



HAL
open science

Exploration des techniques d'intelligence artificielle pour calibrer les modèles physiques

Yasser Sami, Elliott Pollice, Emilian Tichtchenko, Matthieu Jonckheere,
Nicolas Richard, Carole Rossi, Alain Estève

► **To cite this version:**

Yasser Sami, Elliott Pollice, Emilian Tichtchenko, Matthieu Jonckheere, Nicolas Richard, et al.. Exploration des techniques d'intelligence artificielle pour calibrer les modèles physiques. LAAS - CNRS. 2022. hal-03908969

HAL Id: hal-03908969

<https://laas.hal.science/hal-03908969v1>

Submitted on 21 Dec 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Exploration des techniques d'intelligence artificielle pour calibrer les modèles physiques

Yasser Sami, Elliott Pollice, Emilian Tichtchenko, Alain Estève, Matthieu Jonckheere, Nicolas Richard, Carole Rossi

LAAS, University of Toulouse, CNRS-UPR 8001, France

CEA-DAM, DIF, 91297 Arpajon, France

Rapport des travaux 2022 effectués dans le Laboratoire de recherche correspondant sur L'Instrumentation et les Capteurs Ultra-Rapides (LICUR)

Les matériaux thermites, mélanges de particules métal/métal-oxydant, brûlent dans une réaction auto-entretenu avec une densité d'énergie très-élevée ($10\text{-}50 \text{ kJ/cm}^3$) même sous vide, et trouvent applications pour la soudure/désoudure, l'actionnement, l'autodestruction de puces pour la sécurité de donnée, le sectionnement de piste.... Cependant, la conception du mélange thermite, c'est-à-dire de la poudre, en termes de nature chimique des espèces métal/oxyde, taille des particules, rapport métal/oxyde, taux de compaction, est toujours guidée par des considérations empiriques. Les utilisateurs savent que la propagation de la combustion dépend non seulement de la taille des particules métalliques (souvent Al), mais aussi de la nature de l'oxyde métallique, distinguant deux catégories : ceux, tels que CuO , MoO_3 , WO_3 et Bi_2O_3 qui se décomposent ou se gazéifient à des températures inférieures à la température de la réaction et entraînent donc une vitesse de combustion très élevés. Ceux, tels que Fe_2O_3 et NiO , qui se décomposent ou se gazéifient au-dessus de la température de la réaction, donc s'amorcent dans la phase condensée, favorisant une combustion lente et sans gaz. Ils sont d'ailleurs utilisés pour la soudure.

Bien sûr, ces considérations sont insuffisantes pour concevoir des thermites répondant à un cahier des charges précis, ce qui freine le transfert de ces matériaux dans les applicatifs et l'industrie.

Dans le cadre du LICUR, l'équipe NEO du LAAS en collaboration avec le CEA-DAM, et d'autres partenaires académiques et industriels, travaille sur l'élaboration d'une première génération de modèles de combustion et de déflagration réaliste. Les modèles en cours de construction incorporent la cinétique de réaction et de gaz le au plus près des mécanismes physiques, à l'état de l'art des connaissances, afin de décrire la propagation de la réaction d'une poudre d'Al avec un oxydant métallique (CuO) qui se décompose avant la réaction aluminothermique. Les modèles [1-5] considèrent aussi les échanges entre le gaz et la matière condensée en combustion.

Cependant, ces modèles font face aujourd'hui, au manque de certaines données sur des mécanismes de réactions comme les diffusions atomiques. En effet, la combustion d'une thermite met enjeu des réactions en milieu multiphasique qui ne sont pas toutes bien caractérisées et qu'il convient de calibrer afin d'avoir un modèle prédictif. Notamment une dizaine de paramètres sont non connus dont les pré-facteurs et énergie d'activation des lois de diffusion des espèces atomiques (oxygène, métal) et les lois de décomposition de l'oxydant (CuO). Faute de moyens de caractérisation

disponibles rapidement pour accéder à la quantification des coefficients de diffusion, nous explorons deux méthodes pour calibrer nos modèles :

