

MatVir



GÉNÉRATION D'IMAGES DE MATÉRIAUX VIRTUELS PAR APPRENTISSAGE PROFOND

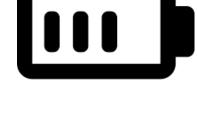
Pourquoi générer des matériaux virtuels?

- Baisse du coût en temps
- Baisse des coûts humains
- Baisse des coûts financiers
- Ecologique









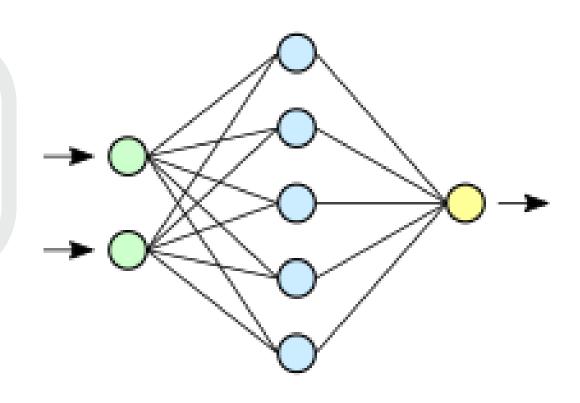


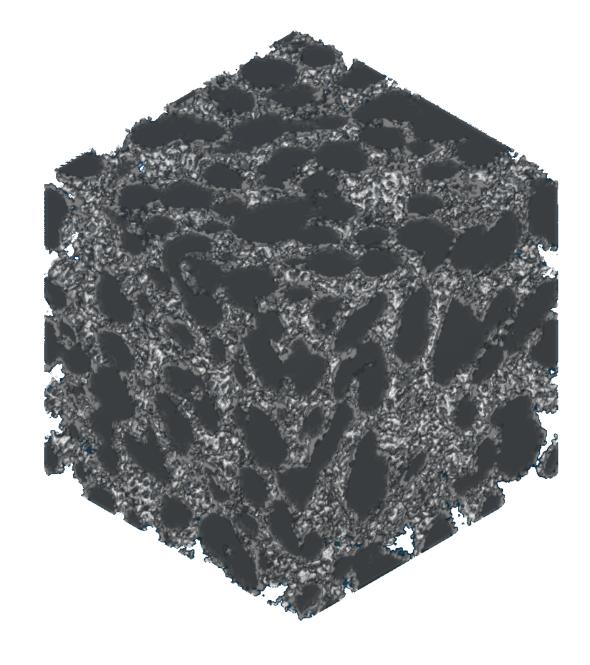
Quels domaines d'application sont concernés?

- Sciences du vivant (matériaux organiques)
- Agriculture (matériaux composites)
- Production et stockage d'énergie (batteries)
- Domotique (capteur d'humidité)
- Transports (parois de propulseur)

Qu'est-ce que l'apprentissage profond?

Méthode itérative visant à résoudre une tâche complexe grâce à des réseaux de neurones.





Objectifs du projet:

- Caractériser les matériaux pour les rendre reproductibles
- Générer des matériaux 3D
- Contraindre les modèles à respecter des propriétés physiques et les valider

