phénomènes intervenant dans les systèmes multiphasiques et viscoélastiques. En particulier, l'étude de la sensibilité des solutions numériques modélisées dans cette partie montre que :

- i) La rigidité (*i.e.* la capacité à se déformer) de l'interface est avant tout pilotée par le régime d'écoulement (nombre de Peclet  $Pe$ ) et le rapport des viscosités entre les fluides.
- ii) Une déformation supplémentaire de l'interface due aux forces élastiques pour des solutions de polymère peut intervenir dans les cas favorables ( $Pe$  élevé).

Cette hiérarchisation de l'influence relative des paramètres de simulation était en partie prévisible. D'après l'étude purement stationnaire et monophasique menée dans la première partie, les déviations observées sur les champs de vitesses à débit imposé étaient de l'ordre de 5% par rapport au cas Newtonien. Il est alors cohérent que dans le cas instationnaire et multiphasique, les solutions obtenues sur un unique pore, et sur des temps relativement courts (20 s) soient très proches, et que les déviations n'apparaissent que dans des régimes d'écoulement particuliers (*e.g.* régimes convectifs à haut nombre de Peclet et de Weissenberg).

Des simulations numériques que nous avons effectuées, l'influence la plus notable de l'augmentation des forces élastiques sur l'écoulement était la déformation supplémentaire de l'interface par rapport au cas Newtonien, qui s'étirait alors conformément aux profils de vitesse dans le fluide. Cette manifestation des forces viscoélastiques n'intervient cependant pas dans toutes les situations. Lors de l'étude monophasique, l'importance des paramètres géométriques de l'écoulement sur l'action des forces viscoélastiques en solution avaient été démontré. Cette observation est toujours vraie dans le cas multiphasique : une déviation entre les solutions Newtonienne et viscoélastique n'intervient que si les forces élastiques présentes en solution peuvent modifier la configuration de l'écoulement, ce qui, à débit imposé, nécessite un artefact géométrique (divergent ou convergent).

Une illustration de cette observation concerne la variation de la taille des interfaces selon la rhéologie des fluides injectés, illustrés Figure IV-21.

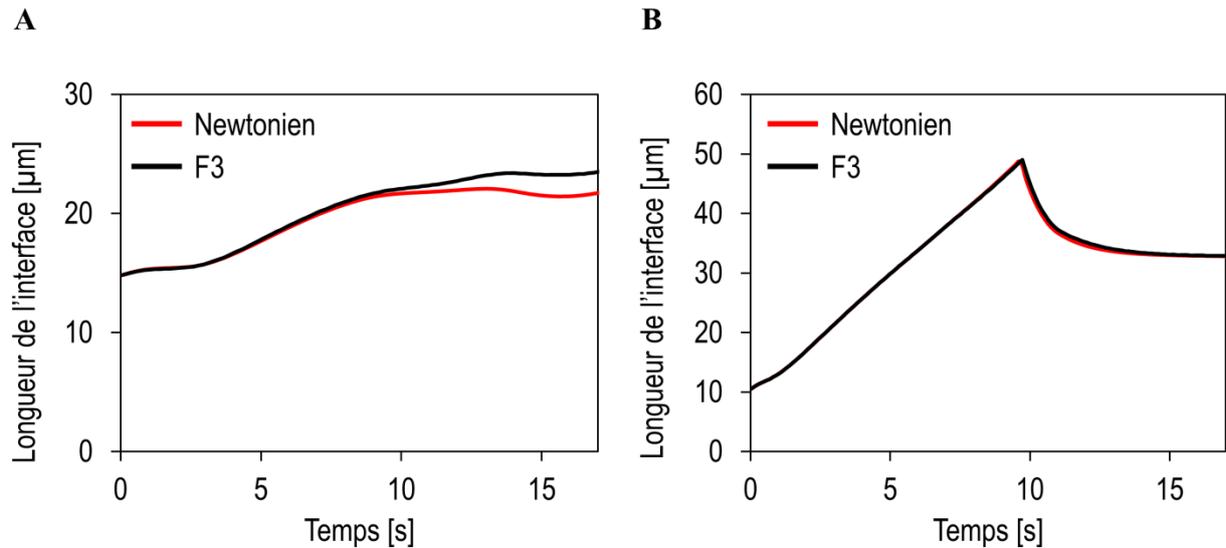


Figure IV-21: Variation de la taille de l'interface dans le temps pour la configuration G1 (A) et G2 (B) selon la rhéologie des fluides injectés.

Sur la Figure IV-21, la variation de l'influence de la rhéologie des fluides injectés dans le temps (et donc en fonction des paramètres géométriques) est clairement visible. Si dans tous les cas, la réponse à l'échelle microscopique de l'utilisation de fluide viscoélastique est un étirement de l'interface (la taille de l'interface entre l'huile et un fluide viscoélastique (courbe noire) étant supérieure à celle entre un l'huile et un fluide Newtonien (courbe rouge)), la déformation de l'interface intervient dans des cas très particuliers. On observe par exemple sur Figure IV-21-A que la déviation entre les solutions apparaît principalement au bout de  $t = 8$  s, et que l'écart entre les solutions se stabilise pour  $t > 15$  s, ce qui correspond au moment où le fluide entre et sort d'un convergent dans la géométrie **G1**. De même, aucune différence sur la forme de l'interface n'est clairement visible pour la géométrie **G2** avant  $t = 7$  s, ce qui correspond à l'instant où le fluide injecté se répartie dans chacune des branches (*i.e.* l'instant où l'effet des forces viscoélastiques sur l'écoulement sont réellement identifiables). À l'instant d'après  $t > 12$  s, la taille des interfaces pour chaque rhéologie est plus proche, l'écoulement étant de nouveau dans une configuration de Poiseuille, sans variation de géométrie dans chaque branche. Les différences entraînées par les forces élastiques ont alors été gommées par l'action des forces capillaires (en particulier l'avancée de l'angle de contact), et seule une légère différence dans le profil de vitesse subsiste. De ce point de vue, le caractère temporel de l'influence des forces viscoélastiques sur l'écoulement paraît essentiel, et rend par la même occasion difficile la généralisation de l'action bénéfique (ou non) à l'emploi de solutions élastiques pour la mobilisation du pétrole à l'échelle du pore. Cependant, les critères d'apparition de manifestation d'effets purement viscoélastiques restent identiques à ceux lors d'écoulements monophasiques, à savoir le nombre de Weissenberg  $Wi$  et le taux d'élongation de l'écoulement.

iv) Quelles sont les conséquences de ces observations sur la récupération du pétrole ?

L'emploi de polymères souples pour la récupération améliorée, et le rôle des forces élastiques sur la mobilisation du pétrole à l'échelle du pore nourrissent beaucoup de discussion du fait des enjeux économiques sous-jacents qu'ils peuvent potentiellement entraîner. Lorsque tous les critères propices à la manifestation d'effets viscoélastiques sont réunis, il est possible d'envisager des scénarios pour lesquels l'apparition de contraintes viscoélastiques, rendant l'interface plus déformable qu'avec une solution Newtonienne, pourrait être utilisée pour améliorer la mobilisation microscopique du pétrole en place (Wei, et al., 2013). Également, l'apparition de directions privilégiées pour les solutions viscoélastiques, différentes par rapport au cas Newtonien, et la position relative des interfaces comme mon-

trée Figure IV-17 peut s'avérer plus efficace pour balayer efficacement une partie de la microstructure qui n'avait été que peu saturée lors d'opérations de récupérations secondaires. Il a aussi été vu que selon les cas, il pouvait y avoir une modulation des forces capillaires de par l'effet des forces viscoélastiques sur l'interface. Si dans la géométrie **G1**, elle était augmentée par les effets viscoélastiques, le phénomène était plus contrasté dans la géométrie **G2**. Ainsi, cette déformation de l'interface entraînée par les forces viscoélastiques pourrait selon les cas diminuer les forces de piégeage capillaire, et augmenter la récupération. Il faut cependant noter que cette étude suggère également que la déformation additionnelle se fait toujours selon le profil des vitesses, ce qui suggère que les zones de stagnations (*e.g.* « dead-end » pore) sont peu concernés *a priori* par les effets viscoélastiques.

#### **D. Synthèse sur la Modélisation de la Récupération Améliorée par Injection de Polymères**

Dans cette partie, le modèle numérique dérivé dans le chapitre précédent a été utilisé afin d'étudier l'écoulement microscopique de fluides viscoélastiques. Dans un premier temps, ces travaux se sont focalisés sur l'écoulement monophasique de ces fluides, afin d'étudier les déviations entraînées par la rhéologie spécifique des polymères avec les écoulements Newtoniens dans plusieurs expériences de microfluidique *in silico*.

Dans ce cas, la manifestation des forces élastiques (dans le régime laminaire étudié) se caractérise principalement par une augmentation de la perte de charge dans la géométrie considérée. Dans le cas d'un écoulement dans un capillaire par exemple, la pression d'entrée à débit imposé augmente avec les nombres viscoélastiques (nombre d'Oldroyd et de Weissenberg). De plus, il a été vu que plusieurs paramètres géométriques influent sur la réponse viscoélastique des solutions de polymère. En particulier, les forces élastiques sont particulièrement sensibles aux écoulements élongationnels et une forte variation de la solution est observable en fonction des propriétés de la microstructure (oscillations, tortuosités, largeur d'ouverture...). Pour des géométries multidirectionnelles, les forces élastiques ajoutent en plus une anisotropie d'écoulement par rapport au cas Newtonien. Dans le cas d'une microstructure en croix par exemple, l'augmentation des forces viscoélastiques tend à dévier l'écoulement vers les sorties perpendiculaires à la direction d'injection.

La prise en compte du caractère multiphasique à l'échelle du pore amène plusieurs variations des observations précédentes. Le couplage entre forces viscoélastiques et forces capillaires au niveau de l'interface entraîne principalement des déviations sur la forme de l'interface par rapport au cas Newtonien. La modification des nombres viscoélastiques impacte la mobilité de la zone de contact entre les phases ; ces dernières sont alors plus ou moins sensibles aux forces convectives, et peuvent se déformer comme sous l'effet d'un changement de régime. Cette observation est valable pour toutes les valeurs de l'angle de contact étudié dans cette thèse (mouillant ou non-mouillant). Ces variations se font dans le sens du profil de vitesse, et correspondent aux observations effectuées dans le cas monophasique sur l'action de la viscoélasticité sur l'écoulement.

Néanmoins, les écoulements multiphasiques de fluides viscoélastiques n'obéissent pas à toutes les hypothèses faites à partir du cas monophasique. L'influence des forces capillaires, et plus exactement de l'avancée du point triple, réduit les déviations entre solutions de différentes élasticités. Alors que la viscoélasticité avait tendance à entraîner l'anisotropie des solutions numériques dans le cas monophasique, l'entraînement de l'interface par le point triple le long de la paroi entraîne des résultats *in silico* proches, et l'influence des forces viscoélastiques s'efface sous l'action d'autres paramètres, tels que le nombre de Peclet, le rapport de viscosité entre solutions ...

Globalement, cette étude numérique sur des configurations microscopiques suggère un effet bénéfique à l'emploi de solutions de polymère pour la récupération tertiaire du pétrole. Les choix de modélisation effectués avaient pour objectif de mettre en lumière l'action purement rhéologique à l'emploi des

solutions de polymère sur la mobilisation de pétrole à l'échelle du pore, sans considérer en premier lieu les autres interactions entre les polymères utilisés et le milieu poreux (adsorption, déplétion...). Toutes les configurations microscopiques possibles des milieux poreux n'ont pas été étudiées. Le choix des microstructures modélisées tient surtout de leur récurrence dans la littérature, et d'autres géométries auraient pu permettre d'observer davantage les effets viscoélastiques des solutions de polymère. Cependant, les résultats retrouvés dans ces travaux correspondent aux hypothèses avancées dans des études expérimentales précédentes (Wang, et al., 2010; Avendano, et al., 2013; Sheng, et al., 2015). Parmi les scénarios envisagés, les cas modélisables par les modèles rhéologiques développés ont été simulés directement dans ces travaux de thèses, et vérifiés numériquement.

Il reste à savoir comment les observations faites se conservent aux échelles supérieures. Ces travaux ont jusque-là surtout étudié les écoulements à l'échelle microscopique. Pour cela, des connaissances plus précises des milieux considérés pour la récupération du pétrole sont nécessaires (porosité, perméabilité, surface spécifique...). Du point de vue de la modélisation, plusieurs pistes sont envisageables. Une possibilité est de continuer à étudier le comportement des solutions numériques à l'échelle microscopique afin de déterminer empiriquement des relations de fermeture entre les paramètres géométriques du VER et les grandeurs macroscopiques (Dye, et al., 2013). Pour cela, le modèle numérique devrait être simulé sur des domaines plus complexes, telles que des images tomographiques représentatives des milieux poreux. Une autre possibilité est de formuler mathématiquement un problème de fermeture pour les grandeurs macroscopiques indéterminées (Whitaker, 1986).

## V. Modélisation de la Croissance Tumorale

### A. Introduction

La modélisation mathématique de la croissance tumorale est une problématique scientifique aujourd'hui très étudiée qui fait appel à de nombreux champs disciplinaires. L'enjeu sociétal de tels travaux est direct : la possibilité de prédire la vitesse d'invasion d'un cancer est une donnée qui permettrait d'améliorer grandement la prise en charge des patients, en caractérisant l'agressivité de leur maladie, en prédisant son évolution et en adaptant les traitements aux pronostics numériques que pourraient fournir les modèles.

L'utilisation des méthodes d'interfaces diffuses pour la description de ce type de problème est apparue très tôt dans la littérature. Leur introduction dans des travaux de modèles « basés sur la physique » a émergé afin de décrire la tumeur et son environnement (autres populations cellulaires, fluides interstitiels) comme un mélange (Wise, et al., 2008; Cristini, et al., 2009) et ainsi exploiter la dépendance des flux diffusifs du système avec la concentration de cellules tumorales, par contraste avec les modèles précédents qui utilisaient davantage une loi de Fick dans les milieux poreux (Byrne & Preziosi, 2003). Mathématiquement, il a été démontré que cette formulation permettait, sous certaines conditions, d'obtenir un système complet qui aurait pu autrement être mal posé pour certaines valeurs du coefficient de diffusion de la loi de Fick. Mais au-delà de ces considérations mathématiques, la dépendance des flux diffusifs et du niveau de concentration des cellules est justifiée par l'hypothèse d'adhésion non-locale des cellules induite par le niveau de cadhérine exprimé à la surface des membranes cellulaires (Steinberg, 2007). Comme il a été vu en introduction, la séparation spontanée des cellules est pilotée par des forces attractives entre individus de même lignage. En exprimant la différence des forces d'adhésion à partir d'une énergie libre d'Helmholtz, un système similaire à celui de Cahn-Hilliard est obtenu (Wise, et al., 2008), qui permet de décrire l'attraction entre cellules conformément à la décomposition spinodale, bien que les forces en jeu aient des origines différentes.

Par la suite, plusieurs raffinements du modèle précédent ont été développés afin de mieux caractériser les tissus cancéreux à l'étude. Un terme de chimiotaxie a par exemple été ajouté au potentiel chimique (Cristini, et al., 2009), afin d'inclure un mouvement cellulaire actif, orienté vers les fortes concentrations de nutriments. Cette considération permet notamment de retrouver qualitativement les processus d'invasion par branchement souvent observés cliniquement. La formulation a également été étendue à un nombre arbitraire de populations cellulaires (Oden, et al., 2010). Plus proche des considérations cliniques, la pertinence de l'utilisation du système de Cahn-Hilliard et de la dynamique de la décomposition spinodale associée, a été étudiée afin de retrouver la microstructure des cancers de la peau (Chatelin, et al., 2011). Dans cette formulation, une expression modifiée du potentiel chimique est introduite dans laquelle les concentrations d'équilibre du système ne sont plus 1 et 0, mais des valeurs intermédiaires. En conséquence, le système est toujours un mélange même une fois l'équilibre atteint, dans des proportions correspondantes aux études expérimentales. Le terme d'interaction non-local ainsi obtenu possède alors un unique minimum sur la position d'équilibre.

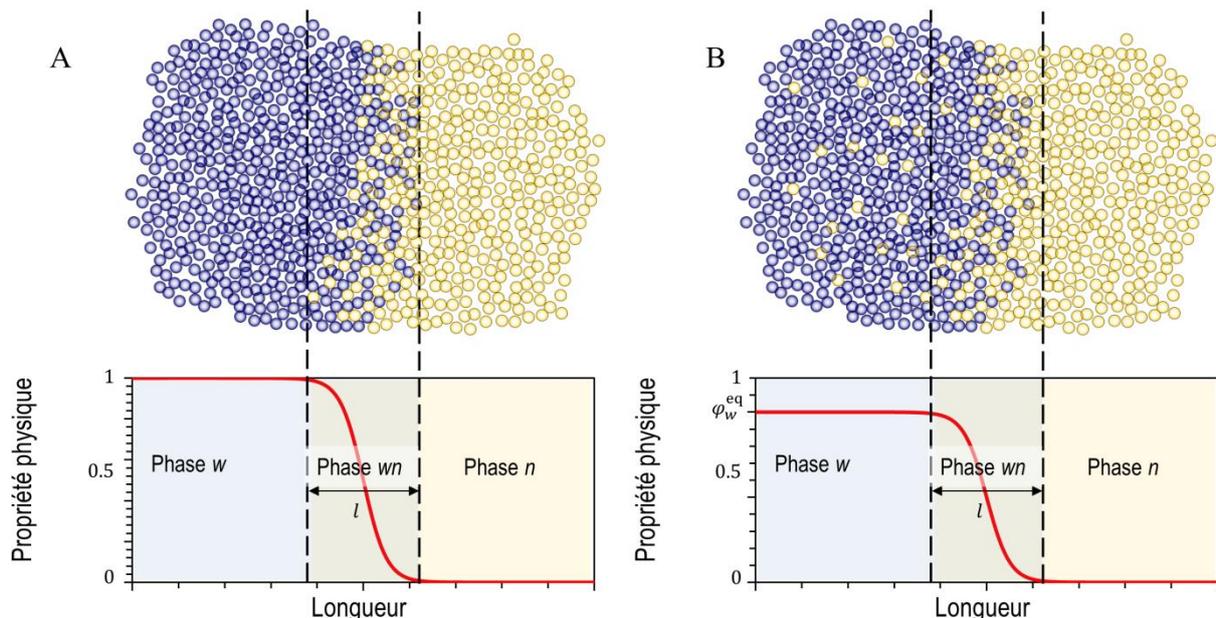
Il est à noter que la majorité des travaux antérieurs cités sont des modèles formulés à l'échelle des tissus biologiques (*i.e.* macroscopiques), qui présentent alors certaines différences avec la formulation mathématique utilisée dans cette thèse où la description du système est à l'échelle d'agrégats cellulaires de quelques centaines de microns. Des adaptations seront apportées à la méthode des interfaces diffuses pour les spécificités de la croissance tumorale et incorporées à la formulation dérivée précédemment afin d'obtenir un modèle mathématique adapté à l'étude microscopique d'un agrégat tumoral libre ou sous contraintes mécaniques. Nous utiliserons l'hypothèse que les cellules interagissent et adhèrent suffisamment entre elles afin que la masse tumorale puisse être décrite comme un milieu continu ayant le comportement d'un fluide viscoélastique en accord avec les caractérisations expérimentales.

tales de la littérature (Foty, et al., 1996; Foty & Steinberg, 2005; Steinberg, 2007; Lecuit & Lenne, 2007; Gonzalez-Rodriguez, et al., 2012). Des simulations numériques de croissance de tumeurs dans divers environnements seront menées *in silico* pour renseigner la dynamique des agrégats de cellules cancéreuses à une échelle submillimétrique.

Ce chapitre explore cette application en s'appuyant sur des études expérimentales menées au laboratoire d'optique d'Aquitaine avec lequel nous avons pu collaborer. Il se décompose en quatre parties : tout d'abord, le modèle dérivé pour l'étude multiphasique de fluides viscoélastiques en milieux poreux est adapté afin de pouvoir simuler correctement la croissance d'un agrégat tumoral. Dans un second temps, la formulation mathématique obtenue est utilisée afin de reproduire numériquement des résultats expérimentaux de croissances d'agrégats tumoraux en milieux confinés (Alessandri, et al., 2013). Par la suite, le modèle sera utilisé dans plusieurs configurations afin d'étudier l'influence des nombres adimensionnels dans le cas précis de la croissance tumorale. Enfin, les limites et pistes d'amélioration de la formulation seront présentées, et ce afin de tendre vers une utilisation multi-échelle du modèle microscopique. La première et seconde partie de ce chapitre ont fait l'objet d'une publication (Le Maout, et al., 2020).

## B. Modification du modèle pour la simulation de la croissance tumorale

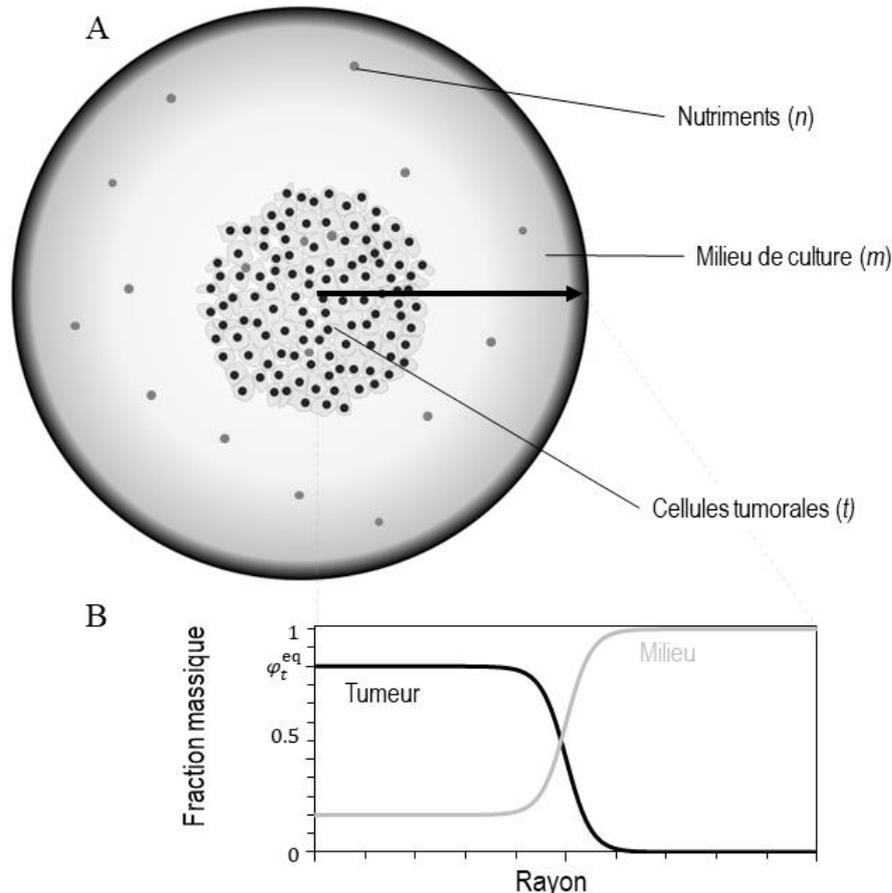
Jusqu'à maintenant, peu d'hypothèses avaient été faites sur la nature des fluides utilisés, pourvu qu'ils aient une viscosité et une densité. L'étude de tissus vivants requiert de caractériser davantage les phases étudiées. Afin de capturer l'aspect vivant et actif des fluides composant le système, certaines hypothèses du modèle précédent sont à réviser. En particulier, la multiplication cellulaire est prise en compte par des termes de réactions chimiques qui ne peuvent pas exister au sein de phases pures. Ainsi, dans cette partie, le système étudié ne sera plus formé de deux fluides immiscibles séparés par une interface de petite taille mais plutôt d'un mélange de deux espèces chimiques : les cellules tumorales  $t$  et le milieu de culture  $m$  qui peut être constitué théoriquement de liquide interstitiel pour une application *in vitro* ou bien de cellules saines pour une application *in vivo* (Figure V-1).



**Figure V-1: Utilisation de la méthode des interfaces diffuses dans le cadre d'un mélange chimique.**

La méthode de description classique (A) pour des phases immiscibles s'adapte naturellement à la description d'un mélange (B) qui possède un minimum stable énergétique pour des concentrations intermédiaires de  $\omega_t^{eq}$ .

Biologiquement, de nombreux facteurs sont impliqués dans la réplication cellulaire. À l'échelle continue, les aspects aléatoires de ce processus sont moyennés et ramenés à un taux de division moyen. Malgré tout, l'influence de certains paramètres extérieurs sur le taux de division ne peut pas être ignorée. L'accessibilité des cellules à des nutriments, et à l'oxygène en particulier, a été montrée expérimentalement comme étant déterminante pour la réplication cellulaire (Freyer & Sutherland, 1986). Ainsi, la concentration de ces derniers doit être calculée au cours du temps, et la dépendance de ce paramètre avec la division cellulaire clairement établie.



**Figure V-2: Modélisation diphasique de la croissance tumorale**

(A) Configuration géométrique. (B) Évolution spatiale de la composition du domaine. Les contours du sphéroïde tumoral sont clairement identifiables bien que le système soit un mélange chimique

L'hypothèse de ne pas considérer des phases pures fournit également un degré de liberté supplémentaire pour la forme du potentiel d'interaction non-local du système de Cahn-Hilliard. Le système initial tendait vers un équilibre où les espèces chimiques étaient les plus séparées possibles (minimum du potentiel chimique à 1 ou 0 de la concentration de la phase). Cette contrainte est allégée ici, et il est envisageable de considérer des mélanges qui sont thermodynamiquement stables pour des valeurs intermédiaires de concentration de cellules tumorales et de milieu de culture. Cette approche a été utilisée pour modéliser la formation de microstructures au sein d'un sphéroïde tumoral dans (Chatelin, et al., 2011), et la concentration volumique d'équilibre utilisée était alors entre 0.64–0.87. En considérant que les cellules tumorales et le milieu dans lequel elles évoluent sont de densités similaires, un résultat identique est trouvé pour les concentrations massiques d'équilibre que nous utilisons (voir Figure V-2).

