

**DOSSIER UNIQUE DE CANDIDATURE
A UNE ALLOCATION DE RECHERCHE
POUR LA RENTREE 2017**

Dossier complété et revêtu des signatures à transmettre impérativement pour le :
15 décembre 2016 17h00, au plus tard,
au Service Recherche et Valorisation de la Recherche
secretariat.recherche@univ-littoral.fr

Titre de la thèse : Modélisation du transfert des nitrates et/ou des pesticides vers les réserves en eau potables

Laboratoire d'accueil ULCO : LMPA

Priorité du laboratoire, tous supports de financements confondus : 2

Directeur de thèse ULCO : Rosier Carole

Merci de renseigner l'ensemble des demandes de financements envisagées pour ce sujet (NB : Les demandes peuvent porter sur plus de deux cofinanceurs envisagés):

Région 50 % (Dans ce cas, ne pas oublier de remplir également le dossier « Région »)

PMCO 50 %

ULCO 50 %

ULCO 100 %

ADEME 50 %

ADEME 100 %

Dispositif AUF/CNRS Libanais / Université Libanaise 100 %

Pour ce dispositif, merci d'indiquer en plus :

- partenaire étrangers si identifié (noms de la structure de recherche et du codirecteur étranger) :

Jazar Mustapha, Université Libanaise.

- Thématique : (5) gestion et le traitement des déchets

Autre Financeur 50 %, préciser le financeur :

Autre Financeur 100 %, préciser le financeur :

***LABORATOIRE D'ACCUEIL**

Nom du laboratoire d'accueil : LMPA

Nombre de HDR dans le laboratoire : 19

Nombre de thèses encadrées dans le laboratoire (rentrée 2014) : 10

Durée moyenne des thèses soutenues dans le laboratoire, sur la période 2010-2014 :
3 ans et 5 mois

ENCADREMENT

Nom, Prénom du directeur de laboratoire : Eliahou Shalom

Nom, Prénom du directeur de thèse (si différent du directeur de laboratoire) :

Rosier carole

Nombre de doctorats en préparation sous la direction du directeur de thèse : 1,5

Avis détaillé du directeur de thèse :

L'originalité de ce travail consiste en le couplage :

1) d'un modèle 2D up-scalé décrivant l'écoulement polyphasique dans un aquifère libre ainsi que les échanges des eaux souterraines avec les eaux de surface avec :

2) des systèmes de chimie cinétique et des systèmes de chimie à équilibre instantané. Les 2 points ont été étudiés séparément dans des travaux antérieurs; ils font appel à des techniques mathématiques et numériques très différentes (liées à la théorie des équations aux dérivées partielles pour le premier point et à la résolution d'équations différentielles ordinaires ainsi qu' à la résolution de systèmes linéaires et non linéaires de grande taille pour le second). Nous proposons d'étudier dans cette thèse le modèle mathématique résultant du couplage du modèle de transport avec celui décrivant la chimie liée à des problématiques environnementales fortes telles que le transfert des nitrates et/ou des pesticides vers les réserves en eau potable.

Puis nous adapterons à notre cas les techniques numériques existantes, en particulier celles concernant la résolution numérique de systèmes linéaires et non linéaires de grande taille, la difficulté majeure étant à présent de prendre en compte la complexité de la chimie.

La mise en oeuvre numérique nécessitera l'utilisation d'ordinateurs performants.

Signature du directeur de thèse

Carole Rosier

Avis détaillé du directeur de laboratoire :

Ce projet de thèse s'inscrit dans la continuité des remarquables travaux de recherche réalisés depuis plusieurs années par la professeure Carole Rosier au sein du LMPA avec des collègues locaux et d'ailleurs, des doctorants et des post-doctorants. Il fait appel à la modélisation mathématique et à l'analyse théorique, s'inscrit dans une thématique très importante pour deux des quatre équipes du LMPA, et concerne de près des problématiques environnementales, une priorité pour l'ULCO. De plus, le financement côté Liban est déjà acquis, ainsi que la doctorante qui développera ce projet de thèse. Il est donc prioritaire pour le LMPA. Son classement en numéro 2 reflète uniquement le fait que son financement est déjà acquis.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'S. Elidou'. The signature is fluid and cursive, with a small dot above the 'i'.

