Science @ifpen
N° 61 - Septembre 2026

Rédigé le 01 octobre 2026

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale



Alors que les défis énergétiques s’intensifient, la modélisation numérique et l’intelligence artificielle deviennent des leviers incontournables pour comprendre des phénomènes complexes et concevoir de nouveaux systèmes. Ce numéro spécial rassemble six brèves scientifiques faisant appel aux compétences des chercheurs de la Direction « Sciences et Technologies du Numérique » qui développent, à différentes échelles et selon des approches complémentaires, les outils et méthodes innovantes pour répondre aux enjeux stratégiques et environnementaux de demain.

Le dossier s’ouvre par les modèles numériques dédiés à la qualité de l’air, qui scrutent les phénomènes du micro?urbain au territoire pour identifier les facteurs d’impact et guider des décisions locales et stratégiques. La question du stockage géologique du CO_2 est ensuite mise en lumière : simulations, enjeux de sûreté et perspectives techniques éclairent les conditions d’un déploiement fiable et responsable. Le contrôle éolien à IFPEN illustre l’alliance entre maîtrise physique et apprentissage automatique, avec un focus sur l’apprentissage par renforcement qui promet d’optimiser la production et la durabilité des parcs. Plus largement, l’intelligence artificielle s’invite dans les modèles de fermeture pour la mécanique des fluides numérique multi?échelle, apportant des solutions pour réduire les approximations et améliorer la précision des prédictions. L’électromobilité est abordée sous l’angle de la méthodologie de conception optimale des infrastructures de recharge, croisant optimisation, usage et contraintes territoriales. Enfin, les méthodes d’IA génératives pour la conception de microstructures catalytiques démontrent comment l’algorithme accélère la découverte de matériaux performants.

Ces brèves témoignent d’un même fil conducteur : l’intégration de modèles physiques, de données et d’algorithmes pour répondre à des défis sociétaux complexes. Elles illustrent comment les chercheurs d’IFPEN, en lien avec les industriels et décideurs, mettent les sciences et technologies du numérique au service de la transition énergétique et écologique, en déployant des solutions innovantes.

Très bonne lecture,

Mongi Ben Gaid, Giovanni De Nunzio, Thibault Faney, Jean-Marc Gratien, Stéphane Jay, Jean-François Lecomte, Jordan Rudloff, Antonio Sciarretta, Delphine Sinoquet, Quang Huy Tran,
Le groupe adjoint scientifique de la Direction Sciences et Technologies du Numérique

LES BRÈVES

La pollution atmosphérique demeure un enjeu majeur de santé publique, notamment dans les grandes agglomérations, malgré le renouvellement progressif du parc automobile et l'essor des mobilités actives, grâce à des aménagements urbains dédiés. De nouvelles valeurs limites européennes de concentration de polluants dans l'air, davantage alignées sur les recommandations de l'OMS[1], seront applicables en 2030. Les collectivités ont donc besoin d'outils capables d'évaluer les niveaux et les sources de pollution en vue d'étayer des scénarios de réduction.

De tels outils existent mais peinent à restituer la forte variabilité de la pollution à faible échelle, typiquement celle d'une rue. En effet, les émissions changent non seulement avec le trafic, mais aussi avec l'évolution rapide de la météorologie, sans oublier que les bâtiments modifient localement les écoulements d'air. Ainsi, les stations de mesure, bien qu'indispensables, ne peuvent décrire seules cette variabilité sur toute une agglomération.

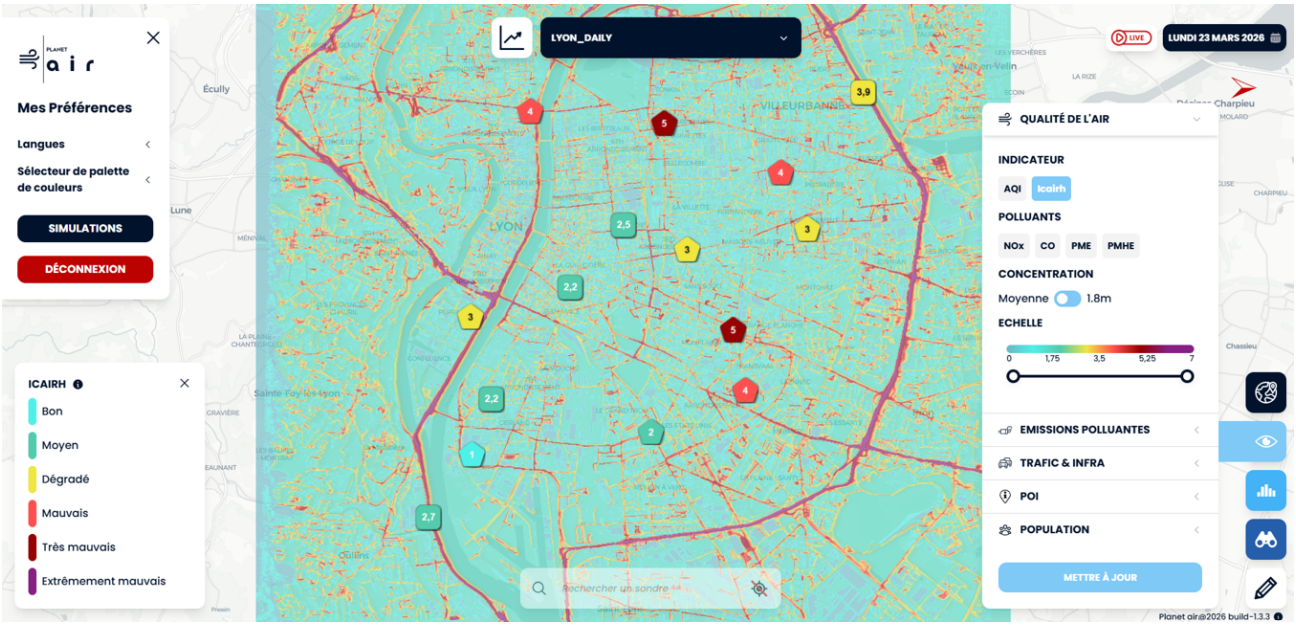


Figure 1 : Représentation de l'indice de la qualité de l'air à l'échelle de la rue dans l'agglomération lyonnaise : concentrations simulées avec capteurs virtuels (représentés par des pentagones) produits par la plateforme PLANET'AIR et valeurs données par les stations de mesure implantées sur le territoire (représentées par les symboles carrés).