Enfin la dernière hypothèse ajoutée par rapport au système initial d'équations est l'absence de flux convectifs au sein du système : seuls des mouvements par diffusion des espèces sont considérés. Cette hypothèse est particulière à la configuration d'étude choisie, calquée sur la configuration expérimentale.

tale étudiée. Elle n'est pas nécessaire dans le sens où le système reste bien posé (fermé) même si elle n'est pas utilisée. Cependant, sa prise en compte facilite grandement les calculs et la résolution du problème numérique associé. Cela ne veut pas dire que les cellules restent immobiles car leur vitesse de diffusion est calculée à partir du potentiel chimique du mélange. Cependant, à chaque instant, les flux diffusifs de cellules tumorales sont compensés par un flux diffusif du milieu de culture de même amplitude mais opposé en signe. La vitesse convective moyenne du mélange restera alors nulle au cours du temps.

## 1. Lois de conservation de la masse

Les lois de conservation de la masse du système sont réécrites en prenant en compte les considérations précédentes. Le système étudié est constitué de deux espèces dominantes, à savoir les cellules tumorales, dénotées par  $t$  et le milieu de culture  $m$ , ainsi que d'une multitude d'espèce diluées en solution dénoté par l'ensemble  $I_d$ . Au sein des espèces diluées, l'oxygène, noté  $n$ , est considéré dans ces travaux comme un facteur limitant de la croissance (voir Figure V-2). Comme précédemment, la conservation de la masse dans le système impose que :

$$\underbrace{\omega_t + \omega_m}_{\text{espèces dominantes}} + \underbrace{\omega_n + \sum_{k \in I_{d-n}} \omega_k}_{\text{espèces diluées}} = 1 \quad \text{Eq V-1}$$

La considération de plusieurs espèces en solution nécessite d'adapter l'expression de la vitesse du mélange selon la loi suivante :

$$\mathbf{v} = \omega_t \mathbf{v}_t + \omega_m \mathbf{v}_m + \omega_n \mathbf{v}_n + \sum_{k \in I_{d-n}} \omega_k \mathbf{v}_k \quad \text{Eq V-2}$$

La définition de la vitesse de diffusion reste quant à elle inchangée, et s'écrit pour chaque espèce  $i$  comme :

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v} \quad \text{Eq V-3}$$

Au sein du mélange, la loi de conservation des cellules tumorales  $t$  s'énonce alors (Gray & Miller, 2014):

$$\frac{\partial(\rho\omega_t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_t \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\omega_t \mathbf{u}_t) - r_t = 0 \quad \text{Eq V-4}$$

Où  $\rho$  est la masse volumique du mélange et  $r_t$  un terme d'échange de masse des autres espèces en solution vers l'espèce  $t$ , prenant en compte les considérations biologiques et chimiques (*e.g.* la division cellulaire) qui ont lieu au sein du mélange. Des lois de conservations similaires à Eq V-4 existent sur chaque espèce chimique présente telle que le milieu de culture et l'oxygène en solution :

$$\frac{\partial(\rho\omega_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_m \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\omega_m \mathbf{u}_m) - r_m = 0 \quad \text{Eq V-5}$$

$$\frac{\partial(\rho\omega_n)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega_n \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\omega_n \mathbf{u}_n) - r_n = 0 \quad \text{Eq V-6}$$

Avec  $r_m$  et  $r_n$  des termes de transferts d'espèces (*e.g.* consommation d'oxygène pour le métabolisme). Notons que la masse du système étant conservée dans le temps, la somme des termes sources sur toutes les espèces doit respecter la condition suivante similaire à (Eq II-14):

$$r_t + r_m + r_n + \sum_{k \in I_{d-n}} r_k = 0 \quad \text{Eq V-7}$$

En sommant les équations de conservation de chaque espèce, et en utilisant les relations Eq V-3 et Eq V-4, la loi de conservation de la masse sur le mélange est retrouvée :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad \text{Eq V-8}$$

De même, le mélange obéit à la loi de conservation du moment cinétique:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \underline{\mathbf{t}} + \rho \mathbf{g} \quad \text{Eq V-9}$$

## 2. Hypothèses de modélisation

Les hypothèses énoncées en introduction sur le système d'étude sont à présent incorporées dans les équations de conservations précédentes. Tout d'abord, la vitesse du mélange est supposée nulle du fait du dispositif expérimental étudié. Cette hypothèse permet de supprimer le membre de gauche dans Eq V-9, mais permet également de simplifier les considérations rhéologiques des espèces chimiques. En l'absence de vitesse globale, les contraintes internes s'écrivent simplement :

$$\underline{\mathbf{t}} = -p \underline{\mathbf{1}} \quad \text{Eq V-10}$$

Où  $p$  est la pression du mélange et  $\underline{\mathbf{1}}$  le tenseur identité. Il peut être remarqué qu'avec cette hypothèse, la prise en compte d'effets viscoélastique n'est plus nécessaire, le tenseur des contraintes viscoélastiques étant toujours nul en l'absence de taux de cisaillement.

Nous supposons également dans la suite que la fraction volumique du mélange en chaque point du domaine varie de façon négligeable au cours du temps. Dans le cas où la masse des espèces diluées est très inférieures à celles des espèces dominantes, cette hypothèse revient à considérer que la densité des cellules tumorales est équivalente à celle du milieu de culture, ce qui est une convention communément utilisée par ailleurs dans la littérature (Wise, et al., 2008).

L'étude de l'évolution du système dans le temps nécessite alors de connaître la fraction massique des cellules  $\omega_t$ , la concentration locales d'oxygène  $\omega_n$  et les contraintes mécaniques du système  $p$ , données par le système d'équation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\omega_t \mathbf{u}_t) - \frac{r_t}{\rho} &= 0 \\ \frac{\partial \omega_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\omega_n \mathbf{u}_n) - \frac{r_n}{\rho} &= 0 \\ -\nabla p + \rho \mathbf{g} &= 0 \end{aligned} \quad \text{Eq V-11}$$

## 3. Caractérisation de la diffusion des cellules tumorales

Expérimentalement, la forme et le contour des agrégats cellulaires sont contrôlés par la compétition entre le mouvement individuel et les forces intercellulaires, qui peuvent être de nature attractives ou répulsives, des cellules qui les composent. L'écriture de ces interactions sous la forme d'une énergie libre d'Helmholtz (Wise, et al., 2008; Chatelin, et al., 2011), rend l'utilisation des méthodes d'interface diffuse adaptée pour modéliser ce type de configuration.

À la différence des fluides immiscibles cependant, ces systèmes ne sont pas des phases pures, même à l'équilibre. Des mesures expérimentales montrent qu'un agrégat est stable pour des fractions massiques de cellules tumorales pouvant varier entre 0.64–0.87. Afin de prendre en compte cette observation, il est nécessaire de modifier les états d'équilibre de l'énergie libre dérivée dans le chapitre 2 (Eq II-31). Plutôt que de considérer des positions d'équilibre de  $\omega_t$  entre 0 et 1 pour deux fluides immiscibles, il est à présent supposé que le système est à l'équilibre pour les valeurs 0 (correspondant alors à un point dans la phase  $m$ ) et une fraction massique de cellules tumorales d'équilibre  $\omega_t^{\text{eq}}$  arbitraire (voir Figure V-2). Cette approche est notamment utilisée dans (Chatelin, et al., 2011; Agosti, et al., 2017) dans laquelle le potentiel chimique est alors perçu comme une contrainte exercée sur les cellules. Il est important d'indiquer que la différence majeure avec les formulations présentées dans ces

études est la prise en compte d'une pression « capillaire » entre les cellules et le fluide interstitiel, qui n'ont pas la même pression dans ces travaux. Il vient une différence dans le terme de forces agissant sur le système, exprimé par Eq V-9, qui reprendra la forme utilisée pour les écoulements diphasiques.

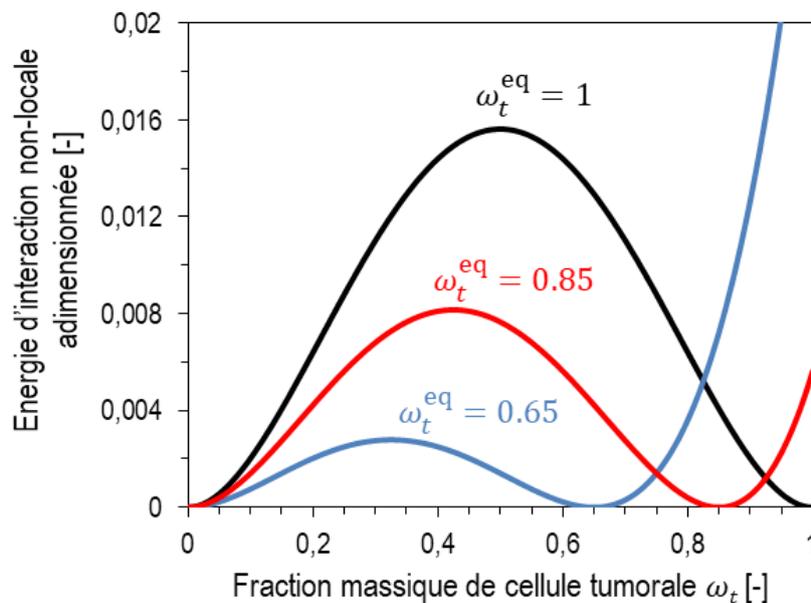


Figure V-3: Énergie d'interaction longue distance pour différente valeur de la concentration d'équilibre des cellules au sein de l'agrégat tumorale.

L'énergie libre d'Helmholtz du système à l'équilibre  $h^0$  considéré ici conserve sa dimension (J/m), mais intègre le déplacement de la fraction massique d'équilibre (Figure V-3). De même, la forme polynomiale est conservée (contre une forme logarithmique dans les études précédentes) :

$$h^0(\omega_t) = \frac{1}{4} \omega_t^2 (1 - \omega_t^{eq})^2 \quad \text{Eq V-12}$$

La force d'interaction non-locale alors introduite dans l'expression du potentiel chimique  $h^0(\omega_t)'$  est tracée sur Figure V-4. On voit que le système est stable comme prédit pour les valeurs 0 et de  $\omega_t^{eq}$ . Pourtant, rien n'interdit le système (surtout en géométrie confinée) d'atteindre des concentrations de cellules tumorales supérieures à cette valeur (sauf si  $\omega_t^{eq} = 1$ ). Dans le cas où  $\omega_t > \omega_t^{eq}$ , le potentiel chimique devient alors élevé, et le système « instable » au sens où les forces intercellulaires sont répulsives (Figure V-4), et les individus s'éloignent les uns des autres afin de rétablir l'équilibre du système.

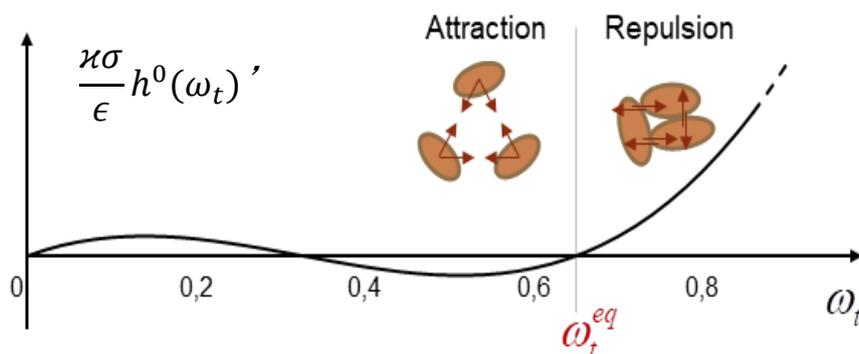


Figure V-4: Forces d'adhésion répulsives/attractives des cellules tumorales au sein du mélange

La définition du potentiel chimique reste inchangée : c'est la variation de l'énergie libre d'Helmholtz du système en fonction de la fraction massique de l'espèce chimique concernée. Elle se décompose

toujours sous la somme d'un terme d'interactions à courtes distances, donné par les gradients de fraction massique de cellules tumorales, et d'un terme d'adhésion non-locale par la définition des forces adhésives  $h^0$ :

$$\mu_t = \frac{\delta H}{\delta \omega_t} = \kappa \sigma (\epsilon^{-1} h^0 (\omega_t)' + \epsilon \Delta \omega_t) \quad \text{Eq V-13}$$

La vitesse de diffusion des espèces s'écrit alors comme la variation du potentiel chimique des cellules tumorales dans le domaine, et prend la forme suivante avec les notations introduites :

$$\omega_t \mathbf{u}_t = -M \nabla \mu_t \quad \text{Eq V-14}$$

#### 4. Diffusion de l'oxygène dans le système

L'évolution de la fraction massique des espèces diluées (et plus spécifiquement de l'oxygène) est généralement prise en compte par des lois de réactions/diffusions (Byrne & Preziosi, 2003; Wise, et al., 2008; Sciumè, et al., 2013). Pour une formulation à l'échelle microscopique, l'aspect poreux des modèles cités précédemment est ignoré, et la vitesse de diffusion s'écrit :

$$\omega_n \mathbf{u}_n = -D_n^{\text{eff}} \nabla \omega_n \quad \text{Eq V-15}$$

Où  $D_n^{\text{eff}}$  est un terme de diffusion, dite effective, qui dépend de la composition chimique de la solution au point considéré. Ce terme rend en compte du fait que, au sein du sphéroïde tumoral, la diffusion est gênée par le rétrécissement des espaces interstitiels entre les cellules. Ainsi, ce coefficient de diffusion est lui-même une fonction des concentrations relatives de fluide interstitiel et de cellules tumorales au point considéré. En supposant les cellules arrangées de façon ordonnée au sein de l'agrégat, la formule suivante a été choisie (voir Figure V-5) :

$$D_n^{\text{eff}} = D_n \frac{2\omega_m}{3 - \omega_m} \quad \text{Eq V-16}$$

Où  $D_n$  est le coefficient de diffusion usuel de l'espèce  $n$  dans la phase  $m$ .

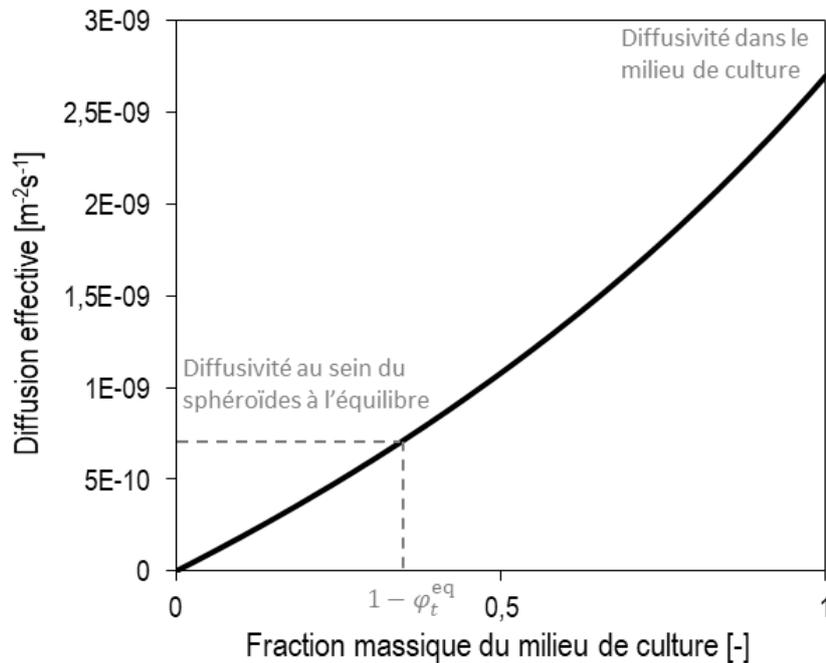


Figure V-5: Diffusion effective des nutriments dans le système

## 5. Caractérisation des transferts de masse entre espèces chimiques

Le taux de réplication des cellules est modélisé comme un terme de réaction chimique ( $r_t$  dans Eq V-4) et calibré d'après des mesures expérimentales. En dehors de toutes contraintes mécaniques ou d'accès aux nutriments, les cellules tumorales se répliquent avec un taux constant  $\gamma_t$ .

En fonction de la fraction massique d'oxygène du milieu et des contraintes agissant sur le système, les cellules se répliquent à un taux optimal ou partiellement (voir totalement) inhibé. L'absence d'oxygène inhibe la croissance des sphéroïdes multicellulaires (Freyer & Sutherland, 1986). Le manque d'oxygène ralentit le métabolisme des individus, et la fréquence cellulaire diminue dans le temps. Si en un point, la fraction massique d'oxygène est inférieure à la quantité minimale nécessaire au métabolisme, la cellule devient quiescente, et elle ne peut plus se diviser.

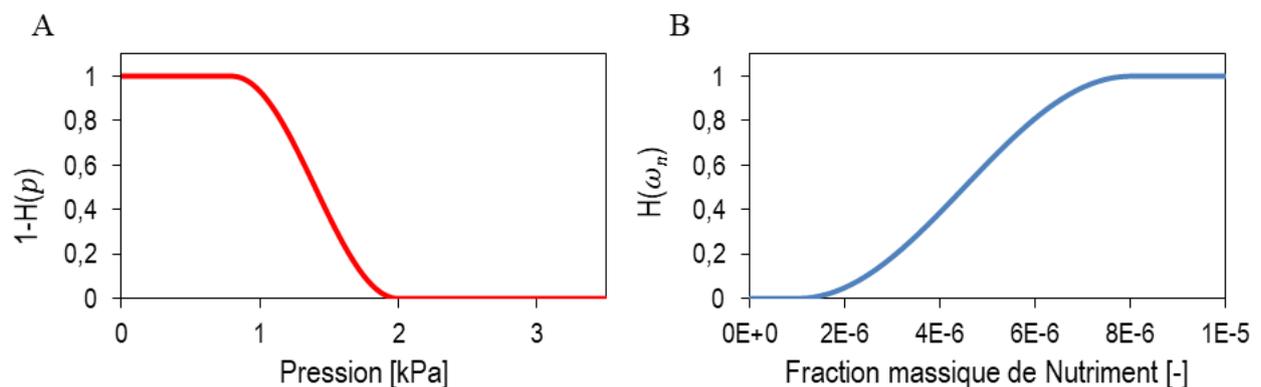
L'effet d'une contrainte extérieure sur la réplication cellulaire a quant à lui été caractérisé expérimentalement (Helmlinger, et al., 1997; Alessandri, et al., 2013; Delarue, et al., 2014). Il a été montré qu'au-dessus d'une certaine contrainte (entre 5 et 15 KPa selon la lignée cellulaire), toute activité de mitose au sein du sphéroïde était arrêtée ; la vitesse de croissance devenait alors proportionnelle à la surface de l'agrégat, indiquant que seules les cellules situées sur sa périphérie étaient capables de se diviser. Il est à noter que bien que l'effet soit décrit comme réversible (Delarue, et al., 2014), les cellules ayant subi un chargement mécanique prolongé voient leur phénotype modifié et potentiellement plus agressif (Alessandri, et al., 2013).

Les deux effets d'inhibition sont considérés découplés ici (pas de changement de consommation de nutriments induits par la pression). Le transfert de masse vers les cellules tumorales s'écrit sous la forme :

$$r_t = \gamma_t \omega_t (1 - \omega_t) H_{\omega_n} (1 - H_p) \quad \text{Eq V-17}$$

Où  $H_{\omega_n}$  et  $H_p$  sont des fonctions inhibitrices, respectivement sur la fraction massique d'oxygène et la pression. Les effets inhibiteurs sont supposés être des effets continus et s'activer entre deux valeurs d'activation des variables concernées (voir Figure V-6-A, B). Les valeurs de références sont fournies dans la Table V-1. Une fonction  $H$  convenant à cette dynamique est donnée par :

$$H(x, x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & \text{for } x_1 < x \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \pi\right) & \text{for } x_2 < x < x_1 \\ 0 & \text{for } x < x_2 \end{cases} \quad \text{Eq V-18}$$



**Figure V-6: Fonction d'inhibition pour (A) la pression dans le système et (B) pour la fraction massique de nutriment. D'après les valeurs données Table V-1.**

Cette étape de la modélisation présente un aspect empirique, en particulier sur les conséquences d'un chargement extérieur sur la croissance cellulaire ; seule une étude précise incluant les effets de mécanotransduction et la dynamique biochimique des protéines concernées permettrait de capturer précisément les effets du confinement. Ces effets étant encore partiellement inconnus, ils sont moyennés

par les fonctions  $H$  qui se concentrent sur une description continue et moyennée des effets observables.

La loi de conservation de la masse des cellules tumorales s'énonce alors :

$$\frac{\partial \omega_t}{\partial t} - \nabla \cdot (M \nabla \mu_t) - \frac{\gamma_t}{\rho} \omega_t (1 - \omega_t) (1 - H_p) H_{\omega_n} = 0 \quad \text{Eq V-19}$$

La consommation de l'oxygène  $r_n$  dans l'équation de conservation de la masse de l'oxygène doit être elle-aussi caractérisée. Les cycles de l'oxygène et des nutriments (en particulier le glucose) au sein des cellules sont difficiles à prendre en compte explicitement dans un modèle continu. Le choix de modélisation fait dans cette étude est de considérer une consommation « usuelle » nécessaire au fonctionnement normal des cellules  $\gamma_{n0}$  et une surconsommation spécifique à l'activité de réplication  $\gamma_{ng}$ . Ainsi, le terme de réaction chimique pour l'espèce  $n$  s'écrit :

$$r_n = - \left( (1 - H_p) H_{\omega_n} \gamma_{ng} + \gamma_{n0} \right) \omega_t (1 - \omega_t) \quad \text{Eq V-20}$$

## 6. Forces volumiques

L'expression des forces capillaires dans le système reste inchangée, et l'équation (Eq III-40) est réécrite avec les notations des espèces considérées :

$$\rho \mathbf{g} = \mu_t \nabla \omega_t \quad \text{Eq V-21}$$

Dans le cas d'une configuration hors équilibre (*i.e.* si le potentiel explose lorsque  $\omega_t > \omega_t^{eq}$  en milieux confinés Figure V-3), la pression du système, directement liée au potentiel chimique augmente (Eq V-21). Une telle approche, bien que formulée dans un formalisme différent de celui des interfaces diffuses, est présent dans d'autres travaux sur la modélisation d'agrégats tumoraux (Byrne & Preziosi, 2003; Sciumè, et al., 2013).

L'hypothèse que la différence de pression entre chaque espèce chimique soit égale à la pression de Laplace est maintenue. Bien que les forces d'adhérence biologiques remplacent les forces électrostatiques dans le cas de deux fluides immiscibles, le déséquilibre de force est toujours caractérisé comme une pression capillaire. Il faut alors adapter la forme du paramètre de normalisation  $\kappa$  dans l'équation précédente Eq V-13, afin que même en modifiant la concentration d'équilibre par une valeur arbitraire, la relation de Laplace soit toujours vérifiée. Pour cela, il faut développer à nouveau l'expression du profil analytique de l'équation de Cahn-Hilliard dans le cas monodimensionnel (Ding, et al., 2007) tel qu'il obéisse à la nouvelle forme du potentiel chimique. On obtient alors le profil stationnaire 1-D suivant :

$$\omega_t(x) = \omega_t^{eq} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left( \omega_t^{eq} \frac{x}{2\sqrt{2}\varepsilon} \right) \right) \quad \text{Eq V-22}$$

Cette expression est alors injectée dans l'expression de la tension de surface définie dans (Eq III-36) sous la forme de l'excès d'énergie libre du système au niveau de l'interface et réécrit ci-dessous :

$$\sigma = \int_I \kappa \sigma \varepsilon |\nabla \omega_t(x)|^2 dx \quad \text{Eq V-23}$$

L'injection de Eq V-22 dans l'intégrale Eq V-23 permet de retrouver la relation vérifiée par le paramètre  $\kappa$  :

$$\int_I \kappa \frac{(\omega_t^{eq})^4}{32\varepsilon} \left( 1 - \tanh \left( \omega_t^{eq} \frac{x}{2\sqrt{2}\varepsilon} \right) \right)^2 dx = 1 \quad \text{Eq V-24}$$

La résolution de Eq V-24 par changement de variable  $y = \omega_t^{eq} \frac{x}{2\sqrt{2}\varepsilon}$  permet de retrouver finalement l'expression vérifiée par le paramètre  $\kappa$  dans le potentiel chimique des cellules tumorales  $\mu_t$  afin de retrouver la loi de Laplace pour les système à l'équilibre :

$$\kappa = \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{\text{eq}}^3} \quad \text{Eq V-25}$$

## 7. Système complet et mise sous forme adimensionnelle

La synthèse des relations dérivées précédemment permet d'obtenir le modèle suivant pour la croissance d'un agrégat tumoral au sein d'une autre phase (qui lui transmet ses nutriments). Les variables primaires sont la fraction massique de cellule tumorale, le potentiel chimique d'interaction entre les cellules tumorales et leur environnement, la fraction massique de nutriment disponible, et la pression du système. Le système complet s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_t}{\partial t} - \nabla \cdot (M \nabla \mu_t) - \frac{\gamma_t}{\rho} \omega_t (1 - \omega_t) (1 - H_p) H_{\omega_n} &= 0 \\ \mu_t &= \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{\text{eq}}^3} \sigma (\epsilon^{-1} h^0(\omega_t))' + \epsilon \Delta \omega_t \\ \frac{\partial \omega_n}{\partial t} - \nabla \cdot (D_n^{\text{eff}} \nabla \omega_n) + \frac{1}{\rho} \left( (1 - H_p) H_{\omega_n} \gamma_{ng} + \gamma_{n0} \right) \omega_t (1 - \omega_t) &= 0 \\ \nabla p - \mu_t \nabla \omega_t &= 0 \end{aligned} \quad \text{Eq V-26}$$

Les conditions aux limites adjointes au système Eq V-26 seront discutées en détail dans la partie application. Les valeurs des paramètres sont données Table V-1.