Signature du directeur de laboratoire

PROJET DE THESE

Intitulé du projet de thèse : **Modélisation du transfert des nitrates et/ou des pesticides vers les réserves en eau potables**

Domaine scientifique : Mathématiques appliquées

Résumé (1/2 page maxi.) :

Ce travail consiste en la modélisation mathématique et numérique d'un problème couplé transport/ chimie décrivant le transfert de nitrate et/ou pesticides vers les réserves en eau potable.

La partie transport sera décrite par un système 2D fortement couplé d'équations paraboliques quasi-linéaires et la partie chimie par des systèmes couplés d'équations différentielles ordinaires et des systèmes linéaire et/ou non-linéaires de grande taille.

La stratégie générale de notre approche consiste à :

- obtenir un modèle 3D avec termes d'échelle physiquement réalistes et procéder à son upscaling pour lui substituer rigoureusement un modèle plus manipulable numériquement couplé à un modèle gouvernant l'erreur en fonction des échelles considérées (analyse asymptotique) ;
- mettre au point des algorithmes de calcul insérant directement la stratégie ci-dessus pour pouvoir être implantés dans des codes classiques ;
- réaliser des premiers tests numériques par rapport à des données terrain ;
- tester la fiabilité en temps long de l'approche sur un algorithme de gestion économique de la ressource en eau.

Projet de thèse (5 pages maxi.) :

Développer sur cinq pages :

§ **Le sujet de recherche choisi et son contexte scientifique**

§ **L'état du sujet dans le laboratoire et l'équipe d'accueil**

§ **Le programme et l'échéancier de travail**

§ **Les retombées scientifiques et économiques attendues**

§ **Les collaborations prévues et une liste de 10 publications maximum portant directement sur le sujet**

Dans le cas d'une demande PMCO, préciser en quoi les travaux menés au cours de la thèse répondent aux problématiques des territoires du littoral Côte d'Opale

§ **Le sujet de recherche choisi et son contexte scientifique**

Notre ambition est de développer une méthodologie de modélisation permettant d'exploiter les contrastes d'échelles et les upscalings correspondant pour obtenir des modèles efficaces, à la fois au sens du réalisme et de l'efficacité numérique, et ce sans découpler le transport de la bio-géo-chimie.

Le nombre de pages limité d'un tel dossier interdit bien sûr de faire l'état de l'art de tous les résultats de modélisation (physique, mathématique, numérique...) obtenus sur le sujet. Il existe une abondante littérature sur chacun des processus en jeu, si bien qu'on peut considérer que la modélisation « réaliste » visée ci-dessus existe en fait déjà. Considérons cependant une configuration simple. L'écoulement de fluides miscibles dans un milieu poreux 3D non saturé est gouverné par un système d'équations aux dérivées partielles fortement couplées, non linéaires de type parabolique dégénéré. En effet, si l'on considère une nappe libre, il faut faire face à la disparition progressive de l'eau dans la zone de désaturation et donc à la disparition d'une inconnue, la saturation en eau, et ce même en utilisant des modèles simplifiés comme celui de Richards. Numériquement, des simulations sur de tels modèles sont très lourdes, aujourd'hui encore, en terme de coût de calcul. De plus, elles génèrent une importante diffusion numérique, en particulier dans les zones de transition, par exemple la transition zone saturée - zone désaturée (ou la transition eau salée - eau douce en cas de salinisation).