IFPEN a développé une méthodologie complète reliant une modélisation de la dispersion atmosphérique des polluants avec les données issues du monde réel, notamment des mesures météorologiques, les émissions liées au trafic routier et la morphologie urbaine. Les résultats du modèle ont été ensuite confrontés aux données d'observation de la qualité de l'air. L'outil ainsi obtenu est mis en œuvre via une plateforme accessible en SaaS : PLANET'AIR [1]. Celle-ci produit des cartes horaires à haute résolution de la pollution de l'air et propose de connaître les concentrations en tout point via des « capteurs virtuels », tout en permettant de comparer des scénarios de mobilité ou d'aménagement.

Cette approche a fait l'objet d'une évaluation approfondie sur l'agglomération lyonnaise (figure 1), avec une validation par rapport à diverses stations de mesure, sur plusieurs jours, et en couvrant des conditions météorologiques et de circulation variées. Les résultats obtenus confirment l'intérêt de cette approche qui permet de prédire avec précision les niveaux d'exposition des populations, démontant ainsi l'importance de prendre en compte :

- des données d'émissions à haute précision spatiale et temporelle [2] ;
- des conditions météorologiques locales ;
- la complexité géométrique des bâtiments, lesquels canalisent ou entravent les flux d'air.

PLANET'AIR ouvre la voie à une estimation plus fine de l'exposition des populations et, en aidant à identifier les facteurs qui gouvernent la qualité de l'air, cette plate-forme fournit aux acteurs territoriaux des éléments quantitatifs pour hiérarchiser leurs actions de prévention et de lutte.

Ces développements ont été soutenus par plusieurs projets collaboratifs avec financement public :
OLGA — Programme Horizon 2020 / European Green Deal
MAGPIE — Programme Horizon 2020 / European Green Deal
SPARC — ADEME – ADEIP
RTAMS — ANR – PREMAT
AMELIA — DIAT / Caisse des Dépôts et Consignations (CDC)

[1] Directive européenne concernant la qualité de l'air UE2024/2881

Références :

[1] Sabiron, G., Jay, S., Agelas, L., Speirs, E., Feng, G., and Bussod, S., "***From Road Traffic to Virtual Air Quality Sensors: PLANET'AIR - An Integrated Mesoscopic Modelling Framework***", in Proceedings of TAP 2025 (Transport and Air Pollution), 2025.

[2] Bussod S., and Sabiron G., ***"Deep learning-based method for an assessment of road traffic pollutant estimation from predicted driving behaviors»***, IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA), Miami, FL, USA, 2024, pp. 658-663
>> DOI : https://doi.org/10.1109/ICMLA61862.2024.00095

Contact scientifique : Guillaume Sabiron

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

La qualité de l'air au coin de la rue : l'apport des modèles numériques

L’étude dite « benchmark SPE11 », déployée sous l'égide de la Society of Petroleum Engineers (SPE), a mobilisé des équipes de chercheurs issues d'universités, d'organismes de recherche et d'entreprises spécialisés dans le stockage géologique du CO? [1]. Son objectif était de comparer les performances des simulateurs numériques dédiés à cette application. Sur la base de cas-tests, avec des données d'entrée et des critères d'évaluation communs, cette action a permis d'analyser la capacité des codes de calcul à reproduire les principaux processus physiques intervenant lors de l'injection et de la migration du CO? dans les réservoirs géologiques. Cette démarche visait principalement à renforcer la confiance dans les simulateurs utilisés pour la conception et l'évaluation des projets de stockage, en évaluant les écarts entre les résultats obtenus.

Pour les codes faisant l’objet du benchmark, les principales difficultés résident aussi bien dans la physique, avec la simulation d'écoulements multiphasiques en milieu fortement hétérogène et le couplage de plusieurs phénomènes (capillarité, gravité, dissolution du CO?, etc.), que dans le numérique, avec des défis liés à la stabilité des schémas de calcul, à la convergence des solveurs et à la représentation des interfaces entre phases.
La Figure 1 présente, d’une part, les hétérogénéités du réservoir étudié ainsi que la position des deux puits injecteurs de CO? et, d’autre part, la distribution finale du CO? dissous dans l’eau, révélant la présence de digitations gravitaires associées au transfert de CO? vers la phase aqueuse.

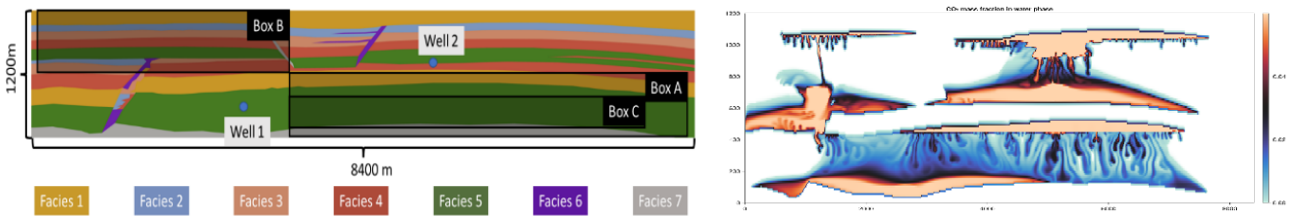


Figure 1 : Distribution des facies lithologiques dans le réservoir et emplacement des puits injecteurs Well1 et Well2 (à gauche), distribution finale du CO_2 dissous dans l’eau obtenue avec le simulateur d’IFPEN : Geoxim (à droite)