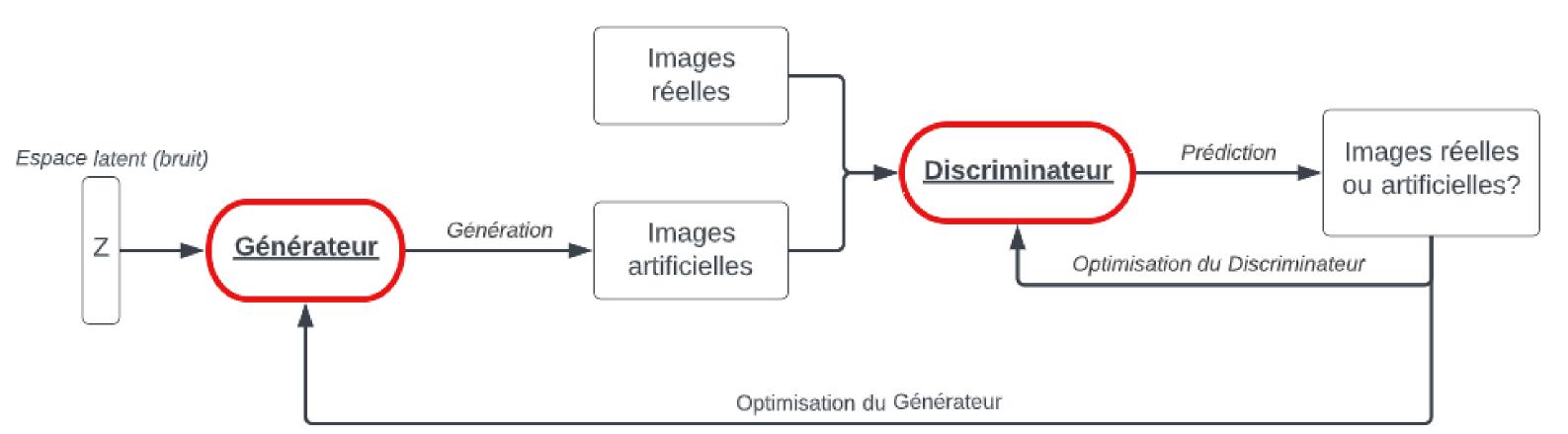


Méthode générative de matériaux virtuel 2D : GAN



Les GANs (**Generative Adversarial Networks** ou réseaux antagonistes génératifs) sont réalisés en apprentissage supervisé.

Fonctionnement: Un générateur et un discriminateur antagonistes. Le discriminateur essaye de distinguer les images générées de celles réelles, tandis que le générateur essaye de le tromper.

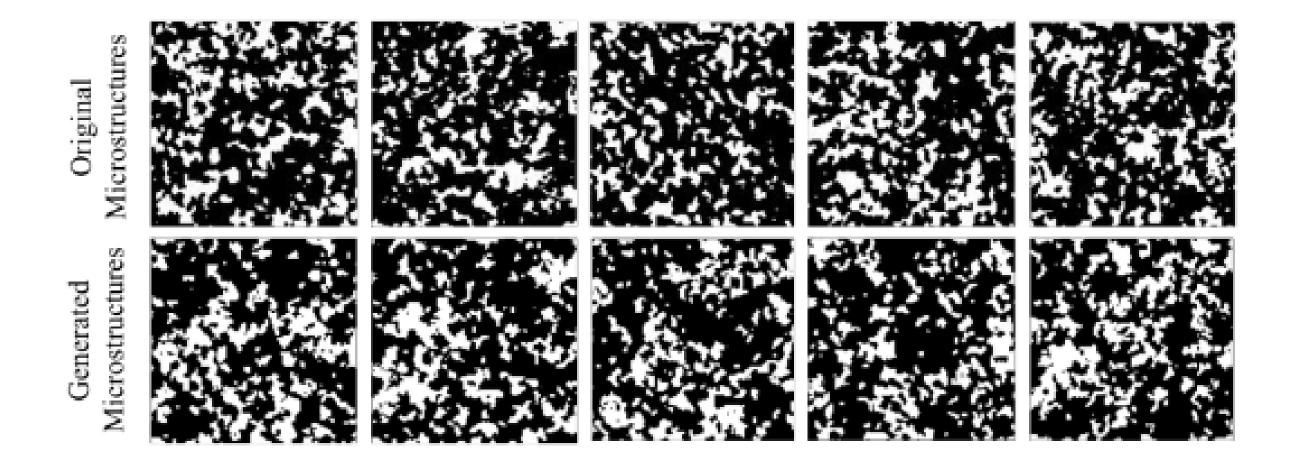


Avantages:

