

Édition Bibliothèque IA en français

L'intelligence artificielle pour la conception de nouveaux matériaux et la propulsion des fusées

Potentiels IA, laboratoires
autonomes et apprentissage
automatique informé par la
physique (PIML)

Kim Kyung-jin, avocat

kimkj.com · Bibliothèque IA · 2026

L'intelligence artificielle pour la conception de nouveaux matériaux et la propulsion des fusées

Potentiels IA, laboratoires autonomes et apprentissage automatique informé par la physique (PIML)

Kim Kyung-jin, avocat

À partir des potentiels d'apprentissage automatique qui apprennent le mouvement d'un seul atome, ce livre présente en dix chapitres les modèles génératifs qui fixent d'abord les propriétés souhaitées puis produisent à rebours la structure cristalline, les laboratoires autonomes où des robots répètent eux-mêmes les expériences, les alliages à haute entropie et les composites céramiques capables de protéger les zones brûlantes des fusées, la surveillance des défauts dans l'impression 3D métallique et la garantie de la durée de vie en fatigue, l'apprentissage automatique informé par la physique qui intègre les lois physiques dans la fonction de perte pour calculer la combustion, ainsi que la conception des canaux de refroidissement, le diagnostic en temps réel des moteurs-fusées à ergols liquides et leur commande par apprentissage par renforcement. Il est rédigé sans formules pour les lecteurs généralistes qui aiment les sciences et les technologies, chaque chapitre comporte des sources vérifiées, et cette version révisée tient compte des critiques de type directeur de recherche formulées par deux évaluateurs en intelligence artificielle.

Dépôt public de documents de recherche

Ce livre a été organisé et produit à l'aide de l'intelligence artificielle. Il rassemble et synthétise des documents rédigés dans les principales langues du monde. NotebookLM ne limite pas la langue des questions en fonction de la langue dans laquelle les documents ont été rédigés. Le lecteur peut interroger, dans sa propre langue, le même dépôt de documents de recherche que celui utilisé pour préparer ce livre. Cela reste vrai même si certains documents sont en coréen, en anglais ou dans d'autres langues. Dans NotebookLM, si l'on ouvre les paramètres et que l'on définit la langue de sortie souhaitée, les réponses et les résultats générés apparaissent dans cette langue.

Dépôt public NotebookLM utilisé pour préparer ce livre (AI for Materials Science and Rocket Engine Engineering, 129 documents) :

<https://notebook.google.com/notebook/ac39e3ce-77a9-4e78-9aaf-b52c45c2934d>

L'édition originale coréenne de ce livre se trouve dans l'AI Library de kimkj.com :

<https://kimkj.com/ai-library/?mod=document&uid=12453>

Table des matières

Cliquez sur le titre de chaque chapitre pour accéder au texte correspondant. Pour lire depuis le début, choisissez le chapitre 1.

- Chapitre 1. Les bases de l'informatique des matériaux et le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP) · 4
- Chapitre 2. Prédiction de la structure cristalline (CSP) et conception inverse des matériaux fondées sur l'IA générative et les modèles de diffusion (Diffusion Models) · 24
- Chapitre 3. Laboratoire autonome et systèmes scientifiques multi-agents · 44
- Chapitre 4. Prédiction à cohérence physique et optimisation de la composition des alliages à haute entropie (HEA) et des superalliages · 64
- Chapitre 5. Contrôle de la microstructure et évaluation de la durée de vie sous échauffement des composites pour l'aérospatiale (CMC) et des céramiques à ultra-haute température (UHTC) · 84
- Chapitre 6. Modélisation des contraintes thermiques dans les procédés de fabrication additive métallique (LPBF/DED) et détection in situ des défauts · 105
- Chapitre 7. Post-traitement des alliages aérospatiaux imprimés en 3D et garantie de durée de vie en fatigue à haut nombre de cycles · 125
- Chapitre 8. Modélisation des écoulements gazeux réactifs et de la chimie de la combustion par l'apprentissage automatique informé par la physique (PIML/PINNs) et l'apprentissage d'opérateurs (FNO) · 145
- Chapitre 9. Optimisation de la rétroconception topologique des canaux de refroidissement régénératif, des trous de refroidissement par film et de l'inducteur · 166
- Chapitre 10. Diagnostic des défauts en temps réel, jumeau numérique et contrôle adaptatif en temps réel de la propulsion fondé sur l'apprentissage par renforcement pour les moteurs-fusées à ergols liquides (LRE) · 184

Chapitre 1. Les bases de l'informatique des matériaux et le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP)

Introduction

Tous les objets que nous utilisons sont faits de matériaux. Une cuillère est faite de métal, et un verre est fait de verre. La tuyère d'un moteur de fusée est elle aussi faite de métaux et de céramiques particuliers. Quand le matériau change, les propriétés de l'objet changent aussi.

Les propriétés d'un matériau commencent dans de très petites particules invisibles à l'œil nu. Ces particules sont les atomes. L'atome est l'unité de base qui compose la matière. Selon la manière dont les atomes s'attachent et se déplacent, le métal peut devenir dur ou mou.

Les personnes qui construisent des fusées veulent connaître à l'avance le mouvement de ces atomes. Dans un moteur de fusée, la température monte jusqu'à plusieurs milliers de degrés. La pression y est aussi très élevée. Il faut savoir à l'avance si un métal peut résister dans un tel milieu sans fondre. Fabriquer une pièce réelle et la tester demande beaucoup d'argent et de temps. C'est pourquoi les scientifiques font bouger les atomes dans un ordinateur. C'est la simulation atomique.

Pour faire bouger des atomes par ordinateur, il faut des règles. Il faut en effet savoir dans quelle direction et avec quelle intensité chaque atome reçoit une force. Pendant longtemps, la méthode permettant de créer ces règles avec précision et celle permettant de les créer rapidement ont été différentes. La méthode précise était lente, et la méthode rapide était imprécise. La nouvelle voie qui abat le mur entre les deux est le potentiel interatomique par apprentissage automatique (Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP). Dans la suite, cette technologie sera appelée MLIP.

Ce chapitre explique pas à pas ce qu'est le MLIP et comment il s'est développé. Il examine d'abord deux anciennes méthodes de calcul atomique. Il montre ensuite comment l'apprentissage automatique a relié ces deux méthodes. Il suit dans l'ordre les approches, des premières aux plus récentes. Enfin, il indique les points auxquels il faut faire attention quand on utilise cette technologie pour les matériaux de fusée et la recherche sur les nouveaux matériaux. Il n'utilise pas de formules. Il explique avec des mots qui permettent de se représenter les choses.

Le terme informatique des matériaux apparaît lui aussi ici pour la première fois. Il désigne la science de l'information appliquée aux matériaux. C'est une discipline qui rassemble de nombreuses données sur les matériaux et les analyse par ordinateur pour trouver de nouveaux matériaux. Le MLIP est, dans ce domaine, un outil essentiel chargé des calculs à l'échelle atomique.

Il faut d'abord expliquer pourquoi cette histoire se rattache aux fusées. Le développement des fusées est difficile à séparer de la recherche de nouveaux matériaux. Si l'on dispose d'un métal plus léger et capable de résister à des températures plus élevées, les performances de la fusée augmentent. Fabriquer ces matériaux un par un en laboratoire et les tester peut prendre plusieurs années. Si l'on filtre d'abord les candidats par calcul atomique dans l'ordinateur, ce temps diminue. Le MLIP est la clé qui rend ces calculs rapides et précis. Après avoir lu ce chapitre, on comprend dans les grandes lignes comment un nouveau matériau naît dans un ordinateur.