Au total, 45 équipes issues de grands instituts de recherche et d'entreprises se sont inscrites. Les simulateurs ont été comparés en fonction à la fois de leurs résultats physiques (masse de CO_2 dans le réservoir, quantité de CO_2 dissous dans l’eau, températures, …) et de leurs performances numériques (tailles des pas de temps, nombre cumulé d’itérations du solveur non linéaire et du solveur linéaire). Parmi ces équipes, seules 18, dont IFPEN avec le simulateur Geoxim, ont produit des résultats retenus dans l'étude comparative [2]. IFPEN s'est ainsi distingué en proposant des résultats cités à plusieurs reprises comme références, notamment comme résultats médians pour l’un des trois cas étudiés.
Ce benchmark a permis d’évaluer les performances de Geoxim, tant en termes de qualité des solutions obtenues que d’efficacité numérique, aussi bien au niveau des solveurs linéaires que non linéaires. Aujourd'hui largement adopté par la communauté scientifique, le benchmark SPE11 constitue un outil de référence pour la validation de nos développements de codes. Il nous permet d'évaluer la robustesse et la précision de nos nouveaux schémas numériques [3], ainsi que la qualité de nos algorithmes de maillage et de nos choix de modélisation [4].

Références :

[1] Nordbotten, J. M., et al. (2024). ***The 11th Society of Petroleum Engineers Comparative Solution Project: Problem Definition.*** SPE Journal, 29(5), 2507–2524.
>> DOI : https://doi.org/10.2118/218015-PA

[2] Nordbotten, J. M., et al. (2025). ***Benchmarking CO? Storage Simulations: Results from the 11th Society of Petroleum Engineers Comparative Solution Project.*** International Journal of Greenhouse Gas Control, 148, 104519.
>> DOI : https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2025.104519

[3] ***Application of Convergent Finite-Volume Methods on Polyhedral Grids for CO_2 Injection Simulation in Deep Saline Aquifers***, L. Astart, S. de Chaisemartin, C. Delage, G. Enchéry, I. Faille; IFPEN. ECMOR 2026, 8-11 September 2026, Porto, Portugal.

[4] ***Modeling of Hydrate Formation in CO_2 Geological Storage - Application to The 11th SPE Comparative Solution Project***, E. Flauraud, D. Ding, A. Michel, IFPEN. SPE Reservoir Simulation Conference , Galveston, Texas, USA, March 2025.
>> DOI : https://doi.org/10.2118/223858-MS

Contacts scientifiques : Eric Flauraud, Anthony Michel, Guillaume Enchery

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

Stockage géologique du CO? : Geoxim se compare avantageusement à d’autres simulateurs numériques

Pour maximiser la production d'énergie éolienne et rationnaliser l'exploitation, les opérateurs conçoivent des parcs éoliens qui regroupent un nombre de plus en plus important de turbines. Or, dans certaines conditions de vent, il arrive fréquemment que les éoliennes interagissent par ce qu'on appelle l'effet de sillage. Le sillage est créé derrière le rotor lorsque celui-ci intercepte l'énergie cinétique du vent pour la convertir en électricité. Du fait de la conservation de l'énergie, une zone de déficit de vitesse du vent apparaît alors, assortie d'une turbulence plus élevée. Chaque sillage, dont la longueur est de plusieurs dizaines de fois le diamètre du rotor qui l'engendre, peut alors perturber le fonctionnement des autres éoliennes situées en aval, comme le montre la Figure 1, où des conditions atmosphériques exceptionnelles ont permis de visualiser le phénomène. Ces sillages induisent une perte de production importante ainsi qu'une sollicitation mécanique accrue.



Figure 1 : Photo aérienne des effets de sillage visibles sur le parc éolien en mer Horns Rev 1 - Copyright Vattenfall

Pour atténuer au maximum ces effets, IFPEN travaille sur plusieurs méthodes :

- La première s'applique dès la conception et consiste à intégrer l'ensemble des conditions de vent attendues pendant la durée de vie du parc, afin de choisir l'emplacement des éoliennes de manière à minimiser leurs influences mutuelles [1].
- La seconde, activée en opération, consiste à piloter de manière indépendante chaque éolienne en fonction des conditions de vent. Pour ce faire, il est possible de rediriger le sillage en modifiant l'angle de lacet de la nacelle, comme l'illustre la Figure 2.

