

PROPOSITION DE SUJET DE THÈSE

Contrats Doctoraux 2018-2021

Appel ciblé

Contrat doctoral ministériel **ED 536**

Encadrement

Directeur de thèse : Philippe BELTRAME

Co-Encadrement : Stéphane SAMMARTINO et Eric MICHEL

email: philippe.beltrame@univ-avignon.fr Tél. : +33(4) 90 14 44 25

Pas de co-tutelle.

Titre en français

Modèles et analyse des dynamiques d'infiltration dans des milieux à double porosité : application aux mésopores

Mots-clés : Milieux poreux, Mésopores, micro-fluidique, mouillabilité, interfaces, dynamiques non-linéaires, méthodes de continuation, bifurcations, analyse numérique.

Titre en anglais

Modelling and analysis of infiltration dynamics in dual-porosity media: application to mesopores

Keywords: Porous media, mesopore, microfluidics, wettability, interfaces, non-linear dynamics, path-following method, bifurcations, numerical analysis.

Opportunités de mobilité à l'international du doctorant dans le cadre de sa thèse : **oui**

Profil du candidat

La candidate ou le candidat doit avoir un master M2 ou équivalent en sciences physiques ou mathématiques appliquées. Il est nécessaire d'avoir des connaissances soit en mécanique des fluides, soit en physique de la matière condensée et une expérience dans la simulation numérique. Des compétences dans les dynamiques non-linéaires (bifurcations, continuation, chaos...) seront grandement appréciées mais ne sont pas requises. Enfin, elle/il doit avoir un goût pour les applications environnementales ainsi qu'une capacité à évoluer dans un environnement pluridisciplinaire.

Candidate profile

The candidate should hold a master degree in physics, computational sciences, or applied mathematics. Basics knowledge either in Fluid Mechanics or in Condensed Matter and a previous experience of numerical simulation are required. Abilities in non-linear dynamics, e.g. bifurcations, continuation, chaos..., would be highly appreciated but not mandatory. Finally, she/he must have a taste for environmental applications as well as an ability to evolve in a multidisciplinary environment. Good oral and written command in English or French is required.

Présentation détaillée du sujet

La compréhension des écoulements d'eau dans les milieux poreux hétérogènes tels que les sols est au centre de nombreux enjeux tels que l'irrigation optimale des cultures ou la gestion de la ressource en eau autant d'un point de vue quantitatif que qualitatif. En effet, le transport de contaminants est fortement lié aux processus de l'écoulement d'eau. Les phénomènes de transport ou stockage dans la porosité ne sont pas identiques suivant la taille des pores. Ainsi, la porosité creusée par les lombrics vont être des voies de transport rapide des écoulements, appelés écoulements préférentiels [12], contrairement à la microporosité qui jouera un rôle de filtre des colloïdes. Les processus physiques mis à l'oeuvre dans l'infiltration sont très peu connus, notamment la macroporosité « active » durant un écoulement et également les mécanismes d'échanges à l'interface des macropores [10]. Dans une récente thèse [15], des avancées sur les modèles dits à double compartiment ont été réalisées grâce notamment à des innovations en imagerie.

Néanmoins, très peu est connu concernant l'influence d'une galerie de mésopores, c'est-à-dire des pores d'un diamètre en deçà du millimètre, typiquement quelques centaines de microns. De telles galeries peuvent être creusées par des petits vers de terre, appelés enchytréides. Omniprésents dans de nombreux sols leur rôle dans le fonctionnement des agroécosystèmes est l'objet d'étude actuels [1]. Néanmoins, il n'existe, à notre connaissance, aucune étude spécifique, de l'effet des galeries creusées par les enchytréides dans les flux d'eau.

La modélisation des flux dans ce contexte soulèvent plusieurs questions.

Premièrement, les écoulements dans les macropores sont habituellement décrits par modèles phénoménologiques tels les modèles à double porosité ou les ondes dispersives [17, 7]. Néanmoins, d'une part, la nature des écoulements ne fait pas consensus dans la littérature [14, 6], et d'autre part, ces modèles ne sont pas nécessairement adapter aux faibles diamètres de pores.