1. Introduction et contexte : combinaison de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et de l'apprentissage automatique

Ce que traite cette section

Pour traiter les atomes par ordinateur, il faut connaître l'énergie et les forces entre les atomes. Il existait deux grandes méthodes pour obtenir ces valeurs. L'une est une méthode précise qui calcule même le mouvement des électrons. L'autre est une méthode rapide qui utilise des formules simples fixées à l'avance. Cette section explique ce que chacune de ces deux méthodes fait bien et ce qu'elle fait mal.

Elle examine aussi l'ancien problème qui existe entre ces deux méthodes. La méthode précise est trop lente, et la méthode rapide se trompe souvent. L'apprentissage automatique est apparu pour résoudre ce problème. Cette section en donne d'abord la vue d'ensemble.

Quelques mots de cette section seront utilisés sans cesse plus loin. Ce sont l'énergie, la force et la surface d'énergie potentielle. Si l'on comprend leur sens maintenant, la section suivante devient plus facile. Il n'y a pas de formules difficiles. L'explication avance seulement avec des mots que l'on peut se représenter.

Dans les calculs qui traitent les atomes, les deux valeurs essentielles sont l'énergie et la force. L'énergie indique la stabilité d'un arrangement d'atomes. Plus l'énergie est basse, plus cet arrangement est dans un état confortable. La force indique dans quelle direction chaque atome est poussé. Si l'on connaît la force, on peut calculer où l'atome se déplacera l'instant suivant.

L'énergie et la force ne sont pas des valeurs séparées. La force vient de la rapidité avec laquelle l'énergie change selon la position. Si l'énergie est comparée au relief du sol, la force est la pente de ce relief. Une balle roule vers le bas du côté où la pente est forte. Les atomes sont eux aussi poussés vers le côté où l'énergie diminue. Ainsi, si l'on connaît la carte de l'énergie, on obtient la force comme la pente de cette carte. Cette relation redeviendra importante plus loin.

La théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT) est une méthode qui calcule la répartition des électrons pour obtenir l'énergie et les forces. Dans la suite, elle sera appelée DFT. L'électron est une très petite particule chargée qui tourne autour de l'atome. L'endroit où les électrons se rassemblent, et en quelle quantité, détermine la liaison chimique. La DFT calcule cette répartition des électrons selon les principes de la mécanique quantique. La mécanique quantique est la loi physique du monde très petit. C'est pourquoi la DFT décrit avec précision les liaisons chimiques.

Les valeurs produites par la DFT ne sont pas non plus une vérité absolue. La DFT traite les attractions et répulsions entre électrons au moyen de formules d'approximation. Les résultats changent légèrement selon la manière dont on choisit ces formules d'approximation. Les valeurs de la DFT sont donc des valeurs de référence obtenues avec un réglage donné, plutôt que des valeurs vraies. L'apprentissage automatique apprend ces valeurs de référence. Même quand la DFT sera appelée réponse correcte plus loin, il faut comprendre ce terme dans ce sens.

Le problème est la vitesse. Avec la DFT, la quantité de calcul augmente rapidement à mesure que le nombre d'atomes croît. Si le nombre d'atomes double, le temps de calcul augmente bien plus que deux fois. Même avec un grand superordinateur, le nombre d'atomes que l'on peut traiter est en général de l'ordre de quelques centaines. Le temps que l'on peut calculer se limite lui aussi à un instant très court. Cette méthode ne convient pas pour observer longtemps un grand bloc de matière, comme dans le cas des matériaux de fusée.

À l'opposé se trouve le champ de force empirique (Empirical Force Field). Cette méthode obtient les forces entre atomes au moyen de formules simples fixées à l'avance. Elle ne calcule pas les électrons un

par un. À la place, elle détermine la force à partir de quelques valeurs, comme la distance entre les atomes. Comme le calcul est léger, elle peut traiter même des millions d'atomes. Elle permet aussi d'observer des durées beaucoup plus longues.

Le champ de force empirique a cependant une faiblesse en échange de sa rapidité. Un champ de force qui suppose des liaisons fixes décrit mal le moment où une liaison se rompt et où une nouvelle liaison apparaît. Les champs de force réactifs apparus plus tard, ou les champs de force pour les métaux, traitent dans une certaine mesure les changements de liaison et les défauts dans un domaine étroit. Mais il est difficile de maintenir la précision dans des conditions larges. Les transitions de phase, où les atomes changent fortement de place, sont elles aussi délicates. Dans un milieu chaud et violent comme un moteur de fusée, ces événements se produisent souvent. C'est pourquoi l'erreur devient grande avec un simple champ de force.

On peut ici comparer la différence entre les deux méthodes à une situation de la vie quotidienne. La DFT ressemble à la correction attentive du devoir d'un seul élève. Elle est précise, mais corriger les devoirs de toute l'école prend beaucoup de temps. Le champ de force empirique ressemble à une vérification rapide des réponses. Il est rapide, mais il se trompe sur les problèmes difficiles. Pendant longtemps, les scientifiques ont dû choisir entre précision et rapidité.

Le potentiel interatomique par apprentissage automatique est une tentative pour abattre ce mur du choix. Le potentiel ressemble à une carte qui indique l'énergie de chaque arrangement d'atomes. Cette carte est appelée surface d'énergie potentielle. Le MLIP apprend, par apprentissage automatique, les valeurs de référence calculées par la DFT. L'apprentissage automatique est une méthode de calcul qui trouve d'elle-même des règles à partir de nombreux exemples. S'il apprend suffisamment d'exemples, il prédit rapidement l'énergie et les forces d'un nouvel arrangement atomique.

Expliquons un peu plus comment le MLIP apprend. On calcule d'abord avec la DFT l'énergie et les forces de plusieurs arrangements atomiques. Ces résultats de calcul ressemblent à un cahier d'exercices où les réponses sont écrites. Le modèle d'apprentissage automatique observe ce cahier et apprend les règles. Il saisit de lui-même pourquoi tel arrangement possède telle énergie. Une fois l'entraînement terminé, il résout rapidement même un nouvel arrangement absent du cahier.

L'objectif de cette méthode est clair. Il s'agit de créer un calcul aussi précis que la DFT et aussi rapide qu'un champ de force empirique. Si cet objectif est atteint, on peut tester les matériaux de fusée dans l'ordinateur à grande échelle et sur une longue durée. On peut voir à l'échelle atomique comment un métal oscille à haute température et comment une fissure se propage. On peut filtrer les matériaux candidats avant les essais réels. Le reste de ce chapitre raconte les différentes technologies qui cherchent à atteindre cet objectif.

Il faut préciser un point à l'avance. Le MLIP ne remplace pas complètement la DFT. Il ne peut apprendre que s'il existe des valeurs de référence produites par la DFT. Les deux méthodes ne sont pas en concurrence, elles forment une paire. La DFT produit les valeurs de référence, et le MLIP diffuse rapidement ces valeurs. Cette coopération rend possibles les grands calculs.

2. Modèles classiques d'apprentissage automatique fondés sur des descripteurs

Ce que traite cette section

Pour apprendre l'énergie atomique par apprentissage automatique, il faut d'abord transformer la forme de l'environnement d'un atome en nombres. L'ordinateur traite en effet des nombres, pas des images. Cette liste de nombres est appelée descripteur (Descriptor). Cette section examine trois méthodes de descripteurs utilisées par les premiers MLIP.

Ces trois méthodes ont chacune leurs caractéristiques. L'une utilise un réseau de neurones, une autre compare à quel point deux environnements se ressemblent, et une autre apprend même les descripteurs par apprentissage profond. Toutes les trois ont obtenu de bons résultats, mais elles ont aussi révélé leurs limites. Ces limites ont appelé la génération suivante de technologies.

Un bon descripteur doit respecter une règle. Le même matériau doit toujours être exprimé par les mêmes nombres. Même si l'on tourne un bureau, un bureau reste un bureau. De même, si l'on tourne ou déplace toute une structure atomique, ses positions changent. Mais le matériau reste le même. Le descripteur ne doit pas être perturbé par ces changements. Cette propriété est appelée invariance (Invariance).