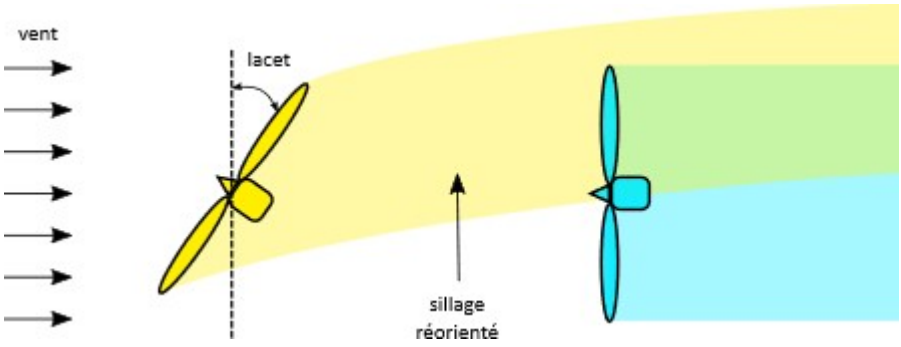
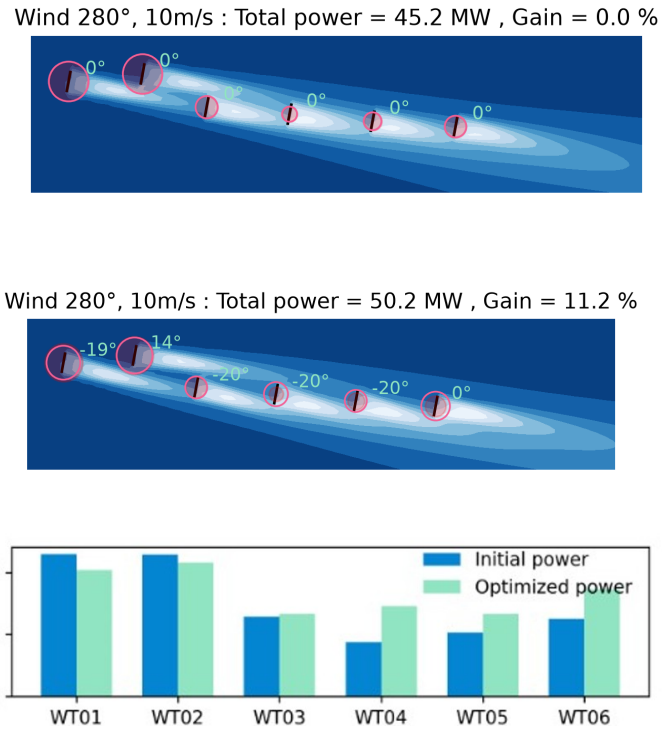


Figure 2 : Réorientation de sillage avec contrôle de lacet

Modifier l'angle de lacet (initialement nul pour que l'éolienne soit face au vent), va entraîner une baisse de production de l'éolienne concernée. Il y a donc un jeu d'angles optimal à trouver pour diminuer la puissance de certaines éoliennes mais augmenter la puissance d'autres, avec un bilan global maximisé (figure 3).



a. Fonctionnement standard d'un parc éolien : chaque éolienne est pilotée individuellement pour faire face au vent incident.

b. Contrôle coordonné du parc éolien : on optimise la production en désalignant intentionnellement les éoliennes par rapport à la direction du vent.

c. Puissance produite par chaque turbine avant et après application du contrôle par redirection de sillages.

Figure 3. Le contrôle par redirection de sillage permet d'augmenter la production totale d'un parc éolien (la taille du cercle rouge est proportionnelle à la production de l'éolienne).

Calculer ces angles n'est pas une chose aisée car les phénomènes aérodynamiques sont notoirement connus pour être complexes à modéliser. De plus, optimiser la production électrique en temps réel nécessite des modèles à la fois fiables et rapides en termes de temps de calcul. De tels modèles sont implémentés dans la suite logicielle FarmShadow, développée par IFPEN, pour prédire la production des parcs éoliens en fonction de conditions de vent et d'angle de lacet donnés. L'utilisation intensive de ces modèles et de la « fonction de coût » créée avec FarmShadow permet alors de trouver les angles de lacet qui maximisent la production électrique globale tout en garantissant un niveau de sollicitation mécanique des éoliennes qui soit acceptable du point de vue de leur durée de vie en exploitation [2]. En outre, des algorithmes d'estimation permettent d'évaluer certains paramètres en fonction des observations faites par des capteurs présents dans le parc [3,4] et ainsi d'adapter la modélisation.

Toutes ces solutions de contrôle et d'estimation fondées sur des modèles numériques ont notamment été développées dans le cadre du projet CAP (Contrôle Avancé de Parc) qui a pour objectif d'implémenter et tester ces solutions en condition réelles. Ce projet est financé par l'ADEME[1] et piloté par GreenWITS, la filiale du groupe IFPEN qui commercialise des solutions numériques innovantes dans le domaine de l'éolien.

Elles complètent d'autres méthodes, uniquement basées sur les données (donc sans modélisation préalable), déjà présentées dans un précédent article et pour lesquelles des algorithmes d'apprentissage par renforcement ont été utilisés pour maximiser la puissance du parc [5].
Enfin, d'autres travaux auxquels prend part IFPEN permettent de prendre en compte ces effets de sillage afin de mieux intégrer l'énergie éolienne sur le réseau électrique [6] et d'aider à la stabilité de ce dernier L'ajustement de la puissance totale d'un parc éolien, tel qu'imposé par les gestionnaires de réseau, peut être obtenu grâce à des algorithmes conçus pour déterminer comment répartir cette puissance totale entre les différentes turbines, et de manière à optimiser certains critères comme par exemple la tenue mécanique.

[1] Dans le cadre du plan d'investissement France 2030 »

Références :

[1] Malisani, P., Bartement, T., & Bozonnet, P. (2025). ***Offshore wind farm layout optimization with alignment constraints.*** Wind Energy Science, 10(8), 1611-1623.

[2] Gharbia, I. B, et al. (2026). ***Wake steering optimization under multiple cumulative fatigue load constraints.*** In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 3224, No. 3, p. 032086). IOP Publishing.

[3] Dubuc, D., & Tona, P. (2025). ***LiDAR-assisted closed-loop control of a wind farm.*** In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 3016, No. 1, p. 012023). IOP Publishing.

[4] Collet, D., & Tona, P. (2025). ***Design and evaluation of EnKF-based estimators for steady-state-model-based wind farm control.*** In 2025 American Control Conference (ACC) (pp. 2862-2869). IEEE.

[5] Monroc, C. B. (2024). ***Multi-agent reinforcement learning for dynamic wind farm control*** (Doctoral dissertation, Ecole normale supérieure-PSL).

[6] Corban, B., Buši?, A., Dubuc, D., & Zhu, J. (2026, May). ***Wind farm power tracking using reinforcement learning for secondary frequency regulation.*** In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 3224, No. 3, p. 032088). IOP Publishing.

