



Journée SFT

Modélisation du transfert radiatif dans des milieux participants, par réseaux de neurones bayésiens et méthode de Monte Carlo

O. Farges[‡], A. Royer^{‡‡}, P. Boulet[‡], D. Burot[†]

[‡]Lemta, Université de Lorraine - [†]Safran Aircraft Engine

olivier.farges@univ-lorraine.fr

Jeudi 8 Juin 2023

- | | |
|-----------------------------|-------------------------------------|
| 1 Contexte | 3 Mise en œuvre et résultats |
| 2 Un couplage MC-ANN | 4 Conclusion |



1 Contexte

2 Un couplage MC-ANN

3 Mise en œuvre et résultats

4 Conclusion

- Constat :

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendence : Augmentation de la température de combustion

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendence : Augmentation de la température de combustion
 - ✓ Besoin : Modélisation fine du rayonnement

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendence : Augmentation de la température de combustion
 - ✓ Besoin : Modélisation fine du rayonnement
- Enjeux :

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendance : Augmentation de la température de combustion
 - ✓ Besoin : Modélisation fine du rayonnement
- Enjeux :
 - ✓ Augmenter la précision sans augmenter les besoins informatiques

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendence : Augmentation de la température de combustion
 - ✓ Besoin : Modélisation fine du rayonnement
- Enjeux :
 - ✓ Augmenter la précision sans augmenter les besoins informatiques
 - ✓ Évaluer T_{paroi} le plus finement possible

- Constat :
 - ✓ Place du transfert radiatif vs CFD pour chambre de combustion aéronautique
 - ✓ Rendement : Gaz plus chaud, rendement cycle plus élevé
 - ✓ Tendances : Augmentation de la température de combustion
 - ✓ Besoin : Modélisation fine du rayonnement
- Enjeux :
 - ✓ Augmenter la précision sans augmenter les besoins informatiques
 - ✓ Évaluer T_{paroi} le plus finement possible
 - ✓ Estimer la durée de vie, la production de polluants,...

Modélisation du transfert radiatif

Modélisation du transfert radiatif

- Modélisation du rayonnement : l'ETR
 - ✓ Méthode aux Ordonnées Discrètes
 - ✓ Méthode de Monte Carlo
 - ✓ Méthode Volumes Finis,
 - ✓ Méthode Éléments Finis, ...

Modélisation du transfert radiatif

- Modélisation du rayonnement : l'ETR
 - ✓ Méthode aux Ordonnées Discrètes
 - ✓ Méthode de Monte Carlo
 - ✓ Méthode Volumes Finis,
 - ✓ Méthode Éléments Finis, ...
- Modélisation de gaz
 - ✓ Modèle Raie par Raie,
 - ✓ Modèles à bandes
 - ✓ Modèles globaux (WSGG, SLW,...)

- Limitations fortes sur la puissance de calcul

- Limitations fortes sur la puissance de calcul
 - ✓ Contexte industriel : maillages extrêmement lourds, simulations couplées, ressources dédiées limitées

- Limitations fortes sur la puissance de calcul
 - ✓ Contexte industriel : maillages extrêmement lourds, simulations couplées, ressources dédiées limitées
 - ✓ Solution retenue aujourd'hui au vu des contraintes : WSGG
=> erreurs importantes

- Limitations fortes sur la puissance de calcul
 - ✓ Contexte industriel : maillages extrêmement lourds, simulations couplées, ressources dédiées limitées
 - ✓ Solution retenue aujourd'hui au vu des contraintes : WSGG
=> erreurs importantes
 - ✓ Des besoins en constante augmentation => respect des normes, environnements de plus en plus chauds, etc

- Limitations fortes sur la puissance de calcul
 - ✓ Contexte industriel : maillages extrêmement lourds, simulations couplées, ressources dédiées limitées
 - ✓ Solution retenue aujourd'hui au vu des contraintes : WSGG
=> erreurs importantes
 - ✓ Des besoins en constante augmentation => respect des normes, environnements de plus en plus chauds, etc