Si l'invariance n'est pas respectée, un problème apparaît. Le modèle prend le même matériau pour plusieurs matériaux différents. Il doit alors apprendre plusieurs fois séparément la même chose. L'apprentissage ralentit et les prédictions deviennent instables. Les premières recherches sur le MLIP ont consacré beaucoup d'efforts à intégrer cette invariance à la main dans les descripteurs.

2.1 Réseau de neurones qui apprend l'énergie atome par atome (BPNN)

Behler et Parrinello ont proposé en 2007 une idée importante. Il s'agissait de diviser l'énergie totale en somme d'énergies atomiques. Cette méthode est appelée décomposition de l'énergie atomique. Chaque atome observe seulement son propre environnement et produit une petite valeur d'énergie. Si l'on additionne les valeurs de tous les atomes, on obtient l'énergie de toute la structure. Ce réseau de neurones est appelé réseau de neurones de Behler-Parrinello (Behler-Parrinello Neural Network, BPNN).

Un réseau de neurones est une structure de calcul inspirée des connexions entre les cellules du cerveau humain. Il reçoit une entrée et produit une réponse après plusieurs étapes. En étant entraîné avec de nombreux exemples, il apprend les règles entre l'entrée et la réponse. Le BPNN reçoit comme entrée la forme de l'environnement d'un atome et produit comme réponse l'énergie de cet atome.

L'outil qui transforme alors l'environnement de l'atome en nombres est la fonction de symétrie centrée sur l'atome (Atom-Centered Symmetry Functions, ACSF). Cette fonction place un atome au centre. Elle examine ensuite les atomes voisins situés dans une certaine distance. Elle enregistre sous forme de nombres les distances jusqu'aux voisins et les angles formés par ces voisins. Elle se divise en une partie qui contient seulement les distances et une partie qui contient aussi les angles. Les nombres ainsi créés ne changent pas même si l'on tourne ou déplace la structure.

Cette méthode a aussi un sens pour la recherche sur les matériaux de fusée. Quand un métal chauffe, les atomes oscillent fortement autour de leur position. Les distances jusqu'aux voisins et les angles changent sans cesse. L'ACSF saisit ces changements sous forme de nombres. Elle est donc devenue une première étape pour apprendre le mouvement d'un matériau selon la température.

Mais ses limites étaient nettes. Quand le nombre de types d'éléments augmente, le nombre de valeurs nécessaires augmente rapidement. Les alliages pour fusées mélangent souvent plusieurs éléments. S'il y a cinq éléments, les combinaisons de paires d'éléments deviennent nombreuses. Les combinaisons de trois atomes qui traitent les angles augmentent encore plus vite. Le problème dans lequel la charge de calcul augmente à mesure que le nombre de types s'accroît est appelé malédiction de la dimension.

Une autre limite est que le descripteur doit être conçu à la main par une personne. Une personne décide quelles distances et quels angles inclure, et avec quelle finesse. Si ce choix est mauvais, des informations importantes sont perdues. Créer un bon descripteur était en soi une tâche difficile. Les efforts pour réduire cette charge ont conduit aux méthodes suivantes.

Cette méthode a pourtant laissé une signification importante. L'idée de diviser l'énergie totale par atome est encore vivante aujourd'hui. La plupart des modèles récents suivent eux aussi ce principe de décomposition. Chaque atome observe seulement son environnement et produit une valeur, puis toutes les valeurs sont additionnées. Grâce à cette méthode, même avec beaucoup d'atomes, le calcul peut être réparti. L'idée de Behler et Parrinello est devenue l'une des pierres de base du MLIP.

2.2 Potentiel qui mesure la ressemblance entre deux environnements (GAP)

Bartók, Csányi et d'autres ont choisi en 2010 une autre voie. Au lieu d'utiliser un réseau de neurones, ils ont comparé directement à quel point deux environnements se ressemblent. Cette méthode est appelée potentiel d'approximation gaussienne (Gaussian Approximation Potential, GAP). Lorsqu'elle rencontre un nouvel environnement atomique, elle le compare aux environnements déjà appris. S'il existe de nombreux environnements semblables, elle se sert de leur énergie pour produire la réponse.

L'outil central de cette comparaison est le Smooth Overlap of Atomic Positions (SOAP), c'est-à-dire le recouvrement lissé des positions atomiques. SOAP représente l'environnement d'un atome non comme des points rigides, mais comme un nuage doux. C'est comme si l'on plaçait une sphère floue autour de chaque atome voisin. Si les nuages de deux environnements atomiques se chevauchent beaucoup, on les considère comme semblables. Cette méthode est conçue pour rester stable même en cas de rotation.

Il y a une raison à cette représentation en nuages doux. Les atomes vibrent toujours un peu. Si l'on ne voit leur position que comme un point rigide, une petite vibration peut faire varier fortement la valeur obtenue. Avec un nuage, les petites vibrations sont absorbées en douceur. C'est pourquoi SOAP s'est montré efficace pour traiter les défauts dans les cristaux et les matériaux désordonnés.

Le potentiel d'approximation gaussienne a produit une grande précision même avec peu de données. Ce point est très utile lorsque les calculs DFT coûtent cher. Il a été beaucoup utilisé pour étudier les défauts cristallins, les états liquides et les matériaux amorphes désordonnés. Dans les matériaux pour fusées aussi, les défauts et le désordre sont des sujets importants. Cette méthode est donc devenue une référence longtemps citée.

La limite apparaît lorsque les données deviennent plus volumineuses. Cette méthode compare chaque nouvel environnement à tous les environnements appris. Plus les données d'apprentissage augmentent, plus le nombre d'objets à comparer augmente. La charge de calcul et de stockage croît alors en même temps. Elle demande beaucoup de calculs pour traiter de grands jeux de données, qui dépassent aujourd'hui souvent plusieurs centaines de milliers d'éléments.

C'est pourquoi cette méthode a cédé sa place à d'autres structures dans les problèmes de grande taille. Pour apprendre rapidement à partir de grandes données, les réseaux de neurones en apprentissage profond étaient mieux adaptés. C'est parce que l'apprentissage profond devient plus puissant lorsque les données sont nombreuses. Cependant, le niveau de précision établi par le potentiel d'approximation

gaussienne reste valable aujourd'hui. Il sert souvent de point de comparaison pour mesurer les performances des nouveaux modèles.

L'idée laissée par SOAP se poursuit aussi. Elle consiste à voir l'environnement atomique comme une densité douce. Cette idée s'est diffusée dans plusieurs modèles apparus ensuite. Traiter les atomes comme une distribution douce plutôt que comme des points rigides rend le calcul plus stable. C'est parce que la valeur ne saute pas au moindre petit mouvement. Dans les calculs à haute température, où les atomes vibrent fortement comme dans les matériaux de fusées, cette stabilité est utile.

2.3 L'apprentissage profond qui apprend lui-même les descripteurs (DeePMD)

Zhang, Car et leurs collègues ont introduit en 2018 l'apprentissage profond dans le calcul atomique de manière systématique. Cette méthode est appelée dynamique moléculaire à potentiel profond (Deep Potential Molecular Dynamics, DeePMD). La dynamique moléculaire est une simulation qui suit le mouvement des atomes au fil du temps. DeePMD calcule par apprentissage profond les forces utilisées dans cette simulation.

Dans les méthodes précédentes, les humains concevaient les descripteurs. DeePMD a fortement réduit cette charge. Le réseau de neurones transforme lui-même les coordonnées autour des atomes en une forme appropriée. Il n'est plus nécessaire que l'humain choisisse une à une les distances et les angles. Cette méthode conserve pourtant les propriétés qui la rendent stable face aux rotations et aux translations.