Contacts scientifiques : Paolino Tona, Donatien Dubuc

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

Optimiser la production des champs d'éoliennes par la modélisation des effets de sillage

L’un des principaux défis en mécanique des fluides numérique est de représenter correctement les phénomènes physiques à différentes échelles de temps et d’espace. De plus, la résolution numérique exacte à chaque échelle est très coûteuse en temps de calcul. L’obtention de solutions fiables passe alors par des simulations effectuées à une échelle grossière mais utilisant des modèles capables de décrire les effets de la physique à très fine échelle. Ces modèles sont utiles par exemple dans l’étude de la combustion, où les réactions chimiques ont lieu dans des zones extrêmement minces appelées fronts de flamme, mais aussi celle des phénomènes turbulents ou encore des écoulements particulaires.

Il existe de nombreux modèles reposant sur des lois physiques, mais leur précision reste en général limitée pour de tels usages, du fait qu’ils s’appuient sur des hypothèses simplificatrices. Une approche récente, rendue possible par les progrès de l’intelligence artificielle, consiste alors à en élaborer de plus exacts, par apprentissage direct sur des données de référence qui proviennent de simulations très détaillées, réalisées chacune sur des domaines de calcul réduits [1].
Cette nouvelle approche a fait l’objet de divers travaux à IFPEN, à commencer dès 2022 par l’apprentissage de lois de forces de trainée sur des particules en suspension. Cela s’est poursuivi par l’apprentissage de modèles de turbulence en mécanique des fluides [2].
Tout récemment, des travaux exploratoires ont été menés sur un cas simplifié de combustion turbulente. Un modèle basé sur un réseau de neurones convolutif (CNN)[1] a été entraîné à partir de simulations numériques directes (DNS) de la flamme, puis utilisé pour prédire le comportement de cette dernière sur des maillages plus grossiers.
Les résultats obtenus sont encourageants, comme l’illustre la figure 1, qui compare le taux de réaction exact ? (mol/s) avec la prédiction du modèle.
Ces travaux se poursuivent aujourd’hui dans le cadre d’une thèse IFPEN/ONERA débutée en 2026 [3].

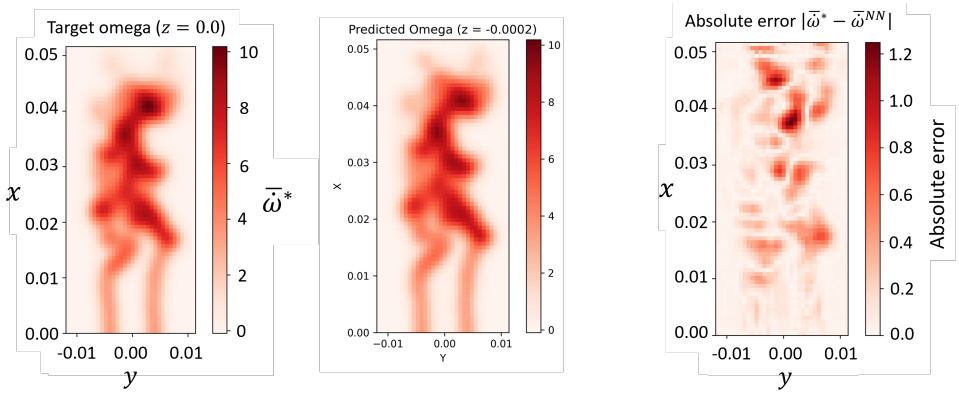


Figure 1: comparaison du taux de réaction d'hydrogène omega (mol/s) entre une solution de référence (gauche) et un champ prédit par CNN (centre). L'erreur absolue entre les deux champs est représentée à droite

[1] Architecture d'apprentissage profond spécialisée dans le traitement des données structurées en grille, comme les images

Références :

[1] Sanderse, B., Stinis, P., Maulik, R., & Ahmed, S. E. (2025). ***Scientific machine learning for***

closure models in multiscale problems: A review. Foundations of Data Science, 7(1), 298–337.
>> DOI : https://doi.org/10.3934/fods.2024043

[2] Vital, E. et al. (2025), ***Neural Network for Subgrid Turbulence Modeling for Large Eddy Simulations***. Proceedings of ParCFD 2025 conference,
>> DOI : https://arxiv.org/abs/2511.05103.

[3] Flament, C., Thèse ONERA/IFPEN: ***Modélisation du plissement de sous-maille par apprentissage automatique pour les simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée***.

Contacts scientifiques : Cédric Mehl, Thibault Faney

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

Intelligence artificielle en mécanique des fluides numérique multi-échelle

L'essor des véhicules électriques impose un déploiement rapide et efficace des infrastructures de recharge (IRVE) car les usagers de la route hésitent à « franchir le pas » tant que ce réseau est jugé insuffisant. Dans le même temps, les opérateurs peinent à investir sans garantie sur le retour financier. Or, l'adoption massive de la mobilité électrique, tout autant que l'adéquation offre/demande, impose de bien positionner les stations, notamment sur les grands axes autoroutiers.

Ce problème est rendu complexe par le fort degré de couplage des facteurs en jeu : besoins de recharge, choix d'itinéraire et congestion des stations. Ainsi, la demande influence les temps d'attente, qui modifient à leur tour les itinéraires et la répartition des flux de véhicules. Les approches existantes prennent rarement en compte cette interaction de manière cohérente, ce qui limite leur capacité à dimensionner efficacement le réseau (taille et répartition) des infrastructures de recharge.

La méthode proposée par IFPEN [1] introduit un modèle d'équilibre de la demande de recharge permettant d'estimer la demande énergétique spatiale et temporelle des véhicules électriques, et s'affranchir ainsi de la dépendance aux données propriétaires des opérateurs de recharge. Cette demande alimente un modèle de files d'attente (par ex. M/M/C)[1], dont les paramètres sont déduits des besoins globaux de mobilité et de recharge, à l'échelle du territoire d'étude. Celui-ci permet d'évaluer les futurs temps d'attente (voir exemple en Figure 1) et de guider le dimensionnement ainsi que le placement optimal des infrastructures.