- Très haute précision
- Diversité des échantillons et création de nouveaux échantillons

Inconvénient:

- Entraînement très long car besoin de synchronisation entre le générateur et le discriminateur
- Peut très vite devenir instable



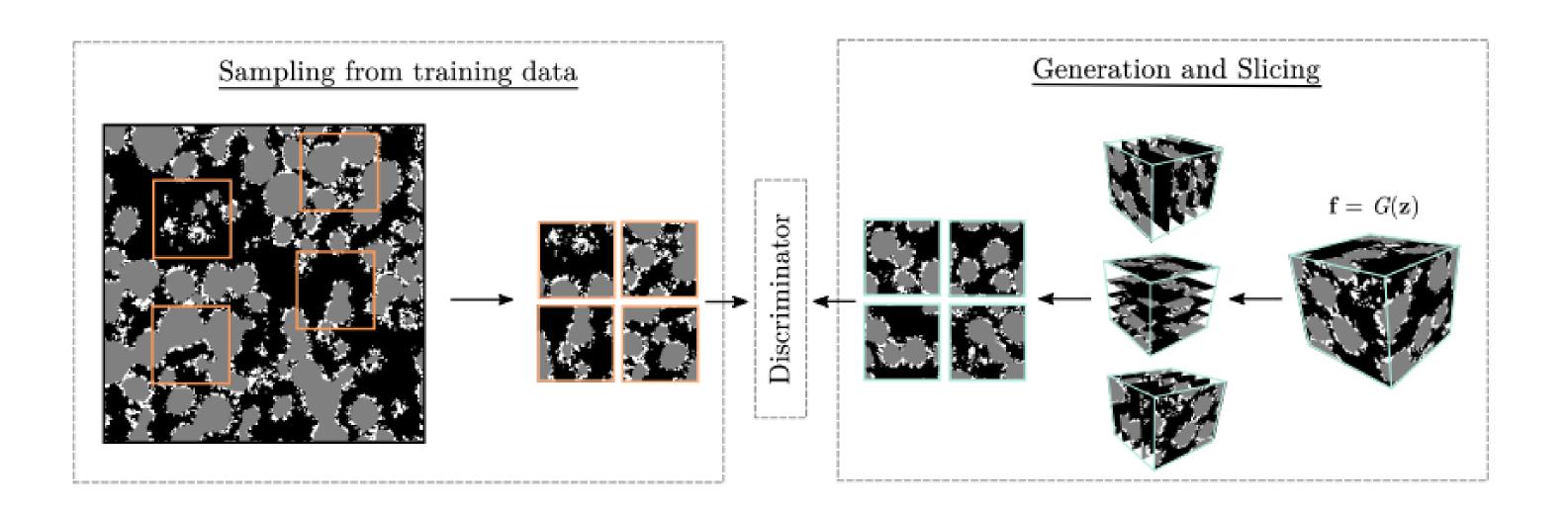
Résultats: Une fois notre GAN entrainé, on est désormais en mesure de générer des surfaces 2D

