

PROPOSITION DE SUJET POUR UN CONTRAT DOCTORAL

<u>Laboratoire</u> LaSIE UMR CNRS 7356
<u>Titre de la thèse</u> Développement de réseaux de neurones pour la simulation numérique multi échelle du transfert de CO₂ et de la carbonatation accéléré d'un stock de granulats recyclés par l'injection de gaz industriels.
<u>Direction de la thèse</u> <i>directeur-trice-s (grade, HDR) et éventuels co-directeur-trice-s</i> Jérôme Lux (McF non HDR, demande de dérogation avec engagement à soutenir son HDR l'année de la soutenance de la thèse) <u>Co-encadrants</u> Cyrille Allery (McF HDR) Philippe Turcry (McF) Pierre Yves Mahieux (McF)
<u>Adéquation scientifique avec les priorités de l'établissement</u> Cette thèse s'intègre dans un projet visant à développer un procédé industriel de carbonatation accéléré des granulats de béton de démolition, directement sur site, permettant de minéraliser le CO₂ produit par l'industrie. Ce procédé pourra notamment permettre de capter le CO₂ émis par les différentes entreprises de la zone de la Pallice à proximité du site de la plateforme de recyclage Valosphère. Cet objectif s'inscrit pleinement dans le projet La Rochelle Territoire Zéro Carbone (LRTZC) visant à atteindre la neutralité carbone, mais permet aussi de valoriser le potentiel de stockage de CO₂ des granulats recyclés, ce qui a pour conséquence d'augmenter la valeur ajoutée de ces produits et ainsi d'en favoriser l'usage. Cette thèse a également pour objectif de développer des méthodes basées sur le « deep learning » appliquées à la modélisation de problèmes physiques couplés et non-linéaires. Enfin, cette thèse fait l'objet d'une demande de cofinancement auprès de la Région et soutenu par Spie batignolles malet.
<u>Descriptif du sujet</u> <i>(enjeux scientifiques, applicatifs, sociétaux...)</i> Dans le cadre du projet Carbone Gris (2020-2023, financé par la Région Nouvelle Aquitaine), les recherches ont mis en avant le fort potentiel des granulats recyclés pour piéger du CO₂, puisque une tonne de GR peut potentiellement piéger plus de 20 kg de CO₂ en moins de 3 mois. Comparé aux émissions de CO₂ générée pour les produire (1,5 kg CO₂ /t GR selon l'UNPG), les GR pourraient donc être des matériaux carbo-négatifs. Néanmoins, il a aussi été constaté qu'en l'état actuel du process, le piégeage réel était cent fois moindre à l'échelle du stock, soit environ 0,2 kg de CO₂/t de GR (Yunlu Hou et al. 2022). Partant du constat qu'il est difficile de changer radicalement le process de fabrication des GR pour des raisons économiques et pratiques, il est alors intéressant de privilégier la carbonatation accélérée grâce à un apport de CO₂ industriel directement sur les plateformes. L'objectif de ce travail est de participer au développement et à l'optimisation d'un procédé industriel pour carbonater significativement les GR sans pour autant bouleverser la technicité d'une industrie du recyclage déjà bien en place pour la production de matériaux de construction. Cet objectif de carbonatation in situ sur la plateforme soulève de nombreuses questions qui seront étudiées au cours de deux thèses complémentaires. Le travail de recherche à réaliser durant la thèse présentée ici aura pour objectif de modéliser et comprendre le phénomène de transfert et de réaction du CO₂ injecté dans un stock de granulats recyclés

soumis à des variations environnementales, afin d'optimiser les paramètres d'injection. On cherchera notamment à répondre aux questions suivantes :

- Comment les variations environnementales (pluie, vent, soleil, etc.) impactent des paramètres clés comme la teneur en eau inter- et intra-granulaire.
- Quels sont les effets de la teneur en eau et de la température sur les cinétiques de carbonatation ?
- Quels sont les effets des paramètres d'injection du CO₂ (pression, débit, concentration, répartition spatiale) sur le transfert et les cinétiques de réaction du CO₂ ?
- Quels sont les effets de la nature, de la granulométrie et de la compacité du stock de GR ?
- Peut-on carbonater l'intégralité du CO₂ injecté ?
- ...

La thèse proposée, cofinancée par la Région Nouvelle Aquitaine et La Rochelle Université, portera sur le développement d'un modèle numérique permettant de comprendre les phénomènes physiques et de venir en appui de la maquette expérimentale pour l'optimisation des paramètres.

D'un point de vue scientifique, le problème à traiter est très complexe : il s'agit en effet de modéliser des phénomènes de **transferts réactifs dans des milieux poreux partiellement saturés, multi échelles et évolutifs**. On s'attachera donc à développer des **solutions originales** basées sur les avancées récentes dans le domaine de l'intelligence artificielle et en particulier des **réseaux de neurones profonds**. De récents travaux montrent en effet l'intérêt des réseaux de neurones profonds pour la simulation numériques de problèmes couplés non-linéaires, par exemple :

- En intégrant la physique dans les fonctions objectifs lors de l'entraînement des réseaux (Physics-Informed Neural Networks ou PINNs (Raissi et al. 2019))
- En modélisant les opérateurs non-linéaires par des réseaux profonds (DeepONets (Lu et al. 2021))

L'aspect **multi échelle** pourra également être traité par l'utilisation de techniques inspirées des **réseaux de neurones convolutifs**, utilisées dans les domaines de la classification d'image ou de la détection d'objets, comme cela a été montré dans (Santos et al. 2021) dans le cas de simulation d'écoulement dans des images 3D de milieux poreux.