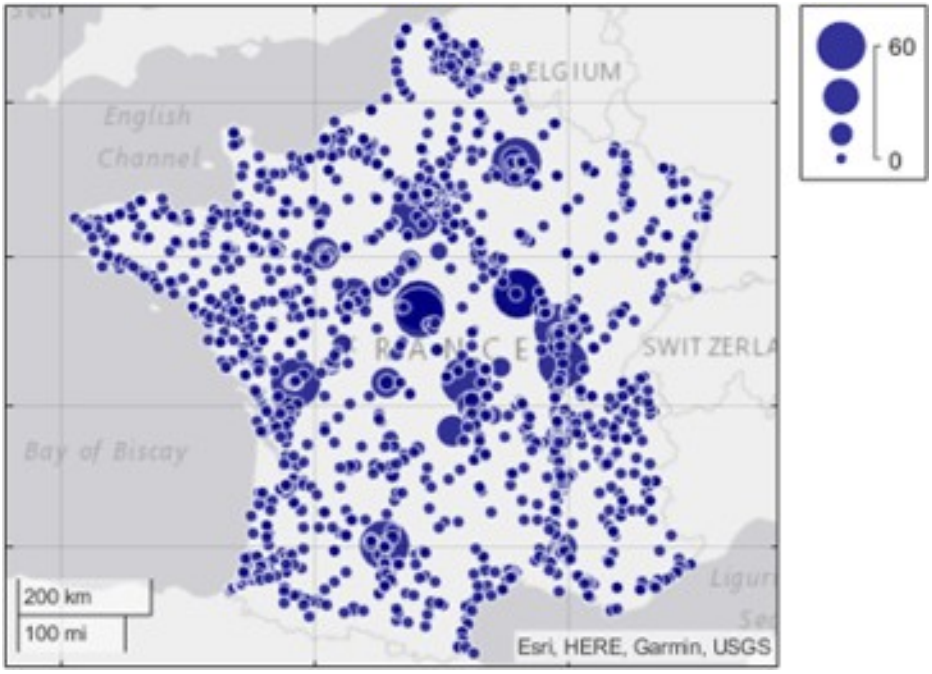


Figure 1 : Durée moyenne (en minutes) des files d'attente en heure de pointe à l'infrastructure de recharge pour véhicules électriques (données IRVE de janvier 2024, hypothèse de taux de véhicules électriques de 2% sur le flux véhiculaire total)

Les résultats pour un réseau optimisé (comme illustré en Figure 2) montrent non seulement une meilleure résilience du réseau face à l'augmentation de la demande mais aussi une amélioration du temps total de trajet.

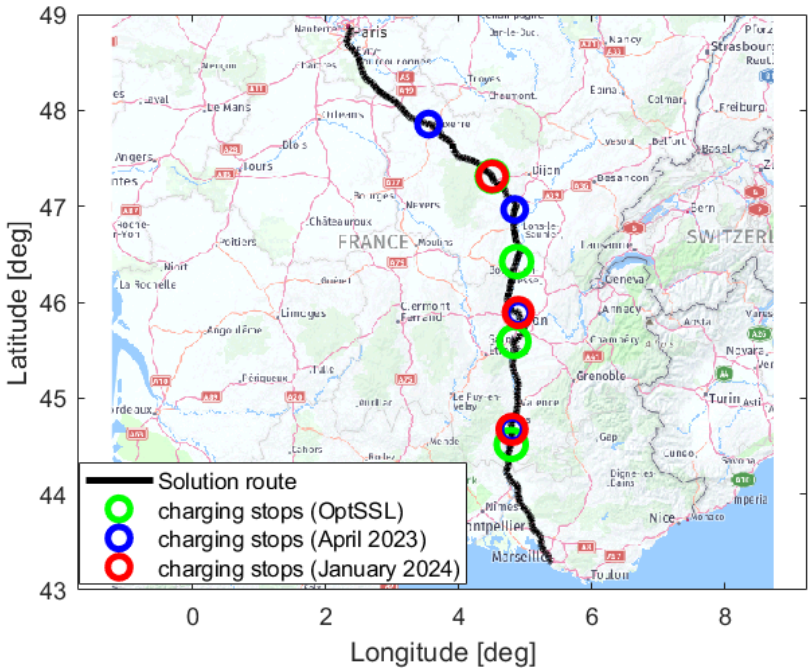


Figure 2 : Solutions optimales d'itinéraire pour un trajet de Paris à Marseille avec trois configurations d'IRVE : infrastructure existante en avril 2023, infrastructure existante en janvier 2024, infrastructure optimale calculée par notre méthode (OptSSL). Pour ce cas d'étude, notre solution optimale permet d'économiser jusqu'à 22 heures de temps de trajet par rapport à la configuration d'avril 2023 (contre seulement 6 heures économisées par la configuration de janvier 2024) pour un taux de véhicules électriques de 2% sur le flux véhiculaire total.

Cette approche fournit un outil d'aide à la décision pour les aménageurs et exploitants d'IRVE en permettant d'identifier les points de congestion, d'évaluer différents scénarios de développement de l'électromobilité et d'orienter les investissements vers les zones les plus critiques.

Les travaux futurs visent à renforcer le caractère opérationnel de la méthode grâce à un modèle d'équilibre dynamique et à la mise à disposition d'un suivi en temps réel de la congestion aux stations. Le principal défi scientifique réside désormais dans la taille du problème d'optimisation et dans la capacité à développer des méthodes de résolution suffisamment « scalables » pour traiter des réseaux nationaux et des scénarios de mobilité de plus en plus complexes.