Il faut aussi préciser ici le sens du mot apprentissage profond. L'apprentissage profond désigne un réseau de neurones empilé en plusieurs couches. Lorsque les couches sont profondes, il peut apprendre des règles complexes. Un réseau de neurones peu profond n'apprend que des règles simples. Un réseau profond peut représenter les relations entremêlées entre les atomes. En revanche, il exige beaucoup de données et de calculs pour apprendre. Le mot profond vient de la profondeur des couches.

La force de cette méthode réside dans la grande échelle. Avec l'apprentissage profond, la charge de calcul n'augmente pas fortement même lorsque les atomes sont nombreux. DeePMD peut donc traiter le mouvement de millions d'atomes. Il a été utilisé pour divers matériaux, comme l'eau, les métaux et les semi-conducteurs. Il s'est montré performant lorsqu'il fallait observer longtemps de grands systèmes.

DeePMD a aussi un sens pour la recherche sur les matériaux de fusées. Pour voir comment un bloc de métal change à haute température, il faut beaucoup d'atomes. Si l'on ne regarde qu'un petit fragment, on manque le comportement d'ensemble. DeePMD peut traiter de grands fragments, ce qui le rend adapté à ce type de recherche.

Cependant, la limite commune aux premières méthodes à descripteurs demeure. Ces méthodes regardent séparément les voisins situés dans une distance fixée. Pour inclure l'influence d'atomes lointains, il faut élargir la distance observée. Le nombre de voisins augmente alors fortement, ce qui accroît la charge de calcul. Leur structure rend difficile la prise en compte des interactions à longue distance.

DeePMD a aussi ouvert une autre porte : l'association avec de grands outils de calcul. Cette méthode a conduit à des recherches traitant des dizaines de milliards d'atomes sur de grands superordinateurs. Elle sert aussi à calculer à grande échelle des alliages mêlant plusieurs éléments. La recherche sur les alliages à haute température pour fusées exige ce type de grands calculs. C'est parce qu'un grand système permet de voir des comportements que de petits fragments ne montrent pas.

Cette limite a suscité une nouvelle idée. Il s'agit de dépasser la méthode qui place un seul atome au centre et regarde son voisinage. Que se passerait-il si les atomes échangeaient des informations entre

eux ? Si l'information est échangée plusieurs fois, l'influence des atomes lointains peut aussi se transmettre de proche en proche. Cette idée mène aux réseaux de neurones graphiques de la section suivante.

3. Réseaux de neurones graphiques (GNN) équivariants modernes

Cette section traite de la méthode devenue aujourd'hui dominante dans les MLIP. Il s'agit du réseau de neurones graphique (Graph Neural Network, GNN). Cette méthode voit les atomes comme des points et les relations de voisinage entre atomes comme des lignes. Ici, la ligne ne désigne pas la liaison chimique elle-même. Elle signifie que des voisins situés dans une certaine distance ont été reliés. Cette ligne peut aussi changer pendant le calcul. Cela ressemble à une carte de métro, où les stations sont représentées par des points et les connexions entre stations par des lignes. L'énergie est calculée en échangeant des informations le long des points et des lignes.

Le mot central de cette section est l'équivariance (Equivariance). C'est une propriété qui forme un couple avec l'invariance de la section précédente. Nous expliquerons d'abord ce qu'est l'équivariance et pourquoi elle est nécessaire au calcul atomique. Ensuite, nous examinerons dans l'ordre les modèles représentatifs qui intègrent cette propriété, des premiers aux plus récents. Enfin, nous traiterons aussi des grands modèles préentraînés sur de vastes données.

Un réseau de neurones graphique calcule en échangeant des informations. Chaque atome envoie un message à ses voisins. Il rassemble les messages venus des voisins et met à jour son propre état. Ce processus se répète plusieurs fois. Après un échange, il connaît les atomes immédiatement voisins. Après deux échanges, il connaît aussi les voisins de ses voisins. Plus les échanges se répètent, plus l'influence d'atomes éloignés peut parvenir jusqu'à lui. Cette méthode s'appelle la transmission de messages (Message Passing).

Cette structure résout en partie la limite de la section précédente. Il n'est pas nécessaire d'élargir artificiellement la distance observée. C'est parce que les informations situées au-delà des voisins arrivent par échanges répétés de messages. Cependant, si le nombre de couches est fixé, la portée de l'information l'est aussi. Des effets comme l'électrostatique très lointaine ou les forces de dispersion sont difficiles à représenter entièrement par cette seule méthode. Ces effets doivent être ajoutés sous forme de termes de longue portée conçus séparément. Malgré cela, le réseau de neurones graphique a constitué une grande avancée pour représenter efficacement des interactions sur une large portée.

3.1 Une symétrie valable même après rotation ou réflexion

Dans le monde atomique, certaines symétries doivent être respectées. Même si l'on déplace ou fait tourner toute la structure, les lois physiques restent les mêmes. L'ensemble formé par les translations, les rotations et les réflexions est appelé $E(3)$. L'ensemble qui ne regroupe que les rotations est appelé $SO(3)$. Les noms sont difficiles, mais l'idée est simple. Il s'agit de l'ensemble des translations, des rotations et des retournements comme dans un miroir. Rotation et réflexion sont deux mouvements différents. La rotation fait tourner la forme sans la changer, tandis que la réflexion produit une image miroir où la gauche et la droite sont inversées.

L'invariance vue plus haut est la propriété par laquelle une valeur ne change pas malgré ces mouvements. L'énergie est une grandeur invariante. Même si l'on fait tourner une structure, son énergie doit rester la même. Mais toutes les valeurs ne sont pas invariantes. La force est une valeur qui possède une direction. Si l'on fait tourner la structure, la direction de la force doit tourner avec elle.

Cette propriété est précisément l'équivariance. L'équivariance signifie que si l'entrée tourne, la sortie tourne de la même manière. La force est une grandeur équivariante. Si l'on fait tourner une structure

vers la droite, la force qui s'exerce sur chaque atome tourne aussi vers la droite. Pour que le calcul atomique corresponde aux lois physiques, il faut respecter à la fois l'invariance et l'équivariance.

Distinguons les grandeurs invariantes et équivariantes en une phrase. Si une valeur reste identique après rotation, c'est une grandeur invariante. Si la valeur tourne avec la rotation, c'est une grandeur équivariante. L'énergie est un nombre unique sans direction, donc une grandeur invariante. Des valeurs comme la température ou la densité n'ont pas non plus de direction et sont invariantes. Les valeurs dotées d'une direction, comme la force ou la vitesse, sont équivariantes. Le modèle doit savoir de quel côté appartient chaque valeur et la traiter en conséquence.

Reprenons ici une question laissée de côté dans la section précédente. Nous avons dit que la force est la pente de la carte d'énergie. Un bon modèle ne cherche pas à ajuster séparément la force. Il calcule d'abord l'énergie, puis obtient la force comme la pente de cette carte d'énergie. Il y a une raison à cet ordre. Si la force est produite librement, elle peut ne pas respecter l'énergie. Si l'on calcule longtemps avec une telle force, une énergie qui n'existait pas peut apparaître ou disparaître d'elle-même. La simulation se gonfle alors peu à peu ou s'effondre. Si la force est obtenue comme une pente à partir de l'énergie, ce désaccord ne se produit pas. En physique, une force issue ainsi de l'énergie s'appelle une force conservative.

Intégrer ces deux propriétés dans le modèle dès le départ apporte un grand avantage. Le modèle n'a pas besoin d'apprendre séparément le même matériau vu dans plusieurs directions. Une règle apprise une fois s'applique automatiquement dans toutes les directions. Il apprend donc de façon stable même avec peu de données. Comme les calculs DFT coûtent cher, cette économie de données est un avantage important.

Dans les matériaux de fusées, beaucoup d'événements dépendent de la direction. Une fissure se propage dans une direction particulière. Une déformation par glissement le long d'un plan cristallin possède aussi une direction. Une réaction d'oxydation se produit différemment selon l'orientation de la surface. Si la direction des forces n'est pas traitée correctement, ces événements sont mal représentés. Les modèles qui respectent l'équivariance sont avantagés sur ce point.