Problématique : Comment atteindre la précision des méthodes statistiques (MC) et des modèles spectraux avec un temps de calcul acceptable? => Méthode de rupture

- 1 Contexte
- 2 Un couplage MC-ANN
- 3 Mise en œuvre et résultats
- 4 Conclusion

Alliance de deux méthodes

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)
- Les réseaux de neurones pour l'interpolation et le calcul en champs

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)
- Les réseaux de neurones pour l'interpolation et le calcul en champs
- Objectif :

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)
- Les réseaux de neurones pour l'interpolation et le calcul en champs
- Objectif :
 - ✓ Proposer une nouvelle méthodologie de calcul de champs utilisable à l'échelle industrielle

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)
- Les réseaux de neurones pour l'interpolation et le calcul en champs
- Objectif :
 - ✓ Proposer une nouvelle méthodologie de calcul de champs utilisable à l'échelle industrielle
 - ✓ Atteindre une précision spectrale

Alliance de deux méthodes

- Les méthodes statistiques pour la précision en calcul sonde (Monte Carlo)
- Les réseaux de neurones pour l'interpolation et le calcul en champs
- Objectif :
 - ✓ Proposer une nouvelle méthodologie de calcul de champs utilisable à l'échelle industrielle
 - ✓ Atteindre une précision spectrale
 - ✓ Diminuer drastiquement l'utilisation des ressources de calcul (temps + RAM) / aux méthodes existantes

Alliance de deux méthodes

Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement

Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement
 - ✓ Méthode et modèle : Monte Carlo + modèle de gaz SNB-CK
=> calcul point sonde

Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement
 - ✓ Méthode et modèle : Monte Carlo + modèle de gaz SNB-CK
=> calcul point sonde
 - ✓ Tirage de N points dans le domaine d'étude : calcul de la divergence du flux en ces points

Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement
 - ✓ Méthode et modèle : Monte Carlo + modèle de gaz SNB-CK
=> calcul point sonde
 - ✓ Tirage de N points dans le domaine d'étude : calcul de la divergence du flux en ces points
 - ✓ Entraînement du réseau de neurones sur la base de données :
valeur de $\nabla \cdot q$ pour un ensemble de paramètres
 $(x_i, y_i, T_i, [\text{H}_2\text{O}]_i, [\text{CO}_2]_i)$

Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement
 - ✓ Méthode et modèle : Monte Carlo + modèle de gaz SNB-CK
=> calcul point sonde
 - ✓ Tirage de N points dans le domaine d'étude : calcul de la divergence du flux en ces points
 - ✓ Entraînement du réseau de neurones sur la base de données :
valeur de $\nabla \cdot q$ pour un ensemble de paramètres
($x_i, y_i, T_i, [\text{H}_2\text{O}]_i, [\text{CO}_2]_i$)
 - ✓ Reconstruction du champ de divergence de flux par interpolation

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation



Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues
 - ✓ « boîte noire »



Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues
 - ✓ « boîte noire »
 - ✓ outil magique
 - ✓ ...

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues
 - ✓ « boîte noire »
 - ✓ outil magique
 - ✓ ...
- Les ANN sont des outils statistiques avancés

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues
 - ✓ «boite noire»
 - ✓ outil magique
 - ✓ ...
- Les ANN sont des outils statistiques avancés
 - ✓ Tout dépend de la base de données, de la méthode d'entraînement, des choix paramétriques utilisés, ...



Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Idées reçues
 - ✓ «boîte noire»
 - ✓ outil magique
 - ✓ ...
- Les ANN sont des outils statistiques avancés
 - ✓ Tout dépend de la base de données, de la méthode d'entraînement, des choix paramétriques utilisés, ...
 - ✓ Autrement dit, tout dépend du travail «humain» de conception

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Algorithme de Levenberg- Marquardt : phase d'apprentissage => minimisation écarts entre résultats du réseau et données d'entrée

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Algorithme de Levenberg- Marquardt : phase d'apprentissage => minimisation écarts entre résultats du réseau et données d'entrée
- Régularisation Bayésienne => Aucun hyperparamètre à fixer « en dur »

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Algorithme de Levenberg- Marquardt : phase d'apprentissage => minimisation écarts entre résultats du réseau et données d'entrée
- Régularisation Bayésienne => Aucun hyperparamètre à fixer « en dur »
 - ✓ Adaptation de la topologie

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

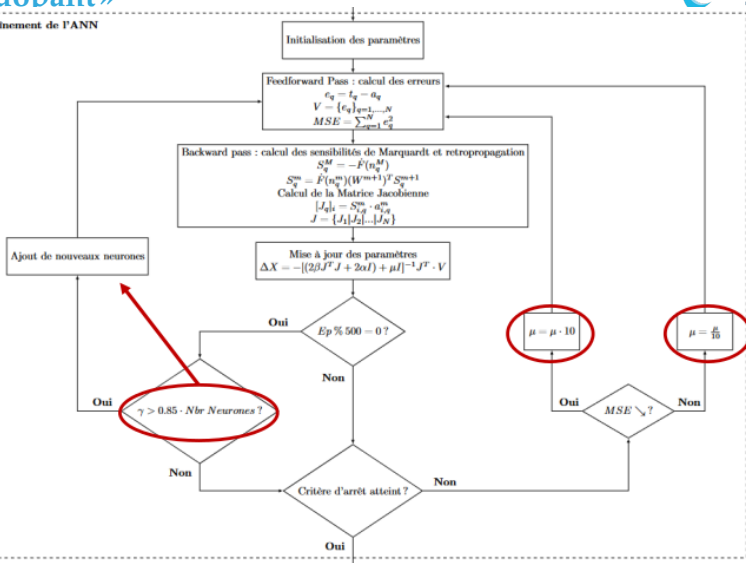
- Algorithme de Levenberg- Marquardt : phase d'apprentissage => minimisation écarts entre résultats du réseau et données d'entrée
- Régularisation Bayésienne => Aucun hyperparamètre à fixer « en dur »
 - ✓ Adaptation de la topologie
 - ✓ Loi d'évolution de μ intégrée

Construction, entraînement et utilisation des réseaux de neurones en modélisation

- Algorithme de Levenberg- Marquardt : phase d'apprentissage => minimisation écarts entre résultats du réseau et données d'entrée
- Régularisation Bayésienne => Aucun hyperparamètre à fixer « en dur »
 - ✓ Adaptation de la topologie
 - ✓ Loi d'évolution de μ intégrée
 - ✓ Intrinsèquement peu sensible à l'overfitting

L'intelligence artificielle comme « produit dopant »

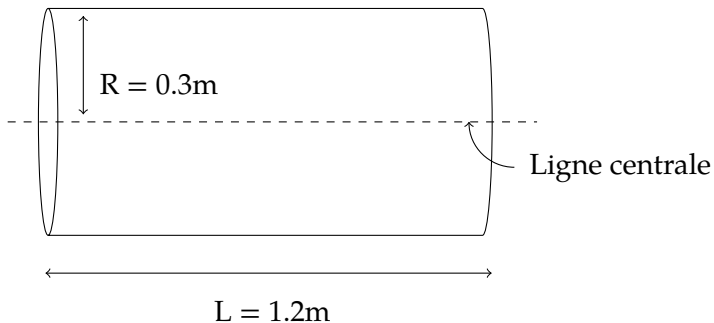
Entraînement de l'ANN





- 1 Contexte
- 2 Un couplage MC-ANN
- 3** Mise en œuvre et résultats
- 4 Conclusion