Le second point concerne les échanges d'eau entre les mésopores et la matrice qui est encore peu comprise notamment en présence de matière organique sur les parois du mésopore lui conférant des propriétés hydrophobes. À ce jour, on ne dispose que peu de modèles décrivant la mouillabilité d'une surface poreuse. Les difficultés principales à sa description sont sa dépendance en teneur en eau dans la matrice et les effets d'hystérésis au niveau de l'infiltration. C'est donc un phénomène essentiellement dynamique et hors-équilibre.

Dans cette thèse nous proposons une approche hydrodynamique incluant les propriétés physico-chimiques liées à la mouillabilité à l'échelle du mésopore couplée avec des modèles de transfert dans la micro-porosité qui tiennent compte aussi de la mouillabilité. Les équations aux dérivées partielles régissant la dynamique de films fins d'eau sont connus pour reproduire des phénomènes dynamiques hors-équilibres au-delà de la relaxation [18]. En effet, l'étude d'un écoulement de film fins de liquide dans un microtube a révélé des dynamiques complexes avec des multiples régimes d'écoulement qui peuvent co-exister que ce soit sous forme de films fins, de ruisselets ou de gouttelettes [5, 3]. Ces régimes déterminent l'impact de défauts topographiques ou physico-chimiques sur l'écoulement et donc nous permettent de prédire l'intermittence de l'écoulement. De tels phénomènes ne sont pas captés par les modèles actuels la littérature.

Nous avons de même, au sein du laboratoire, développé des modèles de transfert dans la microporosité qui simulent des phénomènes d'intermittence, d'hystérésis et fragmentation du front. En fait, ces équations non-linéaires de type lubrification avec une fonctionnelle d'énergie traduisant les interactions fluide avec structure porale sont connues pour pour capturer ces dynamiques non-linéaires complexes.

Ainsi, les écoulements dans les mésopores et les échanges avec la micro-porosité seront explorés dans le domaine de paramètres à l'aide d'outils de systèmes dynamiques tels que l'analyse des bifurcations, continuation des états stationnaires, périodiques dans l'espace des paramètres etc... Les régimes obtenus ne sont plus un a priori comme les modèles de la littérature mais résultent de phénomènes non-linéaires.

La finalité de cette thèse est de fournir les digrammes de phases, c'est-à-dire une vision des régimes d'écoulement dans le plan des paramètres. Notez que dans de tels diagrammes, plusieurs régimes peuvent coexister incluant ainsi des phénomènes d'hystérèse.

Cette analyse s'effectuera sur des géométries de complexité croissante. Après avoir adapté les codes existants au problème actuel, une première étape, consistera à analyser la dynamique d'un mésopore isolé, homogène puis hétérogène, dans la matrice poreuse. Une seconde étape concerne la manière dont l'écoulement s'effectue entre deux mésopores connectés ou voisins. En effet, s'il existe de nombreuses études sur la percolation d'un réseau de macropores, elles modélisent pas la manière dont la connexion du flux s'effectue entre deux mésopores.

Les diagrammes de régime de fonctionnement nous ouvriront la voie d'un modèle macroscopique d'un réseau de mésopore.

En outre de cette exploration des dynamiques non-linéaires, les résultats seront corroborés ou infirmés par l'expérience qui se déroulera avec l'appui de l'équipe DISCOVE¹ qui depuis plusieurs années utilise et développe des techniques de tomographie à Rayons X ou à Neutrons dans le contexte du sol [15]. Capturer la dynamique au coeur de l'écoulement par l'imagerie constituerait un outil performant et novateur pour améliorer les modèles et estimer les paramètres des modèles.

Domaine / Thématique

Le domaine de la thèse s'inscrit dans la problématique du transfert de masse en milieux poreux. L'UMR EMMAH a une expertise dans le domaine de transfert dans les sols insaturés tant au niveau de l'imagerie [16, 15] que dans les modèles déterministes [3, 2] ou encore stochastiques [9, 13]. Le sujet s'intègre donc dans les axes de recherche actuels de l'Unité et constitue un élément clé de la compréhension du transfert.

