Proposition de sujet de thèse

Couplage de méthodes numériques et de réseaux neuronaux pour l'étude d'écoulements de fluides complexes

Directeur de thèse : F. Benkhaldoun

Laboratoire LAGA, Université Sorbonne Paris Nord
École Doctorale Galilée

Mots-clés : Méthodes volumes finis, réseaux de neurones informés par la physique (PINNs), lois de conservation, écoulements multiphasiques, condition d'entropie, formulation faible espace-temps, apprentissage automatique, modèles réduits.

Contexte scientifique

La simulation numérique des écoulements de fluides complexes qu'ils soient multiphasiques, non newtoniens ou en milieux poreux constitue un enjeu majeur en sciences de l'ingénieur. Ces écoulements sont au cur de nombreuses applications : géophysique (écoulements souterrains), ingénierie pétrolière (récupération assistée du pétrole), biomécanique (écoulements sanguins), ou encore procédés industriels (transport de boues, sédimentation). Ils sont décrits par des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) fortement non linéaires, souvent hyperboliques, dont les solutions peuvent développer des discontinuités (chocs) en temps fini.

Méthodes numériques classiques

Les méthodes volumes finis (FV) constituent l'approche de référence pour la simulation des écoulements régis par des lois de conservation. Leur succès repose sur des propriétés fondamentales :

— **Conservativité** : la masse, la quantité de mouvement et l'énergie sont conservées à l'échelle discrète,

— **Stabilité TVD** : les schémas d'ordre 1 contrôlent la variation totale et capturent correctement les chocs,

— **Flexibilité géométrique** : ils s'adaptent aux maillages non structurés.

Le LAGA possède une expertise reconnue dans ce domaine, avec des développements originaux sur les schémas pour les systèmes hyperboliques (Saint-Venant, Euler) et les écoulements non newtoniens.

Cependant, ces méthodes rencontrent des limites pour certaines classes de problèmes :

— la gestion des paramètres multiples et des incertitudes,

— l'adaptation à des géométries très complexes ou évolutives,

— le coût de calcul pour les problèmes instationnaires sur de longues périodes,

— la modélisation de phénomènes mal connus (lois de fermeture, termes sous-maille).

Réseaux neuronaux informés par la physique (PINNs)

Parallèlement, l'essor des méthodes d'apprentissage profond a ouvert de nouvelles perspectives. Les Physics-Informed Neural Networks (PINNs), introduits par Raissi et al. (2019), intègrent directement les équations physiques dans la fonction de coût, offrant ainsi une alternative prometteuse. Le principe est simple : on approxime la solution $u_\theta(x,t)$ par un réseau de neurones et on minimise une fonction de perte qui pénalise le résidu de l'équation, les conditions initiales et les conditions aux limites.

Cependant, les PINNs classiques peinent à capturer correctement les chocs pour plusieurs raisons :

— le résidu fort $\|\partial_t u_\theta + \partial_x f(u_\theta)\|^2$ n'est pas défini au sens des distributions,

— la solution approchée tend à lisser les discontinuités,

— l'unicité de la solution (condition d'entropie) n'est pas garantie.

Vers une approche hybride

Pour surmonter ces limitations, ce projet de thèse propose de développer une approche hybride originale, combinant le meilleur des deux mondes :

— la **robustesse et la rigueur** des méthodes volumes finis,

— la **flexibilité et la puissance d'approximation** des réseaux de neurones.

Objectifs de la thèse

Objectif 1 : Développement d'une méthode PINNs faible et entropique

L'idée centrale est de remplacer le résidu fort par des intégrales de bord sur des sous-domaines D de l'espace-temps :

$$R_\theta(D) = \int_{\partial D} \big(U_\theta n_t + F(U_\theta)\cdot n_x\big) dS.$$

Cette formulation reste bien définie en présence de chocs et contient implicitement les conditions de Rankine-Hugoniot. Pour sélectionner la solution entropique, on ajoute une pénalité unilatérale :

$$E_\theta(D) = \int_{\partial D} \big(\eta(U_\theta)n_t + q(U_\theta)\cdot n_x\big) dS \leq 0.$$

La fonction de perte totale combine ces deux termes avec une perte supervisée pour les conditions initiales :

$$L(\theta) = L_{\mathrm{IC}} + \lambda_1 L_{\mathrm{cons}} + \lambda_2 L_{\mathrm{ent}} + \lambda_3 L_{\mathrm{phys}}.$$

Objectif 2 : Stratégies d'échantillonnage adaptatives

Pour garantir l'efficacité de la méthode, nous développerons des stratégies d'échantillonnage adaptatives :

— **Échantillonnage multi-échelle** : sous-domaines de tailles variées pour capturer à la fois les phénomènes globaux et locaux,

— **Adaptation aux chocs** : concentration des sous-domaines là où la solution varie fortement, via un indicateur basé sur le gradient de u_θ,

— **Apprentissage des domaines** : optimisation des paramètres des sous-domaines (positions, tailles) par rétropropagation.

Objectif 3 : Apprentissage de lois de fermeture et modèles réduits

Au-delà de la résolution directe des EDP, la thèse explorera deux extensions majeures :

— **Apprentissage de lois de fermeture** : pour les modèles multi-échelles où les phénomènes sous-maille sont mal connus, on pourra utiliser des réseaux neuronaux pour apprendre ces lois à partir de données haute fidélité,

— **Construction de modèles réduits** : combinaison de méthodes de réduction de modèle (POD, etc.) avec des réseaux neuronaux pour accélérer les simulations paramétriques.

