

Ecole Doctorale 631 MADIS

Sujet de thèse en Mathématique proposé en 2024

Titre : Analyse mathématique et résolution numérique de quelques systèmes différentiels raides en modélisation biogéochimique

Directeur de thèse : Guillaume Dujardin

E-mail : guillaume.dujardin@inria.fr

Co-directeur de thèse : Benjamin BRACONNIER

E-mail : benjamin.braconnier@ifpen.fr

Laboratoire : Laboratoire Paul Painleve et Inria

NB : le/la doctorant/doctorante sera hébergé.e à l'IFPEN, à Rueil-Malmaison

Equipe : ANEDP

Descriptif : En géothermie, dépollution de l'eau et stockage souterrain d'hydrogène, les processus biochimiques dus aux bactéries et microbes ont un fort impact sur la production d'agents pathogènes et doivent être pris en compte dans l'évaluation des risques de contamination. Cette prise en compte se fait par l'intégration de modules dédiés dans les simulateurs d'écoulement en milieu poreux. Cependant, le développement de ces modules s'appuie sur des modèles de réaction empiriques qui sont assez éloignés de la cinétique chimique habituelle. En l'état actuel, les propriétés mathématiques sous-jacentes à ces nombreux modèles ad hoc, constitués d'équations différentielles ou algèbro-différentielles, ne sont malheureusement pas bien comprises. Non seulement leur stabilité en temps long n'est pas toujours assurée, mais ils peuvent aussi être particulièrement raides dans certaines plages de fonctionnement. Par conséquent, leur intégration numérique s'avère délicate : un schéma même implicite nécessite souvent de très petits pas de temps et ne préserve pas toujours la positivité des concentrations.

Dans ces conditions, le premier objectif de cette thèse est d'étudier ces modèles de biogéochimie sous un angle plus mathématique afin de faire ressortir les différentes structures de trajectoire en fonction des paramètres. Pour cela, nous utiliserons les outils de la théorie des systèmes dynamiques en rapport avec l'analyse de stabilité non linéaire et les bifurcations. Le but de cette étape est non seulement de valider la forme des solutions calculées, mais aussi d'anticiper les difficultés à traiter ultérieurement. Dans un deuxième temps, l'objectif suivant est d'améliorer les méthodes numériques du point de vue de la précision et de la robustesse vis-à-vis des difficultés mises en évidence. À cette fin, on cherchera à adapter plusieurs techniques récentes conçues pour garantir d'une part une meilleure convergence de la résolution par Newton du système algébrique après discrétisation, et d'autre part une gestion mieux adaptée de l'apparition ou la disparition de certaines espèces. On comparera les différentes méthodes d'abord en 0-D, sur des systèmes différentiels purs, puis en 2-D/3-D via un couplage avec les EDP du transport en milieu poreux.

Pour postuler, merci d'envoyer votre lettre de motivation et votre CV à l'encadrant IFPEN indiqué ci-dessus.

IFP Energies nouvelles est un organisme public de recherche, d'innovation et de formation dont la mission est de développer des technologies performantes, économiques, propres et durables dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. Pour plus d'information, voir notre site web.

IFPEN met à disposition de ses doctorants un environnement de recherche stimulant, avec des équipements de laboratoire et des moyens de calcul très performants. Outre une politique salariale et de couverture sociale compétitive, IFPEN propose à tous les doctorants de participer à des séminaires et des formations qui leur sont dédiés.