- Cas académique de type « flamme de diffusion »
 - ✓ Champs de température et d'espèces paramétriques
 - ✓ Pas de variation brutale des grandeurs thermo-physiques

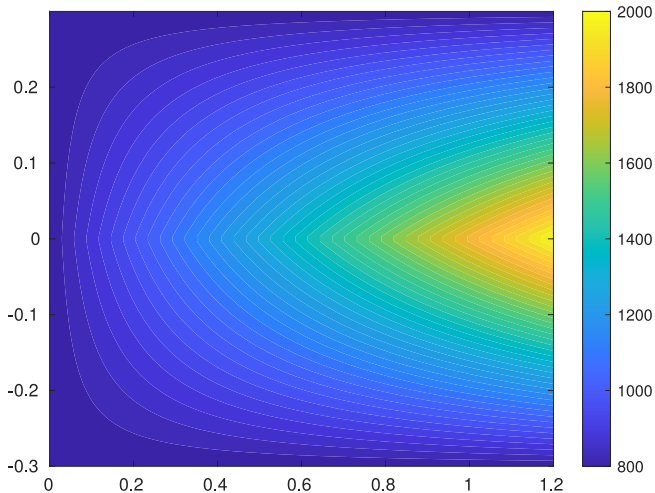


$$T(l, r) = 800 + 1200 \left(1 - \frac{r}{R}\right) \left(\frac{l}{L}\right)$$

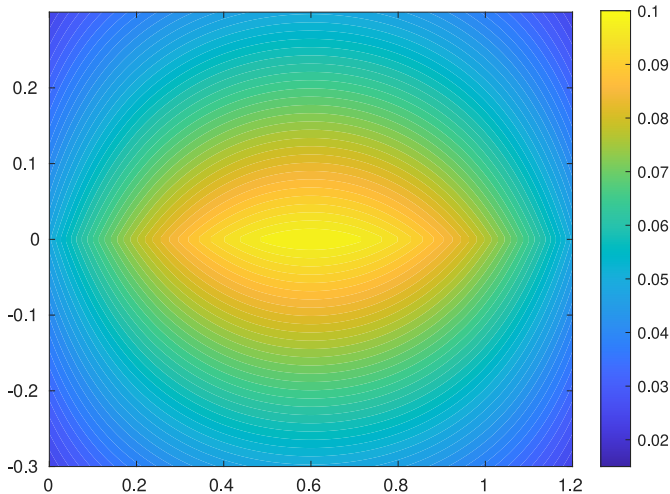
$$x_{H_2O}(l, r) = 0.05 \left[1 - 2 \left(\frac{l}{L} - 0.5\right)^2 \right] \left(2 - \frac{r}{R}\right)$$

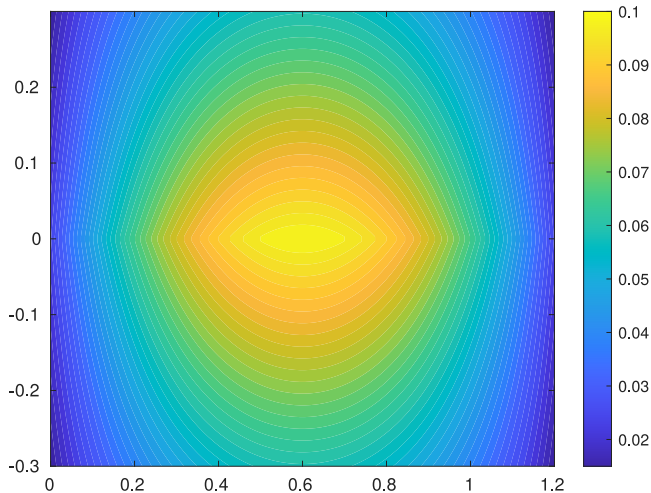
$$x_{CO_2}(l, r) = 0.04 \left[1 - 3 \left(\frac{l}{L} - 0.5\right)^2 \right] \left(2.5 - \frac{r}{R}\right)$$