L'absence de vitesse dans le système oblige à reconsidérer les termes usuellement utilisés pour l'adimensionnement du système. L'ajout d'un terme source fournit cependant une bonne alternative pour la définition d'un temps de référence, celui de la vitesse de croissance de la tumeur, basé sur  $\gamma_t$ . Dans l'équation de conservation de la fraction massique de cellules tumorales apparaît alors une redéfinition du nombre de Péclet ( $Pe_t = \frac{\epsilon d_c^2 r_0}{\rho M_t \sigma}$ ) qui mesure cette fois le rapport entre le temps de réplication des cellules et le temps caractéristique de diffusion de l'interface. L'influence de ce paramètre sur le comportement du système reste cependant proche de la définition donnée dans les chapitres précédents ; il mesure la capacité de l'interface à se déformer. Dans le cas où  $Pe_t \ll 1$ , les forces diffusives sont dominantes : toute création de masse est diffusée afin de baisser l'énergie libre du système. L'agrégat tumoral est alors homogène en composition. Dans le cas contraire ( $Pe_t \gg 1$ ), la diffusion des espèces est trop lente pour réguler les inhomogénéités qui peuvent potentiellement apparaître au cours de la croissance de l'agrégat (notamment en milieu confiné ou partiellement confiné). La forme tout comme la vitesse de croissance du cluster de cellules croissent alors de manière hétérogène.

Le temps de référence choisi devient donc :  $t_c = \rho / \gamma_t$ . Le système complet adimensionné s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_t}{\partial t^*} - \frac{1}{Pe_t} \Delta^* \mu_t - \omega_t (1 - \omega_t) (1 - H_p) H_{\omega_n} &= 0 \\ \mu_t^* &= \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{\text{eq}}^3} (h^0(\omega_w))' + \delta^2 \Delta^* \omega_w \\ \frac{\partial \omega_n}{\partial t^*} + \frac{1}{Pe_n} \nabla^* \cdot \left( \frac{2\omega_m}{3 - \omega_m} \nabla^* \omega_n \right) & \\ + \frac{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}}{\gamma_t} \left( (1 - H_p) H_{\omega_n} \frac{\gamma_{ng}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} + \frac{\gamma_{n0}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} \right) \omega_t (1 - \omega_t) &= 0 \\ \nabla^* p^* - \frac{\sigma}{p_0 \epsilon} \mu_t^* \nabla^* \omega_t &= 0 \end{aligned} \quad \text{Eq V-27}$$

Dans Eq V-27, il apparaît une autre grandeur adimensionnelle qui est le nombre de Péclet pour la diffusion des nutriments ( $Pe_n = \frac{d_c^2 r_0}{\rho D_n}$ ), qui mesure le rapport entre le temps de croissance (temps de référence  $t_c$ ) et le temps de diffusion des nutriments. Une grandeur  $Pe_n \ll 1$  signifie simplement que les

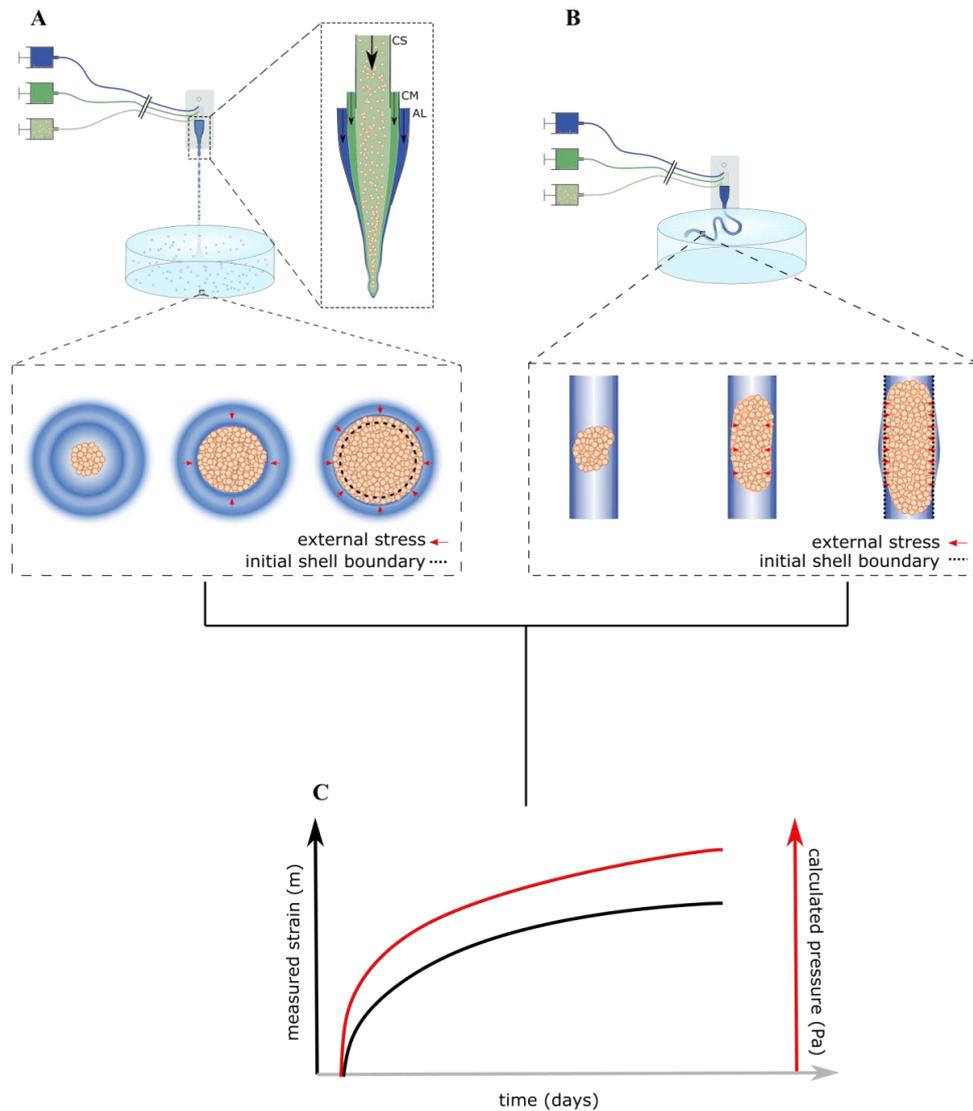
nutriments diffusent plus rapidement que la tumeur ne grandit ; cependant, elle ne garantit pas leur accessibilité, qui est également fonction du rapport  $(\gamma_{no} + \gamma_{ng})/\gamma_r$ . Dans la pratique, ces deux paramètres seront considérés collectivement. Il sera statué dans quelles quantités les cellules tumorales auront accès aux nutriments nécessaires, sans spécifiquement en chercher l'origine (diffusive ou chimique), dont la caractérisation serait sans doute plus pertinente dans des études *in vivo* ou des géométries plus grandes et complexes que celles considérées dans ces travaux. Enfin, il peut être remarqué qu'aucun nombre adimensionnel particulier n'intervient dans l'équation de conservation du moment. Dans le cas quasi-statique considéré, aucune force additionnelle ne vient contrebalancer les forces de pressions qui régissent les contraintes mécaniques au sein du domaine. Ainsi, l'adimensionnement du système ne fait intervenir que le rapport entre les forces capillaires et la pression de référence du milieu. Les valeurs déterminées pour les nombres adimensionnels des configurations expérimentales étudiées sont données Table V-2. Bien que dépendants de nombreux paramètres (chimie du milieu, lignée cellulaire...), ils donnent un aperçu des rapports de forces susceptibles d'être rencontrés.

### **C. Modélisation de la croissance d'un agrégat tumoral en milieu confiné.**

Dans cette partie, le modèle Eq V-27 est utilisé afin de reproduire numériquement l'expérience de croissance d'agrégats de cellules tumorales au sein de microcapsules (Alessandri, et al., 2013). L'étude de sphéroïdes tumoraux en trois dimensions présente une alternative plus proche des modèles *in vivo* que les cultures en deux dimensions pour l'observation de la croissance des agrégats et des effets d'agents thérapeutiques. Du point de vue numérique, ces configurations à l'environnement contrôlé et mesuré, représentent un cas idéal pour l'étude et le calibrage des modèles. Le recours à l'outil numérique permet ensuite d'accéder en chaque instant aux grandeurs physiques à n'importe quel point du domaine, et vient compléter les données récoltées.

#### **1. Protocole expérimental**

Le dispositif expérimental a été monté à l'institut Curie à Paris par Kevin Alessandri durant sa thèse sous la direction de Pierre Nassoy et Danijela Vignjević. Il se présente de la manière suivante : trois tubes capillaires coaxiaux contenant respectivement une suspension de cellules tumorales, une solution d'alginate et du sérum de culture sont disposés au-dessus d'un bain de chlorure de calcium. L'injection d'un débit continu (~50 ml/heure) dans chacun des capillaires entraîne la formation d'un jet qui se fragmente sous l'instabilité de Plateau-Rayleigh. Des perles de taille similaire tombent ensuite dans le bain en contrebas. Au contact du chlorure de calcium, la bille composite se réticule en une sphère encapsulant le sérum de culture et les cellules tumorales. L'alginate forme ainsi une enveloppe poreuse laissant passer nutriments et oxygène dilués dans le bain, mais dont la taille des pores est inférieure à la taille des cellules, les empêchant de s'évader (Figure V-7-A). En plongeant immédiatement les capillaires dans le chlorure de calcium, il est également possible de supprimer l'instabilité et donc la fragmentation du jet en sortie de capillaire. Le dispositif expérimental est alors un cylindre d'épaisseur variable à l'intérieur desquels plusieurs agrégats tumoraux coexistent (Figure V-7-B). Dans les deux cas, à partir du débit d'injection, il est possible de modifier l'épaisseur des capsules pour obtenir des parois plus ou moins fines.



**Figure V-7: Protocole expérimentale.**

(A) Co-extrusion de la suspension de cellule tumorale (CS), du milieu de culture (CM), et de l'alginate (AL) dans le bain de chlorure de calcium. (B) Le même procédé expérimental est effectué directement dans le bain afin de supprimer la fragmentation du jet. Dans chaque cas, les cellules croissent en déformant la capsule, qui en retour exerce une forme mécanique sur elles. (C) La mesure de la déformation (courbe rouge) de l'alginate fournit, par résolution inverse, la mesure des contraintes (courbe noire) en tout temps dans le système.

Dans le cas sphérique, les cellules dispersées au sein de la capsule s'agglomèrent dans un premier temps. S'ensuit une phase de croissance comparable à une croissance « libre » (*i.e.* similaire à ce qui est observé hors encapsulation) avec une vitesse de croissance de l'agrégat proportionnelle à son volume. Le sphéroïde grandit ainsi jusqu'à atteindre les parois de la capsule d'alginate. C'est la confluence. À partir de cet instant, le grossissement du sphéroïde entraîne une déformation de la capsule, qui en retour exerce une force de compression mécanique dirigée vers l'intérieur. La déformation de l'alginate, qui est un matériau élastique, fournit alors une mesure directe de la force exercée par les cellules tumorales. À partir de la confluence, la dynamique de croissance de l'agrégat montre une toute autre dynamique : l'effet de la contrainte mécanique exercée par les parois de la capsule influe sur le taux de réplication des cellules. La croissance de l'agrégat est quasiment stoppée, et seules les cellules en périphérie continuent à se diviser. La déformation des capsules fournit des mesures sur la pression interne du système allant de 1 à 3 kPa dans le temps (Figure V-7-C).

Le cas cylindrique présente des déviations intéressantes avec le cas précédent. L'introduction de cette géométrie vient caractériser plus précisément l'action du confinement sur les cellules tumorales : la

possibilité donnée aux cellules de s'étaler sur la longueur du cylindre est supposée amoindrir les effets du confinement, et une dynamique intermédiaire entre la croissance libre et la croissance confinée est attendue. Expérimentalement, c'est ce qui est observé. Les agrégats initialement disposés à l'intérieur du cylindre se contractent sur des temps courts (quelques heures), puis grossissent proportionnellement à leur volume. Au bout d'un certain temps, cette dynamique de croissance exponentielle s'amoindrit, et un régime de croissance linéaire est observé. Cette déviation s'explique alors par le fait que, au sein de l'agrégat, seule une partie des cellules située aux extrémités échappe aux effets des contraintes mécaniques et peut se multiplier. Cette croissance « par les bouts » reste inchangée jusqu'à la coalescence des différents clusters de cellules au sein du cylindre. Comme attendue, la déformation de l'alginate dans cette géométrie est moindre que dans le cas sphérique, avec des valeurs mesurées allant jusqu'à 1.5 kPa au centre de l'agrégat.

## 2. Modélisation numérique

La reproduction *in silico* du protocole expérimental précédent présente plusieurs points d'intérêt. Tout d'abord, la dynamique de croissance dans les premiers temps de l'expérience permet de statuer sur le caractère réaliste du modèle numérique. Ensuite, la reproduction de l'influence des contraintes extérieures sur le taux de réplication des cellules, et ce pour le cas fortement et partiellement confiné, est un premier pas vers une étude réaliste des interactions des cellules tumorales avec leur environnement pour des modélisations *in vivo*.

Une attention particulière est portée à ce que les modèles utilisés soient identiques dans chaque cas. Les géométries utilisées sont décrites sur la (Figure V-8-A, B). Pour chaque géométrie, le domaine numérique correspond à l'intérieur des capsules. Les interactions entre les cellules et les parois d'alginate, tout comme le transport d'espèces chimique au travers la membrane des capsules, ne sont pas explicitement calculés dans la formulation, mais sont pris en compte dans la définition des conditions aux limites. Le système Eq V-27 est résolu numériquement avec la même approche monolithique utilisée jusqu'à présent. Les domaines sont décrits suivant un système de coordonnées cylindriques afin de tirer parti de la symétrie axisymétrique des configurations expérimentales (on notera  $dV = drd\theta dz$  les éléments d'intégration usuels sur le rayon, l'angle polaire et la hauteur). Les intégrales de la formulation faible sont alors adaptées à cette description. Le problème variationnel s'exprime alors : trouver  $\{p^*, \omega_w, \mu_w^*, \omega_n\} \in (Q \times P \times X \times Y)$  tel que  $\forall \{q, \psi, \chi, \phi\} \in (Q \times P \times X \times Y)$ , le système suivant soit vérifié :

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_t}{\partial t^*} \psi r dV - \int_{\Omega} \frac{1}{Pe_t} \Delta^* \mu_t \psi r dV - \int_{\Omega} \omega_t (1 - \omega_t) (1 - H_p) H_{\omega_n} \psi r dV &= 0 \\
 \int_{\Omega} \mu_t^* \chi r dV &= \int_{\Omega} \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{eq}^3} (h^0(\omega_w)' - \delta^2 \Delta^* \omega_w) \chi r dV \\
 \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_n}{\partial t^*} \phi r dV - \int_{\Omega} \frac{1}{Pe_n} \nabla^* \cdot \left( \frac{2\omega_m}{3 - \omega_m} \nabla^* \omega_n \right) \phi r dV & \quad \text{Eq V-28} \\
 + \int_{\Omega} \frac{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}}{\gamma_t} \left( (1 - H_p) H_{\omega_n} \frac{\gamma_{ng}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} + \frac{\gamma_{n0}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} \right) \omega_t (1 - \omega_t) \phi r dV &= 0 \\
 \int_{\Omega} \nabla^* p^* q r dV - \int_{\Omega} \frac{\sigma}{p_0 \epsilon} \mu_t^* \nabla^* \omega_t q r dV &= 0
 \end{aligned}$$

Le système est ensuite complété par des conditions aux limites (Figure V-8). Initialement, un sphéroïde d'environ 40  $\mu m$  est positionné au centre de la capsule. Les flux de potentiel chimique sont nuls sur les bords du domaine (BC1, BC2 et BC3). Pour conserver le caractère diphasique, et donc une différence de pression entre l'intérieur du sphéroïde et le milieu extérieur, il est supposé qu'une pellicule de liquide interstitiel est présente à chaque instant contre la paroi d'alginate (ce qui revient à dire que la capsule est non-mouillante aux cellules tumorales). Ainsi, la concentration de cellules sur le bord extérieur BC3 est gérée par une condition de Dirichlet  $\omega_t = 0$ . Le flux de nutriments sur cette frontière

mérite d'avantage de discussion. L'alginat étant poreux, il permet la libre circulation des espèces chimiques nécessaires à la réplication cellulaire. L'apport de nutriments à l'intérieur du système est supposé dépendre de la différence de concentrations entre l'extérieur du domaine (qui possède une concentration de nutriments  $n$  fixe dans le temps) et la bordure immédiate (où la concentration de nutriments est variable en fonction de la consommation cellulaire). L'écriture de cette condition se fait sous la forme proche d'une condition de convection sur BC3:

$$\frac{1}{\text{Pe}_n} \nabla^* \omega_n \cdot \mathbf{n} = \frac{h_a \rho}{\gamma_t} (\omega_n^{\text{ext}} - \omega_n^{\text{walls}}) \quad \text{Eq V-29}$$

Où  $h_a$ , est un coefficient déterminé expérimentalement qui prend en compte la porosité de l'alginat. Sur les bords fictifs BC2, une condition de flux nuls pour la fraction massique de cellules tumorales et de nutriments est prescrite afin d'obéir aux conditions de symétrie.

Ces considérations ajoutées au système précédent Eq V-28, le système final obtenu prend la forme suivante : trouver  $\{p^*, \omega_t, \mu_t^*, \omega_n\} \in (\mathbb{Q} \times \mathbb{P} \times \mathbb{X} \times \mathbb{Y})$  tel que  $\forall \{q, \psi, \chi, \phi\} \in (\mathbb{Q} \times \mathbb{P} \times \mathbb{X} \times \mathbb{Y})$ , le système suivant soit vérifié :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_t}{\partial t^*} \psi \, r \, dV + \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Pe}_t} \nabla^* \mu_t \cdot \nabla^* \psi \, r \, dV - \int_{\Omega} \omega_t (1 - \omega_t) (1 - H_p) H_{\omega_n} \psi \, r \, dV = 0 \\ & \int_{\Omega} \mu_t^* \chi \, r \, dV - \int_{\Omega} 6\sqrt{2} h^0(\omega_w)' \chi \, r \, dV - \int_{\Omega} \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{\text{eq}}^3} \delta^2 \Delta^* \omega_w \, r \, dV \, r \, dS \\ & - \int_{\Gamma_{\text{walls}}} \frac{6\sqrt{2}}{\omega_{\text{eq}}^3} \delta^2 \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_s\right) |\nabla^* \omega_w - (\mathbf{n} \cdot \nabla^* \omega_w) \cdot \mathbf{n}| \chi = 0 \\ & \int_{\Omega} \frac{\partial \omega_n}{\partial t^*} \phi \, r \, dV + \int_{\Omega} \frac{1}{\text{Pe}_n} \nabla^* \cdot \frac{2\omega_m}{3 - \omega_m} \nabla^* \omega_n \cdot \nabla^* \phi \, r \, dV - \int_{\Gamma_{\text{paroi}}} \frac{h_a \rho}{\gamma_t} (\omega_n^{\text{ext}} - \omega_n^{\text{walls}}) \phi \, r \, dS \quad \text{Eq V-30} \\ & + \int_{\Omega} \frac{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}}{\gamma_t} \left( (1 - H_p) H_{\omega_n} \frac{\gamma_{ng}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} + \frac{\gamma_{n0}}{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}} \right) \omega_t (1 - \omega_t) \phi \, r \, dV = 0 \\ & \int_{\Omega} \nabla^* p^* q \, r \, dV - \int_{\Omega} \frac{\sigma}{p_0 \epsilon} \mu_t^* \nabla^* \omega_t q \, r \, dV = 0 \end{aligned}$$

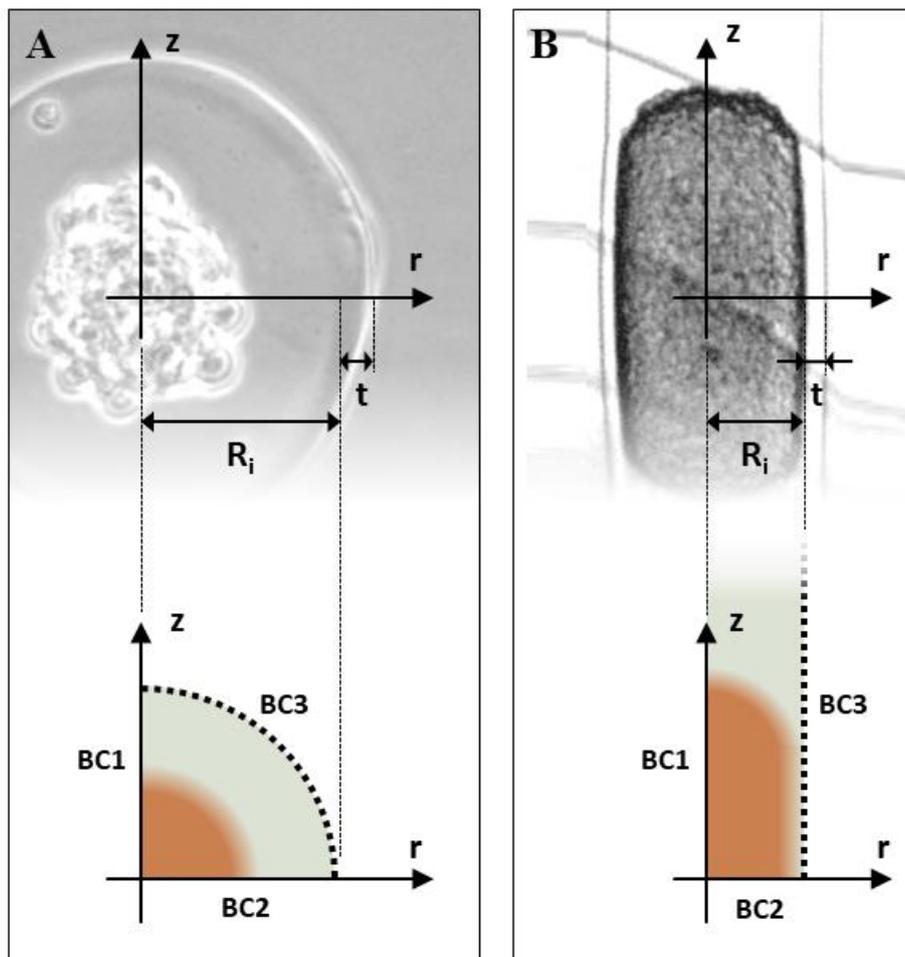


Figure V-8: Conditions aux limites pour la modélisation numérique de la croissance d'agrégats tumoraux

Table V-1: Valeurs des paramètres identifiés pour le modèle numérique afin de retrouver la dynamique de croissance *in vitro*.

Paramètres	Symbole	Évaluation	Unité
<b>Paramètres du modèle</b>			
Fraction massique d'équilibre des cellules tumorales	$\omega_t^{eq}$	0.65	-
Tension de surface	$\sigma$	1.2	mN.m <sup>-1</sup>
Masse volumique	$\rho$	1000	kg.m <sup>-3</sup>
Mobilité cellulaire	$M_t$	2.10 <sup>-16</sup>	m <sup>4</sup> N <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Taux de croissance	$\gamma_t$	0.026	kg.m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
Pression d'inhibition	$p_1$	800	Pa
Pression critique d'inhibition	$p_2$	2000	Pa
Concentration de nutriments d'inhibition	$\omega_{n1}$	8.10 <sup>-6</sup>	-

Concentration de nutriments critique d'inhibition	$\omega_{n2}$	$1.10^{-6}$	-
Coefficient d'échange de masse de nutriments à la paroi	$h_a$	$5.4 \cdot 10^{-6}$	$s^{-1}$
Diffusion de nutriments dans le milieu	$D_n$	$2.7 \cdot 10^{-9}$	$m^2s^{-1}$
Fraction massique de nutriment à l'extérieur de la capsule	$\omega_n^{walls}$	$9. \cdot 10^{-6}$	-
Consommation de nutriment par métabolisme	$\gamma_{n0}$	0.0020	$kg.m^{-3}s^{-1}$
Concentration de nutriment pour la réplacation	$\gamma_{ng}$	0.0026	$kg.m^{-3}s^{-1}$
<b>Paramètres géométriques</b>			
Rayon de la sphere (capsule)	$R_s$	90	$\mu m$
Rayon du cylindre	$R_c$	52	$\mu m$
Hauteur du cylindre	$H_c$	800	$\mu m$

**Table V-2: Évaluation des nombres adimensionnés à partir des valeurs des paramètres Table V-1**

Symboles	Significations physique	Définition	Évaluation
$Pe_t$	Croissance/force interfaciale	$\frac{\epsilon d_c^2 \gamma_t}{\rho M_t \sigma}$	$3.2 \cdot 10^{-1}$
$Pe_n$	Croissance/ Diffusion nutriments	$\frac{d_c^2 \gamma_t}{\rho D_n}$	$7.8 \cdot 10^{-5}$
$\frac{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}}{\gamma_t}$	Consommation nutriments/ Croissance	$\frac{\gamma_{ng} + \gamma_{n0}}{\gamma_t}$	$1.8 \cdot 10^{-1}$
$\delta$	Epaisseur interface/taille du système	$\frac{\epsilon}{d_c}$	$4.10^{-3}$

D'après les paramètres donnés Table V-1, on voit que les forces de croissance s'équilibrent avec les forces de diffusions à l'interface (elles sont légèrement inférieures). On s'attend donc à voir un sphéroïde très stable, dans le sens où la croissance des cellules ne devrait pas en modifier la forme globale. La consommation des nutriments est légèrement inférieure à la vitesse de croissance : on s'attend à ce qu'en l'absence de sources extérieures, les cellules consomment la majorité des nutriments dans le domaine, et deviennent un facteur limitant à la croissance. Cependant, ce phénomène est compensé par une diffusion importante des nutriments au sein de la capsule.

