

Prédiction de la Capacité de Formation des Verres Métalliques : Approches Théoriques et Apprentissage Automatique

I. Introduction

Les verres métalliques sont des alliages métalliques amorphes obtenus par un refroidissement ultrarapide à partir de l'état fondu de l'alliage. La capacité de formation de verre (GFA) constitue un indicateur essentiel pour comprendre, concevoir et développer de nouveaux verres métalliques aux propriétés spécifiques. Pour prédire et évaluer quantitativement la GFA, diverses approches théoriques et expérimentales ont été développées. Parmi celles-ci, on trouve des modèles mathématiques basés sur des considérations thermodynamiques (comme l'énergie libre de Gibbs : G) et cinétiques ((tels que les taux de nucléation et de croissance cristalline), des simulations, et des critères empiriques affinés basés sur les propriétés thermo-physiques mesurables (comme les températures caractéristiques (T_g , T_x , T_l)).

La prédiction de la capacité de formation de verre (GFA) des alliages métalliques peut être abordée principalement de deux manières : par les critères théoriques et par les méthodes d'apprentissage automatique. Ces deux approches diffèrent en termes de principes, de précision, et de flexibilité, chacune ayant ses avantages et ses limites

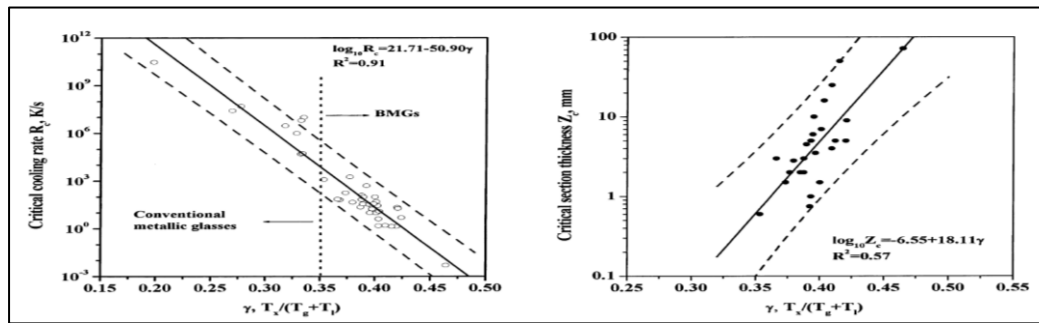
II. Critères Théoriques pour la Prédiction de la GFA

La prédiction de la capacité à former des verres (GFA - Glass Forming Ability) des alliages métalliques par les critères théoriques reposent sur des formules et des modèles mathématiques adimensionnelle (sans unité de mesure) basés sur les propriétés physiques et chimiques des alliages ($T_{rg} = T_g / T_l$, $\gamma = T_x / (T_g + T_l)$, $\gamma_m = (2T_x - T_g) / T_l$). La méthode consiste à établir des corrélations statistiques entre des modèles mathématiques adimensionnels et des paramètres expérimentaux et/ou critiques, notamment la vitesse de refroidissement critique (R_c) et le diamètre critique maximal de l'échantillon (D_{max}), la qualité de ces corrélations est souvent évaluée à l'aide du **facteur de détermination** (souvent noté R^2), qui mesure la force et la direction de la relation entre les variables étudiées.

Les critères théoriques ont l'avantage d'être simples à appliquer et ne nécessitent que des propriétés thermodynamiques ou atomiques accessibles dans les bases de données. Cependant, ils ont leurs limites, car ils sont souvent basés sur des hypothèses simplifiées et ne tiennent pas toujours compte de la complexité des interactions multicomposants dans les alliages. Leur précision diminue donc pour les systèmes complexes.

