

INFLUENCE DE L'HÉTÉROGÉNÉITÉ PHYSIQUE DES MICROENVIRONNEMENTS DU SOL SUR LES TRANSFORMATIONS MICROBIENNES DU CARBONE : EXPLORATION A L'AIDE D'UN MODÈLE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU¹

par Laure Vogel

Ary Bruand² – Cette thèse est dédiée à l'élaboration d'un modèle décrivant explicitement le contrôle de la biodégradation dans le sol par des facteurs physiques à l'échelle des pores, et cela afin d'explorer l'hypothèse de contrôle de l'activité biologique par l'accessibilité physique. L'accent porté sur les régulateurs physiques de l'activité microbienne a conduit Laure Vogel à choisir l'approche Boltzmann sur réseau. En effet, cette méthode est adaptée à l'objectif poursuivi par sa précision, sa simplicité dans l'implémentation de milieux poreux complexes et parce qu'elle offre la possibilité de reproduire avec la même plateforme une variété de processus hydriques. Le modèle mobilisé par Laure Vogel est le modèle TRT-LBM (Ginzburg *et al.*, 2008³) qui permet de reproduire des processus à l'œuvre dans différents régimes hydriques : séparation de phases (permettant d'obtenir la distribution de l'eau à l'équilibre en régime non saturé), transport diffusif en régime hydrostatique non saturé, transport convectif en régime hydrodynamique saturé, sorption, dégradation. Les travaux de développement dont il fait encore l'objet laissent entrevoir une gamme d'utilisations encore plus étendue dans le futur. Un objectif à moyen terme concerne en particulier le couplage du transport convectif dispersif en régime hydrodynamique non saturé. Un tel modèle paraît donc particulièrement approprié pour dépendre finement le rôle central de l'eau et des phénomènes de transport dans la régulation abiotique de l'activité microbienne.

Le travail entrepris par Laure Vogel a consisté en premier lieu à coupler le modèle TRT-LBM à un modèle de biodégradation à compartiments non spatialisé. Ce modèle de biodégradation devait présenter une structure et un comportement relativement simple, pour faciliter l'interprétation des sorties du modèle couplé et souligner les effets attribués aux aspects physiques plutôt qu'aux caractéristiques purement biologiques. Néanmoins, Laure Vogel a cherché à rendre ce module de biodégradation aussi pertinent que possible au regard des concepts de régulation autres que l'accessibilité physique :

- l'équation de biodégradation traduit la double régulation du substrat et de la biomasse (loi de Monod, équation 4) ;
- la structure du module est séquentielle. Le pool de carbone organique dissous (DOC) représente un compartiment intermédiaire central dans l'activité de biodégradation ;
- l'état physiologique (donc la dormance) peut être pris en compte de manière facultative ;
- des pools de composés avec différents degrés de récalcitrance peuvent être intégrés.

Les principes et les caractéristiques du modèle couplé sont décrits en détail dans le premier chapitre. Laure Vogel a utilisé cet outil pour investiguer les régulations abiotiques de l'activité de biodégradation à l'échelle du pore en testant le modèle dans une multitude de configurations.

L'objectif du travail relaté dans le deuxième chapitre est de mettre en évidence et de quantifier les effets sur la cinétique de biodégradation de plusieurs facteurs jouant simultanément à une échelle locale. Les quatre facteurs impliqués sont la morphologie de la porosité, l'indice de saturation en eau, la distribution et la

¹ Thèse préparée dans le l'unité mixte de recherche AgroPariTech – INRA « Écologie fonctionnelle et écotoxicologie des agroécosystèmes (Ecosys) » et soutenue à Agro ParisTech dans le cadre de l'école doctorale ABIÉS le 10 novembre 2015.

² Membre correspondant de l'Académie d'Agriculture de France, Ingénieur agronome INA-PG, Professeur des universités (Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, UMR Université d'Orléans – CNRS – BRGM).

³ GINZBURG I., F. VERHAEGHE et d'HUMIÈRES D., 2008. -- Study of simple hydrodynamic solutions with the tworelaxation-times lattice boltzmann scheme, Communications in computational physics, 3(3), 519–581.

physiologie des microorganismes. Pour satisfaire l'objectif de quantification, Laure Vogel a cherché des moyens de caractériser les propriétés physiques de nos milieux poreux et a construit ses scénarios selon un plan factoriel complet se prêtant à une analyse statistique dans le but de déterminer les contributions respectives des différents facteurs et termes d'interaction entre plusieurs facteurs.

Laure Vogel a ensuite entrepris d'explorer le comportement mathématique du module de biodégradation et d'estimer les incertitudes qui lui sont associées. Ces incertitudes sont en effet moins bien cernées que celles qui découlent du calcul des processus hydriques par la méthode de Boltzmann sur réseau. Les incertitudes et la sensibilité du modèle biologique seul (sans influence des conditions physiques) ont été analysées à partir de scénarios issus d'échantillonnage des paramètres selon des méthodes globales. Ce travail est décrit dans le troisième chapitre. Les incertitudes des paramètres étudiées dans ce chapitre proviennent en partie de la difficulté d'isoler les processus biologiques de l'influence implicite de conditions physiques hétérogènes dans les expérimentations d'incubation classiques. Modèles et expérimentations doivent être pensés conjointement pour que les connaissances provenant des uns nourrissent la réflexion sur les autres et vice-versa.