Transposons cette symétrie dans une image plus simple. Supposons que l'on prenne plusieurs photos d'une même structure en blocs jouets. Une photo prise de face et une photo prise de côté semblent différentes. Pourtant, la structure des blocs elle-même est la même. Un humain le comprend vite. Mais pour un ordinateur, les deux photos sont deux entrées différentes. Un modèle sans symétrie peut voir ces deux photos comme deux matériaux différents. Un modèle intégrant la symétrie les voit comme le même matériau. Cette différence modifie fortement l'efficacité de l'apprentissage.

En résumé, la symétrie n'est pas un décor, mais une ossature. Un modèle qui respecte la symétrie économise les données et stabilise les prédictions. Un modèle qui viole la symétrie peut produire des réponses physiquement étranges. C'est pourquoi les recherches modernes sur les MLIP se concentrent sur la façon de bien intégrer cette propriété.

3.2 De la méthode fondée sur les seules distances à l'échange des directions

SchNet est un premier réseau de neurones graphique apparu en 2018. Ce modèle échange uniquement la distance entre atomes sous forme de messages. La distance est une valeur sans direction. SchNet est donc un réseau de neurones graphique invariant, qui ne traite que des informations invariantes. Sa structure est claire et son calcul rapide.

La méthode qui n'utilise que les distances a une faiblesse. Elle représente difficilement de manière directe les liaisons où la direction est importante. Même à distance identique, une liaison change si

l'angle est différent. Si cette différence est ignorée, une erreur apparaît. DimeNet a complété ce point en incluant dans les messages les angles entre atomes. L'effort pour intégrer l'information directionnelle s'est ainsi poursuivi.

Batzner, Kozinsky et leurs collègues ont franchi une grande étape en 2022. Il s'agit du modèle NequIP. Ce modèle échange non seulement les distances et les angles, mais aussi la direction elle-même sous forme de messages. Il transmet et combine telles quelles les valeurs dotées d'une direction. C'est la transmission de messages équivariante. Elle représente beaucoup plus fidèlement la direction des forces et la forme tridimensionnelle autour des atomes.

Le grand avantage de NequIP est son efficacité en données. Comme il représente l'information directionnelle selon le principe physique, il apprend bien même avec peu d'exemples. L'article publié indique qu'il a atteint une grande précision avec beaucoup moins de données d'apprentissage que les modèles précédents. Dans une recherche où chaque calcul DFT coûte cher, cette économie apporte un avantage réel.

Il faut rappeler pourquoi l'efficacité en données est importante. Un seul calcul DFT demande beaucoup de temps de calcul. Si des dizaines de milliers de cas sont nécessaires à l'apprentissage, le coût de calcul augmente fortement. NequIP atteint une précision comparable avec un nombre bien plus faible de cas. Avec le même budget, on peut alors traiter des matériaux plus difficiles. Les nouveaux matériaux pour fusées manquent souvent de données. Un modèle efficace en données est très utile dans ce type de situation.

Cette avancée a un sens direct pour le calcul des matériaux de fusées. Les fissures, les défauts et les transitions de phase sont tous liés à la direction. Un modèle équivariant représente plus correctement ces événements directionnels. Même avec peu de données DFT, il peut apprendre le comportement en milieu extrême. C'est pourquoi, après NequIP, les méthodes équivariantes sont devenues proches d'un standard dans ce domaine.

À la même période que NequIP, des recherches ont aussi cherché à accroître l'efficacité. Il s'agissait de traiter l'information directionnelle tout en allégeant le calcul. Une étude récente a proposé un modèle équivariant plus efficace, publié dans une revue en 2025. L'objectif est de conserver la précision tout en réduisant la charge de calcul. Grâce à l'accumulation de ces efforts, les méthodes équivariantes sont devenues utilisables dans la recherche réelle.

Il y a toutefois un prix à payer. Pour mêler les informations directionnelles selon les principes, il faut des opérations mathématiques lourdes. On appelle cette opération le produit tensoriel. Elle est précise, mais elle demande beaucoup de calcul et de mémoire. Cette charge redevient ensuite un problème. Nous y reviendrons dans la section 5.

3.3 Méthode pour intégrer d'un seul coup les relations entre plusieurs atomes (MACE)

Batatia, Csányi et d'autres ont présenté MACE en 2022. Ce modèle a combiné un réseau de neurones sur graphe équivariant avec une ancienne théorie physique appelée expansion à plusieurs corps. Le terme « plusieurs corps » désigne les effets produits ensemble par plusieurs atomes. Dans un matériau, la relation entre un atome et un autre n'est pas la seule chose importante. La disposition formée par trois ou quatre atomes change aussi les propriétés.

Les réseaux de neurones sur graphe précédents échangeaient plusieurs fois des messages pour intégrer ces effets à plusieurs corps. Quand le nombre d'échanges augmente, la charge de calcul augmente et l'apprentissage ralentit. MACE a choisi une autre voie. Il multiplie entre elles les informations de

voisinage recueillies en une fois, afin de produire d'un seul coup les effets de plusieurs atomes. Ainsi, avec peu d'étapes de passage de messages, il intègre même les effets de quatre atomes ou plus.

L'avantage de cette conception est qu'elle réunit précision et vitesse. Réduire le passage de messages allège le calcul. Dans le même temps, le modèle ne perd pas les effets à plusieurs corps et conserve sa précision. Cet avantage devient important pour les grands cristaux et la dynamique moléculaire sur de longues durées. C'est pourquoi MACE sert de modèle de référence puissant dans de nombreuses recherches.

MACE est aussi utilisé dans la recherche sur les matériaux pour fusées. Une équipe récente a étudié un alliage à haute entropie mêlant aluminium, titane, chrome, molybdène et tungstène. Cet alliage est un matériau qui mélange plusieurs éléments en quantités comparables. Les chercheurs ont créé avec MACE le potentiel interatomique de cet alliage. Ils ont ensuite examiné la stabilité des phases selon la température. Cette étude a été publiée en 2026 dans une revue de physique. C'est un exemple d'emploi de MACE pour concevoir des alliages destinés aux hautes températures. Cependant, cette étude a montré un calcul de stabilité de phase. Elle n'a pas vérifié, à elle seule, les fissures ou la durée de vie de pièces réelles.

Il faut aussi voir ses limites. MACE utilise aussi le produit tensoriel quand il mêle les informations directionnelles. Ainsi, si l'on augmente la précision directionnelle appelée moment angulaire, la charge de calcul augmente rapidement. Pour des systèmes très grands ou des simulations très longues, cette charge reste un problème. Des recherches visant à la réduire seront présentées plus loin.

Prenons un exemple simple pour expliquer les effets à plusieurs corps. Dans une classe, si l'on observe seulement deux élèves, on sait seulement s'ils s'entendent bien. Quand trois élèves se réunissent, l'ambiance change. Quand quatre élèves se réunissent, un autre mouvement apparaît. Il en va de même pour les atomes. Les relations entre deux atomes ne suffisent pas à décrire toutes les propriétés d'un matériau. La disposition créée ensemble par plusieurs atomes change les propriétés. MACE intègre ces relations entre plusieurs atomes en peu d'étapes.

Un autre enjeu est la situation située hors du domaine appris. Même si MACE est très précis, il peut se tromper devant un arrangement inconnu qui n'existait pas dans l'apprentissage. L'environnement d'une fusée est toujours extrême et comporte de nombreux événements inconnus. C'est pourquoi un modèle précis a besoin d'un dispositif qui signale lui-même les moments où il ne sait pas. Ce dispositif est l'apprentissage actif de la section 4.