II.1 Exemples de méthodes d'approches basées sur des corrélations statistiques

La figure ci-dessous illustre la prédiction de la capacité de formation de verre métallique (GFA) pour 40 alliages multicomposants, basée sur une méthode de corrélation statistique simple. Cette méthode utilise un modèle adimensionnel (un critère de la catégorie thermique) défini par $\gamma = T_x / (T_g + T_l)$ et compare les résultats aux deux paramètres critiques expérimentaux R_c (K/s) et D_{max} . Les résultats montrent que **91 %** de la variation de la propriété dépendante R_c (K/s) peut être prédite à partir de la valeur indépendante γ , tandis que **57 %** de la variation de la propriété dépendante D_{max} peut être estimée à partir de la valeur de γ .



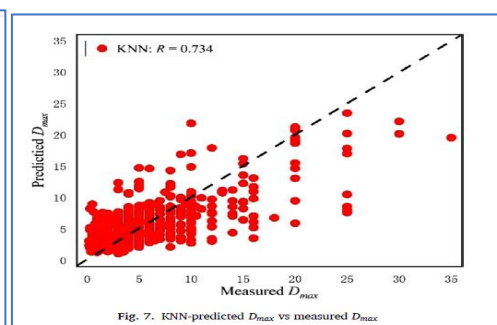
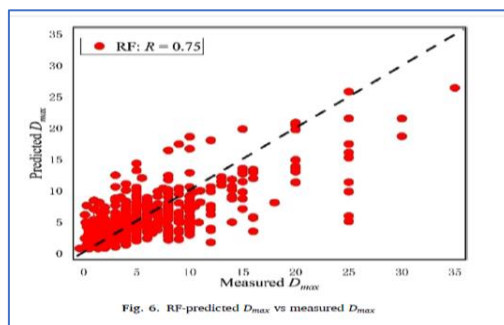
Les approches basses sur des corrélations statistique simple permettent de quantifier et de corréler des données expérimentales existantes avec des paramètres théoriques afin de prédire de nouvelles compositions ayant une GFA élevée.

III. Techniques d'Apprentissage Automatique pour la Prédiction de la GFA

La prédiction de la capacité de formation des verres métalliques (GFA) à l'aide de méthodes d'apprentissage automatique (AA) est un domaine en pleine expansion, car elle permet d'aborder la complexité des alliages multicomposants et de mieux comprendre les facteurs influençant la vitrification. Voici une vue d'ensemble détaillée des étapes et des techniques courantes d'AA utilisées pour prédire la GFA :

- **Régression linéaire et non-linéaire** : Ces méthodes permettent d'établir des relations entre les variables d'entrée (composition chimique, température de transition, propriétés thermodynamiques) et la GFA en ajustant des modèles simples aux données.
- **Arbres de décision et forêts aléatoires** : Les arbres de décision divisent les données en fonction de critères de sélection optimaux, permettant de capturer les relations non linéaires. Les forêts aléatoires, qui combinent plusieurs arbres, améliorent la robustesse et la précision.
- **Machines à vecteurs de support (SVM)** : Utilisées pour classifier les alliages comme ayant une GFA élevée ou faible, les SVM optimisent un hyperplan qui sépare les données et permettent une prédiction fiable.
- **Réseaux de neurones profonds (Deep Learning)** : Ces modèles peuvent traiter un grand volume de données et sont particulièrement utiles pour découvrir des motifs cachés et des relations non linéaires dans des compositions d'alliages complexes.

III.1 Exemples des modèles de prédiction par l'apprentissage automatique



Les deux courbes précédentes illustrent les régressions des modèles KNN et RF (*Random forest*) utilisés pour prédire le diamètre maximal (D_{\max}) sur un ensemble de 660 alliages amorphes. Ces courbes montrent la comparaison entre les valeurs mesurées de D_{\max} et celles prédites par les algorithmes KNN et RF.