Notre ambition est donc de développer une méthodologie permettant d'exploiter les contrastes d'échelles et les upscalings correspondant pour obtenir des modèles efficaces, à la fois au sens du réalisme et de l'efficacité numérique. Dans cet esprit, ont été développés essentiellement depuis les années 60, un certain nombre de modèles 2D (voir les travaux de Jacob Bear par exemple). Ils sont basés sur trois hypothèses : une forme de stratification des écoulements qui autorise la définition d'interfaces, la lenteur de la dynamique naturelle qui assure que ces « interfaces » ont un comportement régulier et stable, et l'orthogonalité des flux aux épontes (hypothèse de Dupuit). La robustesse observée de ces hypothèses a conduit à ce qu'elles ne soient pas affinées (consulter les statistiques de citation de [1,2] est édifiant ; voir aussi [3]).

Cependant, ces hypothèses sont mises en défaut par toute dynamique plus rapide contraignant le système hydrologique, qu'elle soit induite par des phénomènes naturels (inondation...) ou des actions humaines (pompage, activités sur le bassin versant...). Il faut donc développer une **méthodologie de mise à l'échelle au-delà du premier ordre**.

D'un point de vue chimique et géo-chimique, les modèles actuels (CRUNCH, PHREEQC, CHESS, SPECY [4-7]) sont performants et permettent la prise en compte de très nombreux phénomènes chimiques, géochimiques et biologiques. Cependant, inclure un grand nombre d'espèces chimiques et une grande variété de phénomènes dans une modélisation induit inévitablement un coût en temps de calcul qui peut devenir prohibitif. De plus, si la problématique du couplage entre phénomènes chimiques et transport en milieu poreux a été largement étudiée [8], celle du couplage entre les deux formulations de la chimie : cinétique et équilibre instantané, constitue encore un verrou scientifique fort [9].

Pourtant, le suivi des problématiques environnementales fortes que sont le transfert des nitrates [10] et/ou des pesticides vers les réserves en eau potable nécessite une formulation chimique mixte : **équilibre et cinétique**. Le cycle de l'azote dans les eaux est largement contrôlé par des mécanismes biologiques (nitrification / dénitrification), que l'on doit décrire par cinétique chimique. Mais les microorganismes impliqués sont consommateurs de carbone, et, selon la teneur en oxygène du milieu

les voies métaboliques activées peuvent être aérobie, dénitrificatrice, mangano-réductrice, ferro-réductrice, sulfato-réductrice ou méthanogène. Oxygène, manganèse, fer, sulfate sont des éléments dont les interactions avec le fond géochimique sont classiquement décrites par équilibre instantané [11].

La structure stratifiée des écoulements évoquée précédemment peut être exploitée d'un point de vue bio-géo-chimique. A l'heure actuelle, les modèles numériques appliquent à l'ensemble du domaine décrit le même jeu de phénomènes bio-géo-chimique [4, 9-11], même si certains d'entre eux ne sont présents significativement que dans une partie du domaine modélisé. En développant des algorithmes capables d'inclure ou d'exclure des phénomènes chimiques, nous devrions obtenir des gains d'efficacité très significatif.

Références :

- [2] G. De Josselin de Jong, *The simultaneous flow of fresh and salt water in aquifers of large horizontal extension determined by shear flow and vortex theory*, Proc. of Euromech, 1981.
- [3] A.D. Werner et al, *Seawater intrusion processes, investigation and management: recent advances and future challenges*, Advances in Water Res., 2013, doi: 10.1016/j.advwatres.2012.03.004.
- [4] C.I. Steefel & P.C. Lichtner, *Multicomponent reactive transport in discrete fractures: I. Controls on reaction front geometry*. J. of Hydrology 209, 186-199, 1998.
- [5] D.L. Parkhurst & C.A.J. Appelo, *User's guide to PHREEQC (version 2)- A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations.*, Water-Resour.Invest., Editor, Denver, CO, USA. p. 312, 1999.
- [6] J. van der Lee et al., *Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC*. Computers & Geosciences, 29, 265-275, 2003.
- [7] J. Carrayrou, *Looking for some reference solutions for the reactive transport benchmark of MoMaS with SPECY*, Comput.Geosci. 14, 393-403, 2010.
- [8] J. Carrayrou, R. Mosé & Ph. Behra, *Efficiency of operator splitting procedures for solving reactive transport equation*, J. Contam. Hydrol. 68, 239-268, 2004.
- [9] C.I. Steefel, *New directions in hydrogeochemical transport modeling: Incorporating multiple kinetic and equilibrium reaction pathways*, Computational methods in water resources, 1, 331-338, 2000.
- [10] G. Langergraber & J. Simunek, *Modeling variably saturated water flow and multicomponent reactive transport in constructed wetlands*, Vadose Zone Journal, 4, 924-938, 2005.
doi:10.2136/vzj2004.0166
- [11] C.J. Tebes-Stevens, A. Valocchi, J.M. VanBriesen & B.E. Rittmann, *Multicomponent transport with coupled geochemical and microbiological reactions: model description and example simulations*, J. of Hydrology 209, 8-26, 1998. doi:[http://dx.doi.org/10.1016/S0022-1694\(98\)00104-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-1694(98)00104-8)