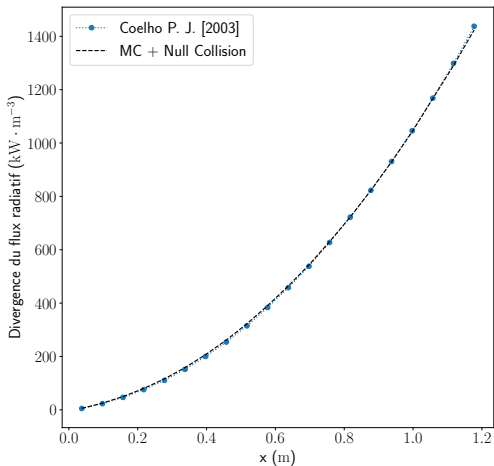
Validation sur un cas benchmark



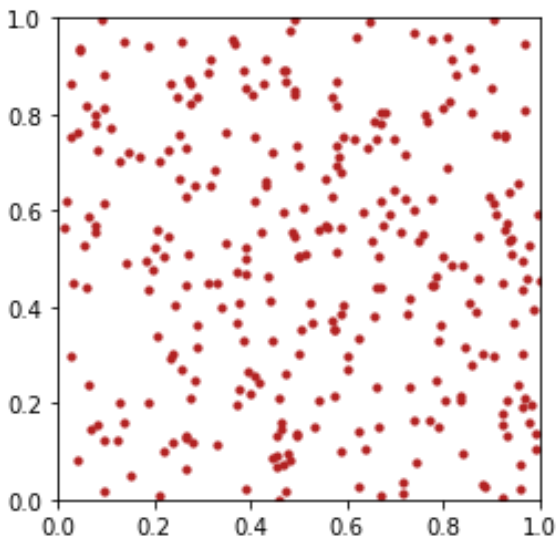
Validation sur un cas benchmark



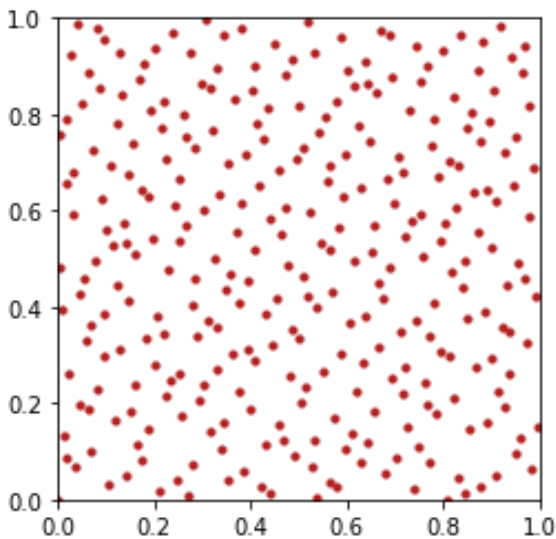


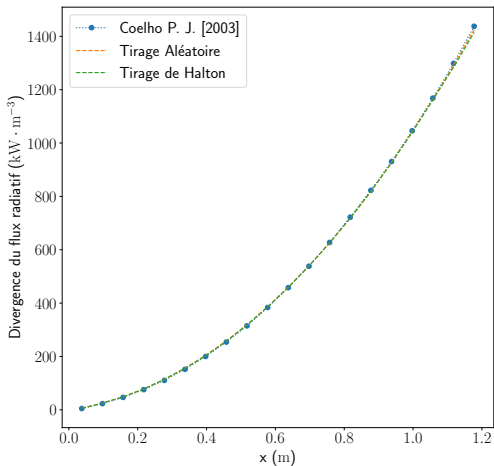


Validation sur un cas benchmark



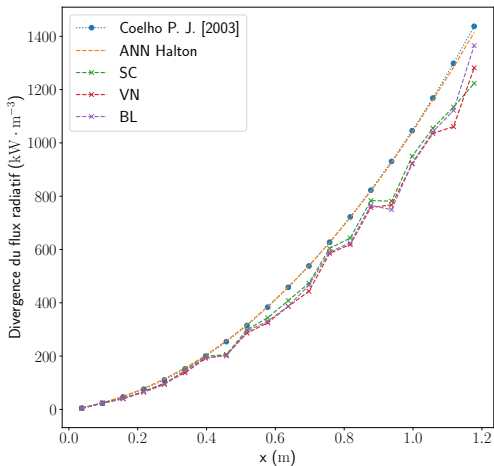
Validation sur un cas benchmark





Méthode	RMSE ($kW.m^{-3}$)
ANN	1.0453
Splines cubiques	15.79
Proche voisin	15.21
Bi-linéaire	14.06

TAB. : Comparaison de la valeur de la RMSE calculée pour les différentes méthodes d'interpolation



Alliance de deux méthodes

- Construction d'une base de données d'entraînement
 - ✓ Méthode et modèle : Monte Carlo + modèle de gaz SNB-CK
=> calcul point sonde
 - ✓ Tirage de N points dans le domaine d'étude : calcul de la divergence du flux en ces points
 - ✓ **Entraînement du réseau de neurones sur la base de données : valeur de $\nabla \cdot q$ pour un ensemble de paramètres $(x_i, y_i, T_i, [H_2O]_i, [CO_2]_i)$**
