

Hybridation de modèle multi-physique et d'apprentissage (IA-ML) pour étudier le comportement d'un réacteur catalytique chimique

Contexte :

L'utilisation de modèle numérique couplé avec des techniques d'apprentissage est de plus en plus récurrente dans le domaine du génie chimique. Dans le cadre de ce projet, un réacteur dit « réacteur catalytique à lit fixe » est étudié. Dans ce type de réacteurs, plusieurs phénomènes physiques sont couplés et donnent naissance à un comportement multi-physique complexe. Un modèle multi-physique existant de ce réacteur est mis en place et permet de générer un grand nombre de données (gProms de la société Siemens). L'enjeu est d'exploiter les contraintes du réacteur et des données générées par le modèle multi-physique afin de construire un modèle d'apprentissage.

Objectif :

L'objectif du projet est de concevoir et de valider un modèle de type réseau de neurones (éventuellement profond) représentant le comportement d'un réacteur catalytique à lit fixe en intégrant les contraintes issues des processus physiques et chimiques à l'œuvre (phénomènes de thermique, d'écoulement,). Le projet s'intéressera plus particulièrement aux « physics-informed neural networks » (PINNs) proposés afin d'hybrider des méthodes d'IA et des contraintes physiques.

Travail attendu :

1. Etat de l'art : physics-informed neural networks (PINNs) et applications de ce type de réseaux de neurones. Des documents pour commencer cette étape pourront être mis à disposition pour les étudiants.
2. Etude des contraintes multi-physiques du réacteur pour comprendre quelles contraintes à intégrer dans le modèle PINN – en collaboration proche avec la doctorante. Cette partie est plus focalisée sur l'exploitation des données issues du modèle multi-physique.
3. Prise en main de codes existant (pytorch / tensorflow) pour mettre en œuvre des PINNs en intégrant progressivement les différentes contraintes physiques.
4. Validation expérimentale des PINNs proposés

Outils :

- pour la partie machine learning : pytorch et/ou tensor flow
- pour la partie simulateur multi-physique : travail avec la doctorante

Encadrement :

- Liantsoa Randriambololona (doctorante)
- Arnaud Cockx (EC au GPE), Philippe Schmitz (EC au GB), Marie-José Huguet (EC au GEI)

Mails des encadrants : liantsoa.randriambololona@insa-toulouse.fr, cockx@insa-toulouse.fr, schmitz@insa-toulouse.fr, huguet@insa-toulouse.fr