IV. Étapes de Développement d'un Modèle de Prédiction par Apprentissage Automatique

Pour construire un modèle de prédiction de la GFA (Glass Forming Ability) en utilisant des techniques d'apprentissage automatique, il est nécessaire de suivre un ensemble d'étapes méthodiques :

1) Collecte des données

- **Base de données de compositions** : Une collection de données sur divers alliages avec leur composition chimique et des étiquettes indiquant si ces alliages ont une capacité de formation de verre (GFA) élevée ou faible.
- **Données expérimentales** : Des mesures expérimentales des propriétés des alliages, telles que la température de transition vitreuse, l'enthalpie de cristallisation, etc.
- **Sources de données** : Bases de données de recherche, articles scientifiques, bases de données open-source sur les matériaux (ex : ICSD, Springer Materials).

2) Sélection des descripteurs (features)

- **Propriétés atomiques** : Rayon atomique, électronégativité, volume atomique, etc.
- **Propriétés thermodynamiques** : Enthalpie de mélange, entropie de mélange, température de fusion.
- **Caractéristiques physiques et mécaniques** : Densité, module de Young, etc.
- **Ratios entre éléments** : Comme le rapport entre les plus petits et les plus grands atomes, les différences d'électronégativité, etc.

3) Prétraitement des données

- **Nettoyage des données** : Gestion des valeurs manquantes, suppression des valeurs aberrantes, correction des erreurs de mesure.
- **Standardisation et normalisation** : Mise à l'échelle des données pour que les caractéristiques aient des valeurs comparables.
- **Réduction de dimensionnalité** : Utilisation de techniques comme l'analyse en composantes principales (PCA) pour réduire le nombre de descripteurs tout en gardant les informations importantes.

4) Sélection et entraînement du modèle

- **Choix de l'algorithme**
- **Modèles de régression** : Régression linéaire, régression Ridge/Lasso pour des relations simples.
- **Algorithmes de classification** : Arbres de décision, forêts aléatoires, SVM pour une classification des alliages.
- **Modèles avancés** : Réseaux de neurones profonds, algorithmes d'ensemble comme le gradient boosting.

- **Entraînement** : Diviser les données en ensembles d'entraînement et de validation. Utiliser une validation croisée pour évaluer la robustesse du modèle.

5) Optimisation des hyper-paramètres

- Utilisation de techniques comme la recherche par grille (grid-search) ou l'optimisation bayésienne pour ajuster les paramètres des modèles et améliorer leur performance.

6) Évaluation du modèle

- **Métriques d'évaluation** : Coefficient de détermination (R^2), erreur quadratique moyenne (MSE), précision, rappel et F1-score pour les modèles de classification.
- **Validation croisée** : Vérifier que le modèle ne surapprend pas et qu'il est capable de généraliser à de nouvelles données.

7) Interprétation et visualisation des résultats

- **Analyse des contributions** : Identifier quelles caractéristiques influencent le plus la prédiction de la GFA.
- **Graphiques** : Courbes ROC, matrices de confusion, visualisation des résidus, etc.

8) Déploiement et Prédiction

- Intégrer le modèle entraîné dans un logiciel ou une application pour faire des prédictions sur de nouvelles compositions d'alliages.

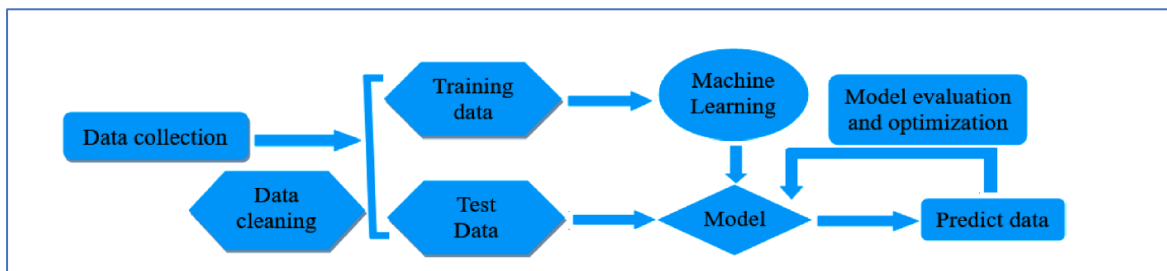


Fig : Processus général de développement d'un modèle d'apprentissage automatique

En suivant les étapes précédentes, il est possible de développer un modèle d'apprentissage automatique capable de prédire la capacité de formation de verres métalliques de manière efficace et fiable.