3.4 Grands modèles ayant appris à l'avance un large ensemble de matériaux (CHGNet, MatterSim)

Les modèles précédents sont généralement entraînés pour un matériau donné ou un domaine étroit. Lorsqu'ils rencontrent un nouveau matériau, il faut les entraîner de nouveau avec des données adaptées. Le courant qui cherche à réduire cette charge est celui des potentiels de fondation. Un potentiel de fondation est un grand modèle qui a appris à l'avance sur des données de matériaux très larges. C'est un peu comme un cuisinier qui connaît de nombreux plats et s'adapte assez bien à de nouveaux ingrédients.

CHGNet est un potentiel de fondation représentatif paru en 2023. Ce modèle a été entraîné avec une grande base de données de calculs appelée Materials Project. Materials Project est une ressource publique qui rassemble les résultats de calculs DFT de très nombreux matériaux. CHGNet apprend en plus des indices sur la charge et l'état magnétique. Il suit donc bien le déplacement du lithium dans les matériaux de batterie ou les changements de phase des oxydes de métaux de transition.

Il y a une raison pour laquelle CHGNet apprend la charge et l'état magnétique. Dans les matériaux de batterie, le lithium entre et sort, et la charge circule. Dans les oxydes de métaux de transition, l'état magnétique des atomes change les propriétés. Si l'on manque ces changements, on décrit mal le comportement du matériau. CHGNet intègre ces indices dans la représentation de l'environnement atomique et couvre ainsi un plus large ensemble de matériaux. Cependant, ce n'est pas un modèle électrochimique qui suit une à une les charges comme des valeurs conservées. Il vaut mieux le comprendre comme un modèle qui intègre des pistes sur l'état magnétique grâce aux représentations apprises. Les matériaux pour fusées utilisent souvent des oxydes et des métaux de transition, ce qui rend cette capacité utile.

MatterSim est un autre potentiel de fondation rendu public en 2024. Ce modèle vise une très large plage de températures et de pressions. L'article public indique qu'il couvre de 0 kelvin à 5000 kelvins, et de 0 gigapascal à 1000 gigapascals. Le kelvin est une unité de température absolue, et le gigapascal est une unité de pression. Les conditions chaudes d'un moteur-fusée entrent dans cette plage. Cependant, le fait que le domaine d'apprentissage se recoupe avec ces conditions et le fait que le modèle prédise correctement sont deux choses différentes. 1000 gigapascals est une valeur bien supérieure à la pression d'une chambre de combustion de fusée. Les situations propres aux fusées, comme les gaz de combustion ou les surfaces oxydées, doivent être vérifiées séparément. C'est pourquoi ce modèle attire l'attention comme point de départ pour la recherche sur les matériaux extrêmes. L'article public indique que ce modèle a économisé beaucoup de données. Comme il a appris à l'avance de larges conditions, il s'adapte rapidement à de nouveaux matériaux.

Récemment, un nouveau potentiel de fondation a aussi amélioré à la fois la précision et la vitesse. Il s'agit du modèle GRACE. Ce modèle a été construit dans le cadre de l'expansion de grappes atomiques sur graphe. Les chercheurs ont entraîné ce modèle avec une partie de données parmi les plus grands ensembles de matériaux. L'étude publiée indique que ce modèle a établi un nouvel équilibre entre précision et efficacité. Cette recherche a été publiée en 2026 dans une revue de calcul des matériaux. Elle a montré qu'un grand modèle bien affiné peut être adapté à une tâche donnée tout en conservant sa précision.

Les potentiels de fondation changent la manière de faire de la recherche. Autrefois, on construisait un modèle depuis le début pour chaque matériau. Aujourd'hui, on utilise d'abord un grand modèle, puis on ajuste seulement les parties nécessaires. Cette manière de modifier légèrement un modèle s'appelle l'ajustement fin. Même face à un nouvel alliage, on peut s'adapter rapidement avec peu de données.

Les efforts pour comparer équitablement ces grands modèles augmentent aussi. Avec l'apparition de plusieurs potentiels de fondation, il est devenu difficile de juger lequel est meilleur. C'est pourquoi des espaces d'évaluation publics mesurant les performances dans les mêmes conditions ont été créés. Il s'agit de plateformes de benchmark élaborées par plusieurs équipes de recherche. Ces espaces comparent ensemble la précision, la vitesse et la stabilité. L'utilisateur peut choisir le modèle adapté à son problème.

Il faut néanmoins rester prudent. Un potentiel de fondation ne convient pas automatiquement à toutes les situations. Dans les alliages ou les réactions de surface rares dans les données d'apprentissage, l'erreur peut augmenter. C'est pourquoi un bon modèle doit toujours être accompagné d'une vérification. Les structures inconnues doivent être recalculées par DFT pour être confirmées. Cette procédure de vérification est le sujet de la section suivante.

4. Boucle d'apprentissage actif (Active Learning), évaluation de l'erreur et de l'incertitude

Même un bon modèle peut se tromper dans une situation qu'il n'a pas apprise. Le problème apparaît quand le modèle se trompe tout en donnant une réponse avec assurance. Dans ce cas, il est difficile pour une personne de détecter l'erreur. Cette section traite des méthodes qui permettent au modèle de signaler lui-même les moments où il ne sait pas.

Cette méthode est l'apprentissage actif (Active Learning). L'apprentissage actif est une procédure cyclique dans laquelle le modèle choisit les structures dont il n'est pas sûr et les fait recalculer précisément. Nous verrons comment cette boucle fonctionne et comment mesurer numériquement le manque de confiance. Nous expliquerons aussi pourquoi cette procédure sert de garde-fou dans un environnement extrême et inconnu comme les matériaux pour fusées.

Prenons des exemples quotidiens pour expliquer l'interpolation et l'extrapolation. Si l'on connaît les températures de plusieurs années passées, on peut estimer la température d'aujourd'hui. Estimer à l'intérieur d'une plage déjà connue relève de l'interpolation. Mais si une vague de chaleur jamais vue arrive, l'estimation se trompe. Sortir du domaine déjà connu relève de l'extrapolation. De même, un modèle prédit bien dans le domaine qu'il a connu et devient instable hors de ce domaine.

Le modèle prédit de manière sûre à l'intérieur des données d'apprentissage. Cette zone s'appelle le domaine d'interpolation. À l'intérieur de l'espace entouré par les données d'apprentissage, les prédictions sont fiables. Mais hors de cet espace, la situation change. Cette zone extérieure s'appelle le domaine d'extrapolation. Dans le domaine d'extrapolation, le modèle peut donner une réponse plausible mais fausse.

L'erreur dans le domaine d'extrapolation est dangereuse. Pendant une simulation, les atomes peuvent se chevaucher ou la structure peut s'effondrer d'une manière anormale. Si cela se produit sans bruit, tout le résultat devient impossible à croire. Dans l'environnement des fusées, les conditions sont toujours extrêmes, si bien que l'extrapolation se produit souvent. Les hautes températures, les chocs violents, l'oxydation et les fissures sont des événements rares dans les données d'apprentissage. Il faut donc absolument un dispositif qui détecte ces moments.

La boucle d'apprentissage actif comporte quatre étapes. On entraîne d'abord un modèle avec un petit ensemble de données DFT. Ensuite, on calcule rapidement les mouvements atomiques avec ce modèle. Si, pendant le calcul, une structure apparaît et que le modèle n'en est pas sûr, on la marque. On choisit seulement cette structure et on la recalcule précisément par DFT. On ajoute le nouveau résultat aux données, puis on corrige le modèle. En répétant ces étapes, le modèle apprend des situations de plus en plus larges. Cela ressemble au fait de vérifier de nouveau la carte à chaque embranchement sur une route inconnue.

Le cœur de cette boucle consiste à mesurer numériquement le manque de confiance. Ce nombre s'appelle l'incertitude (Uncertainty). Il existe plusieurs méthodes pour mesurer l'incertitude. Les sous-sections suivantes présentent les principales.