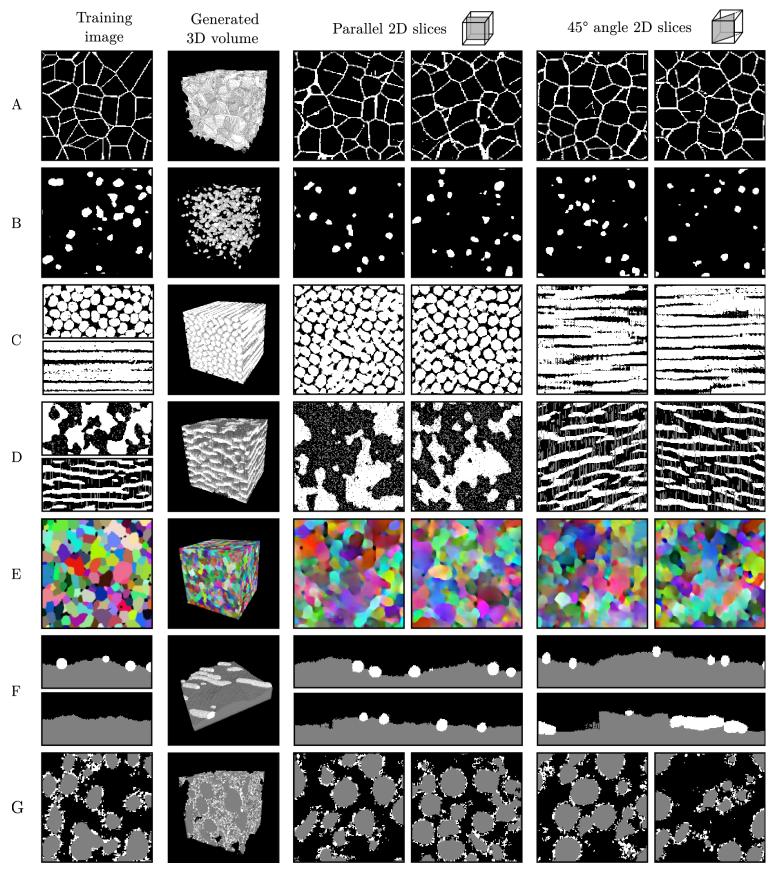


De la 2D vers la 3D



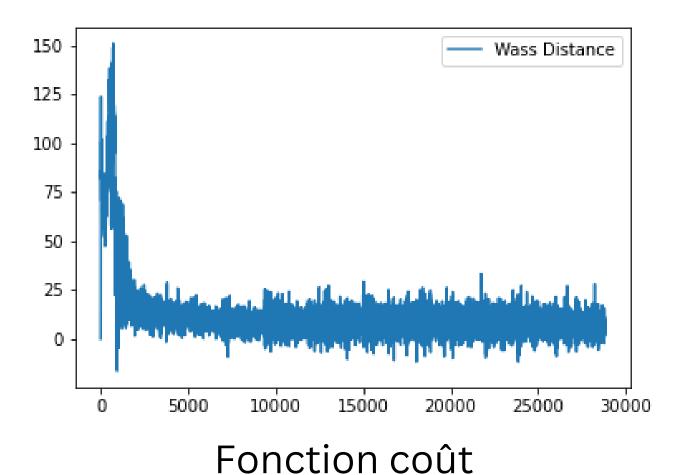
SliceGAN est un outil de génération d'images 3D à partir d'une image 2D. Après obtention d'une microstructure virtuelle, il s'agit de **valider** les propriétés du matériau généré.





GENERATING 3D STRUCTURES FROM A 2D SLICE WITH GAN-BASED DIMENSIONALITY EXPANSION from Steve Kench and Samuel J. Cooper

SliceGAN permet de synthétiser des datasets 3D de haute fidélité, en utilisant une seule image 2D représentative, considérée comme donnée d'apprentissage.