 - ✓ Reconstruction du champ de divergence de flux par interpolation



Ajout d'un point chaud très ponctuel

- Même champs que précédemment + point chaud paramétrique très intense

- Même champs que précédemment + point chaud paramétrique très intense
 - ✓ Numériquement très complexe à modéliser, même avec des méthodes déterministes

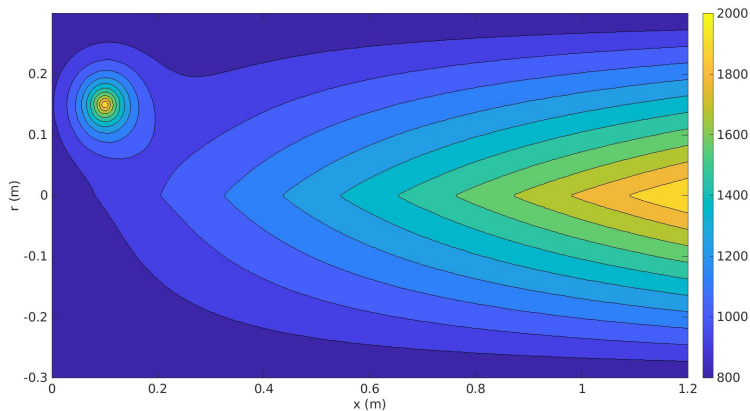
- Même champs que précédemment + point chaud paramétrique très intense
 - ✓ Numériquement très complexe à modéliser, même avec des méthodes déterministes
 - ✓ Typique d'un phénomène de cliquetis dans l'industrie automobile par exemple

- Même champs que précédemment + point chaud paramétrique très intense
 - ✓ Numériquement très complexe à modéliser, même avec des méthodes déterministes
 - ✓ Typique d'un phénomène de cliquetis dans l'industrie automobile par exemple
- La question : comment un ANN peut-il prendre en compte ce type de phénomène ? Peut-il seulement le détecter ?