[1] En théorie des files d'attente, M/M/c est un modèle de file d'attente à serveurs multiples. Il décrit un système dans lequel les arrivées forment une file d'attente unique et obéissent à un processus de Poisson, où il y a c serveurs et où les temps de traitement des tâches suivent une distribution exponentielle.

Référence :

[1] I. Ben Gharbia and G. De Nunzio, ***"Location Planning of Fast Charging Infrastructure for Electric Vehicles and System Resilience Analysis via a Demand-Based Queueing Model"***, 2024 IEEE 27th International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC), Edmonton, AB, Canada, 2024, pp. 1606-1613,
>> DOI : 10.1109/ITSC58415.2024.10919557

Contacts scientifiques : Ibtihel Ben Gharbia, Giovanni De Nunzio

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

Vers une planification plus robuste des infrastructures de recharge pour véhicules électriques

Les performances d'un support de catalyseur – alumine ou zéolithe – se jouent à l'échelle de sa microstructure poreuse : porosité, surface spécifique et connectivité du réseau solide qui gouvernent l'accès des réactifs aux sites actifs. Concevoir un support optimal revient donc à résoudre un problème inverse, c'est-à-dire à identifier la microstructure, puis les paramètres de fabrication, qui satisfont un cahier des charges de propriétés.

Or le problème en question se heurte au fait que plusieurs microstructures très différentes peuvent présenter les mêmes propriétés macroscopiques, et que les méthodes d'optimisation classiques, coûteuses en calcul, n'en exploreront qu'une fraction.

Habituellement, un modèle géométrique part de paramètres de fabrication pour simuler une microstructure, puis calcule les propriétés qui en résultent : c'est la boucle directe. Pour résoudre le problème inverse – remonter de propriétés cibles à une microstructure, puis à ses paramètres de fabrication – des chercheurs d'IFPEN ont complété cette boucle directe par une boucle inverse [1], fondée sur un modèle de diffusion guidé, la famille d'IA à l'œuvre dans les générateurs d'images (Figure 1). Entraîné sur 30 000 microstructures virtuelles issues d'un modèle géométrique aléatoire (processus de COX[1]), le réseau de neurones « débruite » progressivement une image de bruit aléatoire jusqu'à obtenir une microstructure conforme aux propriétés cibles, Les propriétés cibles guident le réseau de neurones à chaque étape, comme un filtre qui oriente la transformation du bruit en une microstructure (Figure 2).

Le point de départ étant tiré au hasard à chaque exécution du calcul, chaque appel au modèle entraîné produit une microstructure différente mais valide, car dotée des mêmes propriétés cibles, ce qui reflète notre réalité physique.

A partir d'une microstructure satisfaisante, un second réseau de neurones convolutif[2] (dédié à l'analyse d'images) déduit ensuite les quatre paramètres d'agrégation[3] du modèle géométrique, directement reliés aux paramètres de fabrication.

Sur près de 3 000 microstructures test, ces paramètres ont été retrouvés avec un coefficient de détermination R^2 moyen de 0,85 (une valeur de 1 correspondant à une prédiction parfaite). La validation « aller-retour »[4] confirme la cohérence physique des propriétés obtenues, le tout grâce à un calcul réalisé en quelques secondes contre plusieurs heures avec les méthodes classiques.

Les prochaines étapes du travail porteront sur la génération 3D de microstructures, l'ajout d'autres descripteurs du transport de masse (tortuosité, physisorption) et la validation sur des matériaux réels caractérisés expérimentalement.

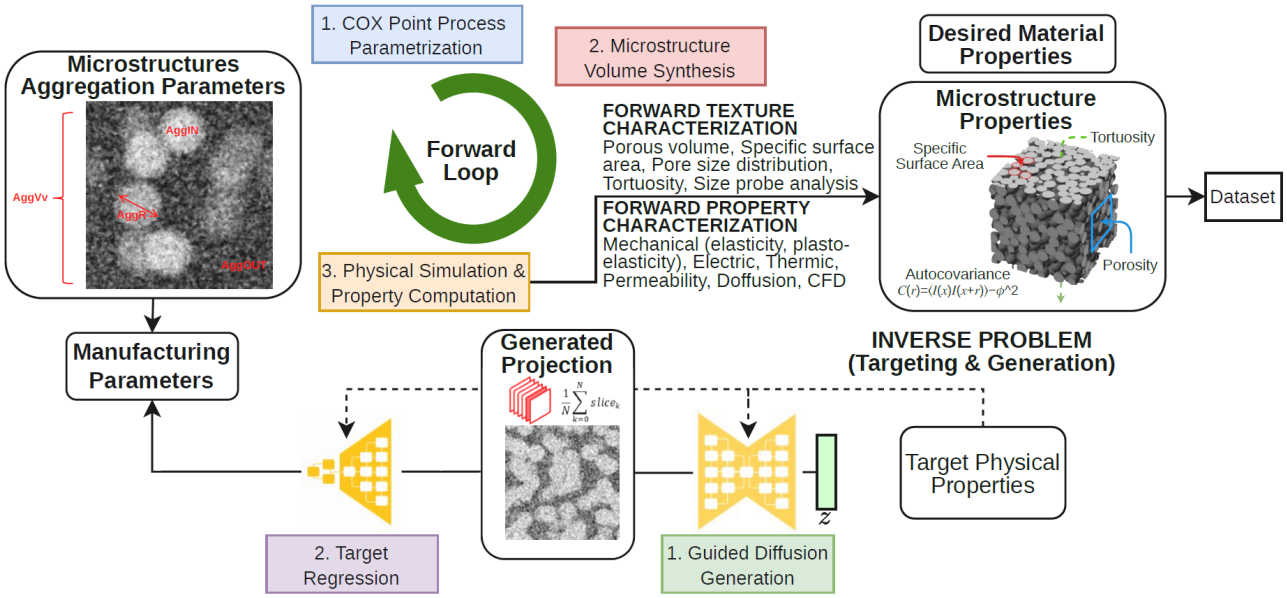


Figure 1 : boucle de co-conception des microstructures : en haut, boucle directe (forward loop) – synthèse des propriétés à partir des paramètres de fabrication ; en bas, boucle inverse – génération d'une microstructure à partir de propriétés cibles, puis retour aux paramètres de fabrication

