



## PhD student or Postdoctoral scholar at the University of Orléans

### Multi-scale modeling of particle transport including diffusiophoresis in porous media for groundwater remediation

#### General information

**Research lab:** Institute of Earth Sciences of Orléans (ISTO), 45100 Orléans (FRANCE)

**Contacts:** Sophie Roman, [sophie.roman@univ-orleans.fr](mailto:sophie.roman@univ-orleans.fr) ; Cyprien Soulaïne [cyprien.soulaïne@cnrs.fr](mailto:cyprien.soulaïne@cnrs.fr)

**Fixed-term contract:** 3-year PhD student, or 2-year postdoc (1-year + 1-year renewable)

**Starting date:** flexible, from 1<sup>st</sup> February 2024

#### Context

##### ERC project "TRACE-it" (2022-2027), summary:



Many engineering applications foresee the usage of small particles for groundwater remediation or for sealing damaged geological confinement barriers, however, delivering materials to a contaminated or damaged region is challenging. TRACE-it aims at controlling the flow of colloidal particles in subsurface geological environments using *in situ* solute concentration gradients. The phenomenon, known as diffusiophoresis, has a tremendous potential to move colloids to regions that are inaccessible by conventional transport. Diffusiophoretic transport in porous media, however, has received very little attention so far. How to use concentration gradients of solute to transport colloids towards target regions? The team of TRACE-it project uses a combined experimental-modelling approach to tackle this challenge. More information here <https://erc-trace-it.cnrs.fr/>

##### Role of the candidate

The objective is to develop a robust and validated macroscale model for particulate transport in porous media. The model will couple solute distributions predicted for subsurface processes (e.g. due to a contaminant dissolving in groundwater or due to mineral dissolution) and diffusiophoretic transport. The candidate will adopt a multi-scale strategy starting at the pore-scale before upscaling to the macroscale. For that, the candidate will,

- Perform an extensive literature review on diffusiophoresis and solute transport in porous media,
- Develop an OpenFOAM-based pore-scale simulator to describe diffusiophoretic transport of colloids in porous media. The candidate will benchmark Lagrangian and Eulerian approaches,
- Verify the model prediction using the experimental data obtained in our microfluidic facilities,
- Investigate numerically the transport of particles by diffusiophoresis in porous media of various geometry, and for different colloid properties in terms of radius and surface charges,
- Upscale the results to the macroscale.
- Participate to the weekly group meetings,
- Present results in national, international conferences and in high-ranked journal, write progress reports.

This work will allow the design of new remediation strategies to bring colloidal particles to contaminated area in subsurface environments.

#### References:

- S. Marbach, H. Yoshida, L. Bocquet (2020), *Local and global force balance for diffusiophoretic transport*, Journal of Fluid Mechanics: 892, A6.
- S. Shin, J. Ault, P. Warren, H. Stone (2017), *Accumulation of Colloidal Particles in Flow Junctions Induced by Fluid Flow and Diffusiophoresis*, Physical Review X, 7
- C. Soulaine, J. Maes, S. Roman (2021), *Computational microfluidics for geosciences*, Frontiers in Water: 3, p. 11.
- D. Velegol, A. Garg, R. Guha, A. Kar, M. Kumar (2016), *Origins of concentration gradients for diffusiophoresis*, Soft Matter: 12 (21), pp. 4686–4703.

## Work environment

### Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO)



The position is located at the Earth Sciences Institute of Orléans (ISTO) in France. ISTO is a joint research laboratory between CNRS, the University of Orléans, and BRGM located on the Geosciences campus of Orléans close to Paris, France. The Porous Media Research Group develops cutting-edge research and worldwide recognized expertise on multi-scale modelling and microfluidic experiments of multiphase flow and reactive transport in geological formations. Our objective is to decipher the mechanisms involved in the remediation of contaminated groundwater, in the underground storage, and in new energy vectors based on the use of the subsurface.

### Collaborations

The candidate will join a network of leading-edge national research institutions including CNRS, BRGM, Sorbonne University, Geosciences Rennes, and Université de Pau et des Pays de l'Adour, and international collaborations including Heriot-Watt University, Julich Forschungszentrum, Ghent University, TU Delft, Lawrence Berkeley National Lab, Princeton University, and Stanford University.

The candidate will have the opportunity to spend time at Princeton University in the group of Prof. Howard Stone who is internationally renowned for studying the dynamics of complex fluids including extensive work on diffusiophoresis phenomena.

## How to apply?

**Candidate profile:** MSc degree (or engineering school), background in engineering, physics, soft matter, computational science, fluid dynamics, or Computational Fluid Dynamics. Prior knowledge of OpenFOAM is a plus but not a prerequisite. A strong taste for research, autonomy. Drafting quality.

**Deadline for application:** until the position is filled (at least until Feb, 2 2024)

Send a CV, cover letter, reference letter(s), and MSc grades to  
[sophie.roman@univ-orleans.fr](mailto:sophie.roman@univ-orleans.fr).