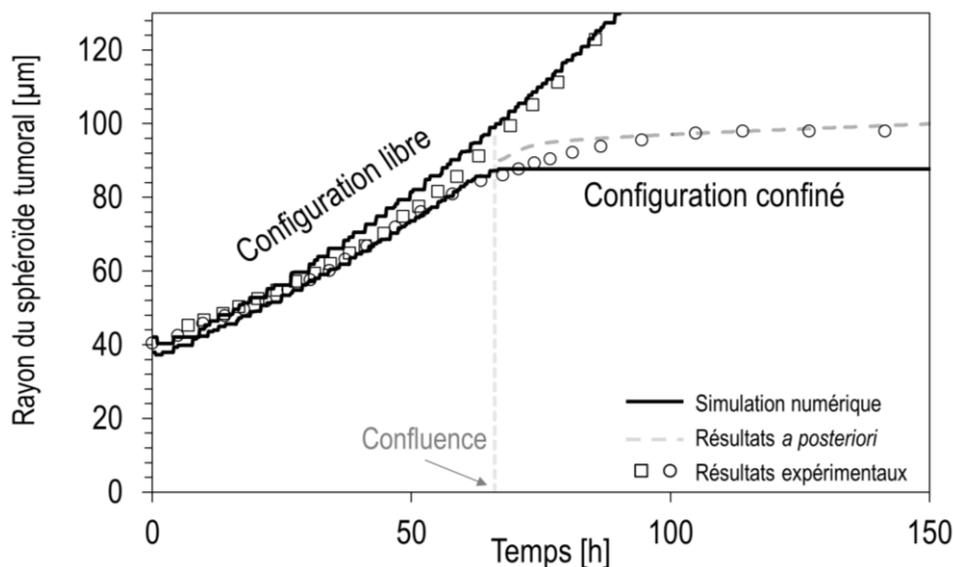
### 3. Résultats

Les résultats de modélisations du système Eq V-28 obtenus dans le cas de capsules sphériques et cylindriques sont à présent étudiés, en complément à leur analyse biophysique effectuée dans (Alessandri, et al., 2013), dont les principaux résultats seront rappelés ici. L'ensemble des paramètres de simulation utilisés est donné (Table V-2). L'interprétation des résultats se fait suivant trois étapes : tout d'abord, la croissance des agrégats dans le cas sphérique est étudiée avant confluence. Dans cette configuration, aucune contrainte mécanique n'est exercée sur le sphéroïde tumoral, et il convient de s'assurer que sa vitesse de croissance correspond bien à celle d'une croissance libre, afin de démontrer que l'encapsulation n'induit pas d'effets parasites avant l'étape de confinement. Une fois que la confluence est atteinte, une seconde dynamique est étudiée : celle des cellules sous chargement mécanique. L'effet des contraintes mécaniques sur les paramètres biophysiques des cellules sera étudié.

Enfin, un cas intermédiaire de croissance en milieu semi-confiné (cylindre) sera étudié afin d'apporter des compléments d'informations aux deux premiers cas. Pour chacune des configurations expérimentales, le film des résultats *in vitro* et numériques sont disponibles (voir Matériel supplémentaire)

*i)* Croissance pré-confluence dans le cas sphérique

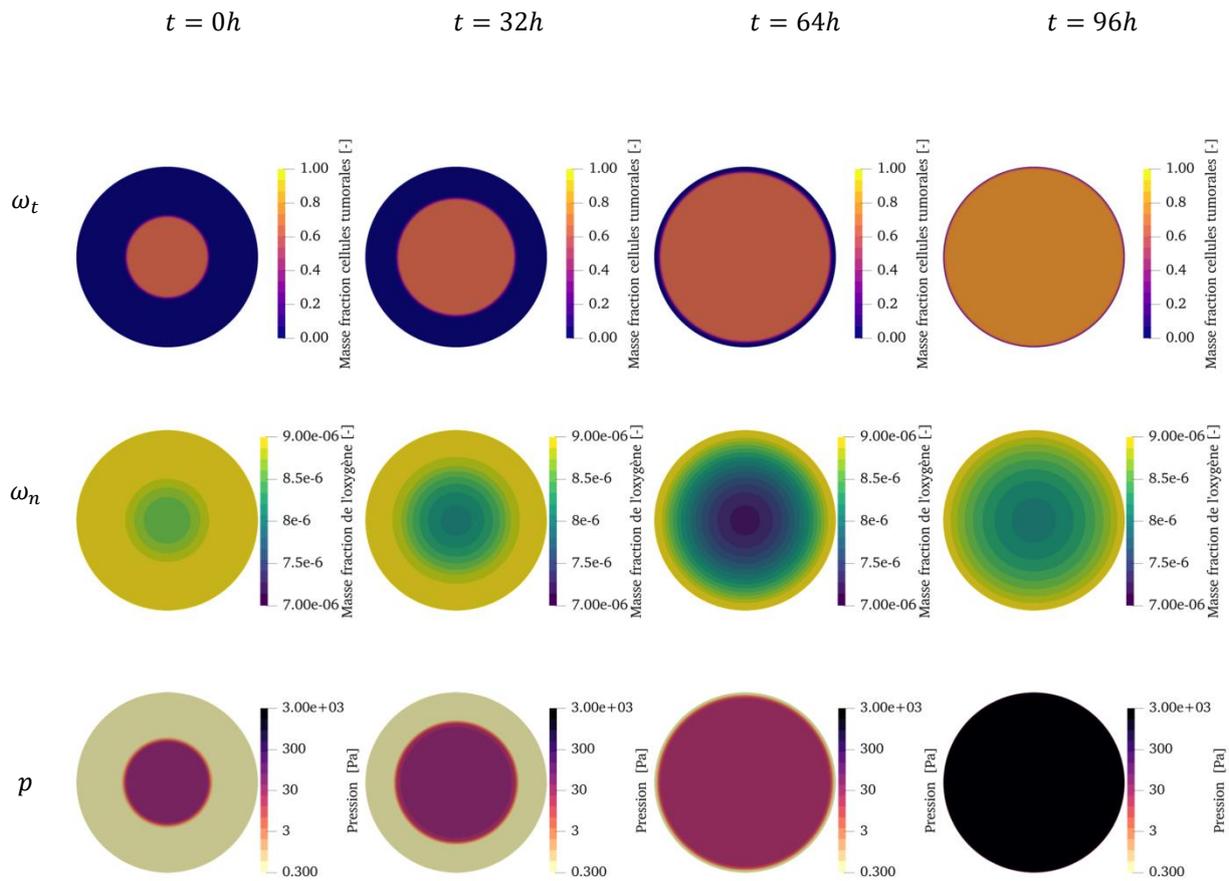
Cette étape concerne des agrégats tumoraux de petite taille (entre 30 et 90  $\mu m$ ) encapsulés dans l'alginate. Les résultats numériques sont donnés Figure V-10. La variation temporelle du rayon du sphéroïde est tracée expérimentalement et numériquement sur la Figure V-9. Avant la confluence, les résultats obtenus numériquement correspondent aux observations expérimentales. De  $t=0h$  à  $t=66h$  (instant de la confluence), la vitesse de croissance de l'agrégat montre une dynamique exponentielle. Cette observation s'accorde avec des études précédentes qui assurent que pour des sphéroïdes de cette taille, l'accès aux nutriments n'est pas limité pour les cellules qui possèdent donc tout le matériel nécessaire afin de se répliquer (Sutherland, 1988). Numériquement, ce résultat est également retrouvé : la concentration de nutriment au sein de la capsule ne descend que très légèrement en dessous de sa concentration d'inhibition, même en prenant en compte le caractère poreux de l'agencement de cellules (voir Figure V-11 et l'insertion en haut à droite de Figure V-11 pour comparer les concentrations avec celles d'inhibition). Le minimum de concentration en nutriments est atteint lorsque le système arrive à confluence. Au regard de l'accès aux nutriments, la croissance d'agrégats encapsulés, dans les premiers temps, est très comparable à celle d'une tumeur libre, ce qui était recherché.



**Figure V-9: Variation temporelle du rayon de l'agrégat de cellules tumorales dans le cas d'une capsule sphérique.**

Traits pleins : résultats numériques. Symboles : valeurs expérimentales (Alessandri, et al., 2013)

Comme l'effet de confinement n'est pas encore ressenti, le sphéroïde se trouve dans un état chimiquement stable : la création de cellules tumorales ne perturbe pas la composition chimique de l'agrégat dont la concentration massique reste à la fraction d'équilibre fixée  $\omega_t^{eq} = 0.65$  (voir Figure V-10 et Figure V-12 avant  $t = 66$  h). Cela signifie que pour des agrégats de cette taille, la diffusion des cellules vers la périphérie est un processus plus rapide que la répllication cellulaire, et l'interface reste stable. Enfin, la pression mesurée au sein du sphéroïde, supposée correspondre à la pression de Laplace, diminue sur toute la phase de croissance de l'agrégat dans le modèle numérique (voir insertion Figure V-13).



**Figure V-10: Évolutions des variables d'intérêt pour la modélisation d'agrégats sphériques encapsulés.**

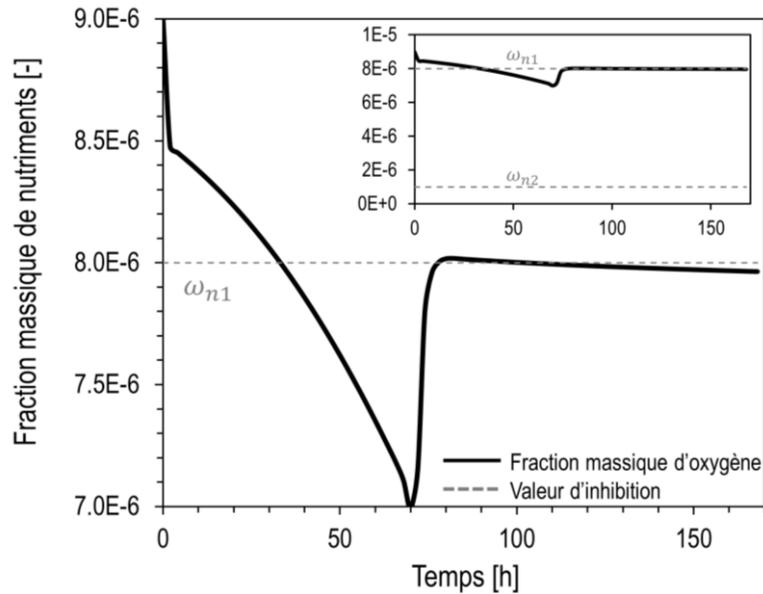
Les valeurs de fraction massique de cellule tumorale  $\omega_b$ , de fraction massique de nutriment  $\omega_n$  et de pression  $p$  sont données aux temps  $t = 0$  (condition initiale),  $t = 32h$  (croissance libre),  $t = 64h$  (confluence) et  $t = 99h$  (confinement).

### ii) Croissance post-confluence dans le cas sphérique

Expérimentalement, le régime post-confluence est caractérisé par une montée rapide en pression des cellules tumorales (une fois la déformation de la capsule suffisamment grande pour pouvoir être calculée). La dynamique de croissance de l'agrégat est elle aussi fortement perturbée : le régime de croissance passe d'une vitesse exponentielle à linéaire avec une vitesse d'avancée de  $6 \mu\text{m}/\text{jour}$  dans les premières 24h qui suivent la confluence, puis seulement  $2 \mu\text{m}/\text{jour}$  au-delà. Des études de fluorescence en microscopie révèlent une grande déviation dans le comportement cellulaire des individus composant l'agrégat. Les cellules situées en périphérie montrent un caractère actif, et continuent à se répliquer, tandis que beaucoup de cellules centrales sont inactives.

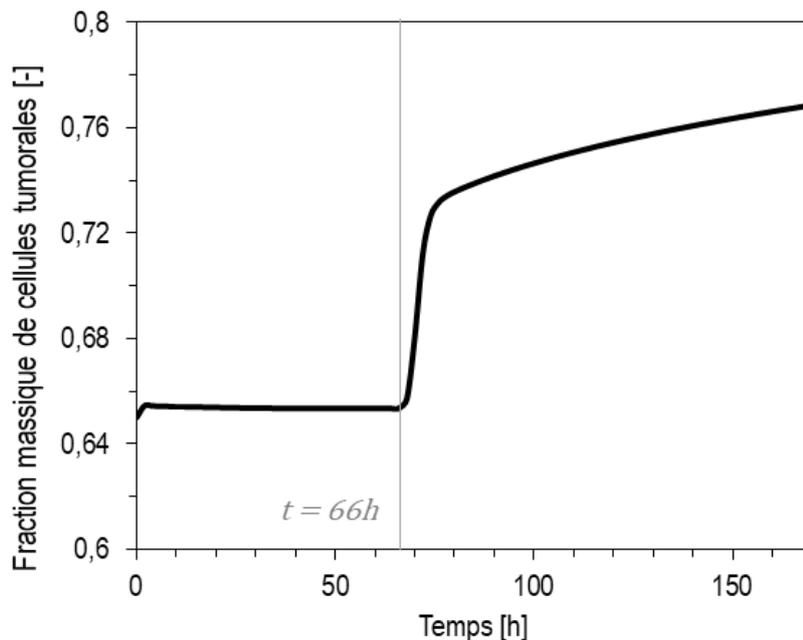
Mathématiquement, le confinement a un effet immédiat sur la concentration des cellules tumorales dans l'agrégat (voir Figure V-12). La composition chimique du mélange n'étant plus à l'équilibre, des forces de répulsion entre cellules apparaissent et font monter la pression au sein du sphéroïde (montré Figure V-13). La dynamique de montée en pression expérimentale est ainsi retrouvée. Elle croît de façon exponentielle au début du confinement, puis la réplication des cellules étant freinée, la pression augmente de façon continue au-delà de  $t=80h$ . Comme les parois sont indéformables dans ce modèle, la vitesse de croissance de l'agrégat au-delà du domaine numérique prescrit ne peut être calculée explicitement, néanmoins, elle est déterminée *a posteriori* en injectant les mesures de pression trouvées dans le système par la loi de déformation de la capsule (traits pointillés Figure V-9). Comme une condition de Dirichlet sur la fraction massique de cellule tumorale a été prescrite sur le bord, la pression varie continument vers la pression extérieure sur la frontière du domaine. De ce fait, seules les cellules

dans l'interphase (zone de concentration intermédiaire) échappent aux valeurs inhibitrices de la pression et peuvent se répliquer.



**Figure V-11: Variation temporelle de la fraction massique de nutriment au centre du sphéroïde.**  
Il n'existe pas de mesure expérimentale afin de valider les résultats numériques

Dans ce cas précis, l'utilisation d'un modèle à interface diffuse semble correspondre à une réalité physique et non une stratégie de modélisation artificielle. Le paramétrage de la taille de l'interface pourrait provenir d'observations expérimentales, étude qui n'a pas été menée ici mais qui pourrait intervenir dans un raffinement du modèle. L'application d'un chargement mécanique inhibant la réplication cellulaire, les nutriments au sein du système ne sont plus consommés. En conséquence, leur concentration augmente après la confluence (voir Figure V-11 après  $t = 66h$ ).

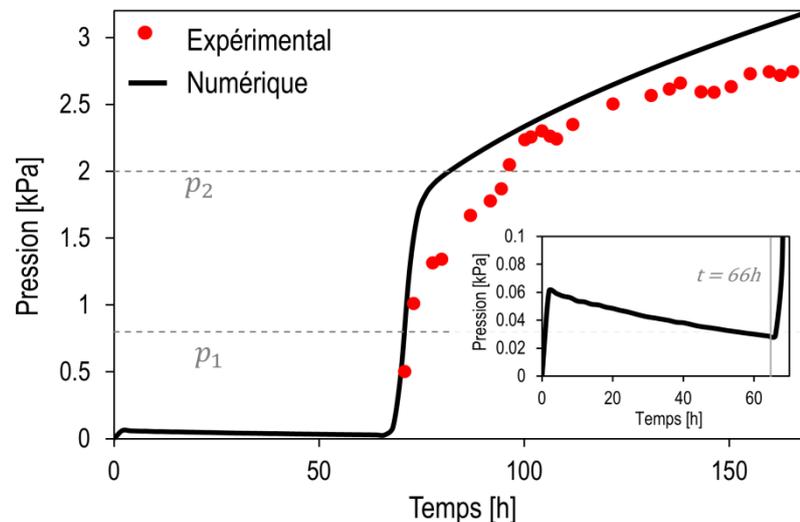


**Figure V-12 : Variation temporelle de la fraction massique de cellule tumorale au centre du sphéroïde**

La définition d'origine de la confluence établit qu'elle survient à  $t=66$  h (temps pour lequel le sphéroïde tumoral atteint la circonférence initiale de la capsule d'alginate). Il est cependant possible de

s'interroger mathématiquement si cette définition a plus de sens que l'instant pour lequel les cellules tumorales commencent à ressentir l'action d'une force mécanique extérieure. Dans le second cas, la confluence surviendrait plus tôt, aux alentours de  $t=60$  h. Numériquement, un changement de régime de croissance avec le cas libre est déjà observable (Figure V-9), alors que la montée en pression au-dessus de la valeur  $p_1 = 800$  Pa affecte la vitesse de croissance de l'agrégat. Mathématiquement, la transition entre les régimes survient donc de façon continue.

L'étude numérique du système montre qu'apparemment, l'apport en nutriments n'a aucune influence sur ce système dans les configurations étudiées. Expérimentalement, il est difficile d'accéder à la mesure de ces paramètres, et l'utilisation de la formulation mathématique a permis d'identifier clairement le rôle relatif de la concentration en nutriments et de la contrainte mécanique extérieure sur le comportement du système. Une confirmation expérimentale (tant sur le modèle de diffusion que sur les paramètres utilisés) permettrait de valider plus en avant les hypothèses considérées ici.



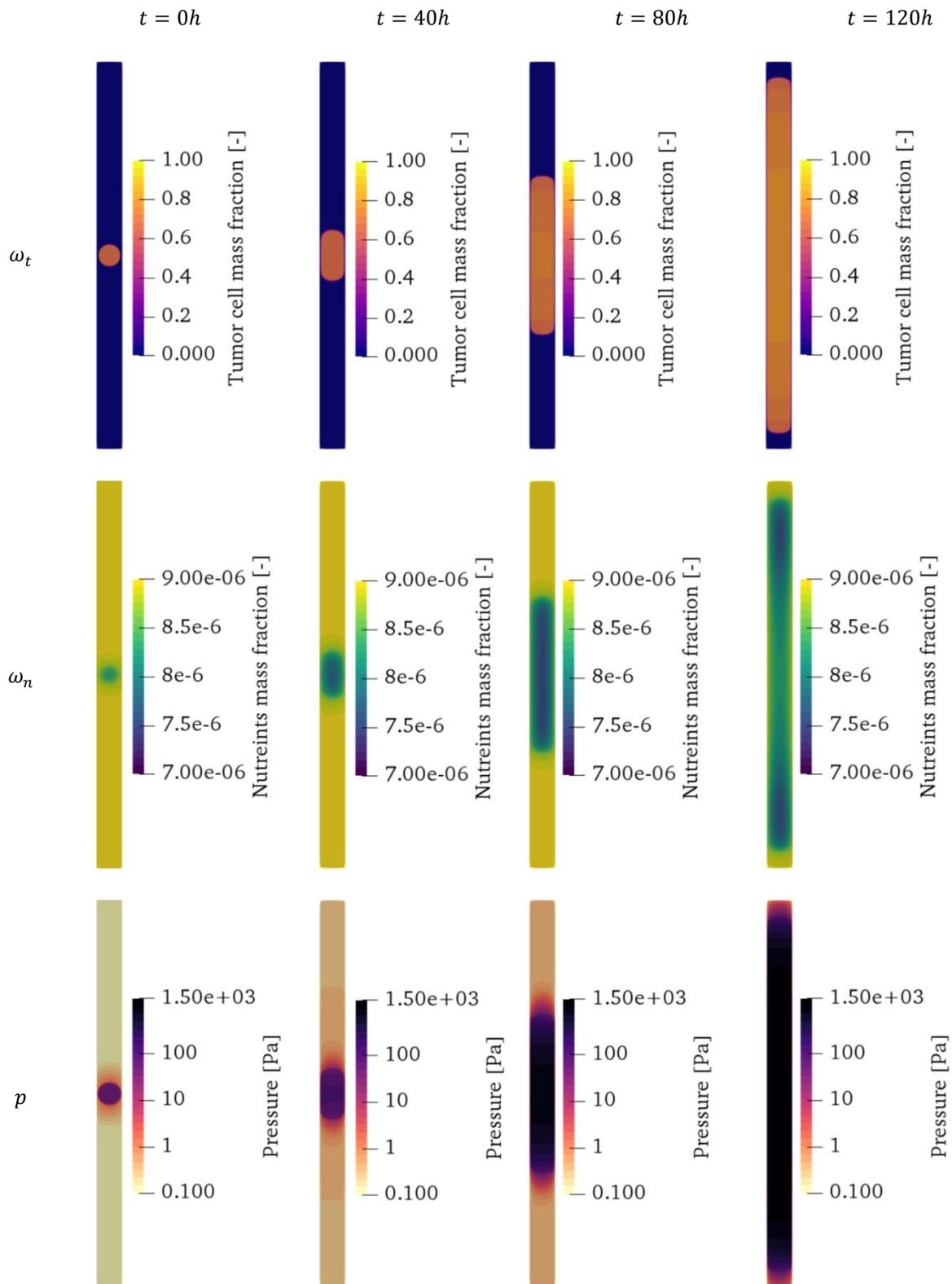
**Figure V-13: Variation temporelle de la pression dans le système au centre du sphéroïde de cellules tumorales.**

L'insertion en bas à droite montre la décroissance de la pression sur les premières heures avant le confinement, provoqué par la loi de Laplace qui diminue la pression lorsque le rayon augmente. Les traits correspondent aux données numériques, les points rouges aux données expérimentales (Alessandri, et al., 2013). On peut observer une variation très similaire à la courbe Figure V-12 du fait du lien existant entre les deux variables à travers le potentiel chimique du mélange.

### iii) Croissance en milieu semi-confiné

L'effet observé précédemment du confinement sur la croissance des agrégats est de nouveau étudié dans une configuration cylindrique. Dans cette nouvelle géométrie, l'effet des contraintes mécaniques est supposé être amoindri par le fait que les cellules peuvent se mouvoir dans la direction parallèle à l'axe de symétrie du cylindre pour échapper au confinement. Les résultats numériques obtenus sont illustrés Figure V-14.

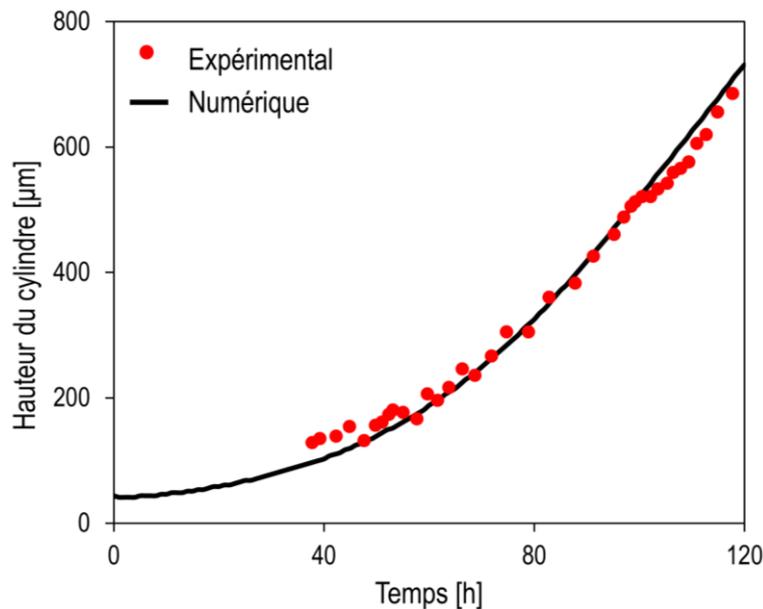
Expérimentalement, trois étapes de croissances sont identifiables. Tout d'abord, sur les premières heures, une compaction des cellules est observée. L'agrégat disposé automatiquement par le dispositif expérimental perd ainsi près de 50% de sa taille initiale (voir film expérimental Matériel supplémentaire). Une fois le sphéroïde compact, il se met à croître de manière exponentielle, signe d'un accès aux nutriments en abondance. Ce régime de croissance se poursuit jusqu'à  $t=80h$  où une nette déviation avec le régime exponentiel est visible (voir Figure V-15). À partir de là, un régime de croissance linéaire est observé, ce qui indique une différence de taux de répllication des cellules au sein du domaine : seul une partie des cellules composant la tumeur est capable de se multiplier. Aussi, si la croissance n'est pas à l'arrêt, ce changement de dynamique indique malgré tout une influence du confinement, même dans ce type de géométrie.



