|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Une image contenant texte  Description générée automatiquement |  | |  |
|  | |  | |

Sujet de thèse de doctorat

Thèse co-financée par l’université de La Rochelle et la région Nouvelle-Aquitaine, LaSIE UMR CNRS 7356

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

**Mots clés :** deep learning, intelligence artificielle, simulation numérique, déchets inertes du BTP ; granulats recyclés ; carbonatation accélérée, transferts réactifs, empilement granulaire, stockage de CO2.

**Contexte**

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 la zone industrielle proche du site de recyclage Valosphère, filiale de Spie batignolles malet qui soutient financièrement le projet.

La ou le doctorant aura pour objectif de **modéliser** et de **simuler numériquement** le transfert réactif du CO2 dans un stock de granulats recyclés en se basant sur des méthodes de **deep learning** récentes.

**Descriptif du sujet**

Les granulats recyclés (GR) sont des matériaux produits sur plateformes de recyclage à partir de déchets inertes issus des chantiers de construction et de démolition du BTP. Ces matériaux présentent la particularité d'être constitués de granulats de différentes natures présents en proportions variables. Les granulats de béton, largement majoritaires, sont réactifs au contact du CO2, et peuvent donc potentiellement piéger du CO2.

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, **puisqu’une tonne de granulats recyclés (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’entrainement 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).

**Profil de candidature**

La ou le candidat devra avoir des connaissances en modélisation des **phénomènes de transferts** (par exemple mécanique des fluides et/ou diffusion-réaction, etc.) ainsi que de solides bases en **simulation numérique**. Des compétences afférentes au fonctionnement des **réseaux de neurones** constituent un point très positif. Par ailleurs, la ou le candidat devra être à l’aise avec le langage de programmation **python.** Des expériences (stages ou autres) concernant le développement informatique et/ou **l’intelligence artificielle** seront très appréciées.

**Encadrement**

Le doctorant sera encadré par une équipe multidisciplinaire constituée de spécialistes 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.

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 parcarbonatation.

|  |
| --- |
| **Lieu du doctorat** : La Rochelle Université, Laboratoire des Sciences de l’Ingénieur pour l’Environnement  **Durée** : 36 mois  **Rémunération mensuelle minimale** : 2044,12 € brut  **Contact :**  Jérôme Lux, Maître de Conférences email : [jerome.lux@univ-lr.fr](mailto:jerome.lux@univ-lr.fr)  tel +33 5.46.51.39.31 IUT La Rochelle Département Génie Civil  <http://www.iut-larochelle.fr>  Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement UMR CNRS 7356 Université de La Rochelle  <http://lasie.univ-larochelle.fr> |

**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