Enfin, il sera également nécessaire de **modéliser la géométrie du stock** de granulats, soit par des méthodes d'imagerie (tomographie par exemple), soit par des méthodes de génération numériques (schémas booléens, ou réseaux de neurones de type « Generative Adversarial Networks » par exemple).

Références Bibliographiques

- Lu L, Jin P, Pang G, et al (2021) Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. Nat Mach Intell 3:218–229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis GE (2019) Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics 378:686–707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Santos JE, Yin Y, Jo H, et al (2021) Computationally Efficient Multiscale Neural Networks Applied to Fluid Flow in Complex 3D Porous Media. Transp Porous Med 140:241–272. <https://doi.org/10.1007/s11242-021-01617-y>
- Yunlu Hou, Pierre-Yves Mahieux, Philippe Turcry, et al (2022) Plateforme de recyclage de déchets inertes du BTP : un puits de carbone « gris » ? AJCE 40:. <https://doi.org/10.26168/ajce.40.1.24>

Contexte partenarial (cotutelle internationale, EU-CONEXUS, partenariat avec un autre laboratoire, une entreprise...)

Cette thèse s'intègre dans un projet cofinancé par la Région Nouvelle Aquitaine et SPIE batignolles malet. SPIE possède en effet un site de recyclage et valorisation des matériaux issus de la déconstruction situé à La Rochelle (Valosphère). Dans le cadre de ce projet, l'aspect expérimental (maquette, mesure, dimensionnement) sera traité dans une thèse financée par SPIE, tandis que l'allocation demandée à l'Université et à la Région permettra le développement d'un modèle et de méthodes numériques innovantes afin de comprendre et optimiser les paramètres du procédé.

Impacts (scientifiques, technologiques, socio-économiques, environnementaux, sociétaux...)

Cette thèse s'inscrit dans un objectif plus large de valorisation des stocks de granulats recyclés. Les retombées environnementales et économiques sont d'une part la réduction de l'empreinte carbone de la fabrication des granulats recyclés et, de fait, une augmentation de leur valeur ajoutée qui doit favoriser leur utilisation dans des applications aussi bien routières que cimentières. Le procédé permettra également de piéger du CO₂ produit par les activités du Port Atlantique.

D'un point de vue plus académique, cette thèse vise à développer de nouvelles approches basées sur des travaux très récents montrant le potentiel des réseaux de neurones profonds pour la simulation numérique de phénomènes complexes, comme des problèmes de transferts couplés en milieu réactifs et multi échelle.

Programme de travail du doctorant (*tâches confiées au doctorant*)

1. Étude bibliographique :
 - Carbonatation minérale des sols et des bétons, transfert réactif.
 - Utilisation des réseaux de neurones pour la simulation numériques (DeepONet, PINNs, etc.).
2. Écriture du modèle de réaction/advection/diffusion. Choix de l'échelle de description et des hypothèses. On pourra se baser sur les nombreux travaux traitant de la carbonatation réalisés au LaSIE.
3. Développement des outils de simulations numériques : choix des architectures de réseaux de neurones pour la résolution multi échelle. On pourra se baser sur des bibliothèques existantes pour la mise en oeuvre (Tensorflow, Jax, deepXDE, etc.).
4. Modélisation de la géométrie et intégration des paramètres de nature des grains (schéma booléen, tomographie, réseaux de neurones type GANs ou modèles de diffusion).
5. Comparaison des résultats avec les données expérimentales qui seront obtenues dans le cadre du projet cofinancé par SPIE et la Région Nouvelle Aquitaine
6. Exploitation :
 - Optimisation des paramètres d'injection du CO₂
 - Influence des paramètres environnementaux

Calendrier de réalisation

	T0		T0+12		T0+24		T0+36
Tâche	Année 1		Année 2		Année 3		
Étude bibliographique							
Modèle de transfert réactif							
Développement et entraînement des réseaux de neurones							
Modélisation de la géométrie							
Validation & comparaison avec les mesures							
Optimisation - Exploitation des résultats numériques.							

Accompagnement du doctorant / Fonctionnement de la thèse (*accompagnement humain, matériel, financier, en particulier pour la prise en charge du fonctionnement de la thèse et des dépenses associées*)

Le sujet proposé Le doctorant sera encadré par une équipe multidisciplinaire constituée de spécialiste de la modélisation de la carbonatation, des réseaux de neurones et du développement de méthodes numériques.

La direction de thèse sera assurée par J. Lux (MCF, LaSIE) dont l'expérience concernant les réseaux de neurones, la modélisation multi échelle et la simulation numérique appliqués à la carbonatation des granulats recyclés, permettra d'accompagner le doctorant dans l'appropriation de ce sujet complexe et pluridisciplinaire et de faire le lien entre les différents membres de l'équipe d'encadrement.

Encadrement :

Cyrille Allery (MCF, LaSIE) apportera ses compétences dans le développement de méthodes numériques innovantes.

Pierre Yves Mahieux (MCF, LaSIE) apportera son expérience concernant la carbonatation des granulats recyclés et assurera ainsi le lien avec la partie plus expérimentale du projet dans lequel la thèse s'intègre.

Philippe Turcry (MCF, LaSIE) apportera son expertise de la modélisation des mécanismes de minéralisation du CO₂ par carbonatation.

Financement

La thèse étant intégré à un projet de la Région Nouvelle Aquitaine, le financement en équipement et fonctionnement proviendra de la Région Nouvelle Aquitaine et du partenaire industriel SPIE batignolles malet.