**Figure V-14: Évolutions des variables d'intérêt pour la modélisation d'agrégats en milieu semi-confiné.** Les valeurs de fraction massique de cellule tumorale  $\omega_t$ , de fraction massique de nutriment  $\omega_n$  et de pression  $p$  sont données aux temps  $t = 0$  (condition initiale),  $t = 40$  h (croissance exponentielle),  $t = 80$  h (transition de régime de croissance) et  $t = 120$  h (régime linéaire).

Numériquement, chacune des dynamiques précédentes a été retrouvée. La contraction initiale a été attribuée à une dynamique d'agrégation pilotée par le terme d'interactions non-locales de l'équation de

Cahn-Hilliard. À l'image de la décomposition spinoïdale, le placement aléatoire des cellules lors de l'initialisation de l'expérience ne permettant pas de respecter l'équilibre chimique de la composition ; donc les cellules se rassemblent jusqu'à former un agrégat uniforme correspondant à une teneur  $\omega_t^{eq} = 0.65$ . Une dynamique similaire a été obtenue numériquement; cependant, afin de reproduire le temps caractéristique de cette phase initiale de façon pertinente une identification précise de la mobilité cellulaire (paramètre  $M$ ) à l'aide d'expériences dédiées s'avère nécessaire. Pour cette raison la modélisation a focalisé principalement sur les étapes suivantes de l'expérience. La comparaison entre résultats expérimentaux et numériques commence donc une fois la compaction terminée, pour des agrégats d'une hauteur de  $40 \mu\text{m}$ . L'évolution temporelle de la hauteur du cylindroïde tumoral trouvée mathématiquement correspond aux observations *in vitro* (Figure V-15). Notamment, le passage d'un régime exponentiel à  $t = 80 \text{ h}$  à un régime linéaire est retrouvé.



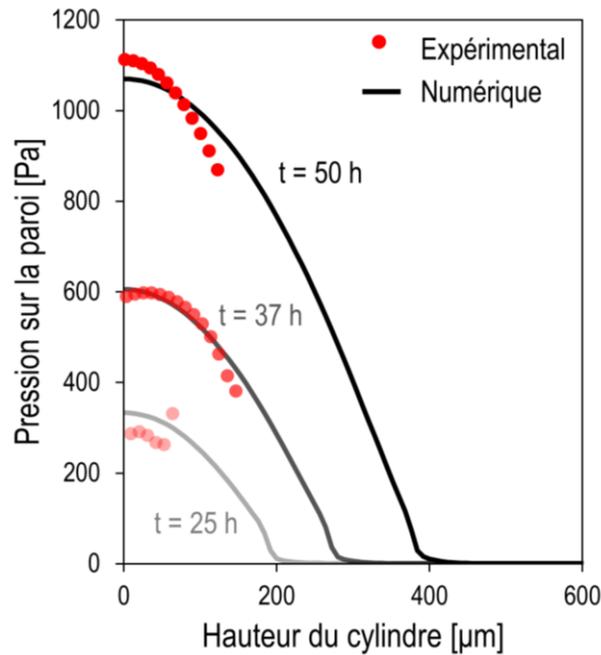
**Figure V-15: Variation temporelle de la hauteur du cylindroïde tumoral.**

Trait plein : résultat numérique, cercle rouge : données expérimentales.

La montée en pression du système est représentée dans la (Figure V-16). La déformation expérimentale des parois d'alginate dans cette configuration montre clairement que dans le cas cylindrique, lorsque la taille de l'agrégat augmente, les cellules ne diffusent plus aussi vite qu'elles se multiplient. Par conséquent, la concentration des cellules tumorales au centre du cylindroïde augmente, et un net gradient de fraction massique apparaît le long de la hauteur du cylindroïde (Figure V-14, Figure V-17) sur les temps longs. Parce que le rayon du cylindre est plus restreint que celui des capsules (voir Table V-1), la déformation de l'alginate entraînée par la multiplication des cellules contre la paroi provoque une montée en pression de l'agrégat dès les premières heures de l'expérience. Les contraintes sont cependant inférieures à celles exercées dans le cas sphérique : la pression dans le système atteint une valeur maximale de  $1.07 \text{ kPa}$  au bout de  $50 \text{ h}$  après confluence alors qu'elle était de près de  $2.5 \text{ kPa}$  pour un confinement total. La montée des contraintes mécaniques au sein du système est plus étalée dans le temps et moins importante que dans le cas précédent.

Il est important de remarquer que, contrairement aux capsules sphériques, le système n'est plus isotrope ici en termes de contraintes mécaniques. Ainsi, la pression s'exerce sur les parties les plus âgées de l'agrégat tandis que les extrémités, plus jeunes, ne sont pas encore dans le même état de confinement. Du fait de la dépendance du taux de répllication avec les contraintes mécaniques, une structuration des cellules tumorales s'effectue au sein du cylindroïde. Les cellules localisées dans les parties anciennes du cylindre sont soumises à une pression inhibitrice qui les laisse dans un état de quiescence

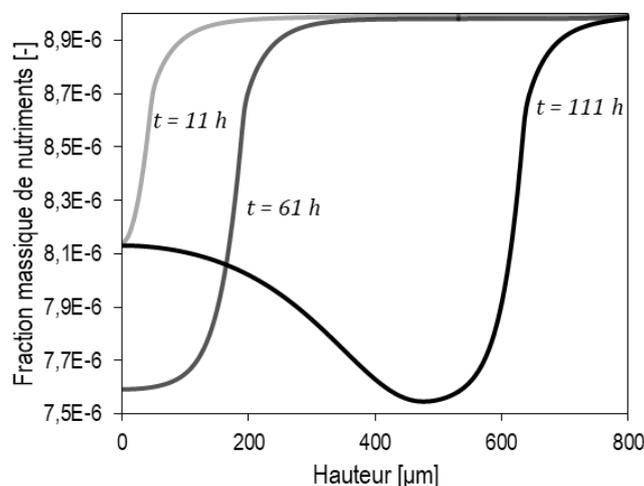
(pas de réplication même avec les nutriments à leur disposition). Au contraire, les parties jeunes aux extrémités ne sont pas concernées par ces contraintes et continuent de se multiplier à leur plein potentiel. C'est une croissance « par les bouts » qui explique la transition entre les régimes de croissances exponentielles puis linéaires durant l'expérience.



**Figure V-16: Variation temporelle de la pression le long de la hauteur du cylindre (valeur déterminée en  $r = R_c$  le long de la hauteur)**

Trait plein : résultat numérique, cercle rouge : données expérimentales.

L'évaluation du niveau d'oxygène dans le milieu montre que bien que le régime de croissance est piloté par les contraintes mécaniques, la concentration de nutriments dans cette configuration passe en dessous du seuil de début d'inhibition  $\omega_{n1} = 8.10^{-6}$  au centre du cylindre (voir Figure V-17). Comme dans le cas sphérique, l'inhibition du taux de réplication cellulaire par les contraintes mécaniques extérieures permet un nouvel apport de nutriments dans les régions quiescentes. Au vu des valeurs d'inhibition données au modèle, l'oxygène a cependant une influence limitée sur la croissance des cellules. Encore une fois, une mesure expérimentale de la concentration d'oxygène permettrait de confirmer cette observation.



**Figure V-17: Variation de la concentration de nutriments suivant l'axe de symétrie du cylindre.**

Les cellules capables de se diviser consomment plus de nutriments que les cellules quiescentes, ce qui explique que le minimum d'oxygène (sous la valeur d'inhibition  $\omega_{n1}$ ), se déplace en hauteur dans le temps.

#### 4. Discussion sur l'étude numérique et expérimentale simultanée de la croissance de sphéroïde en milieux confinés

Le modèle décrit précédemment et utilisé jusqu'alors a montré des résultats très proches de ceux observés expérimentalement en termes de vitesse de croissance d'agrégat, de la montée en pression du sphéroïde, ainsi que des répercussions qu'entraînaient des effets mécaniques extérieurs (comme le confinement) sur les cellules tumorales. Le choix d'un potentiel chimique modifié, dont l'équilibre est atteint pour des fractions massiques intermédiaires, semble capturer naturellement les forces d'adhésion cellulaires, attractives ou répulsives.

##### i) Limitations dues aux choix de modélisation

Malgré ces succès, plusieurs points restent cependant à améliorer ou à préciser :

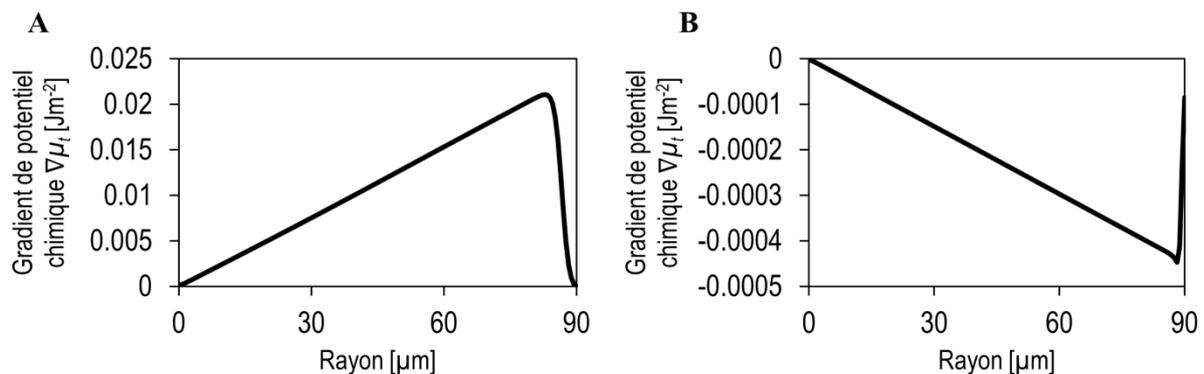
- (i) La déformation de la capsule n'est pas prise en compte pour l'instant. L'étude des interactions mécaniques entre les cellules tumorales et leur microenvironnement représente des pistes de développements intéressantes pour prendre en compte des phénomènes biomécaniques (Northcott, et al., 2018; Jain & Martin, 2014) et de mechanotransduction (Broders-Bondon, et al., 2018). Dans cette optique, l'étude de la déformation de l'alginate élastique représente un cas test *in vitro* pertinent pour tester le modèle.
- (ii) Aucune valeur précise de la variation temporelle de la densité des cellules au sein du sphéroïde tumoral ne vient confirmer les valeurs calculées numériquement. Pourtant, ce paramètre contrôle la seconde phase de croissance (une fois la confluence atteinte). Confirmer les hypothèses avancées par le modèle serait une étape de validation supplémentaire. Des phénomènes de nécroses peuvent apparaître au centre des agrégats, ce qui vient modifier ses propriétés biochimiques, et des phénomènes de transferts supplémentaires pourraient être pris en compte.
- (iii) L'apport de nutriments dans le domaine n'est pas non plus vérifié expérimentalement. Afin de limiter leur impact, cette étude s'est focalisée essentiellement sur des sphéroïdes de taille réduite pour lesquels, en principe, la croissance n'est pas impactée par l'apport de glucose et d'oxygène. Pour des modèles *in vivo* ou sur des capsules plus grandes en revanche, ce paramètre pourrait jouer un rôle important.
- (iv) Le domaine de validité du modèle microscopique développé ici doit être cerné distinctement. Les expériences menées sur des agrégats de petites tailles s'étalent sur une dizaine de jours tout au plus, et la composition chimique du domaine laisse à penser qu'une description multi-espèces telle qu'utilisée dans cette étude est pertinente. Pour des études effectuées sur des échelles de temps plus importantes (ou des capsules plus grosses), la capacité des cellules à générer un microenvironnement proche d'un milieu *in vivo* (en particulier la création de matrice extracellulaire), doit être prise en compte, et un point de vue plus macroscopique (et possible multiphasique) doit être adopté.

Il est notable que les points (i), (ii) et (iii) sont des objectifs techniques qui relèvent respectivement du modèle mathématique et des capacités de mesures expérimentales. S'ils peuvent être difficiles à mettre en œuvre, il n'est pas attendu qu'ils changent radicalement la physique du modèle - sauf correction majeure de la description employée dans ces travaux - mais la complèterait et la validerait, ce qui pourrait amener à des ajustements de paramètres (*e.g.* fraction massique d'équilibre) ou de modèle (*e.g.* diffusion des nutriments). Le dernier point requiert par contre plus de discussions. Il peut être remarqué que dans le cas de la croissance semi-confinée, les structures à l'étude sont de tailles grandes par rapport à l'échelle microscopique (pouvant aller jusqu'à 2 mm dans les dernières heures d'expérience). Devant la capacité de notre formulation à capturer la croissance de tels agrégats, il pourrait être tentant d'utiliser ce modèle y compris pour des cas de croissance de taille arbitraire, qui ferait interagir seulement deux milieux ou populations cellulaires. L'utilisation du modèle développé dans les cas d'étude se justifie par l'absence de structures fibreuses au sein de l'agrégat ; le système étant toujours composé uniquement de deux espèces principales que sont les cellules tumorales et le milieu de culture. Cependant, dans un environnement favorable, ces mêmes cellules se mettent à créer leur propre microenvironnement, et la physique du problème change : les cellules évoluent dans une

matrice poreuse, qui modifie les forces dans les milieux. (Sciumè, et al., 2013). Il est important de savoir dans quel cadre les cellules sont capables de modifier l'environnement *in vitro* à l'étude, si cela concerne les sphéroïdes de toutes tailles plongées dans des configurations favorables, ou si ce problème survient uniquement lors de configurations proches du cas *in vivo*. Cette problématique n'a pas été éclaircie durant ces travaux, et il a été vu dans une autre étude que le cas sphérique pouvait également être correctement traité avec un modèle purement formulé à l'échelle de Darcy pour des capsules de tailles intermédiaires.

ii) Limitations dues à la nature du problème

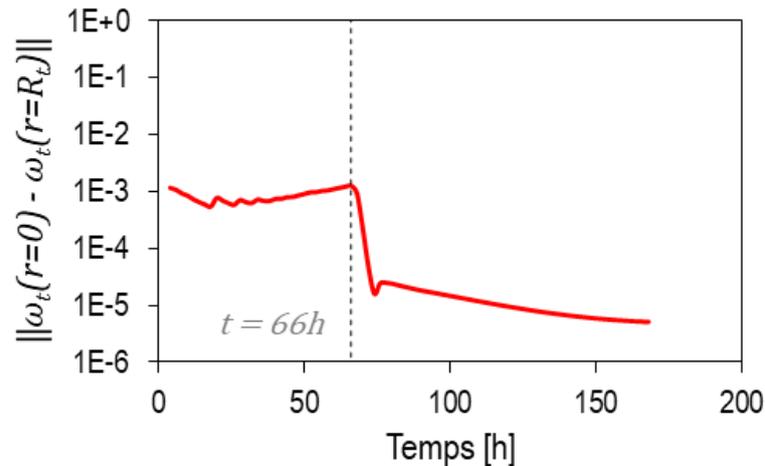
Enfin, il reste à discuter des limites dues au caractère biomécanique de la formulation mathématique. Ces restrictions apparaissent particulièrement sur l'étude des effets des confinements très longs (supérieurs à une dizaine de jour). Dans l'étude expérimentale (Alessandri, et al., 2013), l'application prolongée d'une contrainte mécanique semblait avoir un effet direct sur le phénotype de cellules tumorales qui acquéraient des propriétés invasives, en particulier une mobilité accrue. D'un autre côté, notre étude numérique montre également que les forces intercellulaires répulsives augmenteraient avec le prolongement du chargement mécanique (et la montée de la fraction massique au sein du sphéroïde). Un lien existe-t-il entre les deux observations ? Il est intéressant d'étudier *in silico* s'il est possible de reproduire certaines propriétés des cellules *post*-confinement sans modifier le modèle numérique, afin de savoir si les caractéristiques expérimentalement observées sont de nature biologique, ou peuvent être reproduites uniquement par la forme utilisée pour le potentiel chimique dans notre étude. Pour cela, la vitesse de diffusion  $u_i$  des cellules est étudiée dans le temps. Sur la Figure V-18 l'opposé du gradient du potentiel chimique (auquel la vitesse de diffusion est proportionnelle d'après Eq V-14) a été tracé à la confluence, puis pendant le confinement le long du rayon de la capsule sphérique. Dans la formulation du problème, cette vitesse de diffusion est la manifestation directe des forces intercellulaires sur le mouvement des cellules.



**Figure V-18: Gradient de potentiel chimique.**

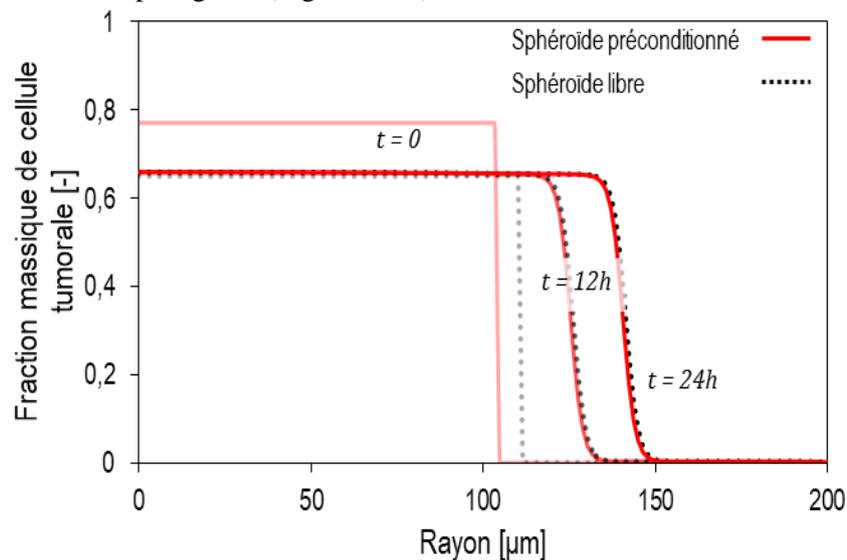
Les données représentées correspondent au temps (A)  $t = 66h$  (confluence) et (B)  $t = 110h$  (confinement).

En traçant les vitesses radiales au sein de la capsule pour des phases d'expansion (Figure V-18-A) et de confinement (Figure V-18-B), il est visible que le sens de diffusion est inversé et que plusieurs ordres de grandeurs séparent les magnitudes des vitesses. Avant le confinement, la vitesse de diffusion est dirigée vers le centre du sphéroïde (Figure V-18-A). C'est une vitesse d'agrégation au contraire de la vitesse post-confluence, où les cellules sont poussées contre la paroi par diffusion du fait des forces de répulsion entre cellules. Au fur et à mesure que la fraction massique des cellules tumorales augmente dans le domaine, ces vitesses diffusives diminuent en intensité car la composition chimique devient de plus en plus homogène (bien qu'hors équilibre, voir Figure V-19).



**Figure V-19:** Variation temporelle de l'écart de concentration en cellule tumorale entre le centre du sphéroïde et un point en périphérie de l'agrégat à  $R_s$ .

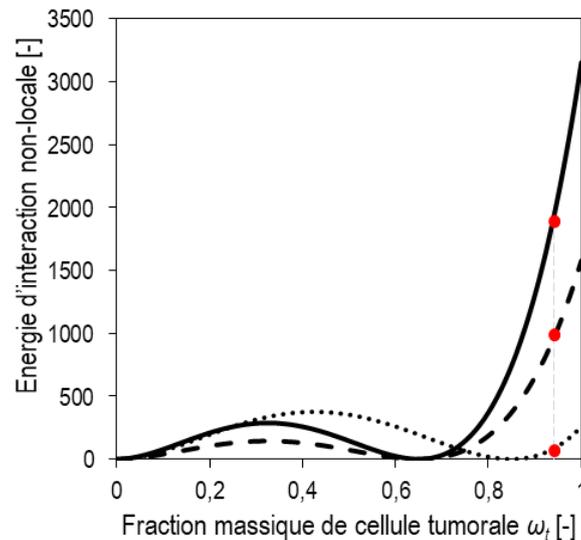
Expérimentalement, le caractère invasif est conservé une fois la capsule éclatée, c'est-à-dire au-delà d'une configuration confinée. D'un point de vue biologique, cela signifie que l'application d'un chargement mécanique sur des durées longues permettrait de changer les propriétés des cellules et que ces modifications se conserveraient au cours du temps. Mathématiquement, il est possible d'étudier une telle configuration en injectant les valeurs des variables d'intérêt comme des conditions initiales du sphéroïde sur un domaine plus grand (Figure V-20).



**Figure V-20:** Comparaison de la croissance d'un sphéroïde pré-conditionné (*i.e.* après dissolution de la capsule) par rapport à un agrégat libre de même densité initiale

Ce pré-conditionnement a pour objectif d'étudier le passage d'une croissance confinée à une croissance libre, et d'isoler des observations expérimentales les phénomènes de transfert de masse décrit par le modèle dérivé des phénomènes purement biochimiques. Il est alors observé sur la Figure V-20 que dans le cas d'une tumeur initialement instable, la vitesse de croissance était supérieure à la moyenne attendue le temps que le système diffuse suffisamment pour retrouver un état thermodynamiquement stable (écart entre le profil pré-conditionné et le profil stable à  $t = 0$ ), avant de reprendre un régime identique à celui d'un sphéroïde libre (*i.e.* croissance quasi-statique comme observée dans les premières heures de l'expérience *in vitro* pour  $t = 12h$  et  $t = 24h$ ). Le pré-conditionnement du sphéroïde n'a donc eu aucun effet sur le long terme, et passé un régime transitoire, les effets des contraintes initiales ont disparu. Cet aspect réversible du confinement a été observé expérimentalement (Delarue,

et al., 2014) en appliquant une contrainte mécanique durant plusieurs heures. Au contraire, dans l'étude (Alessandri, et al., 2013), le confinement prolongé semble avoir agi directement sur le phénotype des cellules, qui conservaient leur caractère invasif même plusieurs jours après le confinement. Dans l'état, ce comportement ne peut donc pas être pris en compte par la formulation mathématique.



**Figure V-21: Stratégies de diminution de l'énergie du système.**

Courbe pleine obtenue avec les données de Table V-1, courbe hachée avec  $\sigma=0.6 \text{ mN.m}^{-1}$  et la courbe pointillée avec  $\omega_t^{\text{eq}} = 0.85$

Il vient alors une nouvelle limitation du modèle dans sa formulation actuelle, cette fois-ci sur le plan temporel : c'est la réponse biologique aux contraintes imposées par la configuration d'étude. Ce qui différencie fondamentalement les deux résultats expérimentaux cités précédemment est le temps d'application de la contrainte mécanique. Dans le cas (Delarue, et al., 2014), le chargement est imposé sur un laps de temps de quelques heures, ce qui est faible par rapport au temps du cycle de réplication des cellules et à la probabilité d'apparition de mutations génétiques. Par conséquent, les effets mécaniques sont réversibles, comme dans notre modèle, et une démarche purement biophysique est possible. Sur des expériences plus longues en revanche, les cellules tumorales ont suffisamment de temps pour ingérer l'information mécanique et y trouver une parade. Dans ces cas de figure, une démarche purement mécanique n'est peut-être pas adaptée à la simulation du système.

De ces considérations survient une nouvelle piste d'amélioration possible de notre modèle. La dépendance des paramètres biophysiques (tension de surface, mobilité de l'interface ...) à certaines situations mécaniques (*i.e.* relative aux contraintes extérieures) ou chimiques (*i.e.* relative à l'accès aux nutriments). En partant du principe que les cellules réagissent aux contraintes extérieures, et qu'elles sont capables de s'y adapter (par mécano-transduction (Broders-Bondon, et al., 2018)), il est alors envisageable que certains paramètres employés dans le modèle utilisé varient au cours de l'expérience. En particulier, le confinement prévoit mathématiquement une augmentation drastique de l'énergie du système une fois la confluence atteinte. De par leur caractère actif, il peut être supposé que les cellules possèdent des mécanismes biophysiques capables d'alléger l'énergie du système. La diminution de leur tension de surface, tout comme le déplacement de la concentration d'équilibre par exemple, constitueraient des stratégies pour diminuer leur contrainte. À titre d'exemple, la Figure V-21 montre que pour des points placés à une même valeur de fraction massique des cellules tumorales, l'énergie du système décroît significativement. Un changement de la valeur de la tension de surface du système (aussi appelé dérégulation des forces d'adhésion), est étudiée du point de vue biophysique comme un mécanisme d'invasion des cellules (Douezan, et al., 2011). Le caractère variable des paramètres utilisés semble alors une nouvelle direction de recherche pour l'emploi du modèle mathématique précédent.

## D. Étude de stabilité des sphéroïdes de cellules tumorales microscopiques

Jusqu'à présent, la formulation mathématique Eq V-27 a permis de reproduire avec précision la dynamique de croissance d'agrégats tumoraux de tailles microscopiques *in vitro*. Ses limitations par rapport aux observations expérimentales ont ensuite été discutées. Dans cette partie, le modèle numérique est employé dans un cadre plus général afin d'étudier dans quelles circonstances il peut être utilisé afin de caractériser le potentiel invasif d'une tumeur à l'échelle microscopique. Ces travaux ne sont associés à aucune étude expérimentale, et doivent surtout être interprétés comme une étude de sensibilité plutôt qu'une réelle étude biomécanique.