§ L'état du sujet dans le laboratoire et l'équipe d'accueil

La procédure d'Up-scaling du modèle de transport a d'ores et déjà été étudiées dans le cas des problèmes d'intrusion saline dans les aquifères côtiers; cela a fait l'objet de 2 thèses soutenues et 1 en cours :

- Ji Li, Université du Littoral-Cote d'Opale, (inscrit en octobre 2012, Thèse soutenue le 20 Octobre 2015).

Titre de la thèse: Analyse mathématique de modèles d'intrusion marine dans les aquifères côtiers.

- Abudawia Amel, Université du Littoral Cote d'Opale (inscrite en octobre 2012, Thèse soutenue le 20 décembre 2015).

Titre de la thèse: Analyse numérique d'une approximation éléments finis pour un modèle d'intrusion saline dans les aquifères côtiers.

- Thèse en cotutelle avec M. Jazar, Université Libanaise :
Mourad Aya, ULCO , Université Libanaise (inscrite en octobre 2014).
Titre de la thèse: Identification de paramètres pour un problème d'intrusion saline.
Comparaison avec l'approche stochastique.

La mise à l'échelle des modèles 3D dans le cas des échanges entre eaux de surface et eaux souterraines fait l'objet d'une thèse en cours co-dirigée avec Christophe Bourel :

Tsegmid M.

Titre de la Thèse Analyse mathématique et numérique d'un modèle décrivant les échanges entre eaux de surface et eaux souterraines.

§ Le programme et l'échéancier de travail

Les principales tâches correspondantes sont décrites ci-après.

2017/2018:

Tâche 1 : Upscaling :

Mise à l'échelle d'un modèle 3D d'écoulements multi-fluides polyphasiques dans un aquifère libre au-delà du premier ordre (obtention du modèle effectif et des modèles d'erreur, avec processus de dispersion, avec ou sans effet de capillarité).

Tâche 2 : Contrôle de l'applicabilité :

Reprise des travaux de H. Van Duijn (voir <https://www.tue.nl/en/university/departments/mechanical-engineering/the-department/staff/detail/ep/e/d/ep-uid/19700960/ep-tab/4/>) pour évaluer la robustesse du modèle développé en Tâche 1 par rapport au mode de captage des opérateurs exploitant l'eau.

2018/2019:

Tâche 3 : Chimie et bassin versant :

Étude numérique des méthodes et erreurs de résolution des systèmes couplés de chimie cinétique (ODE stiff) et équilibre instantané (Algébrique non linéaire).

Mise au point d'algorithmes de zonation bio-géochimique et estimation des erreurs par rapport à un modèle complet.

Tâche 4 : Première modélisation globale :

- Couplage du modèle d'aquifère côtier avec des éléments extérieurs naturels contraignant sa dynamique : on se concentrera sur la dynamique de la mer et l'inondation des marais (voir *C.T. Simmons et al, How important is the impact of land-surface inundation on seawater intrusion caused by sea-level rise, Hydrogeology Journal, 2013*).

- Couplage des tâches 1 et 3.

2018/2019:

Tâche 5 : Simulations numériques. Test de portabilité sur un logiciel commercial.