Pour aborder la question des écoulements, les travaux de thèse font appel à la théorie du mouillage dans des milieux complexes, c'est-à-dire des milieux hétérogènes où les interfaces entre les phases du milieu jouent un rôle prédominant. Ces modèles font intervenir une fonctionnelle d'énergie liée aux énergies de surface qui est à l'origine d'instabilité du front d'écoulement et de sa complexité spatiale et temporelle résultante. D'autre part, les aspects non-linéaires de l'écoulement à surface libre sont primordiaux pour comprendre les mécanismes hors-équilibres.

Ce sont des ingrédients analogues qu'on retrouve dans la modélisation de la dynamique de séparation de phases dans les milieux dilués et la matière condensée où les équations d'Allen-Cahn et Cahn-Hilliard [18] sont l'analogie des équations de type lubrification ou de Darcy-Richards avec mouillabilité [2] utilisées dans notre contexte.

Les équations d'évolution temporelle gouvernant la teneur en eau sont connues pour fournir un grand nombre de scénarios d'écoulements tels que l'intermittence du flux, la fragmentation du front, les phénomènes d'hystérèse. Nous employons des techniques liées à l'étude de systèmes dynamiques que sont la continuation d'états, l'analyse des instabilités et des bifurcations résultantes. Cette méthode s'est révélée particulièrement efficace dans des situations analogues [3, 8]. Cette démarche pour analyser les dynamiques dans un milieu complexe est une méthode à la pointe dont l'Unité a été l'un des précurseurs [4, 5].

Objectif

La finalité des travaux de thèse est de fournir une vue aussi complète que possible des régimes de fonctionnement du transfert d'eau dans des milieux poreux en présence de mésopores. Notamment, la détection d'effets d'hystérésis ou d'immobilisation d'eau, d'intermittences... et les mettre en lien avec les processus à l'échelle mesoscopique. Ces informations sont des indicateurs cruciaux sur le transport des colloïdes ou au contraire leur possible piégeage dans la matrice.

De plus, cette compréhension des comportements non-linéaires des flux pourra être couplée à des approches stochastiques de percolation ou de marche au hasard ouvrant la voie à une modélisation adaptée au contexte naturel d'un sol en présence d'enchytréides. L'équipe DISCOVE travaille sur la caractérisation statistique des galeries contruites par les enchytréide. Le couplage d'un tel modèle avec les résultats de l'analyse non-linéaire de phénomènes hydrodynamiques et physico-chimiques serait une approche particulièrement et transposable à un large spectre de problèmes dans les milieux naturels [11].

1. Dynamique des Interactions dans les Sols : Contaminants, Organismes Vivants et Eau

Finally, the results could be integrated into the Sol Virtual modeling platform. This platform from INRAE is developed at UMR EMMAH. It aims to favor the coupling of models allowing the modeling of soil functioning in its physical, chemical and biological components. It already has a national reach (it is part of the ANAEE-Services project) and European.

Contexte et enjeux

The general context of the thesis is inscribed in the critical environmental questions of soil durability, water management in quantity and quality, biodiversity (meso and macro-organisms of soil) and agricultural practices (chemical risks, microbial). More precisely, the DISCOVE team, in interaction with the SWIFT² team, focuses on the role played by soil as a support of agriculture and a water filter, affecting the quality of water resources by studying complementary models of biological processes with physical processes. Notably, one of the domains of expertise and innovation is the understanding of the impact of earthworms and enchytraeids on soil structure and its consequences in terms of water flux, colloids and contaminants.

The understanding and prediction of flow phenomena in the presence of fauna and therefore of macropores or mesopores is a major issue. However, due to their intermittent, localized nature in space, the observation of flow heterogeneities is difficult to capture. Modeling is then a necessary tool. The processes of flows, such as preferential transports, the mechanisms of exchanges between different porosities linked to the initial porous structures, are still phenomena that are not well understood and which impact a large spectrum of the soil science domain.

The first issue of modeling lies in the taking into account of effective interactions between water and the porous matrix, organic matter, that is to say the effects of wetting, in a non-equilibrium context. A second issue is the comparison with experience and the evidence of mesoscopic phenomena that predict the models. However, we have theoretical, numerical and experimental tools at the forefront in current research in the SWIFT and DISCOVE teams. Thus, the work of theses that combine theoretical models on the taking into account of wettability and an experience at the forefront of soil imaging techniques are inscribed in a new approach both on the theme and on the tools used.