L'agressivité d'une tumeur peut être caractérisée de différentes façons. Historiquement, les cancers malins (*i.e.* dangereux pour la santé) sont identifiés par les propriétés biologiques des cellules qui les composent (Hanahan & Weinberg, 2000; Hanahan & Weinberg, 2011). Alternativement, plusieurs études récentes ont examiné les capacités d'invasion d'une tumeur à partir de leur comportement mécanique, tant du point de vue numérique (Nematbakhsh, et al., 2017; Bogdan & Savin, 2018) qu'expérimental (Streitberger, et al., 2020). Dans ces travaux, le caractère invasif des agrégats est caractérisé par leur déplacement « fluide » plutôt que solide. Les agrégats qualifiés d'agressif partagent alors certaines caractéristiques rhéologiques telles que la vitesse d'expansion rapide des structures tumorales complexes, une décohérence des interfaces... L'étude de la structuration des tissus biologiques attribue ce comportement fluidifiant à une dérégulation des forces d'adhésion entre cellules (Steinberg, 2007; Gonzalez-Rodriguez, et al., 2012), qui jusqu'ici ont été modélisées par l'introduction d'une tension de surface entre les espèces chimiques présentes. Cette modification de comportement, appelée transition épithélio-mésenchymateuse, décrit le passage d'un agrégat cohérent à une structure dispersée. Du point de vue mécanique, cette transition peut également être vue comme une modification des forces capillaires entre les cellules et leur environnement (Doezan, et al., 2011).

Cette partie s'intéresse donc au comportement du modèle mathématique sous l'effet d'une dérégulation de la tension de surface et de la mobilité de l'interface, afin d'étudier dans quelles mesures ces paramètres peuvent être numériquement reliés à un caractère « invasif » du sphéroïde tumoral. Plusieurs études mathématiques sur la stabilité du système de Cahn-Hilliard pour la modélisation de la croissance tumorale à l'échelle macroscopique ont été menées formellement dans (Chatelin, et al., 2011; Olmeda & Ben Amar, 2019; Cristini, et al., 2009). À ce niveau de description, les principaux paramètres contrôlant l'expansion de la masse tumorale étaient le taux d'accès au nutriment et le taux de mortalité des cellules. Bien que ces études de stabilité permettent d'établir des scénarios sur la dangerosité du cancer modélisé, ils n'apportent pas d'information sur le comportement mécanique des agrégats. À l'échelle microscopique, la destruction des cellules par manque de nutriments n'est pas prise en compte, du fait de la taille restreinte des domaines d'étude. En revanche, il a été vu dans les parties précédentes comment la stabilité du système reposait en grande partie sur les forces attractives à l'interface, mesurées notamment par le nombre de Péclet (quelles que soient ses différentes définitions). Une modification de la tension de surface entre les cellules, supposée être à l'origine de la transition épithélio-mésenchymateuse, aurait un impact direct sur le nombre de Péclet défini Table V-2 dans le cas spécifique de la croissance tumorale. Il est donc attendu que ce paramètre guide la forme de l'agrégat durant sa croissance.

Enfin, cette étude est motivée par les observations expérimentales établissant un lien direct entre la digitation visqueuse en milieu poreux et la croissance invasive de gliomes (Streitberger, et al., 2020). Dans le cas précis de ce phénomène, les forces capillaires jouent un rôle important dans la régulation des perturbations et la croissance des instabilités (Homsy, 1987), notamment à l'échelle microscopique. La capacité du modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes à modéliser ce type d'instabilité a été

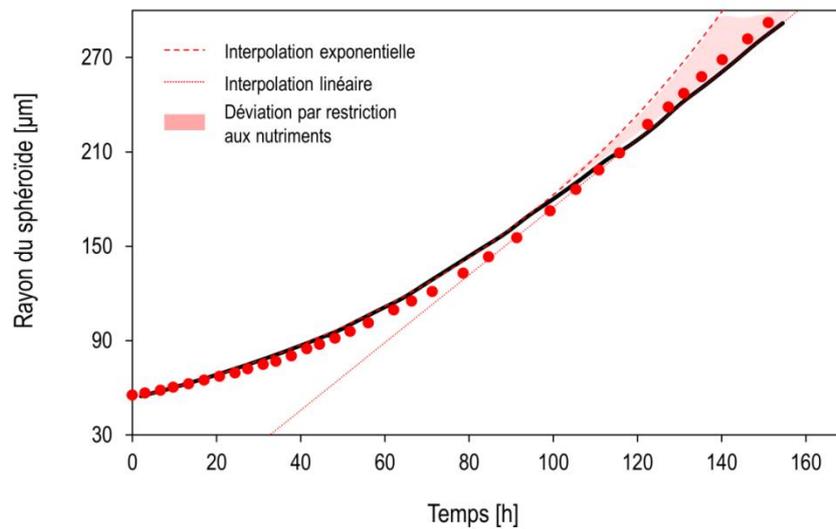
précédemment étudié (Ding, et al., 2007). L'étude de ce phénomène à l'échelle microscopique représente donc un outil d'intérêt pour l'étude *in silico* des hypothèses précédemment avancées.

Cette partie commence par l'étude de la croissance libre d'un sphéroïde de cellule tumorale, ce qui permettra d'obtenir un cas de référence à partir duquel il sera possible d'étudier l'influence de la variation des paramètres. Dans un second temps, l'impact d'une baisse de la tension de surface et/ou du coefficient de mobilité sur la forme des agrégats sera étudié dans différents environnements.

## 1. Étude de la croissance libre d'un agrégat

Le système adimensionné tel que formulé Eq V-27 permet avec peu de modification d'étudier des sphéroïdes dans divers configurations. Dans un premier temps, il peut être intéressant d'étudier la croissance d'un agrégat libre, *i.e.* qui ne subit pas les effets de forces extérieures. Par conséquent, la seule limitation à la croissance exponentielle des cellules est la disponibilité en nutriment du milieu. Numériquement, ce comportement est modélisé en plaçant un sphéroïde de taille réduite dans une suspension de milieu de culture, puis de le laisser croître sans interruption sur plusieurs jours. La variation temporelle du rayon est donnée sur la Figure V-22.

Comme attendu, le sphéroïde libre grandit de façon exponentielle dans les premières heures de l'expérience (interpolation exponentielle Figure V-22) jusqu'à une taille critique légèrement supérieure à  $150 \mu\text{m}$ . Une fois cette dimension atteinte, la diffusion au sein du sphéroïde est déséquilibrée, les nutriments diffusant moins rapidement dans l'agrégat que dans le milieu de culture. Ainsi, les zones éloignées de la source de nutriment sont peu à peu privées de l'énergie nécessaire pour la multiplication cellulaire. Une structuration de l'agrégat apparaît avec, comme précédemment, un centre inactif par manque de nutriments et une périphérie sans contrainte qui pilote la croissance. La vitesse d'expansion devient alors proportionnelle à la surface du sphéroïde (interpolation linéaire Figure V-22). Globalement, la correspondance avec les données expérimentales de croissance libre effectuée dans (Alessandri, et al., 2013) est satisfaisante, et la transition entre régimes correctement capturée. Comme dans l'étude des sphéroïdes *in vitro*, l'interface obtenue est stable, et l'agrégat conserve sa forme sphérique tout au long de la simulation.



**Figure V-22: Croissance libre d'un sphéroïde de cellule tumorale.**

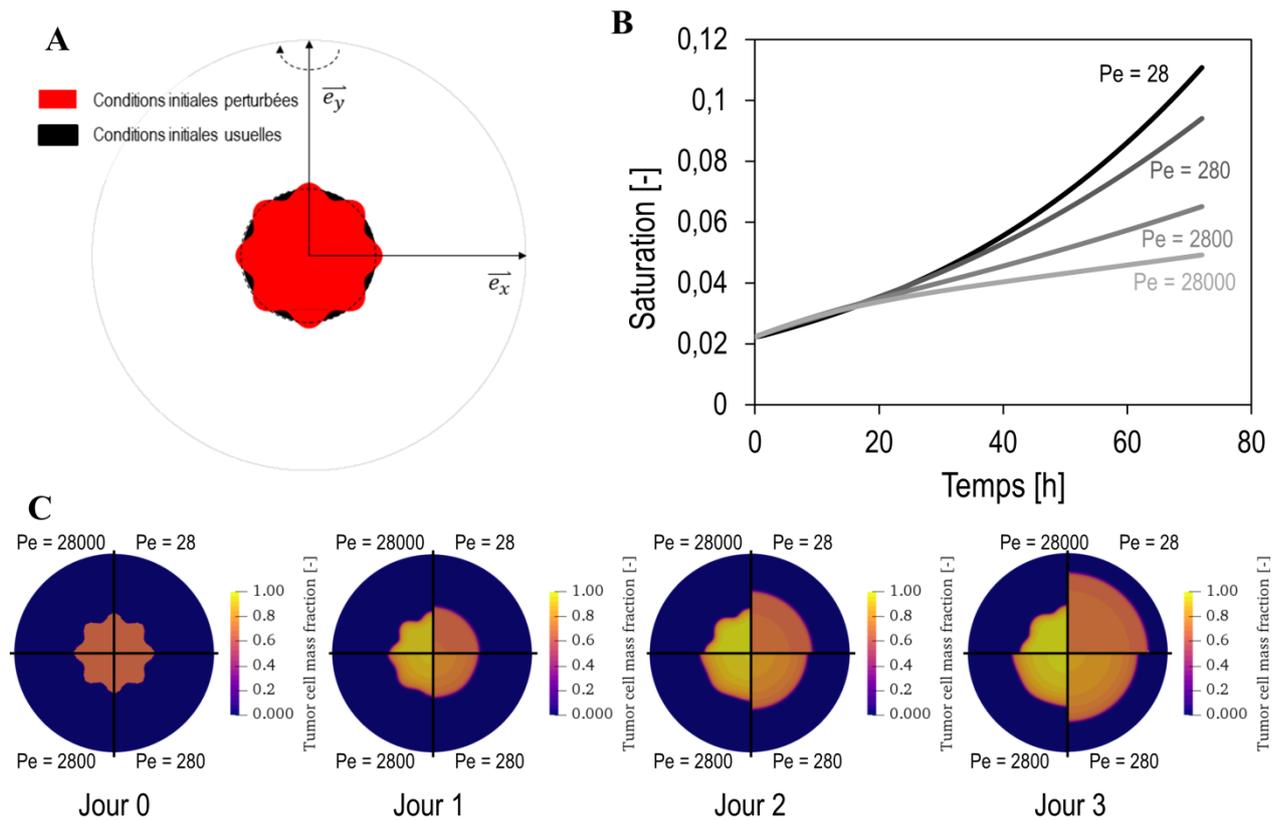
Les données expérimentales (Alessandri, et al., 2013) sont représentées par les cercles. Les résultats numériques sont tracés par la ligne pleine noire.

## 2. Influence du nombre de Péclet sur la stabilité du système

Le même système est à présent étudié pour différentes valeurs du nombre de Péclet (on rappelle  $Pe = \frac{\epsilon d_c^2 r_0}{\rho M_t \sigma}$ ):  $Pe = 28$  ;  $Pe = 280$  ;  $Pe = 2\,800$  et  $Pe = 28\,000$ , en diminuant successivement la tension de surface du problème (hypothèse de dérégulation des forces intercellulaires généralement avancée (Douezan, et al., 2011)). À noter qu'il est également possible de modifier la mobilité des cellules tumorales  $M_t$ , ce qui peut mener à des différences de solutions pour des nombres de Pecllet pourtant identiques du fait de la pression capillaire du système). Dans cette étude, la dérégulation du nombre de Pecllet s'accompagne donc simultanément d'une diminution des forces capillaires. Les valeurs utilisées pour le nombre de Pecllet sont volontairement supérieures à celles correspondant aux cas *in vitro* étudiés précédemment Table V-2. L'influence du nombre de Péclet est étudiée pour chacun des régimes de croissance du sphéroïde libre. Afin d'étudier la stabilité du système, les conditions initiales sont légèrement perturbées autour du cas précédent (Figure V-23-A). La bonne stabilité ou non du système est donnée par le lissage ou au contraire l'augmentation de la taille de ces perturbations dans le temps. Dans ces travaux, ces perturbations initiales n'ont pas d'origines physiques clairement identifiées. S'il est possible de les justifier du point de vue biomécanique (anisotropie de la diffusion d'oxygène, mouvement actif des cellules, application de contraintes extérieures...), la modélisation d'une situation réaliste n'est pas à l'étude dans cette section.

### i) Système sans limitation des nutriments

Dans un premier temps, aucune limite à la croissance entraînée par l'absence des nutriments n'est considérée. Pour assurer cela, le rayon moyen de l'agrégat initial est alors de  $55\ \mu\text{m}$  alimenté en nutriments par une source située à  $150\ \mu\text{m}$ , inférieure à la taille de déviation de la croissance de l'agrégat par absence de nutriments (voir Figure V-22). Une condition de Dirichlet sur la paroi remplace alors la condition de transport des nutriments à travers la membrane d'alginate des cas précédents. La variation de fraction massique de cellules cancéreuses, pour chaque valeur du nombre de Pecllet, est tracée Figure V-23-C. On voit que pour  $Pe < 28\,000$ , les perturbations initiales s'amenuisent avec le temps : l'agrégat adopte une forme sphérique très rapidement au bout de  $t = 24\text{h}$ , sauf dans le cas  $Pe = 28\,000$ , puis toute trace des perturbations initiales disparaît dans les temps plus longs. Pour  $Pe = 28\,000$  en revanche, la perturbation persiste sur des temps bien plus longs (supérieur à 10 jours). Dans aucuns des cas étudiés une augmentation des instabilités n'est observée dans le temps.



**Figure V-23: Étude de la stabilité de la croissance d'agrégat pour des croissances non limitée par l'accès aux nutriments.**

(A) Perturbations des conditions initiales pour l'étude de la stabilité. (B) Évolution de la saturation du milieu dans le temps pour plusieurs valeurs du nombre de Peclet. (C) Fraction massique de cellules tumorales dans le système au temps  $t=0h$ ,  $t=24h$ ,  $t=48h$  et enfin  $t=72h$  (cadrant supérieur droit :  $Pe=28$  ; quadrant inférieur droit :  $Pe=280$  ; quadrant inférieur gauche :  $Pe=2800$  et quadrant supérieur gauche :  $Pe=28000$ ).

Sur la Figure V-23-C, l'influence du nombre de Péclet semble conforme à sa définition Table V-2 : il mesure le rapport entre le temps de diffusion et de répllication des cellules tumorales. À Péclet élevé (dès  $Pe=280$ ), la fraction massique des cellules à l'intérieur du sphéroïde dépasse significativement la concentration d'équilibre définie par le potentiel chimique, sans action mécanique extérieure. Par conséquent, la pression ressentie au sein des cellules augmente, mais comme la tension de surface associée à ces configurations est très faible (cas  $Pe=2800$  et  $Pe=28000$  notamment), ces valeurs restent largement inférieures aux valeurs d'inhibition. Cependant, une conséquence directe de l'accumulation des cellules au sein de l'agrégat est la diminution de la fraction massique du milieu de culture au centre de la structure, ce qui ralentit la multiplication cellulaire de façon importante. Par conséquent, à fort nombre de Péclet, bien que le sphéroïde soit en dehors de tout état inhibitif, les cellules au centre ne se multiplient pas, et seule la surface est active. À titre d'exemple, les sphéroïdes obtenus pour  $Pe=2800$  et  $Pe=28000$  sont bien plus petits que ceux obtenus pour des nombres de Péclet plus faibles (meilleure diffusion des cellules autour de la concentration d'équilibre).

L'évolution de la saturation en cellule tumorale du système  $S_t$  illustre bien ce comportement (voir Figure V-23-B). On définit la saturation selon (Gray & Miller, 2014) :

$$S_t = \frac{\int_{\Omega} \omega_t dV}{\int_{\Omega} 1 dV} \quad \text{Eq V-31}$$

Alors que la taille des agrégats augmente avec la décroissance du nombre de Péclet, le système obtenu après 2 jours de simulation montre une saturation en cellule tumorale comparable pour  $Pe=28$ ,  $Pe=280$ . Cela s'explique par une concentration plus importante de cellules au sein de la structure pour les nombres de Peclet grands (voir concentrations Figure V-23-C). En revanche, au bout de trois jours, le

régime de croissance pour  $Pe = 280$  devient linéaire, car la faible diffusion des cellules ralentit la multiplication comme dans les cas à Péclet élevé.

Pour cette taille d'agrégat et les paramètres considérés, le système d'équation résolu est particulièrement stable. Les perturbations initiales du système sont progressivement lissées à cette échelle, et une géométrie purement sphérique est observée pour 3 des configurations étudiées. Pour  $Pe > 28\ 000$ , les perturbations subsistent jusqu'à 10 jours. S'il semble ainsi possible de faire perdurer les instabilités initiales sur des temps très longs en adaptant le nombre de Péclet, il n'existe pas de configuration dans laquelle la solution numérique permet leur croissance dans le temps.

La dynamique de la saturation est purement exponentielle, excepté pour des nombre de Péclet très élevé, pour lesquels la haute densité cellulaire au sein de l'agrégat est un frein à la réplication. Dans les systèmes étudiés, l'hypothèse d'une invasion pilotée par une diminution de la tension de surface est alors peu envisageable à l'échelle microscopique sans considérations supplémentaires dans ce modèle mathématique. Cependant, il est à noter qu'en terme énergétique, les sphéroïdes résultant de la croissance à haut nombre de Péclet sont hors équilibre, et constituent des réservoirs cellulaires très importants par rapport au cas de référence.

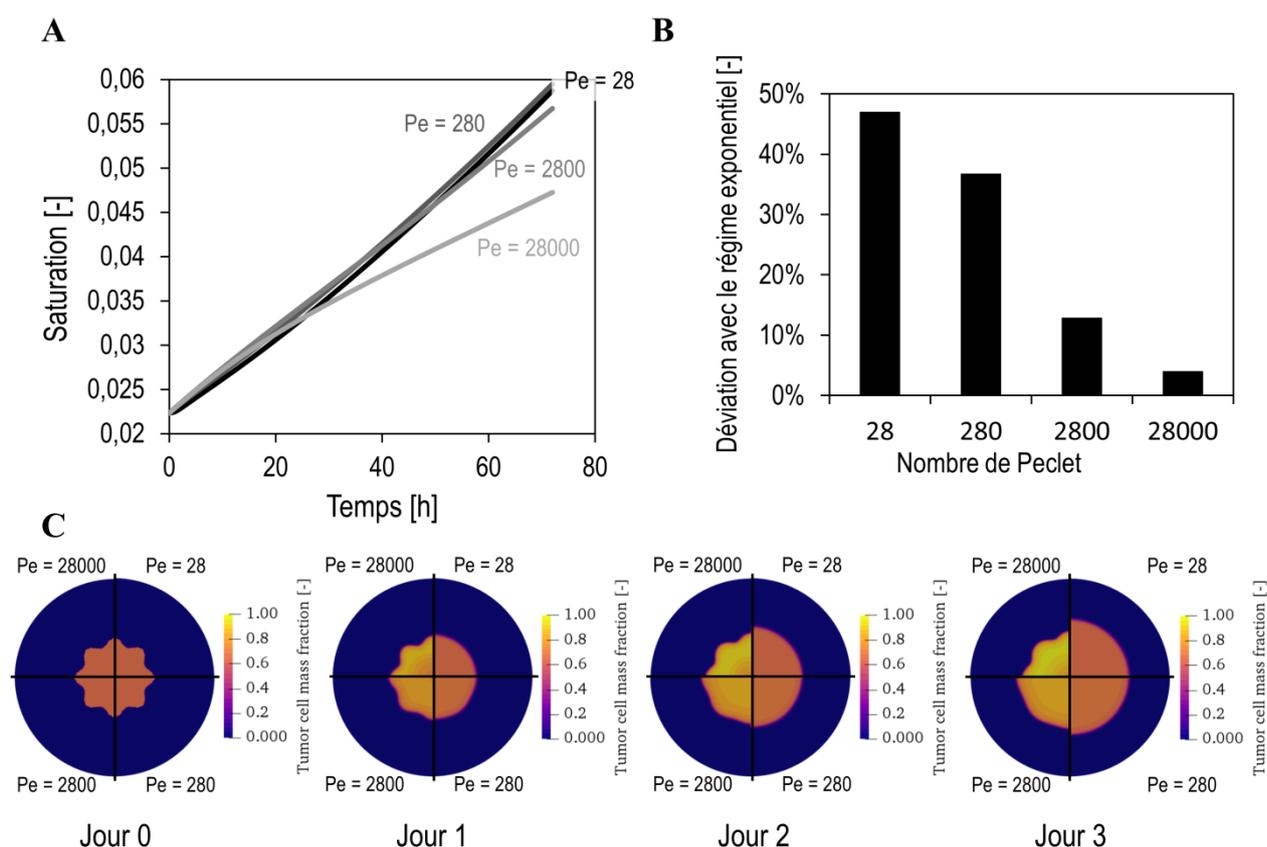
La dérégulation de la tension de surface n'a donc pas l'effet direct d'évasion attendu comme on l'observait dans le cas de deux fluides immiscibles. Parce que le système est un mélange et non un système diphasique, l'augmentation du nombre Péclet tend davantage à augmenter la composition locale en cellule tumorale qu'à augmenter la taille des perturbations initiales. Comme le terme de réaction chimique entre les cellules et le milieu de culture diminue lorsque la fraction massique des cellules augmente, la croissance du sphéroïde est peu à peu inhibée alors qu'aucun chargement mécanique n'est appliqué sur le domaine. Ainsi, le sphéroïde croît peu dans le temps à haut nombre de Péclet. La stabilité du système repose alors entièrement sur la définition du terme source tel qu'écrit Eq V-20. Une caractérisation moins empirique de ce terme pour l'étude de lignées cellulaires plus agressives pourrait constituer une piste d'étude intéressante.

Ce qui semble faire défaut à notre système par rapport aux études canoniques des instabilités du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes est l'absence de force venant contrebalancer les interactions attractives entre cellules. En mécanique des fluides, c'est généralement le rôle joué par les mouvements convectifs entraînés par la différence de masse volumique ou de viscosité. L'ajout d'un mouvement actif des cellules, orienté dans le sens des gradients de nutriments permettrait peut être aux cellules d'échapper aux forces d'adhésion (Bogdan & Savin, 2018). Intégrée au système de Cahn-Hilliard, ces considérations ont permis de trouver des structures de croissance tubulaires (Cristini, et al., 2009). Cependant, ces hypothèses sur la présence (ou non) des nutriments s'éloignent des considérations rhéologique des études expérimentales (Streitberger, et al., 2020). Une alternative à l'hypothèse d'un mouvement actif serait de considérer qu'initialement, le sphéroïde présente une variation de certains paramètres (*e.g.* la tension de surface) en fonction des propriétés locales du système. Cette étude a montré que si la modélisation des forces adhésives entre cellules ne permettait pas la croissance de structures instables dans la formulation mathématique utilisée, elle a cependant mis en avant la dynamique particulière des agrégats à Péclet très élevé : ces derniers forment des systèmes fortement hors équilibre qui s'inhibent d'eux-mêmes sans forces extérieures. Par conséquent, leur régime de croissance devient très rapidement linéaire (Figure V-23-B). Cependant, comme le système consomme moins de nutriments à cause de son activité cellulaire inhibée, il présente, au temps final, des concentrations de nutriments plus élevées. De plus, les perturbations initiales subsistant dans le temps, sa surface (active) est plus importante que celle des agrégats lisses, et peut permettre une vitesse de saturation plus importante sous certaines conditions. Dans la prochaine partie, l'impact de l'accès aux nutriments sur les systèmes étudiés est analysé.

ii) Système avec inhibition par absence des nutriments

Pour des mêmes valeurs du nombre de Péclet, le système est étudié pour des agrégats initiaux de taille supérieure. La Figure V-24 montre les résultats obtenus pour des agrégats de rayon initial moyen de  $150 \mu\text{m}$ , dont le centre est situé à  $400 \mu\text{m}$  de la source de nutriment.

Pour cette configuration, la croissance des agrégats est fonction de la taille de la surface des sphéroïdes. Comme montré Figure V-24-A, C la limitation d'accès aux nutriments n'affecte pas de la même façon les sphéroïdes à faibles ou hauts Péclet (voir Figure V-24-B). La différence de saturation finale du système entre chaque configuration montre une déviation croissance avec le nombre de Péclet décroissant : pour les sphéroïdes avec  $Pe = 28\ 000$ , la saturation finale du système est de l'ordre de 5%, montrant que l'inaccessibilité au nutriment a peu d'influence sur le comportement de la solution, tandis qu'elle est de 50 % pour  $Pe = 28$ .



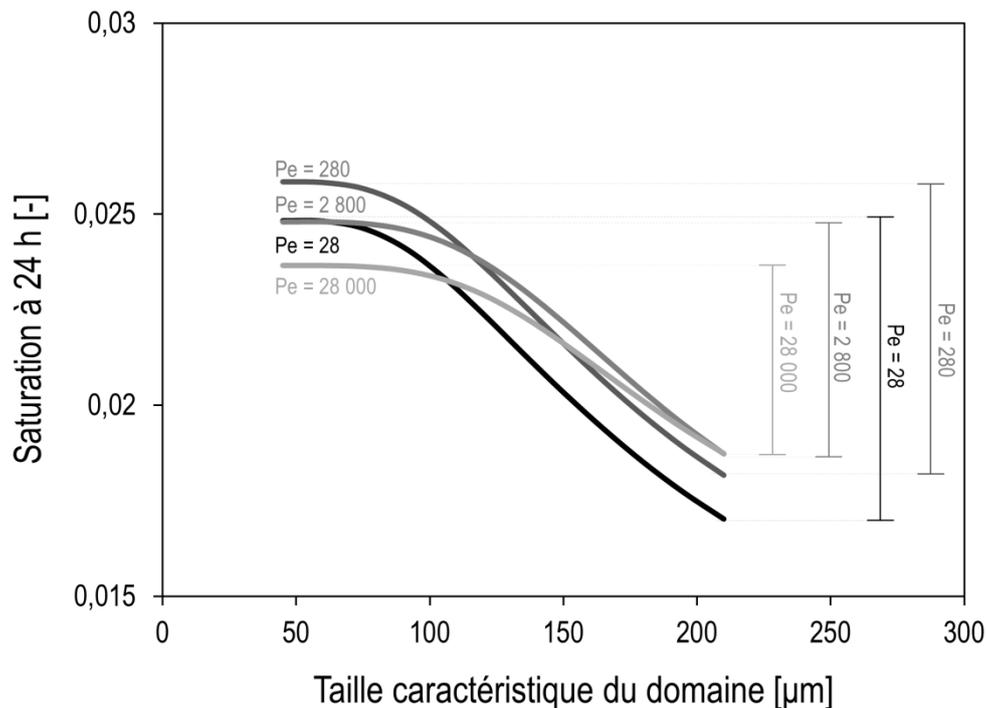
**Figure V-24: Étude de la stabilité de la croissance d'agrégat pour des croissances limitée par l'accès aux nutriments.**

(A) Évolution de la saturation du milieu dans le temps pour plusieurs valeurs du nombre de Péclet. (B) Fraction massique de cellules tumorales dans le système au temps  $t=0\text{h}$ ,  $t = 24\text{h}$ ,  $t = 48\text{h}$  et enfin  $t = 72\text{h}$  (cadrant supérieur droit :  $Pe = 28$  ; cadrant inférieur droit :  $Pe = 280$  ; cadrant inférieur gauche :  $Pe = 2\ 800$  et cadrant supérieur gauche :  $Pe = 28\ 000$ ).