Tâche 6: Test de portabilité en temps long par couplage à un algorithme de contrôle économique.

Confrontation à des données terrain (Présentation des résultats à la CASO).

§ Les retombées scientifiques et économiques attendues

Pour la partie transport, l'obtention d'un modèle mis à l'échelle reprenant l'esprit des approches à interface nette (élévation de la nappe ou biseau salé) et l'hypothèse de Dupuit, mais à un ordre supérieur n'a jamais été entreprise.

Il est aujourd'hui impératif d'associer cinétique et équilibre dans la description des phénomènes chimique. Ce point est actuellement réalisé par de nombreux codes, mais il n'existe (à notre connaissance), aucune étude fondamentale sur les méthodes mathématiques et numérique de couplage entre ces deux descriptions. Nous proposons ici d'étudier ce point.

Les modèles de transport réactif actuels appliquent à l'ensemble du domaine la totalité des phénomènes chimiques envisagés. Il en résulte un coût en temps de calcul très important. Nous proposons ici de développer des algorithmes permettant de travailler localement sur des ensembles restreint de phénomènes chimiques.

§ **Les collaborations prévues et une liste de 10 publications maximum portant directement sur le sujet**

*** Collaborations**

- Partie transport :

Catherine Choquet, Université de La Rochelle, Laboratoire Mia.

- Partie Chimie:

*** Modélisation : Jérôme Carreyrou, Université Strasbourg, Laboratoire LhyGeS,**

*** Résolution de systèmes linéaires et non linéaires de grandes tailles : Hassane Sadok, Khalide Jbilou.**

1. Références bibliographiques

Vous trouverez ci-dessous une sélection de références récentes liées au présent projet.

[Aug1] E. Augeraud-Veron & M. Leandri, *Optimal pollution control with distributed delays*, J. of Mathematical Economics, 55, 24-32, 2014.

[Bel,Car,Leh1] B. Belfort, J. Carrayrou & F. Lehmann, *An easily implementable adaptive time stepping method: applications to chemistry, reactive transport and unsaturated flow in porous media*, Transport in Porous Media 69, 123-138, 2007.

[Car1] H. Machat, J. Carrayrou J., *Comparison of linear solvers for equilibrium geochemistry computation*. Soumis à Computational Geosciences, 2015.

[Car2] J. Carrayrou, R. Mosé & Ph. Behra, *Efficiency of operator splitting procedures for solving reactive transport equation*, J. Contam. Hydrol. 68, 239-268, 2004.

[Car,Hof1] J. Carrayrou, J. Hoffman, P. Knabner, S. Krautle, C. Dedieuleveult, J. Erhel, J. Van der Lee, V. Lagneau, M. Kern, L. Amir, K.U Mayer & K.T.B. McQuarrie K.T.B, Comparison of numerical methods for simulating strongly nonlinear and heterogeneous reactive transport problems—the MoMaS benchmark case. Computational Geosciences. **14**, 483-502, 2010.

[Cho1] C. Choquet & A. Mikelic, *Rigorous upscaling of the reactive flow with finite kinetics and under dominant Peclet number*, Continuum Mechanics and Thermodynamics, 21, 125-140, 2009.

[Cho,Dié,Ros1] C. Choquet, M.M. Diédhiou & C. Rosier, *Mathematical analysis of a sharp-diffuse interfaces model for seawater intrusion*, J. of Diff. Equations, 259, 3803-3824, 2015.

[Cho,Ros1] C. Choquet, J. Li & C. Rosier, *Global existence for seawater intrusion models: comparison between sharp interface and sharp-diffuse interface approaches*, EJDE, 126, 1-27, 2015.

[Cho,Ros1] C. Choquet & C. Rosier, *Effective models for reactive flow under dominant Peclet and Damköhler numbers: numerical simulations*, Nonlinear Anal., Real World Applications, 15, 345-360, 2014.

[Saa1] M. Saad, *Slightly compressible and immiscible two-phase flow in porous media*, Nonlinear Analysis, Real World Applications, 15, 2014.