## Offre de thèse ou postdoc à l'Université d'Orléans

### Modélisation multi-échelle du transport des particules en milieu poreux incluant la diffusiophorèse : application à la remédiation des eaux souterraines

#### Informations générales

**Laboratoire de recherche :** Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO), 45100 Orléans (FRANCE)

**Contacts :** Sophie Roman, [sophie.roman@univ-orleans.fr](mailto:sophie.roman@univ-orleans.fr) ; Cyprien Soulaïne [cyprien.soulaine@cnsr-orleans.fr](mailto:cyprien.soulaine@cnsr-orleans.fr)

**Contrat à durée déterminée :** 3 ans de thèse ou 2 ans de post-doctorat (1 an + 1 an renouvelable)

**Début du contrat :** flexible, à partir du 1er février 2024

#### Contexte

**Le projet ERC "TRACE-it" (2022-2027), résumé :**



De nombreuses applications en ingénierie du sous-sol envisagent d'utiliser de petites particules pour l'assainissement des eaux souterraines ou pour étanchéiser les barrières de confinement géologique endommagées. Cependant transporter ces matériaux vers une zone contaminée ou une région endommagée est aujourd'hui très difficile. TRACE-it vise à contrôler l'écoulement de particules colloïdales dans les environnements géologiques en utilisant des gradients de concentration de solutés générés *in situ* comme force motrice. Le phénomène, connu sous le nom de diffusiophorèse, amène la possibilité de déplacer des colloïdes vers des régions habituellement inaccessibles par les mécanismes de transports conventionnels. Le transport par diffusiophorèse dans les milieux poreux a reçu très peu d'attention jusqu'à présent, et il n'est pas considéré dans les modèles standards de transport en milieux poreux. Comment utiliser les gradients de concentration de soluté pour transporter les colloïdes vers une région cible ? L'équipe du projet TRACE-it utilise des outils numériques et expérimentaux pour relever ce défi. Plus d'informations sur le projet ici : <https://erc-trace-it.cnrs.fr/>

#### Rôle du (de la) candidat(e)

L'objectif est de développer un modèle macro-échelle robuste et validé pour le transport de particules en milieux poreux. Le modèle couplera les distributions des concentrations chimiques prédites pour les processus souterrains (par exemple due à la dissolution d'un contaminant dans les eaux souterraines ou à la dissolution des minéraux) et le transport par diffusiophorèse. Le candidat adoptera une stratégie multi-échelle en commençant à l'échelle du pore avant de passer à l'échelle macroscopique. Pour cela, le candidat devra :

- Effectuer des recherches bibliographiques étendues sur la diffusiophorèse et le transport de soluté en les milieux poreux,
- Développer un modèle numérique à l'échelle des pores basé sur OpenFOAM pour décrire le transport de colloïdes par diffusiophorèse en milieux poreux. Les approches lagrangiennes et eulériennes seront comparées,
- Comparer les prédictions du modèle aux données expérimentales obtenues dans notre laboratoire microfluidique,

- Simuler le transport des particules par diffusiophorèse dans des milieux poreux de géométrie variable, et pour différentes propriétés des colloïdes,
- Mettre à l'échelle les résultats vers l'échelle macroscopique.
- Participer aux réunions hebdomadaires du groupe,
- Présenter les résultats obtenus lors de conférences nationales et internationales et dans des revues scientifiques de haut niveau, rédiger des rapports d'avancement.

Ces travaux permettront de concevoir de nouvelles stratégies de remédiation afin d'amener des particules colloïdales vers les zones contaminées dans les environnements souterrains.

#### References:

- S. Marbach, H. Yoshida, L. Bocquet (2020), *Local and global force balance for diffusiophoretic transport*, Journal of Fluid Mechanics: 892, A6.
- S. Shin, J. Ault, P. Warren, H. Stone (2017), *Accumulation of Colloidal Particles in Flow Junctions Induced by Fluid Flow and Diffusiophoresis*, Physical Review X, 7
- C. Soullaine, J. Maes, S. Roman (2021), *Computational microfluidics for geosciences*, Frontiers in Water: 3, p. 11.
- D. Velegol, A. Garg, R. Guha, A. Kar, M. Kumar (2016), *Origins of concentration gradients for diffusiophoresis*, Soft Matter: 12 (21), pp. 4686–4703.

## Environnement de travail

### Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO)



Le poste est basé à l'Institut des sciences de la Terre d'Orléans (ISTO). L'ISTO est une unité mixte de recherche entre le CNRS, l'Université d'Orléans et le BRGM situé sur le campus Géosciences d'Orléans près de Paris, en France. Le groupe de recherche sur les milieux poreux développe une recherche de pointe et une expertise mondialement reconnue sur la modélisation multi-échelle et les expériences microfluidiques d'écoulement multiphasique et de transport réactif dans les formations géologiques. Notre objectif est de décrypter les mécanismes impliqués dans la dépollution des eaux souterraines contaminées, dans le stockage souterrain et dans les nouveaux vecteurs énergétiques basés sur l'utilisation du sous-sol.

#### Collaborations

Le (la) candidat(e) rejoindra un réseau d'institutions de recherche nationales de pointe comprenant le CNRS, le BRGM, l'Université de la Sorbonne, Geosciences Rennes et l'Université de Pau et des Pays de l'Adour, ainsi que des collaborations internationales telles que l'Université Heriot-Watt, Julich Forschungszentrum, l'Université de Gand, TU Delft, Lawrence Berkeley National Lab, l'Université de Princeton et l'Université de Stanford. Le candidat aura l'opportunité de passer du temps à l'Université de Princeton dans le groupe du professeur Howard Stone, reconnu internationalement pour l'étude de la dynamique des fluides complexes, comprenant des travaux approfondis sur les phénomènes de diffusiophorèse.

## Pour postuler

**Profil du (de la) candidat(e)** : diplôme de Master 2 ou d'école d'ingénieur, formation en ingénierie, physique, matière molle, sciences numériques, dynamique des fluides, CFD (mécanique des fluides numérique). Une connaissance préalable d'OpenFOAM est un plus mais pas obligatoire. Goût prononcé pour la recherche, autonomie et qualité rédactionnelle sont requis.

**Date limite de candidature** : jusqu'à ce que le poste soit pourvu (et au moins jusqu'au 2 février 2024)

Envoyer un CV, une lettre de motivation, une (des) lettre(s) de recommandation et les relevés de notes de master à [sophie.roman@univ-orleans.fr](mailto:sophie.roman@univ-orleans.fr).