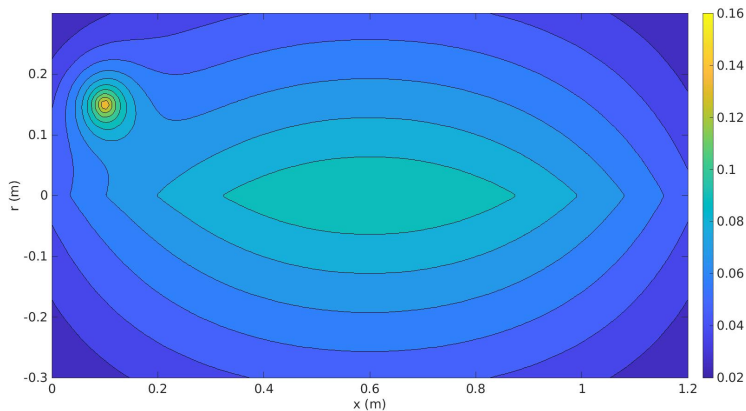
- Même champs que précédemment + point chaud paramétrique très intense
 - ✓ Numériquement très complexe à modéliser, même avec des méthodes déterministes
 - ✓ Typique d'un phénomène de cliquetis dans l'industrie automobile par exemple
- La question : comment un ANN peut-il prendre en compte ce type de phénomène ? Peut-il seulement le détecter ?

Importance de la construction de la base de données

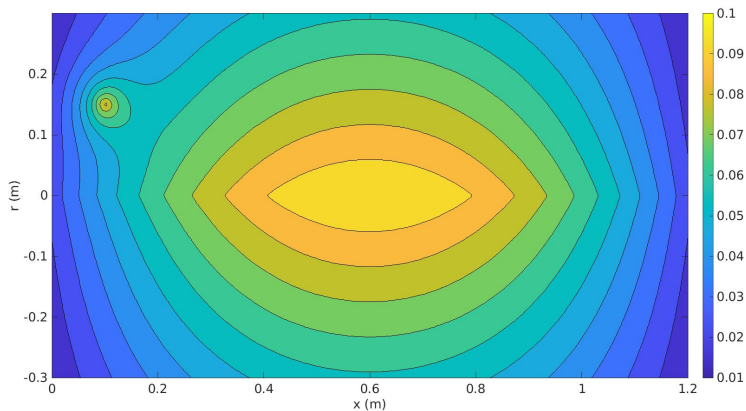
Ajout d'un point chaud très ponctuel



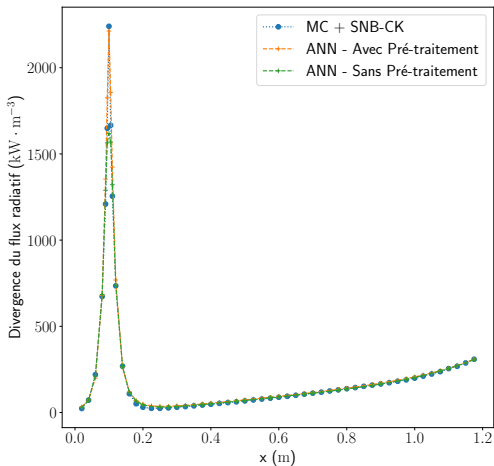
Ajout d'un point chaud très ponctuel



Ajout d'un point chaud très ponctuel



Ajout d'un point chaud très ponctuel



Paramètre	Valeur
Base de données	500 points
Méthode de tirage	Halton
Temps moyen de calcul d'un point de référence	21.3 s
Nombre de neurones	4
Nombre de paramètres	29
Valeur de γ	25
Nombre d'époques	10000
Temps d'entraînement	49.03 s
RMSE	$5.740 \text{ kW} \cdot \text{m}^{-3}$

TAB. : Caractéristiques du réseau de neurones et de l'entraînement - Cas "Point chaud"



- 1 Contexte
- 2 Un couplage MC-ANN
- 3 Mise en œuvre et résultats
- 4 Conclusion**

- La méthode proposée est capable de :
 - ✓ Tracer des champs d'une grandeur radiative en mobilisant peu de ressources de calcul
 - ✓ Atteindre la précision des meilleures méthodes stochastiques
 - ✓ Prendre en considération des événements très ponctuels
 - ✓ S'adapter à la difficulté du problème traité grâce au paradigme bayésien
 - ✓ S'affranchir de certaines limites relatives à ce type d'outil : définition de beaucoup d'hyperparamètres, forte tendance au sur-apprentissage...
 - ✓ Étude d'autres cas académiques avec d'autres type de singularité (bruit numérique, discontinuités)