4.1 Mesurer numériquement les moments où le modèle ne sait pas (UQ)

La première méthode pour mesurer l'incertitude consiste à utiliser le degré d'extrapolation. Un modèle appelé potentiel à tenseur de moments (Moment Tensor Potential, MTP) utilise cette méthode. Ce modèle mesure par un nombre à quel point l'arrangement atomique actuel diffère des données d'apprentissage. Ce nombre s'appelle le degré d'extrapolation. Si le degré d'extrapolation est faible, l'arrangement est familier et la prédiction est sûre. S'il est élevé, l'arrangement est inconnu et il faut le recalculer.

La deuxième méthode consiste à comparer les réponses de plusieurs modèles. On crée plusieurs modèles entraînés de manière légèrement différente avec les mêmes données. Cet ensemble s'appelle un ensemble. Si les réponses de ces modèles sont proches pour une nouvelle structure, elles sont généralement fiables. Si les réponses divergent fortement, cette structure est un signal de risque. Cependant, des modèles appris avec les mêmes données peuvent se tromper ensemble face à une entrée inconnue. L'accord d'un ensemble n'est donc qu'un indicateur de référence, et non une garantie complète. C'est comme poser la même question à plusieurs personnes et considérer que le problème est difficile si leurs réponses divergent.

La troisième méthode consiste à faire produire par le modèle lui-même une marge d'erreur. Des recherches récentes ont avancé dans cette direction. Une équipe a ajouté aux potentiels interatomiques une méthode appelée apprentissage profond fondé sur les preuves. Cette méthode fournit la valeur prédite ainsi que le degré de confiance dans cette valeur. Elle allège le calcul, car il n'est pas nécessaire d'exécuter séparément plusieurs modèles. Cette étude a été publiée dans une revue en 2025.

Des recherches cherchent aussi à intégrer plus profondément l'incertitude à l'apprentissage actif. Une méthode pousse la simulation à rechercher elle-même les zones incertaines. Elle guide les mouvements atomiques vers les arrangements dont le modèle n'est pas sûr. Cela permet de recueillir plus vite les structures qui ont une grande valeur d'apprentissage. C'est une méthode efficace pour remplir les situations inconnues.

Cette procédure est l'ossature qui protège la sûreté dans la recherche sur les matériaux pour fusées. Dans les environnements extrêmes, des arrangements imprévus apparaissent toujours. Sans dispositif d'incertitude, on risque de croire vrai un résultat faux. Avec un dispositif d'incertitude, le calcul s'arrête au moment risqué et l'on vérifie. Les résultats deviennent d'autant plus fiables.

Les méthodes de traitement de l'incertitude continuent encore d'apparaître. Récemment, certaines recherches ont même abordé le cas où le modèle est mal conçu. Si les hypothèses de base du modèle sont fausses, l'incertitude produite est elle aussi fausse. Une recherche portant sur ce problème a été publiée dans une revue en 2025. Cela signifie que mesurer l'incertitude est une tâche très délicate. Malgré cela, les progrès dans cette direction soutiennent la sûreté du calcul des matériaux extrêmes.

Un autre avantage de cette procédure cyclique est l'économie de données. Les calculs DFT sont coûteux. Calculer au hasard n'importe quelle structure entraîne donc un grand gaspillage. L'apprentissage actif choisit seulement les structures qui ont une grande valeur d'apprentissage. Avec le même budget, il rassemble des données plus utiles. Il permet ainsi d'obtenir plus vite un meilleur modèle.

On peut comparer cette méthode à la préparation d'un examen. Refaire des exercices que l'on connaît déjà fait perdre du temps. Si l'on choisit seulement les exercices que l'on a ratés, les progrès sont rapides. L'apprentissage actif comble lui aussi seulement les parties faibles du modèle. C'est une méthode qui produit un grand progrès avec peu de calculs. Dans la recherche sur les matériaux pour fusées, le budget de calcul est toujours serré. Cette économie devient donc une force dans le développement réel.

Cependant, mesurer correctement l'incertitude est en soi une tâche difficile. Certaines méthodes demandent une lourde charge de calcul, tandis que d'autres perdent en précision. Si le modèle est mal conçu dès le départ, même l'incertitude peut être mal évaluée. Des recherches récentes continuent de traiter ce problème. La quantification de l'incertitude n'est pas encore une technique achevée, mais un domaine en cours de développement.

5. Réseaux de neurones géométriques qui allègent le produit tensoriel : efficacité des calculs et lissage des courbes

Les modèles équivariants sont précis, mais ils portent le poids d'un calcul lourd. Une grande cause de ce poids est le produit tensoriel mentionné plus haut. Cette section explique pourquoi le produit tensoriel est coûteux et quelles recherches récentes cherchent à le réduire ou à le supprimer.

Un autre point important ici est le lissage des courbes. Le résultat d'un calcul atomique est une surface d'énergie potentielle, c'est-à-dire une carte de l'énergie. Si cette surface est irrégulière, le calcul des forces devient instable et la simulation se brise. Cette section explique comment les nouvelles méthodes cherchent à obtenir à la fois la vitesse et le lissage.

Le produit tensoriel est une opération mathématique qui mélange selon les principes des valeurs dotées d'une direction. Les modèles équivariants utilisent cette opération pour traiter correctement l'information directionnelle. Le problème est que plus la précision directionnelle augmente, plus la charge de cette opération croît rapidement. Le temps de calcul et la mémoire augmentent ensemble. Dans les simulations de grands systèmes ou sur de longues durées, cette charge devient un mur.

Représentons le produit tensoriel avec des mots plus simples. Quand on mélange des informations dotées d'une direction, les règles sont strictes. On ne peut pas simplement additionner ou multiplier deux valeurs directionnelles. Il faut les associer et les mélanger conformément aux lois physiques. Le produit tensoriel réalise correctement cet appariement difficile. Il est précis, mais le nombre de paires augmente vite avec la précision directionnelle. Ainsi, même une légère hausse de précision alourdit le calcul.

Des recherches apparaissent dans plusieurs directions pour franchir ce mur. Une première voie consiste à créer des programmes spéciaux qui calculent le produit tensoriel plus vite. Une étude récente a fortement accéléré les calculs de dynamique moléculaire par cette méthode. Cette étude a été publiée dans une revue en 2026. C'est une voie qui conserve le produit tensoriel lui-même, mais optimise le calcul.

5.1 Une nouvelle conception qui n'utilise pas du tout le produit tensoriel

Une autre voie consiste à ne pas utiliser du tout le produit tensoriel. L'étude appelée Geodite a choisi cette direction. Son titre est « potentiel interatomique équivariant sans produit tensoriel ». Elle remplace par une autre méthode l'opération lourde qui mélange les directions. Elle respecte néanmoins la symétrie de rotation selon les principes.

Résumons simplement le principe par lequel cette méthode remplace le produit tensoriel. Au lieu d'une opération d'appariement lourde, elle établit un repère local. Elle fixe un cadre de directions de référence autour de chaque atome. En traitant l'information dans ce cadre, on peut conserver les directions avec un calcul plus léger. La symétrie est préservée, tandis que la charge diminue.

Cette étude annonce deux résultats. Le premier est la vitesse. Le résumé publié indique qu'elle est trois à cinq fois plus rapide que des modèles de précision comparable. Le second est l'étendue de la précision. Elle a obtenu une précision comparable à celle de modèles antérieurs pour la prédiction de la stabilité des matériaux, la conductivité thermique, les vibrations du réseau et la dynamique moléculaire à l'échelle de la nanoseconde. Elle a donc fortement accru la vitesse tout en gardant la précision. Cette étude est une recherche préliminaire qui n'a pas encore été évaluée par les pairs. Elle doit donc être considérée non comme une norme établie, mais comme une technologie candidate prometteuse.