Bibliographie

- [1] J. Amossé, S. Bart, F. Brulle, C. Tebby, R. Beaudouin, S. Nélieu, I. Lamy, A. Péry, et C. Pelosi. A two years field experiment to assess the impact of two fungicides on earthworm communities and their recovery. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 203:110979, 2020.
- [2] P. Beltrame. *Les sols au coeur de la zone critique*, chapitre Mouillabilité, pages 49–78. Éditions ISTE, 2018.
- [3] P. Beltrame. Partial and complete wetting in micro-tube. *Europhys. Lett.*, 121:64002, 2018.
- [4] Ph. Beltrame et U. Thiele. Time integration and steady-state continuation for 2d lubrication equations. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 9:484–518, 2010.
- [5] Philippe Beltrame, Edgar Knobloch, Peter Hänggi, et Uwe Thiele. Rayleigh and depinning instabilities of forced liquid ridges on heterogeneous substrates. *Phys. Rev. E*, 83(1):16305, Jan 2011.
- [6] Keith Beven et Peter Germann. Macropores and water flow in soils revisited. *Water Resources Res.*, 49:3071–3092, 2013.
- [7] L. Di Pietro, S. Ruy, et Y. Capowiez. Predicting water flow in soils by traveling-dispersion waves. *J. Hydrol.*, 278:64–75, 2003.
- [8] S. Engelnkemper, S. V. Gurevich, H. Uecker, D. Wetzel, et U. Thiele. Continuation for thin film hydrodynamics and related scalar problems. *Computational Methods in Applied Sciences*, 2019.
- [9] Maminirina Joelson, Jacques Golder, Philippe Beltrame, Marie-Christine Néel, et Liliana Di Pietro. On fractal nature of groundwater level fluctuations due to rainfall process. *Chaos, Solitons & Fractals*, 82:103–115, 2016.
- [10] S. Katuwal, T. Norgaard, P. Molrup, M. Lamande, D. Wildenschild, et L. W. de Jonge. Linking air and water transport in intact soils to macropore characteristics inferred from x-ray computed tomography. *Geoderma*, 237:9–20, 2015.
- [11] A. A. Keller et S. Sirivithayapakorn. Transport of colloids in unsaturated porous media: explaining large-scale behavior based on pore-scale mechanisms. *Water Resour. Res.*, 40:0, 2004.
- [12] Anne-Sophie Lissy. *Imagerie quantitative non invasive et expérimentation pour l'intégration des phénomènes d'écoulement non - uniforme dans les modèles de transfert de masse en milieux poreux hétérogènes - Application aux sols structurés*. PhD thesis, Avignon University, Avignon, 2019.

- [13] B.S. Maryshev, T.P. Lyubimova, D.V. Lyubimov, et M.-C. Néel. Discretization of an admixture flux within the framework of the fractal model of anomalous diffusion. *Fluid Dynamics*, 46(1):148–157, 2011.
- [14] John R. Nimmo. Theory for source-responsive and free-surface film modeling of unsaturated flow. *Vadose Zone J.*, 9(2):295–306, 2010.
- [15] S. Sammartino, A. Lissy, C. Bogner, R. Van Den Bogaert, Y. Capowiez, S. Ruy, et S. Cornu. Identifying the functional macropore network related to preferential flow in structured soils. *Vadose Zone J.*, 14(10), 2015.
- [16] S. Sammartino, E. Michel, et Y. Capowiez. A novel method to visualize and characterize preferential flow in undisturbed soil cores by using multislice helical ct. *Vadose Zone Journal*, 11(1), 2012.
- [17] J. Simůnek, J. Jarvis, M. Th. van Genuchten, et A. Gärdenäs. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology*, 272:14–35, 2003.
- [18] U. Thiele. Recent advances in and future challenges for mesoscopic hydrodynamic modelling of complex wetting. *Colloids and Surfaces A*, 553:487–495, 2018.