- Prochaines étapes :
 - ✓ Couplage avec des logiciels commerciaux type Fluent
 - ✓ Étude d'un cas « métier » : test de la méthode sur une chambre de combustion réelle
 - ✓ **Soutenance de thèse d'Alex Royer le 23 juin prochain**



5^{èmes} Journées Annuelles du GDR TAMARYS
26-28 juin 2023 à Nancy



5 conférences invitées

- ❖ Claire Prada, Institut Langevin (Paris) « Résonances locales et dispersion négative dans les guides d'ondes élastiques observées par ultrasons laser – applications »
- ❖ Denis Rochais, CEA Le Ripault (Monts) « Ingénierie numérique des matériaux : une nouvelle stratégie pour concevoir et élaborer des matériaux optimisés »
- ❖ Yann Favenec, LTEN (Nantes) « Un cadre éléments finis pour la résolution de problèmes radiatifs et conducto-radiatifs »
- ❖ Eric Louradour, 3D CERAM-SINTO (Bonnac-La-Côte) « Réalisation de pièces architecturées par impression 3D céramique »
- ❖ Célien Zacharie, Fives Cryo (Golbey) « Modèle réduit pour le pilotage procédé HT Fives Cryo »

Et de nombreuses communications orales et par affiches !

Vous avez encore quelques jours pour vous inscrire aux 5^{èmes} Journées Annuelles (JA) du GDR TAMARYS qui auront lieu sur le campus ARTEM de Nancy ! (26-28 juin 2023)

Ces Journées commenceront le **lundi 26 à 14h00** pour finir le **mercredi 28 à 12h00**.

La manifestation est organisée par le **LEMTA** et l'**UL** de Nancy et bénéficie du partenariat de la **Société Française de Thermique** et du parrainage du **France Interpore Chapter**. Ces Journées sont également soutenues par les pôles scientifiques, Matière, Matériau, Métallurgie, Mécanique (**M4**) et Energie, Mécanique, Procédés, Produits (**EMPP**) de l'Université de Lorraine.

Les inscriptions sont gratuites pour les doctorants, post-doctorants et ATER. Elles sont portées à 75€ HT pour les permanents du GDR (académiques et industriels) et fixées à 400 € HT pour les industriels non membres du GDR.

⇒ **Pour vous inscrire (jusqu'au 14 juin!)**

<https://www.azur-colloque.fr/DR06/inscription/inscription/71/fr>

⇒ Informations pratiques : <https://gdr-tamarys.cnrs.fr/5emes-journees-annuelles-du-gdr-tamarys-26-28-juin-2023/>

3 ateliers thématiques

- ❖ Mise en place de l'exercice d'analyse comparée des méthodes de modélisation du couplage conduction-rayonnement dans des matériaux hétérogènes (coordinateur **Franck Enguehard**, Institut P², Poitiers).
- ❖ Problèmes de thermique dans les plasmas (coordinateur **Yann Cressault**, LAPLACE, Toulouse)
- ❖ Nouveaux matériaux et nouveaux concepts pour la récupération, la conversion et le stockage de la chaleur à haute température (coordinateurs **Olivier Farges**, LEMTA, Nancy & **Gérard Vignoles**, LCTS, Pessac)

2 présentations institutionnelles

- **Fabrice Lemoine**, Co-directeur du PEPR SPLEEN (Soutenir l'innovation pour développer de nouveaux procédés industriels largement décarbonés) « Présentation du PEPR SPLEEN »
- **Christophe Coutanceau**, Délégué Scientifique Cellule Energie CNRS, « Présentation du plan Europe au CNRS »