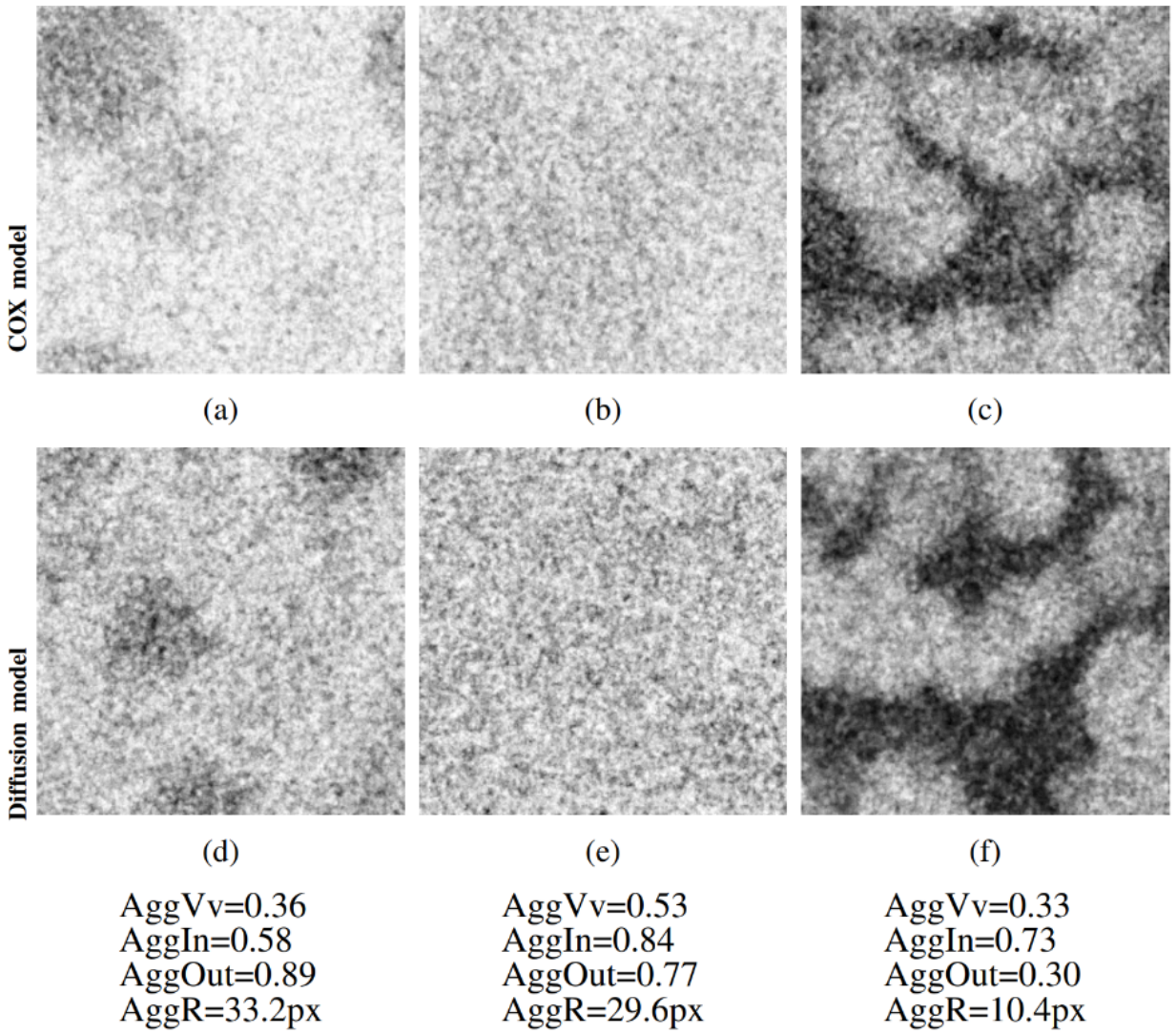


Fig. 1: COX model-generated (a–c) vs. diffusion-generated microstructures (d–f).

Figure 2 : Comparaison, sur 3 cas de microstructures aux paramètres AggVv, AggIn, AggOut et AggR distincts, entre les images issues du modèle géométrique direct (haut) et celles générées par le modèle de diffusion guidé (bas).

[1] Méthode probabiliste pour la génération de microstructures permettant de simuler des assemblages de grains polycristallins en 2D ou 3D, à partir de germes placés aléatoirement qui croissent ensuite en cercles réguliers pour définir les frontières des grains.
[2] Architecture de deep learning spécialisée dans le traitement des données structurées sous forme de matrice
[3] Modèle stochastique piloté par quatre paramètres : AggVv (fraction volumique d'agrégats), AggIn (fraction intra-agrégats), AggOut (fraction extra-agrégats), AggR (rayon moyen des agrégats).
[4] Resynthèse d'une microstructure à partir des paramètres prédits

Références :

[1] J. Peyrelon, A. Pirayre, L. Sorbier, M. Moreaud, A. Hammoumi, Guided Diffusion Model for

Microstructure Generation Design, communication à congrès, 2026 (DOI à venir).

Contacts scientifiques : Julien Peyrelon

>> NUMÉRO 61 DE SCIENCE@IFPEN

Des supports de catalyseurs conçus grâce à l'IA générative

Numéro 61 de Science@ifpen : Spécial "Sciences et technologies du numérique"
01 octobre 2026

Lien vers la page web :