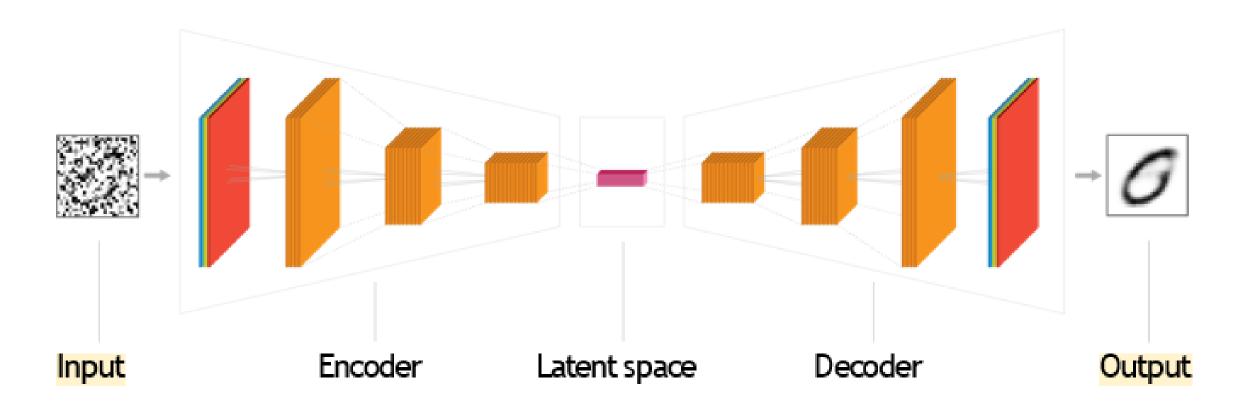




Autre méthode générative de matériaux virtuels 2D : le VAE



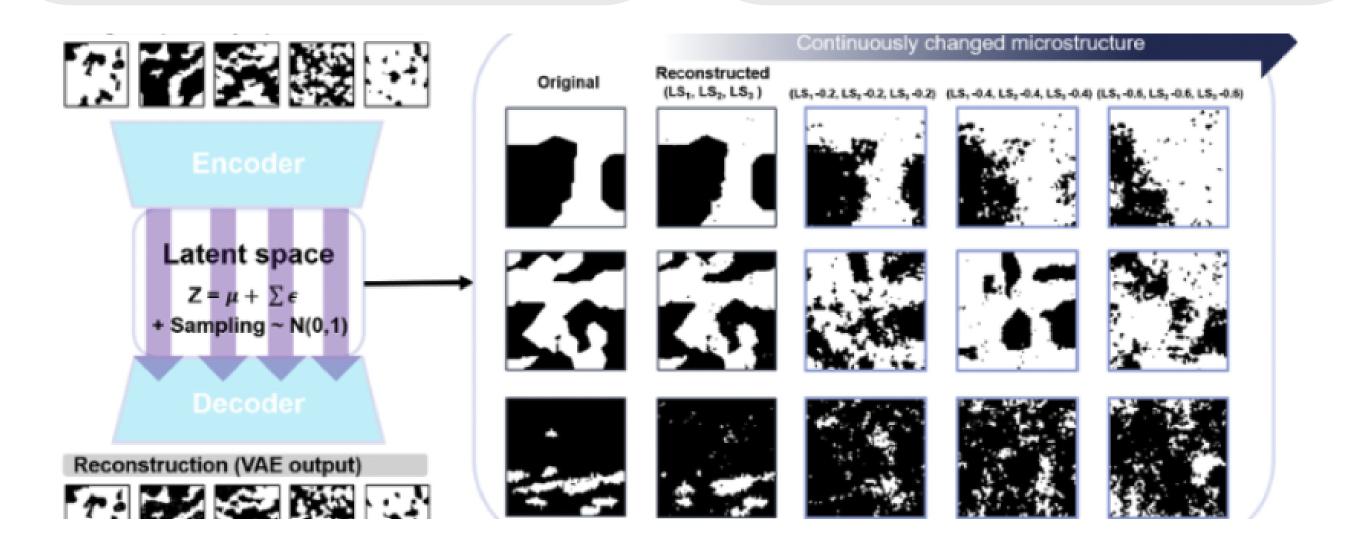
Le VAE (Variational AutoEncoder) est une autre architecture de réseaux de neurones probabilistes qui apprennent à représenter des données de manière latente grâce à un apprentissage non supervisé.



Principe:

- **Réduire la dimension** des données d'entrée
- Générer des nouvelles structures de matériaux

On cherche à **minimiser la fonction de perte** (loss function)
afin que la sortie puisse
ressembler au maximum à la
donnée d'entrée.



Avantages:

- Entraînement plutôt rapide
- Utilisation d'une seule donnée d'entraînement

Inconvénient:

 Pas de haute précision car résultats très proches de la donnée d'entraînement