- (i) La caractérisation des premières étapes de réactions [6-8] et la modélisation à l'échelle atomique (DFT principalement) [9] de la décomposition des oxydes, puis de la réaction thermitique par simulation moléculaire (ReaxFF-MD) [10] pour déterminer les mécanismes et les hiérarchiser en fonction de la température,
- (ii) L'utilisation de méthodes statistiques pour générer des bases de données à partir des modèles physiques sur des dimensions étendues aux paramètres inconnus, afin d'en déduire le ou les meilleur(s) ensemble(s) pour la thermitique « à concevoir » à partir de quelques valeurs expérimentales, mais aussi de pouvoir disposer de modèles de substitutions ultra-rapides au plan des temps de simulation. C'est ce deuxième point qui a fait l'objet du travail de 2022. Nous explorons actuellement, sur la base d'un modèle physique à l'état de l'art, une fonction cible à 11 dimensions, incluant la variation des paramètres usuels du design des thermites (taille des particules, compaction, ratio stoechiométrique ...) ainsi que d'autres, plus relatifs aux phénomènes physiques, dont les valeurs ne sont pas connues et difficiles, voire impossibles d'accès par les techniques de caractérisation expérimentales ou autres modèles théoriques. Le mapping des données de simulation, opéré sur une plage déterminée de variation des paramètres permet de collecter des données de simulation caractéristiques de la combustion des thermites, tels le taux de pressurisation, la température, la pression générée ... qui sont les grandeurs importantes utilisées par les expérimentateurs. Le travail effectué cette année porte sur l'optimisation de la procédure utilisée pour générer la base de données, dans la mesure où un maillage brutal de l'espace à 11 dimensions constitue une masse de calcul considérable. Nous avons exploré des méthodes algorithmiques pour générer des bases de données « optimisées », c'est-à-dire décrivant la fonction à 11 dimensions de meilleure manière tout en limitant la quantité nécessaire de points. L'estimation de la qualité des algorithmes est jugée par la quantité de données nécessaires à l'établissement d'un modèle de substitution au modèle physique permettant d'atteindre un degré nominal de prédiction. Pour ce faire, nous proposons une méthode incrémentale qui utilise à minima une méthode standard basée sur EGO (Efficient Global Optimisation), qui peut, dans un second temps être couplée à un facteur de mérite (FOM) dérivé d'une expertise spécifique dans les matériaux thermitiques. C'est-à-dire que nous avons donné un poids relatif à certains paramètres. Enfin, nous avons étudié le gain potentiel de coupler ces méthodes à des techniques d'apprentissage par renforcement. L'intervention de ce renforcement au moment de choisir les points de simulation les plus pertinents peut intervenir sous plusieurs formes, afin d'introduire un bruit stochastique dans l'exploration de l'espace multidimensionnel : nous envisageons la modification dynamique de certains hyperparamètres des fonctions de cœur de l'apprentissage EGO, mais aussi des modifications dans les rayons de coupure autour des points de simulation courants en deçà desquels on refuse en principe toute exploration sur l'itération à suivre. Ce travail ouvre la voie à des applications machine learning dans un cadre de recherche en matériaux complexes, où le nombre de données et la fiabilité des paramètres des modèles sont deux obstacles majeurs. Ces tâches sont en cours de finalisation, et un article devrait être proposé en début d'année 2023. Un stage master et une thèse débuteront en 2023.



Références

- [1] V. Baijot, D.R. Mehdi, C. Rossi and A. Esteve, A multi-phase micro-kinetic model for simulating aluminum based thermite reactions, *Combust Flame*, 180 (2017)
- [2] E. Tichtchenko, A. Estève and C. Rossi, Modeling the self-propagation reaction in heterogeneous and dense media: Application to Al/CuO thermite, *Combust Flame*, 228 (2021) 173-183
- [3] E Tichtchenko, V Folliet, O Simonin, B Bedat, L Glavier, A Esteve, C Rossi, Combustion model for thermite materials integrating explicit and coupled treatment of condensed and gas phase kinetics, *Proc. Combust. Inst.*, 1-9 (2022)
- [4] G. Lahiner, J. Zapata, J. Cure, N. Richard, M. Djafari-Rouhani, A. Esteve and C. Rossi, A redox reaction model for self-heating and aging prediction of Al/CuO multilayers, *Combust Theor Model*, 23 (2019) 700-715
- [5] G. Lahiner, A. Nicollet, J. Zapata, L. Marín, N. Richard, M. Djafari-Rouhani, C. Rossi and A. Estève, A diffusion–reaction scheme for modeling ignition and self-propagating reactions in Al/CuO multilayered thin films *J Appl Phys*, 122 (2017)
- [6] I. Abdallah, J. Zapata, G. Lahiner, B. Warot-Fonrose, J. Cure, Y. Chabal, A. Esteve and C. Rossi, Structure and Chemical Characterization at the Atomic Level of Reactions in Al/CuO Multilayers, *ACS Applied Energy Materials*, 1 (2018) 17-62
- [7] J. Zapata, A. Nicollet, B. Julien, G. Lahiner, A. Esteve and C. Rossi, Self-propagating combustion of sputter-deposited Al/CuO nanolaminates, *Combust Flame*, 205 (2019) 389-396
- [8] H.Y. Wang, B. Julien, D.J. Kline, Z. Alibay, M.C. Rehwoldt, C. Rossi and M.R. Zachariah, Probing the Reaction Zone of Nanolaminates at similar to μs Time and similar to μm Spatial Resolution, *J Phys Chem C*, 124 (2020) 13679-13687
- [9] C. Lanthony, J.M. Ducere, A. Esteve, C. Rossi and M. Djafari-Rouhani, Formation of Al/CuO bilayer films: Basic mechanisms through density functional theory calculations, *Thin Solid Films*, 520 (2012) 4768-4771
- [10] H. Jabraoui, A. Esteve, M. Schoenitz, E.L. Dreizin and C. Rossi, Atomic Scale Insights into the First Reaction Stages Prior to Al/CuO Nanothermite Ignition: Influence of Porosity, *Acs Appl Mater Inter*, (2022)DOI: 10.1021/acsami.2c07069