Un autre objectif dans cette thèse était de mettre au point des méthodes expérimentales adaptées à l'échelle et aux conditions de notre modèle. Les expérimentations ont été conçues pour servir à la paramétrisation et la validation du modèle. Les méthodes et les résultats expérimentaux sont présentés dans le quatrième chapitre.

Pour clore cette thèse, Laure Vogel tente de reproduire dans un cinquième et dernier chapitre les conditions de l'expérimentation de validation à l'aide du modèle développé. Les systèmes expérimentaux employés avaient une structure hétérogène construite selon un protocole particulier. Laure Vogel retranscrit cette structure dans le modèle en acquérant des images tomographiques de ces milieux poreux et en réalisant le traitement de ces images en vue de leur implémentation dans le modèle. Laure Vogel a comparé les variables de biodégradation observées et simulées. Les écarts constatés ont donné l'occasion de discuter de la pertinence des caractéristiques des systèmes expérimentaux et modélisés.

Un modèle spatialisé a ainsi été construit pour explorer les effets des conditions abiotiques sur la cinétique de biodégradation de substrats carbonés par des microorganismes. Pour y parvenir, Laure Vogel a couplé un modèle de Boltzmann sur réseau calculant des processus hydriques dans les milieux poreux et un modèle biogéochimique de dégradation des matières organiques du sol. Des processus physiques et biologiques ont pu ainsi être simulés à l'échelle des pores du sol, échelle jugée pertinente pour décrire les conditions abiotiques caractérisant les microhabitats et leurs conséquences sur l'activité biologique. En décrivant explicitement des conditions et processus hétérogènes à l'échelle des microhabitats et en y reliant la cinétique globale de biodégradation d'un substrat soluble, le modèle développé par Laure Vogel apparaît capable de simuler des effets de régulation de l'activité de microorganismes par la structure de leur milieu.

L'approche est particulièrement intéressante car elle offre la possibilité d'intégrer de multiples processus et facteurs décrivant les conditions abiotiques dans les microenvironnements. Les processus de transport conditionnent l'accès des microorganismes aux composés qui leur sont essentiels dans des milieux à forte hétérogénéité spatiale et font à ce titre l'objet d'une attention particulière dans le concept d'accessibilité physique. L'eau occupe un rôle majeur dans la description des habitats microbiens : sa localisation et son mouvement dans les pores déterminent les flux de matière, l'occupation et le déplacement des microorganismes. Les approches spatialisées qui décrivent des conditions de saturation partielle restent pourtant rares. Laure Vogel a choisi d'explorer l'influence de la distribution hétérogène de l'eau en conditions de saturation partielle et sans déplacement de l'eau. Dans de telles conditions, le mécanisme de transport à l'œuvre est la diffusion. Ainsi, dans tous les scénarios réalisés au cours de cette thèse, la cinétique globale de biodégradation est gouvernée par les vitesses de deux processus : la diffusion et la consommation d'un substrat soluble.

La relative plasticité du modèle développé permet comme annoncé d'envisager l'intégration de processus variés (sorption, hydrolyse de composés insolubles, diffusion d'autres composés tels que l'oxygène dissous, etc.) dont les effets sur l'activité microbienne pourraient être examinés à leur tour. L'effet régulateur de la

structure se manifeste par le biais de trois facteurs qui, en générant de l'hétérogénéité spatiale, ont altéré les vitesses de diffusion et de consommation du substrat. Il s'agit de l'architecture de l'espace poral, de la distribution de la phase aqueuse et de l'arrangement spatial du substrat et des décomposeurs dans la porosité. La simplicité d'implémentation d'images discrètes dans les modèles de Boltzmann sur réseau permet de recourir à des technologies d'imagerie 3D – ici la microtomographie aux rayons X – pour décrire la structure de milieux poreux réels. La distribution de l'eau en conditions de saturation partielle est simulée par le modèle TRT-LBM, conçu pour calculer divers processus dans différents régimes hydriques.

Grace à un tel couplage entre un modèle de Boltzmann sur réseau et un modèle biogéochimique de carbone, il est possible de calculer des processus de transport – diffusion – et de biodégradation à l'échelle des pores, et ceci dans des milieux hétérogènes dont certaines propriétés structurales sont explicitement décrites, telles que l'architecture de la porosité (implémentée sous la forme d'images discrètes), la distribution de l'eau en conditions de saturation partielle et l'arrangement spatial des substrats et des décomposeurs – représentés dans l'étude par des bactéries immobiles. L'influence de ces différents facteurs est évaluée en analysant la variabilité de la cinétique de biodégradation pour une gamme de scénarios décrivant des conditions abiotiques contrastées. Cette source de variabilité est comparée aux incertitudes relevant de la description du métabolisme microbien. Enfin, des expérimentations manipulant la structure de milieux hétérogènes ont été réalisées pour confronter tendances simulées et observées.

L'ensemble de la thèse représente un document de 251 pages remarquablement présenté. Outre le fait qu'elle est extrêmement novatrice, peu de thèses atteignent ce niveau de qualité dans la présentation. Enfin, deux articles publiés antérieurement à la présentation orale de la thèse, et dont Laure Vogel est premier auteur de l'un d'eux, sont présentés en annexe.