Il est alors remarquable que, contrairement à la situation précédente où les agrégats conservant une interface perturbée étaient d'une taille très inférieure à celle d'un agrégat aux interfaces lisses, les saturations finales obtenues pour des systèmes plus grands sont du même ordre de grandeur. L'absence de nutriments a de plus une influence non-négligeable sur la structuration des agrégats obtenus en solution. Si pour des sphéroïdes de tailles réduites, le gradient de masse de cellules tumorales était toujours dirigé du centre vers la périphérie, il est visible que pour  $Pe = 28\ 000$ , une couche intermédiaire de plus forte concentration cellulaire persiste dans le temps (voir Figure V-24-C).

Ces observations se confirment-elles avec la croissance du système ? La Figure V-25 montre l'évolution de la saturation au bout de 1 jour pour différentes tailles de sphéroïdes initiaux. Sur cette figure, l'amplitude des variations est représentée à droite pour chaque valeur du nombre de Péclet. Il

est clairement visible que la variation de la saturation du milieu est à la fois corrélée par la taille de domaine (qui contrôle la distance de diffusion des nutriments), mais aussi par le nombre de Péclet : plus ce dernier est faible, plus la saturation est sensible à l'apport de nutriments.



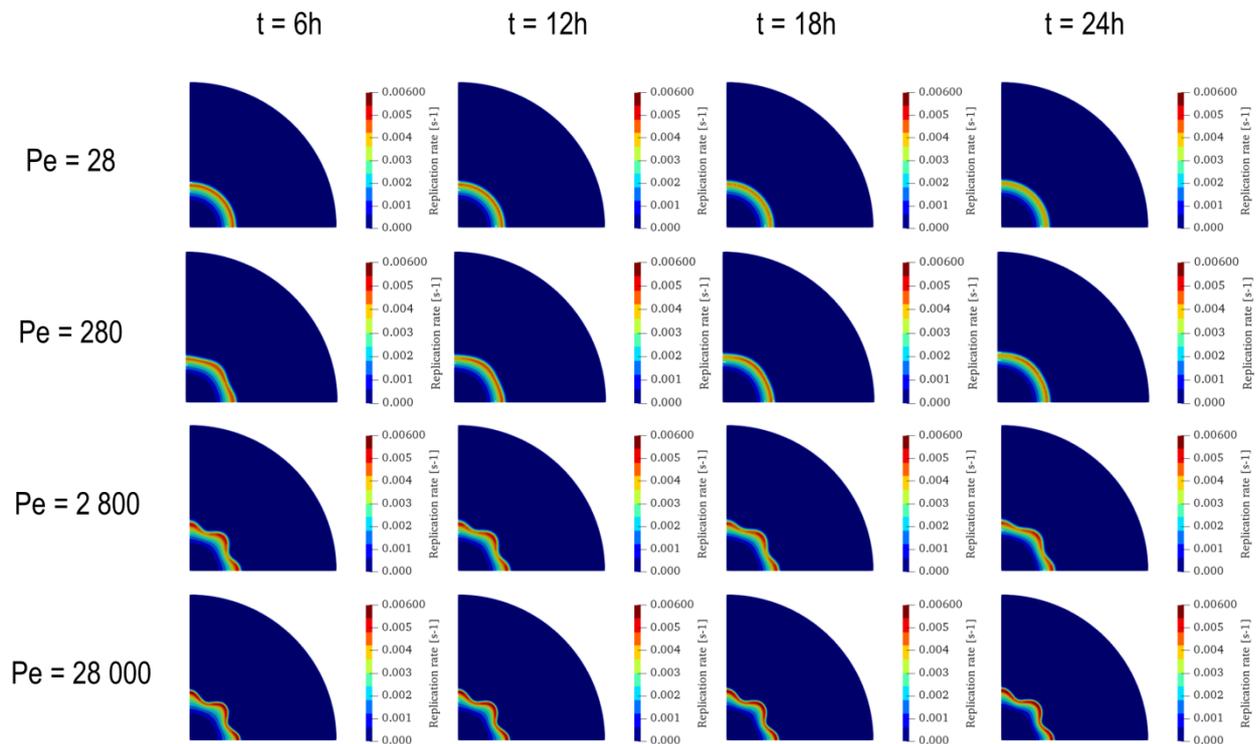
**Figure V-25: Variation de la saturation du système en cellule tumorale à  $t = 24\text{h}$  en fonction de la taille des systèmes étudiés.**

Dans chaque situation, la source de nutriment est située à une distance  $d = 3.33d_c$  pour des agrégats initiaux de rayon moyen  $r = d_c$ ; de façon à priver progressivement les sphéroïdes étudiés de l'apport en nutriment.

Cette observation s'explique par le fait que, dans des systèmes inhibés, la cinétique de croissance des agrégats est proportionnelle à la surface des sphéroïdes, comme il a été montré dans l'étude des systèmes libres. Or la perturbation initiale opérée sur les agrégats augmente leur surface. Par conséquent, les systèmes à hauts nombres de Péclet conserveront pendant plusieurs jours leurs formes étoilées, ce qui leur confère un avantage non négligeable par rapport aux systèmes purement sphériques dans ces régimes de croissances inhibés (augmentation de la saturation à 24 h pour  $Pe = 28000$  par rapport à  $Pe = 28$  Figure V-25). Cette hypothèse est illustrée sur la Figure V-26, où l'on peut observer la persistance de la surface irrégulière de l'agrégat pour des nombres de Péclet élevés et les conditions de réplification plus avantageuses (en termes de nutriments et de milieu de culture) le long de la périphérie. Cet avantage perdure dans le temps jusqu'à ce que l'interface se régularise.

La dérégulation des forces d'adhésion entre cellules a donc deux effets à première vue contradictoires selon la quantité de nutriments disponible dans le système pour la réplification cellulaire. Il a été vu que pour une source de nutriments placée proche du sphéroïde (*i.e.* la distance de diffusion est inférieure à celle du rayon de l'agrégat), alors l'évolution exponentielle de la saturation à bas nombre de Péclet était largement supérieure à celle des agrégats moins rigides, dont la tension de surface était plus faible. Au contraire, dans le cas où le système présente un défaut de nutriments, les systèmes permettant un prolongement temporel des irrégularités de l'interface (et donc un périmètre plus élevé) sont avantageux : la vitesse de saturation du milieu est supérieure, et cet avantage est proportionnel, que ce soit en amplitude ou en durée, au nombre de Péclet. D'un point de vue physiologique, on peut donc s'attendre à ce qu'une dérégulation de la tension de surface puisse faire partie des stratégies des cellules tumorales pour s'adapter à un environnement hostile (Hanahan & Weinberg, 2011). Cependant,

la formulation mathématique utilisée dans ces travaux ne permet pas de conclure sur une possibilité d'invasion uniquement guidée par ce paramètre.



**Figure V-26: Taux de réplcation des cellules dans le système.**

La taille caractéristique est  $d_c = 210\ \mu\text{m}$  et la source de nutriment est placée à  $700\ \mu\text{m}$  du centre du sphéroïde initial. Le taux de réplcation est montré pour différente valeur du nombre de Peclet au temps  $t = 6\text{h}$ ,  $t = 12\text{h}$ ,  $t = 18\text{h}$  et enfin  $t = 24\text{h}$ .

## E. Conclusions

Dans cette partie, il a été vu comment le modèle mathématique écrit pour deux fluides immiscibles pouvait être adapté à l'étude de la croissance tumorale. Le mélange est alors constitué de deux espèces chimiques qui ne forment plus deux zones chimiquement pures séparées par une interface comme pour deux fluides immiscibles ; l'état d'équilibre du système est supposé intervenir pour des fractions massiques intermédiaires de chaque espèce en solution. Il a été vu comment ces nouvelles considérations permettaient de bien prendre en compte des observations expérimentales. En particulier la réécriture du potentiel chimique a permis de considérer des systèmes à l'équilibre et sous confinement, ce qui permettait alors de capturer l'effet de l'application de contraintes mécaniques sur des sphéroïdes cellulaires.

La formulation mathématique résultante a ensuite été utilisée afin de reproduire des expériences *in vitro*, et ainsi définir la pertinence des hypothèses utilisées. Le modèle numérique a alors montré ses capacités prédictives pour l'étude des agrégats de tailles restreintes sur des temps de l'ordre de la semaine. Les dynamiques de croissance des sphéroïdes tout comme l'évolution des contraintes du système ont pu être retrouvées. Plusieurs pistes d'amélioration ont par la suite été proposées afin de compléter la formulation dérivée dans ces travaux.

Enfin, l'étude de la sensibilité du modèle à une perturbation de ses conditions initiales a montré que les solutions numériques fournies par le système d'équation utilisé étaient particulièrement stables : les forces d'adhésion entre cellules étant dominantes sur toute autre force. Ainsi, les observations expérimentales démontrant l'implication de phénomènes rhéologiques dans les stratégies d'invasion des tumeurs ne peuvent pas être reproduites dans l'état par notre modèle. Cependant, cette étude de paramètres a permis de mettre en lumière une différence importante de comportement des sphéroïdes selon les concentrations en nutriments du système, et ce, même en l'absence de mouvements actifs des cel-

lules. Dans quelle mesure ces résultats numériques sont représentatifs de situation *in vivo* reste à déterminer, mais cela montre néanmoins les futures possibilités offertes par le modèle pour étudier plus spécifiquement les stratégies d'invasion de lignées cancéreuses agressives.

## **F. Matériel supplémentaire**

Croissance *in vitro* d'un agrégat de cellule tumorale dans une capsule d'alginate (Alessandri, et al., 2013)

Simulation numérique de la croissance d'un agrégat de cellule tumorale confiné dans une capsule d'alginate

Croissance *in vitro* d'un agrégat de cellule tumorale dans une capsule d'alginate cylindrique (Alessandri, et al., 2013)

Simulation de la croissance d'un agrégat de cellule tumorale dans une capsule cylindrique

## VI. Conclusion et discussion sur les travaux de thèses

Ces travaux de thèse ont principalement porté sur l'établissement et la simulation d'un modèle numérique multiphasique en milieux poreux impliquant un fluide viscoélastique, et à l'étude de ses solutions *in silico* pour deux applications d'intérêt : la modélisation de la récupération améliorée du pétrole par injection de polymère ainsi que la croissance tumorale.

Le chapitre 1 expose les travaux antérieurs disponibles dans la littérature sur différents aspects du sujet de thèse. La modélisation multi-échelle dans laquelle s'inscrit ces travaux est aujourd'hui une piste de recherche majeure pour l'amélioration des modèles d'écoulements en milieux poreux dans de nombreux domaines d'application, et fait l'objet d'une attention particulière. Pour permettre la réalisation de formulations mathématiquement rigoureuses, la dynamique des fluides à l'échelle du pore doit être explicitement caractérisée afin de pouvoir être correctement prise en compte aux échelles supérieures. À un niveau de description microscopique, les équations de la mécanique des fluides utilisent une description continue des phases en présence. Les lois constitutives caractérisant la rhéologie des solutions transportant des entités diluées déformables peuvent également être décrites par cette approche, et leurs principales formulations ont été discutées. Pour pouvoir prendre en compte les effets de mémoire propre aux chaînes polymériques souples, les lois viscoélastiques non-linéaires sont nécessaires en dimension deux ou trois. Enfin, l'insertion d'une étude numérique à l'échelle du pore dans les applications visées a été justifiée : d'une part, ces travaux de thèse cherchent à valider l'hypothèse d'une récupération améliorée du pétrole par l'emploi de solution de polymères viscoélastiques lors d'opérations de récupération tertiaire du pétrole. D'autre part, la modélisation microscopique d'agrégats tumoraux pourrait permettre de renseigner les interactions entre les cellules et leur microenvironnement.

Le chapitre 2 est consacré à la dérivation d'un modèle satisfaisant pour les applications recherchées. Pour cela, un modèle d'interface diffuse a été choisi afin de considérer une variation continue des propriétés (notamment viscoélastiques) des phases considérées à travers le domaine. Cette méthode permet également un traitement implicite du point triple, ce qui est souvent recherché pour des modélisations sur la microstructure de milieux poreux. Cependant, la vitesse d'avancée du point de contact fluides/paroi dépend de nombreux paramètres du modèle qui sont parfois difficiles à déterminer physiquement, pouvant mener à des solutions peu représentatives de la réalité. Une loi d'Oldroyd-B a été choisie afin de modéliser la viscoélasticité. La formulation mathématique obtenue a été adimensionnée afin de réduire le nombre de paramètres et contrôler facilement la transition entre les régimes d'écoulement.

L'application du modèle obtenu pour la modélisation de la récupération améliorée du pétrole par injection de solution de polymère lors de la récupération tertiaire fait l'objet du chapitre 3. Afin de comprendre le rôle précis de la rhéologie pour cette utilisation, une étude préalable de l'écoulement de fluide viscoélastique seul a d'abord été menée. Ainsi, il a été montré comment les forces élastiques pouvaient se manifester dans des géométries communément utilisées pour représenter la microstructure des milieux poreux usuels. La sollicitation répétée de l'élasticité du polymère entraîne une modification de la perte de charge au sein du pore, qui en fonction des paramètres viscoélastiques, peut être ramenée à un comportement faiblement rhéofluidifiant ou au contraire rhéoépaississant. Pour des géométries présentant en plus différentes directions d'écoulement, une perte d'isotropie peut être observée lorsque la viscoélasticité de la solution augmente. Ces résultats, déjà discutés dans la littérature spécialisée, expérimentale comme numérique, ont permis en plus d'étudier la variation des solutions numériques avec les paramètres de la microstructure, montrant un fort couplage. L'ajout de l'aspect multiphasique au problème précédent amène à considérer de nombreuses dépendances supplémentaires : au couplage viscoélasticité/microstructure discuté précédemment s'ajoute la dépendance entre

la position de l'interface et les forces élastiques du système, ce qui entraîne de ce fait une modification des forces capillaires. Cette interaction est la conséquence la plus directe de la viscoélasticité, et son effet se répercute sur de nombreuses relations précédemment observées. Pour des solutions de viscosité similaires, l'augmentation des paramètres purement élastiques (*i.e.* le temps de relaxation de la chaîne polymérique pour le modèle d'Oldroyd-B) entraîne des effets similaires à ceux qui avaient pu être observés dans l'étude monophasique. La dynamique de l'écoulement est donc contrôlée par une compétition entre les forces élastiques et capillaires. C'est ce qui est notamment observé dans les géométries en croix, où, contrairement au cas d'un écoulement unidirectionnel, les déviations entre le cas Newtonien et viscoélastique s'atténuent avec les considérations multiphasiques, du fait de l'entraînement de l'interface par le point triple. Les conséquences de ces résultats sur l'hypothèse d'une récupération améliorée par l'emploi de solution de polymère ont ensuite été discutées. D'après les expériences numériques menées dans cette étude, les principaux avantages à l'utilisation de chaînes élastiques résident dans la déformation supplémentaire de l'interface par les forces viscoélastiques. Par cet aspect, il est possible de supposer que l'injection d'un fluide viscoélastique permettrait de balayer différemment la microstructure d'un milieu poreux, en privilégiant des directions d'écoulement différentes, ou en induisant une déformation de l'interface supplémentaire. On retrouve cependant dans ces hypothèses l'importance des caractéristiques géométriques de la microstructure dans la réponse viscoélastique du système.

Le modèle numérique est ensuite utilisé pour la modélisation de la croissance tumorale dans le chapitre 4. Le modèle d'interface diffuse précédemment dérivé a été adapté afin de correspondre plus précisément aux observations expérimentales sur les états d'équilibre des agrégats cellulaires. Cette modification passe par une réévaluation des transferts diffusifs dans le système, qui ont pour origine physique des forces d'adhésion intercellulaire. En se basant sur des études expérimentales, la croissance d'agrégats libres dans des milieux confinés a ensuite été étudiée numériquement. L'action des forces mécaniques sur le système a pu être correctement caractérisée en termes d'inhibition du taux de réplique cellulaire, ce qui permet d'étudier la dépendance relative des solutions de la formulation avec l'apport de nutriment et la géométrie considérée. Des régimes de croissance distincts entre les milieux fortement et partiellement confinés ont ainsi pu être retrouvés *in silico*, conformément aux observations *in vitro*. Dans un second temps, comme effectué précédemment, le système d'équations a été adimensionné. L'objectif de cette démarche était d'étudier comment une dérégulation des forces intercellulaires influait sur la stabilité de la solution modélisée par notre formulation mathématique ; cette hypothèse étant souvent introduite dans la littérature pour expliquer les variations d'agressivité des lignées de cellules tumorales. En fonction de l'importance relative des nombres caractéristiques obtenus, différents régimes de croissance ont été mis en évidence. Cependant, une dérégulation *in silico* des forces intercellulaires, modélisés dans nos travaux comme une augmentation du nombre de Péclet, ne provoque pas d'instabilité sur les solutions numériques. Bien qu'on puisse remarquer qu'une telle stratégie permettrait de réduire les effets d'une diminution extérieure de la fraction massique de nutriments, une invasion uniquement guidée par la mobilité de l'interface semble peu probable à travers le modèle dérivé.

### **A. Discussion sur la modélisation de la récupération améliorée du pétrole**

Les résultats concernant l'emploi de solution de polymère dans la récupération tertiaire sont globalement en accord avec les travaux expérimentaux disponibles dans la littérature (Clarke, et al., 2016) et dans une moindre mesure (Sheng, et al., 2015; Avendano, et al., 2013) à l'échelle du pore. Cependant, ces travaux ne tranchent pas avec la discussion générale existant sur les mécanismes intervenant lors de l'injection de polymère (Azad & Trivedi, 2019) quant au rôle précis des forces viscoélastiques.

Des simulations numériques effectuées, il ressort que la dynamique des écoulements multiphasiques et viscoélastiques à l'échelle du pore dépend de nombreux paramètres, intrinsèques (élasticité des polymères, régime d'écoulement), et extrinsèques (microstructure du milieu poreux considéré), ce qui rend difficile d'évaluer leur impact sur le système d'étude. Selon les cas, la variation des paramètres purement rhéologiques n'entraîne que peu de variation de la solution numérique finale. Il a aussi été montré que, même lorsque les conditions étaient favorables à l'émergence des forces viscoélastiques, leur influence sur la forme de la solution était globalement inférieure aux résultats expérimentaux décrits dans la littérature, et seule une corrélation qualitative a pu être obtenue. Par exemple, l'existence de forces élastiques normales suffisantes pour créer une anisotropie d'écoulement en fonction de la rhéologie des fluides utilisés dans les microstructures en croix telle que montrée dans (Wang, et al., 2010), n'a pas été retrouvée avec les paramètres employés dans nos simulations numériques.

De façon générale, il était attendu d'autres manifestations plus visibles de la viscoélasticité sur l'écoulement, comme par exemple les résultats obtenus dans (Pinilla, et al., 2016) où les fluides n'empruntent pas le même chemin en fonction de leur rhéologie, ou encore les résultats expérimentaux obtenus dans (Clarke, et al., 2016), où une transition vers un régime turbulent à bas Reynolds semble apparaître. La validation du modèle numérique se heurte alors au manque de données dans la littérature concernant les écoulements multiphasiques viscoélastiques à l'échelle microscopique. À titre d'exemple, l'observation d'une déformation de l'interface due aux forces élastiques n'apparaît pas dans (Pinilla, et al., 2016).

D'après ces considérations, la validation des différentes formulations analytiques doit donc passer par une confrontation avec des données expérimentales. Cependant, une autre difficulté éprouvée lors de ces travaux a été la correspondance entre les paramètres numériques de la loi d'Oldroyd-B et les grandeurs rhéologiques habituellement utilisées en laboratoire. Le fait que plusieurs lois constitutives de différentes complexités coexistent dans la littérature rend parfois difficile les comparaisons entre les études. De plus, de nombreuses recherches sur les milieux poreux tendent avant tout à établir une loi macroscopique de viscosité apparente, au contraire des modèles mathématiques existants sur les solutions de polymère. Cette mésentente sur plusieurs points de modélisation rend à l'heure actuelle les comparaisons difficiles à l'échelle microscopique.

Enfin, il reste à étendre les résultats obtenus dans ces travaux à des milieux plus représentatifs de la réalité. Pour cela, une étude sur des domaines provenant d'échantillon de milieux poreux réels, avec des variations de viscoélasticité plus importantes, semble nécessaire pour caractériser les lois constitutives des matériaux d'intérêt. La comparaison avec les études expérimentales concernant les résultats de perméabilités ou de pression capillaire s'en verra alors facilitée, et la construction de modèles multi-échelles capables de prendre en compte la viscoélasticité des solutions de polymères dans les écoulements multiphasiques envisageables aux échelles d'intérêt pour les applications industrielles.

### **B. Discussion sur la modélisation de la croissance tumorale**

L'application du modèle d'écoulement multiphasique viscoélastique microscopique à l'étude de la croissance tumorale n'a pas rencontré le problème évoqué ci-dessus, car des données expérimentales très précises ont pu être trouvées dès l'élaboration du modèle mathématique (Alessandri, et al., 2013), ce qui a permis une validation rapide des solutions numériques obtenues. Du fait des configurations étudiées, la portée des simulations numériques s'est vue réduite : seules des études de croissances quasi-statiques ont été menées afin de correspondre au dispositif *in vitro*, ce qui a éliminé toutes considérations rhéologiques dans le modèle numérique.

Malgré des résultats *a priori* satisfaisants pour la validation du modèle (Le Maout, et al., 2020), plusieurs pistes d'améliorations ont été envisagées afin de rendre la formulation proposée plus générale. D'une part, un couplage mécanique plus fort entre les fluides en présence et la matrice solide semble nécessaire pour se rapprocher de cas *in vivo*. Pour cela, la déformation de la matrice poreuse doit pou-

voir être prise en compte dans le modèle microscopique. D'autre part, des considérations sur le mouvement actif des cellules existent par ailleurs dans la littérature (Cristini, et al., 2009), qui permettent d'étudier des formes spécifiques d'invasion. Des corrections proposées, l'étude numérique du rôle de la biomécanique des cellules tumorales dans leur capacité d'invasion pourra être plus rigoureusement menée à l'échelle du pore, et pourquoi pas à l'échelle du tissu biologique une fois le couplage entre niveau de description validé (Streitberger, et al., 2020).

### C. Discussion générale sur ces travaux de thèse

Durant cette thèse, il a été choisi de privilégier une approche à l'échelle du pore et l'étude des résultats associés. Ce parti pris a permis d'étudier en détail les systèmes microscopiques d'intérêt, mais on peut regretter le manque de considérations pour l'étude de *l'upscaling* de lois de comportement : en se concentrant sur l'étude des solutions du modèle pour chaque application, peu de temps restait pour une étude rigoureuse multi-échelle. De ce fait, l'aspect « poreux » des applications étudiées semble parfois occulté ; le modèle reposant surtout sur une description continue et explicite de la dynamique de fluide. Dans l'état, ce travail reste encore éloigné d'une modélisation multi-échelle comme le propose de le faire la TCAT. Pour atteindre cet objectif, le modèle numérique doit être numériquement stabilisé afin de pouvoir :

1. Considérer des microstructures de formes complexes issues d'échantillons réels de milieux poreux,
2. Pouvoir considérer des gammes larges de paramètres viscoélastiques afin de les comparer à des données expérimentales.

Pour pouvoir réaliser le premier point, le schéma numérique doit être revu pour diminuer le coût informatique d'une modélisation sur des domaines étendus. À la vue des résultats présentés durant cette thèse, une stratégie possible serait d'abandonner la résolution monolithique du problème afin de réduire la taille des systèmes linéaires à résoudre. En faisant ce choix, il faut alors s'assurer que le pas de temps choisis soit suffisamment faible pour que la solution reste satisfaisante même avec des variables « décalées » temporellement. Pour des écoulements rampants multiphasiques, cela ne devrait pas poser de problème, étant donné que le facteur limitant sur le choix du pas de temps était donné par le système de Cahn-Hilliard, bien inférieur à celui de système Stokes/Oldroyd-B. De plus, il serait alors possible d'envisager une linéarisation progressive du problème, afin d'employer des méthodes d'inversion directe, plutôt que des algorithmes itératifs comme celui de Newton utilisé dans ces travaux.

