

LABO – Institut Pascal Axe GePEB

Directeur de thèse : Jean-Pierre FONTAINE (PR), email : j-pierre.fontaine@uca.fr

Co-directeur de thèse : Thierry CHATEAU (PR), email : thierry.chateau@uca.fr

Co-Encadrant : Alain Marcati (MCF), email : alain.marcati@sigma-clermont.fr

Titre du sujet de thèse :

Apport des « réseaux de neurones informés par la physique » aux réacteurs polyphasiques dédiés aux bioprocédés anaérobies de production de vecteurs énergétiques

Résumé du sujet de thèse :

Les bioprocédés anaérobies dédiés à la production de vecteurs énergétiques, tels que la méthanisation, la fermentation sombre pour la production de biohydrogène ou encore la méthanation biologique, constituent des briques technologiques majeures pour la transition énergétique. Ils jouent un rôle central dans la valorisation des déchets organiques, la décarbonation des systèmes énergétiques, ainsi que dans le stockage de l'électricité renouvelable excédentaire via des stratégies de type *power-to-gas*, en particulier dans le cas de la méthanation biologique.

Les types de bioréacteurs opérant ces procédés concernent notamment des cuves agitées mécaniquement ou par dispersion de gaz, tels que les colonnes à bulles et leurs variantes. Ces systèmes sont caractérisés par des écoulements complexes, souvent turbulents, et par de fortes hétérogénéités spatiales, susceptibles d'impacter fortement les performances, voire causer des dysfonctionnements. La prédiction de ces hétérogénéités repose classiquement sur des approches de mécanique des fluides numérique (CFD), fondées sur la résolution des équations de Navier–Stokes couplées aux équations de transport des espèces. Toutefois, pour être précises ces méthodes nécessitent des maillages fins, ce qui induit des coûts computationnels élevés en termes de mémoire et de temps de calcul. Malgré les avancées récentes, comme l'utilisation de processeurs graphiques GPU, ces approches restent difficiles à coupler directement avec des données expérimentales. Une alternative prometteuse est offerte par les réseaux de neurones informés par la physique (PINN). Ces méthodes de *machine learning* permettent d'intégrer explicitement des lois physiques, généralement formulées sous forme d'équations différentielles, au sein des fonctions de perte, orientant ainsi l'apprentissage vers des solutions physiquement cohérentes. L'absence de maillage confère aux PINN un avantage décisif en termes de rapidité. Par ailleurs, ils peuvent être utilisés dans des approches inverses afin de reconstruire des champs d'écoulement ou de concentration à partir d'un nombre limité de mesures expérimentales. Néanmoins, introduits récemment (2017), les PINN restent encore en phase de développement, et leur application aux cas complexes demeurent limitées.

L'axe GePEB (Génie des Procédés, Énergétique et Biosystèmes) de l'Institut Pascal dispose d'un ensemble conséquent de données expérimentales sur les procédés anaérobies. Concernant les cuves agitées dédiées à la production de biohydrogène, des études menées dans le cadre de plusieurs thèses (Trad 2017, Chezeau 2018, Danican 2021, Li 2024) ont permis de caractériser les écoulements de fluides newtoniens et non newtoniens, à l'aide de mesures de champs de vitesse et de concentration par imagerie, complétées par des mesures locales. Un modèle CFD a été développé pour des nombres de Reynolds supérieurs à 200, permettant de générer des données tridimensionnelles supplémentaires pour l'apprentissage. Par ailleurs, une base de données expérimentales est en cours de constitution pour une colonne à bulles, dans le cadre d'une thèse en cours (Essid 2026) et d'un projet postdoctoral incluant des développements CFD. L'objectif de la thèse est de tirer parti de ces jeux de données expérimentales et numériques afin de développer, de manière incrémentale, un outil de simulation basé sur les PINN pour modéliser le comportement fluide de ces bioréacteurs. L'approche consistera à traiter successivement les champs de vitesse, les champs de concentration, puis les phénomènes de transfert de matière gaz–liquide (voire les réactions limitées par le transfert), chacun de ces niveaux constituant un verrou scientifique croissant et une contribution originale par rapport à l'état de l'art. Dans un premier temps, l'étude se concentrera sur une cuve mécaniquement agitée en configuration axisymétrique, pour laquelle l'écoulement sera considéré comme monophasique en première approximation, compte tenu des faibles taux de gaz produits. Après validation de la démarche, la thèse se portera sur une configuration tridimensionnelle. En fonction des résultats obtenus, les travaux pourront être étendus à une colonne à bulles dédiée à la méthanation biologique. L'objectif final est de proposer un outil robuste, rapide et fiable, permettant d'optimiser les conditions opératoires en conciliant transfert de matière, qualité du mélange et consommation énergétique.

Le profil recherché correspond soit à un(e) candidat(e) en génie des procédés avec une forte appétence pour les approches numériques (python, CFD...), soit à un profil en informatique ou en mathématiques appliquées, avec un intérêt marqué pour les phénomènes physiques. Bien que la thèse soit principalement orientée vers la modélisation numérique, une participation aux expérimentations est envisagée, afin de mieux appréhender les phénomènes étudiés et leurs ordres de grandeur.