



Offre de Contrat Post-Doctoral de 24 mois

Intitulé de l'offre :

Design accéléré de matériaux architecturés : approche d'apprentissage automatique pour l'optimisation topologique d'échangeurs de chaleur.

Contexte :

Cette étude post doctorale est proposée dans le cadre de l'axe ADAM (Accelerated Design of Architected Materials), l'un des 13 axes du PEPR¹ exploratoire DIADEME (Dispositifs Intégrés pour l'Accélération du DEploiement de Matériaux Emergents, lancé en juin 2022 - <https://www.pepr-diadem.fr/>). Ce programme, piloté par le CEA et le CNRS, vise à accélérer la conception et la réalisation de matériaux plus performants, durables et issus de matières premières non critiques et non toxiques. Il cherche à combiner de façon intégrée modélisation, simulation numérique, méthodologies associées à l'intelligence artificielle (IA), technologies de synthèse/criblage et caractérisation à haut débit.

Concernant l'axe ADAM (lancé en septembre 2023 - <https://www.pepr-diadem.fr/projet/adam/>), l'intelligence artificielle doit être appliquée à la fois à la conception, la caractérisation, l'optimisation numérique des matériaux architecturés et à leur voie d'élaboration par fabrication additive. Les équipes du CNRS et du CEA engagées dans cet axe mettent actuellement en place les outils nécessaires à la réalisation de 2 plateformes (de caractérisation et de simulation) devant être mises à la disposition de la communauté scientifique française. A cette fin, des démonstrateurs doivent être réalisés pour assurer la fiabilité et la robustesse des chaînes expérimentales et numériques développées.

Le démonstrateur, objet de cette étude, est lié au domaine de l'énergie. Il s'agira d'optimiser la structure d'un échangeur de chaleur pour répondre à un cahier des charges donné et de le fabriquer par LPBF (Laser Powder Bed Fusion) métallique.

Les familles de matériaux architecturés qui seront étudiées pour y parvenir, sont des géométries paramétrées TPMS (Triply Periodic Minimal Surface), dont les morphologies peuvent être décrites par une formule mathématique [<https://doi.org/10.1088/2631-7990/ac5be6>].

Déroulement de l'étude

Le programme de travail envisagé est divisé en 3 phases au cours desquelles des interactions fortes avec d'autres post-doctorants et chercheurs des équipes engagées auront lieu. Le pilotage de l'étude sera assuré conjointement par les équipes du CEA LITEN à Grenoble et du CEA Le Ripault à Monts. Ce travail sera réalisé essentiellement au CEA LITEN avec quelques déplacements possibles à Paris et Monts. Il fera l'objet de publications dans des revues scientifiques et congrès internationaux.

Phase 1 : création d'une base de données

L'objectif de cette phase est de construire une base de données permettant d'alimenter les algorithmes d'apprentissage, compatible du choix des descripteurs retenus et définis à partir du cahier des charges. Cette base sera constituée de 2 parties :

¹ PEPR : PROGRAMMES ET ÉQUIPEMENTS PRIORITAIRES DE RECHERCHE

- La première s'appuiera sur des simulations en régime stationnaire des transferts thermo-fluidiques. Elle nécessitera de traiter le passage d'une cellule élémentaire à un nombre de cellule permettant de définir la taille représentative du modèle numérique pouvant in fine être fabriqué. Le code ANSYS FLUENT sera utilisé et associé à un code CEA (THERMIVOX). Ces simulations pourront faire éventuellement l'objet d'une inter comparaison avec celles issues du code OPENFOAM utilisé au laboratoire PIMM (Laboratoire procédés et ingénierie des matériaux et structures de l'ENSAM), pouvant aussi compléter la base.
- Avec l'augmentation très rapide des études sur le sujet, des éléments de choix sont sans doute aussi disponibles dans la littérature. Une deuxième partie de la base de données sera donc à construire à partir des données accessibles dans la littérature scientifique en utilisant des algorithmes d'extraction de l'IA symbolique développés à l'UTBM (Université Technique Belfort Montbéliard). Elle permettra d'enrichir les données d'apprentissage en intégrant des informations liées à l'impact des procédés de fabrication et aux expériences déjà réalisées sur les TPMS.

Phase 2 : optimisation topologique

L'objectif de cette phase est de concevoir une TPMS optimisée grâce à l'utilisation d'algorithmes d'apprentissage automatique utilisant une approche de réduction de modèle s'appuyant sur des auto-encodeurs spécifiques dits RRAEs (Rank Reduction Autoencoders) [Mounayer, J. et al. (2024)]. Ces outils sont développés au PIMM et pour être utilisés dans cette étude, une phase d'apprentissage sera nécessaire à partir de la base de données construite lors de la phase 1. Les données d'entrée pour l'entraînement pourront donc être soit une géométrie (définie par une formule mathématique ou une image 3D voxelisée) pour restituer une propriété (descripteur), soit un descripteur pour restituer une géométrie. Une fois l'apprentissage validé, l'optimisation topologique pourra débiter pour répondre au cahier des charges.

Phase 3 : fabrication et tests

L'objectif de cette phase est (1) de fabriquer par LPBF métallique, au CEA Grenoble, des structures considérées optimales pour répondre au cahier des charges, issues de la phase 2 et (2) d'évaluer les performances de ces structures sur un dispositif expérimental de test afin d'apprécier les potentiels écarts entre prédiction et expérience.

Pour mener à bien cette étude, d'une durée de 2 ans, le ou la candidat(e) retenu(e) devra avoir des compétences en mathématiques appliquées, informatique, avec un accent sur l'optimisation et l'apprentissage automatique.

Localisation : CEA Grenoble, déplacements possibles au CEA Le Ripault

Profil du candidat recherché : Le ou la candidat(e) retenu(e) devra avoir des compétences en mathématiques appliquées, informatique, avec un accent sur l'optimisation et l'apprentissage automatique.

Connaissances souhaitées : python, langage de programmation C, C++. La connaissance d'ANSYS FLUENT serait un plus mais une formation sera possible.

Contacts :

- Vincent Bonnefoy – CEA Grenoble – courriel : vincent.bonnefoy@cea.fr
- Denis Rochais – CEA Le Ripault – courriel : denis.rochais@cea.fr