V. Importance des modèles dans la Prédiction de la GFA

La construction d'un modèle pour prédire la GFA (Glass Forming Ability) des verres métalliques à l'aide de l'apprentissage automatique sert à plusieurs objectifs cruciaux dans la recherche et le développement des matériaux :

a) Accélérer la découverte de nouveaux matériaux

- **Gain de temps et de coûts** : Les expérimentations physiques pour découvrir de nouveaux alliages capables de former des verres métalliques sont coûteuses et longues. Un modèle prédictif permet de réduire considérablement le nombre d'expériences nécessaires en identifiant rapidement les compositions prometteuses.
- **Rationalisation des recherches** : Cela permet aux chercheurs de se concentrer sur des compositions d'alliages ayant une probabilité élevée de former des verres métalliques, optimisant ainsi le processus de découverte.

b) **2. Compréhension approfondie des mécanismes sous-jacents**

- *Analyse des descripteurs importants* : L'utilisation de modèles d'apprentissage automatique permet d'identifier les caractéristiques ou combinaisons de propriétés qui influencent le plus la GFA. Cela peut aider à mieux comprendre les facteurs déterminants dans la formation des verres métalliques et affiner les théories existantes.

- *Exploration de corrélations complexes* : L'apprentissage automatique est capable de capturer des relations non linéaires et des interactions entre plusieurs variables, ce qui peut échapper aux méthodes analytiques classiques.

c) **3. Optimisation des processus de fabrication**

- *Ajustement des compositions* : En fournissant des prédictions précises, le modèle peut aider à ajuster la composition des alliages pour optimiser la GFA, augmentant ainsi la qualité et la stabilité des verres métalliques produits.

- *Amélioration de la fiabilité* : Les fabricants peuvent utiliser ces modèles pour réduire les défauts et améliorer la répétabilité des processus de production.

d) **4. Approche prédictive pour la recherche exploratoire**

- *Simulation virtuelle de tests* : Au lieu de tester chaque composition dans un laboratoire, les modèles prédictifs permettent de simuler virtuellement des centaines, voire des milliers, de compositions. Cela facilite l'identification de nouvelles combinaisons d'éléments qui n'ont pas encore été étudiées expérimentalement.

- *Innovation accélérée* : Cette approche augmente le potentiel d'innovation dans le développement de nouveaux matériaux aux propriétés uniques, comme des alliages à haute résistance et faible densité, ou des verres métalliques résistants à la corrosion.

e) **5. Applications Industrielles et Technologiques**

- *Conception de nouveaux alliages* : Dans des secteurs tels que l'aérospatiale, l'électronique, et la médecine, la prédiction précise de la GFA permet de concevoir des matériaux avancés adaptés à des applications spécifiques.

- *Réduction des risques de défaillance* : En utilisant des alliages dont la capacité à former un verre est connue à l'avance, les industriels peuvent minimiser les risques de cristallisation imprévue ou de formation de phases indésirables.

VI. Conclusion

En conclusion, la prédiction de la capacité de formation de verre (GFA) des alliages métalliques est essentielle pour le développement de nouveaux matériaux aux propriétés spécifiques.

Les approches théoriques offrent des modèles simples basés sur des propriétés mesurables, mais leur précision diminue dans les systèmes complexes.

L'apprentissage automatique, quant à lui, représente une méthode prometteuse pour aborder la complexité des alliages multicomposants, en permettant l'analyse de relations non linéaires et en identifiant des descripteurs cruciaux influençant la GFA.

Grâce à ces techniques, les chercheurs peuvent accélérer la découverte, optimiser les processus de fabrication et favoriser l'innovation, tout en réduisant les coûts expérimentaux. Ces outils facilitent ainsi la conception de nouveaux alliages adaptés aux besoins industriels, tout en minimisant les risques de défaillance liés à la cristallisation imprévue.