Pour le second point, une approche différente de celle utilisée dans ces travaux peut être nécessaire afin d'étudier des solutions d'élasticité supérieure, et pouvoir se référer à d'autres travaux de la littérature. Ces dernières années ont vu une reformulation des lois rhéologiques usuelles avec une approche logarithmique, qui permet d'assurer une meilleure stabilité des calculs. Cependant, ces approches sont également coûteuses numériquement. Un tel choix doit aller de pair avec les optimisations proposées précédemment pour étendre la portée de la formulation faite au cours de cette thèse.

En se concentrant sur l'étude à l'échelle du pore, il a été possible de comparer les solutions numériques obtenues avec plusieurs études expérimentales (Alessandri, et al., 2013; Avendano, et al., 2013), et ainsi d'étudier la dynamique des écoulements à l'échelle du pore. Les agrégats de cellules tumorales *s'écoulent* ils au sein des tissus biologiques de la même manière qu'une solution de polymère poussant du pétrole dans un milieu poreux ?

Force est de constater que de nombreuses similarités entre les systèmes d'équations existent dans le cas général entre les deux systèmes modélisés : la forme des solutions dans chaque cas est principalement pilotée par la mobilité de l'interface (ou le nombre de Péclet) ainsi que sa mouillabilité. Notons cependant quelques différences également : ce qui semble être un écoulement dans le cas de la croissance tumorale est (de façon simplifiée) une chaîne de réaction biochimique menant à la formation de nouvelles cellules, et du point de vue des équations, il est plus juste de parler de problème statique

## Discussion générale sur ces travaux de thèse

dans le sens où la vitesse relative des phases est nulle. Il en résulte alors que toutes les observations effectuées dans l'étude des écoulements immiscibles pour la récupération du pétrole ne s'appliquent pas dans le cas de la croissance tumorale. Cette observation est particulièrement vérifiée pour l'influence du système relativement au nombre de Péclet, qui provoque l'instabilité de l'interface entre deux fluides immiscibles d'une part, et la réduction de la taille de l'agrégat de cellules tumorales d'autre part. L'étude biomécanique (voire rhéologique) des cellules tumorales est aujourd'hui un secteur de plus en plus actif dans la recherche. J'espère que ces modestes résultats de thèse pourront participer à de futurs travaux sur l'importance des considérations mécaniques sur les propriétés invasives des cancers, et à développer ces approches pluridisciplinaires qui m'ont stimulé tout au long de ces années de travail.

## VII. Bibliographie

- Agosti, A. et al., 2017. A Cahn-Hilliard–type equation with application to tumor growth dynamics. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 40(1), p. 7598–7626.
- Alessandri, K. et al., 2013. Cellular capsules as a tool for multicellular spheroid production and for investigating the mechanics of tumor progression in vitro. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 110(37), pp. 14843-8.
- Alnaes, M. S. et al., 2015. The FEniCS Project Version 1.5. *Archive of Numerical Software*, pp. 9-23.
- Alpak, O. F., Riviere, B. & Frank, F., 2016. A phase-field method for the direct simulation of two-phase flows in pore-scale media using a non-equilibrium wetting boundary condition. *Computational Geosciences*, pp. 881-908.
- Anderson, D. M., McFadden, G. B. & Wheeler, A. A., 1998. Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1), p. 139–165.
- Anderson, W. G., 1986. Wettability Literature Survey - Part 2: Wettability Measurement. *Journal of Petroleum Technology*, 38(11), pp. 1246-1262.
- Avendano, J. et al., 2013. Enhanced displacement of a liquid pushed by a viscoelastic fluid. *Journal of Colloid and Interface Science*, pp. 172-180.
- Azad, M. S. & Trivedi, J. J., 2019. Quantification of the Viscoelastic Effect During Polymer Flooding: A Critical Review. *SPE Journal*, 24(6), p. 2731–2757.
- Baaijens, P. F., 1998. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pp. 361-385.
- Barriga, E. H. & Mayor, R., 2018. Adjustable viscoelasticity allows for efficient collective cell migration. *Seminars in Cell & Developmental Biology*, 93(1), pp. 55-68.
- Beeder, J. et al., 2018. *Biopolymer Injection in Offshore Single-Well Test*. Copenhagen, s.n.
- Berg, S. & van Wunnik, J., 2017. Shear Rate Determination from Pore-Scale Flow Fields. *Transport in Porous Media*, 117(1), pp. 229-246.
- Bing, W., Laura, R.-Z. & Denis, R., 2013. Oil displacement mechanisms of viscoelastic polymers in enhanced oil recovery (EOR): a review. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, pp. 113-121.
- Blunt, M. J. et al., 2013. Pore-scale imaging and modelling. *Advances in Water Resources*, 51(1), p. 197–216.
- Bogdan, M. J. & Savin, T., 2018. Fingering instabilities in tissue invasion: an active fluid model. *Royal Society Open Science*, 5(1), pp. 1-15.
- Bresch, D. et al., 2010. Computational Modeling of Solid Tumor Growth: The Avascular Stage. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(4), p. 2321–2344.
- Bris, C. L. & Lelièvre, T., 2009. Multiscale Modelling of Complex Fluids: A Mathematical Initiation.. Dans: *Multiscale Modeling and Simulation in Science. Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Berlin: Springer, pp. 49-137.
- Broders-Bondon, F., Nguyen Ho-Bouloires, T. H., Fernandez-Sanchez, M.-E. & Farge, E., 2018. Mechanotransduction in tumor progression: The dark side of the force. *Journal of cell biology*, 217(5), p. 571–1587.

- Brooks, R. H. & Corey, A. T., 1964. *Hydraulic properties of porous media*. Fort Collins: Hydrology Papers, Colorado State University.
- Buckley, S. E. & Leverett, M. C., 1942. Mechanism of Fluid Displacement in Sands. *Transactions of the AIME*, 146(1), pp. 107-116.
- Byrne, H. & Preziosi, L., 2003. Modelling solid tumour growth using the theory of mixtures. *Mathematical Medicine and Biology*, 20(1), pp. 341-366.
- Cahn, J. W. & Hilliard, J. E., 1958. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *The Journal of Chemical Physics*, pp. 258-267.
- Chatelin, C., Balois, T., Ciarletta, P. & Ben Amar, M., 2011. Emergence of microstructural patterns in skin cancer: a phase separation analysis in a binary mixture. *New Journal of Physics*, 13(1), pp. 1-21.
- Chauveteau, G., 1986. Fundamental Criteria in Polymer Flow Through Porous Media. Dans: *Water-Soluble Polymers*. Washington: American Chemical Society, pp. 227-267.
- Chierici, G. L., 1984. *Novel Relations for Drainage and Imbibition Relative Permeabilities*. San Antonio, Society of Petroleum Engineers.
- Cho, K. C., 2016. *Viscoelasticity of Polymers*. Daegu: Springer.
- Clarke, A. et al., 2016. How Viscoelastic-Polymer Flooding Enhances Displacement Efficiency. *SPE Journal*, pp. 675-687.
- Cristini, V., Li, X., Lowengrub, J. S. & Wise, S. M., 2009. Nonlinear simulations of solid tumor growth using a mixture model: invasion and branching. *Journal of Mathematical Biology*, Volume 58, p. 723-763.
- De Boer, R., 2000. *Theory of Porous Media*. Berlin: Springer.
- de Gennes, P. G., 1981. Polymer Solutions near an Interface. 1. Adsorption and Depletion Layers. *Macromolecules*, 14(1), pp. 1637-1644.
- de Gennes, P. G., 1985. Wetting: statics and dynamics. *Review of Modern Physics*, 57(1), pp. 827-863.
- De Haan, H. J., 1995. *New Developments in Improved Oil Recovery*. London: Geological Society.
- Delarue, M. et al., 2014. Compressive Stress Inhibits Proliferation in Tumor Spheroids through a Volume Limitation. *Biophysical Journal*, 107(1), p. 1821-1828.
- De, S., Kuipers, A. M., Peters, E.-A. J.-F. & Padding, J. T., 2017. Viscoelastic flow simulations in model porous media. *Physical Review Fluids*, 2(1), pp. 1-21.
- De, S., Kuipers, J., Peters, E. & Padding, J., 2017. Viscoelastic flow simulations in random porous media. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pp. 50-61.
- Ding, H., Spelt, P. D.-M. & Shu, C., 2007. Diffuse interface model for incompressible two-phase flows with large density ratios. *Journal of Computational Physics*, 226(1), pp. 2078-2095.
- Douezan, S. et al., 2011. Spreading dynamics and wetting transition of cellular aggregates. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(18), p. 7315-7320.
- Duarte, A., Miranda, A. & Oliveira, P. J., 2008. Numerical and analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 154(1), p. 153-169.
- Durst, F., Haas, R. & Interhal, W., 1982. Laminar and turbulent flows of dilute polymer solutions: a physical model. *Rheologica Acta*, 21(1), pp. 572-577.
- Dusheck, J., 2012. Oncology: Getting physical. *Nature*, 491:(7425), pp. S50-1.

## Bibliographie

- Dye, A. L., McClure, J. E., Miller, C. T. & Gray, W. J., 2013. Description of non-Darcy flows in porous medium systems. *Physical Review E*, 87(033012), pp. 1-14.
- Fan, J. C. et al., 2018. Molecular mechanism of viscoelastic polymer enhanced oil recovery in nanopores. *Royal Society Open Science*, 5(180076), pp. 1-11.
- Fischer, T., Hayn, A. & Mierke, C. T., 2019. Fast and reliable advanced two-step pore-size analysis of biomimetic 3D extracellular matrix scaffolds. *Scientific Reports*, 9 (1), pp. 1-10.
- Fortin, M. & Guénette, R., 1995. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pp. 27-52.
- Fortin, M. & Pierre, R., 1989. On the convergence of the mixed method of Crochet and Marchal for viscoelastic flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pp. 341-350.
- Foty, A. R., Pflieger, M. C., Forgacs, G. & Steinberg, S. M., 1996. Surface tensions of embryonic tissues predict their mutual envelopment. *Development*, 122(1), pp. 1611-1620.
- Foty, R. A. & Steinberg, M. S., 2005. The differential adhesion hypothesis: a direct evaluation. *Developmental Biology*, 278(1), pp. 255-263.
- Frantz, C., Stewart, K. M. & Weaver, V. M., 2010. The extracellular matrix at a glance. *Journal of Cell Science*, 123(24), pp. 4195-4200.
- Freyer, J. & Sutherland, R., 1986. Regulation of growth saturation and development of necrosis in EMT6/Ro multicellular spheroids by the glucose and oxygen supply. *Cancer Res.*, 46(7), pp. 3504-12..
- Gonzalez-Rodriguez, D., Guevorkian, K., Douezan, S. & Brochard-Wyart, F., 2012. Soft Matter Models of Developing Tissues and Tumors. *Science*, 338(6109), pp. 910-917.
- Gray, W. G. & Miller, C. T., 2006. Thermodynamically constrained averaging theory approach for modeling flow and transport phenomena in porous medium systems: 3. Single-fluid-phase flow. *Advances in Water Resources*, 29(1), p. 1745–1765.
- Gray, W. G. & Miller, C. T., 2011. TCAT analysis of capillary pressure in non-equilibrium, two-fluid-phase, porous medium systems. *Advances in Water Ressources*, 34(6), pp. 770-778.
- Gray, W. G. & Miller, C. T., 2014. *Introduction to the Thermodynamically Constrained Averaging Theory for Porous Medium Systems*. Cham: Springer International Publishing.
- Groisman, A. & Steinberg, V., 2000. Elastic turbulence in a polymer solution Flow. *Nature*, 405(1), pp. 53-55.
- Gupta, R. K. & Sridahar, T., 1985. Viscoelastic effects in non-Newtonian flows through porous media. *Rheologica Acta*, 24(1), pp. 148-151.
- Hanahan, D. & Weinberg, R. A., 2000. The Hallmarks of Cancer. *Cell*, 100(1), pp. 57-70.
- Hanahan, D. & Weinberg, R. A., 2011. Hallmarks of Cancer: The Next Generation. *Cell*, 144(1), pp. 646-674.
- Hassanizadeh, S. M. & Gray, W. G., 1993. Thermodynamic Basis of Capillary Pressure in Porous Media. *Water Ressources Reasearch*, 29(10), pp. 3389-3405.
- Helmlinger, G. et al., 1997. Solid stress inhibits the growth of multicellular tumor spheroids. *Nat Biotechnol.*, 15(8), pp. 778-83.
- Homsy, G. M., 1987. Viscous Fingering in Porous Media. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 19(1), pp. 271-311.

- Hulsen, M. A., Fattal, R. & Kupferman, R., 2005. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high Weissenberg number: Stabilized simulations using matrix logarithms. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, pp. 27-39.
- Hulsen, M., van Heel, A. & van den Brule, B., 1997. Simulation of viscoelastic flows using Brownian configuration fields. *Journal of non-Newtonian Fluid Mecanics*, pp. 79-101.
- Jacqmin, D., 1999. Calculation of Two-Phase Navier–Stokes Flows Using Phase-Field Modeling. *Journal of Computational Physics*, 155(1), p. 96–127.
- Jacqmin, D., 2000. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interphace. *Journal of Fluid Mechanics*, pp. 57-88.
- Jain, R. K. & Martin, J. D. S. ., T., 2014. The role of mechanical forces in tumor growth and therapy. *Annu Rev Biomed Eng.*, 1(16), p. 321–346.
- Jakson, A. S., Miller, C. T. & Gray, W. G., 2009. Thermodynamically constrained averaging theory approach for modeling flow and transport phenomena in porous medium systems: 6. Two-fluid-phase flow. *Advances in Water Resources*, 32(6), pp. 779-795.
- Jonietz, E., 2012. The forces of cancer. *Nature*, 491(1), pp. 56-57.
- Juarez Morejon, J. L., 2017. *Récupération assistée du pétrole par injection de polymères hydrosolubles : nouvelle approche*, Bordeaux: s.n.
- Kim, J., 2005. A continuous surface tension force formulation for. *Journal of Computational Physics*, p. 784–804.
- Lasseux, D., Ahmadi, A. & Ali Akbar, A. A., 2008. Two-phase inertial flow in homogeneous porous media: A theoretical derivation of a macroscopic model. *Transport in Porous Media*, 75(3), pp. 371-400.
- Lasseux, D., Quintard, M. & Whitaker, S., 1996. Determination of Permeability Tensors for Two-Phase Flow in Homogeneous Porous Media. *Transport in Porous Media*, 24(1), pp. 107-137.
- Lasseux, D., Valdés-Parada, F. J. & Bellet, F., 2019. Macroscopic model for unsteady flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 862(1), pp. 283-311.
- Le Maout, V. et al., 2020. Role of mechanical cues and hypoxia on the growth of tumor cells in strong and weak confinement: A dual in vitro–in silico approach. *Science Advances*, 6(13), pp. 1-15.
- Lecuit, T. & Lenne, P.-F., 2007. Cell surface mechanics and the control of cell shape, tissue patterns and morphogenesis. *Nature Reviews Molecular Cell Biology volume*, 1(8), pp. 633-644.
- Lee, D. et al., 2014. Physical, mathematical, and numerical derivations of the Cahn–Hilliard equation. *Computational Materials Science*, pp. 2016-225.
- Lomeland, F. & Ebeltof, A., 2008. *A New Versatile Capillary Pressure Correlation*. Abu Dhabi, s.n.
- Lomeland, F., Ebeltoft, E. & Thomas, W., 2005. *A New Versatile Relative Permeability Correlation*. Toronto, Conference: SCA Symposium.
- Lopes, L. F., Silveira, M. O. & Moreno, Z. L., 2014. Rheological Evaluation of HPAM fluids for EOR Applications. *International Journal of Engineering & Technology*, 14(3), pp. 35-41.
- Luévano-Rivas, O. A. & Valdés-Parada, F. J., 2015. Upscaling immiscible two-phase dispersed flow in homogeneous porous media :A mechanical equilibrium approach. *Chemical Engineering Science*, 126(1), pp. 116-131.
- Marshall, R. J. & Metzner, B., 1967. Flow of Viscoelastic Fluides Thorough Porous Media. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6(3), pp. 393-400.

## Bibliographie

- Mckee, F., 2013. *Etude de la mise à l'échelle des écoulements diphasiques en milieux hétérogènes par une approche d'optimisation*, Nantes: s.n.
- Michor, F., Liphardt, J., Ferrari, M. & Widom, J., 2013. What does physics have to do with cancer?. *Nat Rev Cancer*, 11(9), p. 657–670.
- Miller, A. S. & Gray, W. G., 2009. Thermodynamically constrained averaging theory approach for modeling flow and transport phenomena in porous medium systems: 3. Single-fluid-phase flow. *Advances in Water resources*, 29(11), pp. 1745-1765.
- Miller, A. S. & Grey, W. G., 2009. Thermodynamically constrained averaging theory approach for modeling flow and transport phenomena in porous medium systems: 5. Single-fluid-phase transport. *Advances in Water Resources*, 32(5), pp. 681-711.
- Needham, R. B. & Doe, P. H., 1987. Polymer Flooding Review. *Journal of Petroleum Technology*, pp. 1503-1507.
- Nematbakhsh, Y., Pang, K. T. & Lim, C. T., 2017. Correlating the viscoelasticity of breast cancer cells with their malignancy. *Convergent Science Physical Oncology*, 3(1), pp. 1-11.
- Nield, D. A. & Bejan, A., 2017. *Convection in porous media*. New York: Springer.
- Northcott, J. M., Dean, I. S., Mouw, J. K. & Weaver, V. M., 2018. Feeling Stress: The Mechanics of Cancer Progression and Aggression. *Frontiers in Cell and Developmental Biology*, 1(6), p. 17.
- Oden, J. T., Hawkins, A. & Prudhomme, S., 2010. General diffuse-interface theories and an approach to predictive tumor growth modeling. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 20(3), pp. 477-517.
- Oldroyd, J. G., 1950. On the Formulation of Rheological Equations of state. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, pp. 523-551.
- Olmeda, F. & Ben Amar, M., 2019. Clonal pattern dynamics in tumor: the concept of cancer stem cells. *Scientific Reports*, 9(15607), pp. 1-18.
- Oswald, P., 2005. *Rhéophysique*. Paris: Belin.
- Pasquier, S., Quintard, M. & Davit, Y., 2017. Modeling two-phase flow of immiscible fluids in porous media: Buckley-Leverett theory with explicit coupling terms. *Physical Review Fluids*, 2(10), pp. 104101/1-104101/19.
- Pinilla, J., Bruneau, C.-H. & Tancogne, S., 2016. Front-tracking by the level-set and the volume penalization methods in a two-phase microfluidic network. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, pp. 23-52.
- Pisani, L., 2011. Simple Expression for the Tortuosity of Porous Media. *Transport in Porous Media*, 88(1), pp. 193-203.
- Poole, R. J., 2012. The Deborah and Weissenberg numbers. *Rheology Bulletin*, 53(2), pp. 32-39.
- Qi, P., Ehrenfried, D. H., Koh, H. & Balhoff, M. T., 2017. *Reduction of Residual Oil Saturation in Sandstone Cores by Use of Viscoelastic Polymers*. Tulsa, s.n.
- Reiner, M., 1964. The Deborah Number. *Physic Today*, 17(1), pp. 62-63.
- Sciumè, G., Ferrari, M. & Schrefler, B. A., 2014. Saturation–pressure relationships for two- and three-phase flow analogies for soft matter. *Mechanics Research Communications*, 62(1), pp. 132-137.
- Sciumè, G. et al., 2013. A multiphase model for three-dimensional tumor growth. *New Journal of Physics*, Volume 15, p. 015005.

- Seright, R. S., Tianguang, F., Wavrik, K. & de Carvalho, R., 2011. New insights into polymer rheology in porous media. *SPE Journal*, 16(1), pp. 35-42.
- Sheng, J. J., Bernd, L. & Azri, N., 2015. Status of Polymer-Flooding Technology. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, pp. 116-126.
- Sheng, J. J., Leonhardt, B. & Azri, N., 2015. Status of Polymer Flooding Technology. *Journal of Canadian Petroleum Technology*, 54(2), pp. 116-126.
- Sigmund, P. M. & McCaffery, F. G., 1977. *An Improved Unsteady-State Procedure for Determining the Relative-Permeability Characteristics of Heterogeneous Porous Media*. Denver, Society of Petroleum Engineers.
- Skauge, A. et al., 2018. Polymer Flow in Porous Media: Relevance to Enhanced Oil Recovery. *Colloids and Interfaces*, pp. 1-27.
- Sorbie, K. S., 1991. *Polymer-Improved Oil Recovery*. Edinburgh: Springer Science.
- Sousa, P. C., Pinho, F. T. & Alves, M. A., 2018. Purely-elastic flow instabilities and elastic turbulence in microfluidic cross-slot devices. *Soft Matter*, pp. 1344-1354.
- Spagnolie, S. E., 2015. *Complex Fluids in Biological System*. New York: Springer.
- Steinberg, M. S., 2007. Differential adhesion in morphogenesis: a modern view. *Curr Opin Genet Dev.*, 17(4), pp. 281-6.
- Streitberger, K.-J. et al., 2020. How tissue fluidity influences brain tumor progression. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(1), pp. 128-134.
- Sutherland, R. M., 1988. Cell and Environment Interactions in Tumor Microregions: The Multicell Spheroid Model. *Science*, 240(4849), pp. 177-184.
- Takada, Y., Sato, T. & Teramoto, A., 1991. Dynamics of Stiff-Chain Polymers in Isotropic Solution. 2. Viscosity of Aqueous Solutions of Xanthan, a Rigid Double-Helical Polysaccharide. *Macromolecules*, 24(1), pp. 6215-6219.
- Tyssee, D. A. & Vetter, O. J., 1981. Chemical Characterization Problems of Water-Soluble Polymers. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 21(6), pp. 721-730.
- Van der Waals, J. D., 1979. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. *Journal of Statistical Physics*, 20(2), pp. 200-244.
- Vermolen, E. C. M., van Haarstrecht, M. J. T. & Masalmeh, S. K., 2014. *A Systematic Study of Polymer Visco-Elastic Effect on Residual Oil Saturation by Core Flooding*. Muscat, Society of Petroleum Engineers, pp. 1-14.
- Wang, D., Xia, H., Liu, Z. & Yang, Q., 2001. *Study of the Mechanism of Polymer Solution With Visco-Elastic Behavior Increasing Microscopic Oil Displacement Efficiency and the Forming of Steady "Oil Thread" Flow Channels*. Jakarta, Society of Petroleum Engineers Inc., pp. 1-9.
- Wang, D., Yang, S. & Wang, G., 2010. *The Influence of Viscoelasticity on Micro Forces and Displacement Efficiency in Pores, Cores and in the field*. Oman, s.n.
- Wei, B., Roméo-Zeron, L. & Rodrigue, D., 2013. Oil displacement mechanisms of viscoelastic polymers in enhanced oil recovery (EOR): a review. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, pp. 113-121.
- Weissenberg, K., 1947. A Continuum Theory of Rheological Phenomena. *Nature*, pp. 310-311.
- West, A. et al., 2017. Dynamics of cancerous tissue correlates with invasiveness. *Scientific reports*, 7(43800), pp. 1-11.

## Bibliographie

- Whitaker, S., 1986. Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law. *Transport in Prous Media*, 3(1), pp. 3-25.
- Whitaker, S., 1996. Flow in Porous Media II: The Governing Equations for Immiscible, Two-Phase flow. *Transport in Porous Media*, 25(1), pp. 27-61.
- Whitaker, S., 1996. The Forchheimer Equation: A Theoretical Development. *Transport in Porous Media*, 25(1), pp. 27-61.
- Wise, S. M., Lowengrub, J. S., Frieboes, H. B. & Cristini, V., 2008. Three-dimensional multispecies nonlinear tumor growth–I. Model and numerical method. *Journal of Theoretical Biology*, 253(3), p. 524–543.
- World Health Organization, 2014. *Global status report on noncommunicable diseases 2014*, Geneva: WHO Library.
- Wörner, M., 2012. Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications. *Microfluidics and Nanofluidics*, pp. 841-886.
- Yankeelov, T. et al., 2016. Multi-scale Modeling in Clinical Oncology: Opportunities and Barriers to Success. *Ann Biomed Eng.*, 44(9), pp. 2626-41.
- Yankeelov, T. E. et al., 2014. Clinically Relevant Modeling of Tumor Growth and Treatment. *Science Translational Medicine*, 5(187), pp. 1-10.
- Yin, H. G. et al., 2012. *Flow Characteristics of Viscoelastic Polymer Solution in Micro-Pores*. Muscat, s.n.
- Zami-Pierre, F., de Loubens, R., Quintard, M. & Y., D., 2017. Polymer Flow Through Porous Media: Numerical Prediction of the Contribution of Slip to the Apparent Viscosity. *Transport in Porous Media*, 119(3), pp. 521-538.
- Zhang, D., Zhang, G., Chen, S. & Soll, W. E., 2000. Pore Scale Study of flow in porous media: Scale dependency, REV, and statistical REV. *Geophysical Research Letter*, 27(8), pp. 1195-1198.
- Zhang, L.-j. & Yue, X.-a., 2008. Displacement of polymer solution on residual oil trapped in dead ends. *Journal of Central South University of Technology*, pp. 84-87.
- Zhang, M., Zhang, L., Jiang, B. & LI, X., 2008. Rheological properties of salt-tolerant HPAM solutions with ultrahigh molecular weight. *Journal of Central South University*, 15(1), pp. 93-97.
- Zhao, J. & Dongsheng, W., 2017. Pore-scale simulation of wettability and interfacial tension effects on flooding process for enhanced oil recovery. *RSC Advances*, p. 41391–41398.
- Zirnsak, M. A., Boger, D. V. & Tirtaatmadja, V., 1999. Steady shear and dynamic rheological properties. *Journal of Rheology*, 43(1), pp. 627-650.