Objectif 4 : Analyse mathématique

Un volet important de la thèse consistera à établir les fondements mathématiques de la méthode :

— **Consistance** : montrer que si $L_{\text{cons}} \to 0$ pour une famille dense de sous-domaines, la limite est une solution faible,

— **Convergence entropique** : montrer que si $L_{\text{ent}} \to 0$, la limite est une solution entropique,

— **Estimation d'erreur** : établir des bornes d'erreur en fonction du nombre de sous-domaines et de la complexité du réseau,

— **Stabilité** : analyser la robustesse de la méthode face au bruit et aux perturbations.

Objectif 5 : Validation sur des cas tests de complexité croissante

La méthode sera validée sur des cas tests académiques et industriels :

1. **Équation de Burgers** : validation sur les problèmes de Riemann (détente, choc),
2. **Flux de Buckley-Leverett** : écoulement diphasique en milieu poreux (flux non convexe),
3. **Système de Saint-Venant 1D** : rupture de barrage (onde de détente + choc),
4. **Équations de Navier-Stokes** : écoulements visqueux compressibles ou incompressibles,
5. **Systèmes couplés** : écoulements avec transport de polluants ou de pulpes.

Méthodologie

Le travail s'articulera autour des étapes suivantes :

1. **Étude des modèles** : analyse des équations de conservation, lois constitutives, propriétés de convexité et condition d'entropie.
2. **Implémentation des méthodes de référence** : schémas volumes finis (Godunov, Roe, HLL) pour les cas tests.
3. **Développement de la méthode hybride** :
   — Implémentation de la formulation faible espace-temps,
   — Construction des réseaux neuronaux (architectures récurrentes, ResNet, etc.),
   — Stratégies d'échantillonnage adaptatives.
4. **Analyse mathématique** : preuves de consistance, convergence, estimation d'erreur.
5. **Validation** : comparaison systématique avec les solutions exactes et les méthodes classiques.
6. **Extensions** : apprentissage de lois de fermeture, construction de modèles réduits.

Calendrier prévisionnel

Période	**Activités**
1ère année	État de l'art, étude des modèles, analyse théorique de la formulation faible, développement de la méthode sur flux de Burgers et de Buckley-Leverett, analyse de convergence.
2ème année	Extension au système de Saint-Venant, développement de stratégies et d'échantillonnage adaptatif.
3ème année	Extension aux systèmes 2D/3D, apprentissage de lois de fermeture, modèles réduits, validation sur cas industriels, rédaction de la thèse.

Compétences requises

— Solide formation en mathématiques appliquées (EDP, analyse numérique, optimisation).

— Connaissances en programmation scientifique (Python, éventuellement C++).

— Intérêt pour l'apprentissage automatique et les réseaux neuronaux (TensorFlow, PyTorch).

— Une première expérience en simulation numérique (volumes finis, éléments finis) serait appréciée.

— Capacité à travailler en autonomie et à rédiger en français et en anglais.

Encadrement et environnement

La thèse sera réalisée au sein du laboratoire LAGA (UMR CNRS 7539), dans l'équipe de Modélisation et Calcul Scientifique (MCS). Le laboratoire dispose :

— d'une expertise reconnue en méthodes volumes finis et simulation numérique,

— de collaborations actives avec des partenaires académiques et industriels (CTU Prague, ASNR (ex IRSN), LSPM, LIPN, UM6P Maroc, Université d'Annaba, etc.),

— de ressources de calcul (cluster local, accès aux supercalculateurs nationaux).

Le doctorant bénéficiera d'un encadrement rapproché et d'une intégration dans une équipe dynamique.

Perspectives professionnelles

Les résultats attendus pourront contribuer à :

— l'amélioration des outils de simulation pour des systèmes complexes (industrie pétrolière, environnement, énergie),

— le développement de nouvelles approches hybrides en calcul scientifique,

— l'ouverture vers des carrières académiques (post-doctorat, enseignement-chercheur) ou industrielles (R&D en simulation numérique, deep learning).

Références bibliographiques

Références

[1] M. Raissi, P. Perdikaris, G.E. Karniadakis, *Physics-informed neural networks : A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations*, Journal of Computational Physics, 378 :686707, 2019.

[2] G.E. Karniadakis, I.G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang, *Physics-informed machine learning*, Nature Reviews Physics, 3(6) :422440, 2021.

[3] E. Godlewski, P.A. Raviart, *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, Springer, 1996.

[4] R.J. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, 2002.

[5] E.F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Springer, 2009.

[6] Z. Mao, A.D. Jagtap, G.E. Karniadakis, *Physics-informed neural networks for high-speed flows*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 360 :112789, 2020.

[7] P. Patel, S.R. Yadav, *Application of physics-informed neural networks for solving water penetration problems in unsaturated soils*, Engineering with Computers, 42(1) :9, 2026.

[8] F. Benkhaldoun, A. Bradji, *An L(H1)-error estimate for gradient schemes applied to time fractional diffusion equations*, FVCA X, Springer, 2023.

[9] S.E. Buckley, M.C. Leverett, *Mechanism of fluid displacement in sands*, Trans. AIME, 146 :107116, 1942.

Laboratoire d'accueil : LAGA, Université Sorbonne Paris Nord
Directeur de thèse : F. Benkhaldoun
École Doctorale : Galilée