Supprimer le produit tensoriel n'améliore pas seulement la vitesse. Cela aide aussi à lisser les courbes. Si l'on réduit la précision directionnelle dans le produit tensoriel, de fines ondulations peuvent apparaître

sur la surface. Ces ondulations font sauter le calcul des forces. Les conceptions sans produit tensoriel sont faites pour éviter ces ondulations. La courbe reste lisse même dans les zones où les liaisons se forment et se rompent.

Ce lissage est important dans les calculs de matériaux pour fusées. À haute température, les atomes vibrent fortement et les liaisons se rompent souvent. Si la courbe est rugueuse, les forces sautent dans ces zones et la simulation s'effondre. Une courbe lisse stabilise le calcul même dans des conditions extrêmes. C'est pourquoi le lissage est une propriété aussi importante que la précision.

D'autres études poursuivent des objectifs semblables. L'une d'elles déploie l'information directionnelle sur une grille sphérique, puis la mélange avec un réseau de neurones léger. Cette méthode est elle aussi plus rapide que le produit tensoriel tout en conservant la capacité d'expression. Des recherches ont aussi proposé de modifier en douceur la distance de coupure selon la situation. Toutes ces études en sont encore à un stade préliminaire. Plusieurs équipes essaient des chemins différents vers le même objectif.

Examinons un peu plus pourquoi le lissage est si important. La force vient de la pente de la surface d'énergie. Si la surface est lisse, la pente change elle aussi en douceur. S'il y a de petites ondulations sur la surface, la pente saute brusquement. Une force qui saute pousse les atomes dans une mauvaise direction et gâche la simulation. Il faut donc une surface lisse autant qu'une énergie précise. Même si l'erreur apparente est faible, une surface rugueuse pose de grands problèmes dans les longs calculs.

Le sens de ce courant est clair. Il s'agit d'alléger la charge de calcul tout en gardant la précision des modèles équivariants. Quand le calcul devient plus léger, on peut observer des systèmes plus grands pendant plus longtemps. Cela aide directement à étudier longtemps de grands matériaux, comme les pièces de fusée. Cependant, les preuves expérimentales s'accumulent encore, et il faut donc examiner aussi la validation.

6. Modélisation de la densité électronique et élagage structurel pour faire fonctionner les modèles sur des équipements légers

Les grands modèles sont précis, mais ils sont lourds et exigent de grands équipements de calcul. Cette section traite des méthodes qui rendent les grands modèles plus légers tout en respectant les lois physiques. Elle examine deux idées. La première est l'élagage, qui supprime les voies de calcul moins importantes. La seconde consiste à introduire dans le modèle des indices sur la distribution des électrons. Le point central de cette section est d'alléger le modèle sans le couper au hasard. Les calculs atomiques doivent respecter de nombreuses propriétés physiques. Il s'agit de la symétrie, de la direction des forces, et de la cohérence entre l'énergie et les forces. Cette section explique comment réduire le modèle tout en préservant ces propriétés.

L'élagage (Pruning) est une méthode qui réduit les voies moins importantes dans un réseau de neurones. Dans un réseau de neurones, les voies qui transportent l'information sont appelées canaux. Tous les canaux ne sont pas également importants. Réduire les canaux peu utilisés allège le calcul. C'est comme enlever d'un sac les affaires que l'on utilise rarement pour le rendre plus léger.

Le problème est que couper n'importe quel canal peut perturber les lois physiques. Dans un modèle équivariant, les canaux sont liés aux directions. Si l'on coupe séparément des canaux appartenant à un même groupe directionnel, la direction des forces devient étrange. Il faut ici corriger un malentendu. Si le modèle produit d'abord l'énergie puis calcule la force comme sa pente, la relation entre l'énergie et la force reste préservée même lorsque l'on réduit les canaux. L'élagage ne brise pas directement cette relation. En revanche, la précision avec laquelle le modèle traite les directions et la précision des prédictions peuvent se dégrader. L'élagage doit donc être fait avec prudence.

6.1 Élagage structurel qui préserve la cohérence physique

L'élagage structurel (Structured Pruning) est une méthode qui coupe les canaux par groupes directionnels. Il ne coupe pas les canaux séparément, mais les traite par groupes entiers. C'est ainsi que l'équilibre des directions reste intact. Le rapport entre canaux scalaires et canaux vectoriels est lui aussi contrôlé. Un scalaire est une valeur sans direction, tandis qu'un vecteur est une valeur avec direction. Il faut préserver ce rapport pour garder intactes la symétrie et la direction des forces.

Illustrons pourquoi il faut couper par groupes entiers. Une aiguille de boussole n'a de sens que si elle indique ensemble le nord, le sud, l'est et l'ouest. Si l'on ne garde que le nord et le sud en coupant l'est et l'ouest, la direction se déforme. Les canaux directionnels d'un modèle équivariant sont du même ordre. Les valeurs d'un même groupe doivent rester ensemble pour indiquer correctement la direction. Si l'on n'en coupe qu'une partie séparément, la direction des forces se décale. C'est pourquoi la coupe doit toujours se faire par groupe.

Le choix des canaux à couper se fait selon leur importance. On mesure combien chaque canal contribue au résultat. On réduit d'abord les canaux qui contribuent peu. Là encore, l'unité de base est le groupe directionnel. On examine ensemble les valeurs d'un même groupe pour juger. De cette manière, on enlève seulement le superflu tout en gardant la structure qui transporte l'information.

Une équipe de recherche récente a appliqué cette méthode à un potentiel de fondation. Le titre de cette étude est « modèle atomique dense équivariant SO3 créé par élagage structurel ». Le résumé publié indique que le nombre de paramètres a été réduit de plusieurs fois. Les paramètres sont le nombre de valeurs que le modèle apprend. La quantité de calcul nécessaire au préentraînement a elle aussi été réduite de plusieurs fois. L'étude indique en outre qu'après l'ajustement fin, les erreurs sur l'énergie et les forces ont même diminué. Cette étude est une recherche préliminaire publiée en 2026. Comme elle n'a pas été évaluée par les pairs, elle ne doit pas être considérée comme un résultat établi.

L'objectif visé par cette étude est de faire tourner des calculs précis même sur des équipements légers. Les grands modèles exigent en général plusieurs machines très performantes. Si l'on réduit correctement le modèle, on peut effectuer des calculs semblables avec des équipements plus petits. Si le seuil d'entrée dans la recherche baisse, davantage de chercheurs peuvent participer aux calculs de matériaux. Cependant, il faudra encore vérifier jusqu'à quel type d'équipement cela est possible.

Cette direction a aussi un sens pour la recherche sur les matériaux de fusée. Pour simuler longtemps un environnement extrême, il faut répéter de nombreux calculs. Si le modèle est léger, on peut lancer davantage d'expériences avec le même équipement. Cela aide à filtrer rapidement les matériaux candidats. L'essentiel est d'obtenir de la vitesse tout en préservant la précision.

Il existe d'autres méthodes qui poursuivent un objectif semblable à celui de l'élagage. L'une consiste à transférer les connaissances d'un grand modèle vers un petit modèle. Cette méthode s'appelle distillation des connaissances. Un grand modèle bien entraîné devient le professeur du petit modèle. Le petit modèle apprend en imitant les réponses du professeur. Il obtient ainsi, malgré sa petite taille, des performances proches de celles du grand modèle. L'élagage et la distillation des connaissances sont deux voies pour alléger le transfert d'un grand modèle.

Il faut faire attention à ne pas oublier la validation physique. Même un modèle allégé par élagage doit être vérifié. Il faut examiner ensemble la cohérence entre l'énergie et les forces, la direction des forces, la symétrie et l'indication de l'incertitude. Ce n'est que si ces propriétés sont respectées qu'un modèle léger peut être fiable. Un modèle seulement rapide est dangereux dans les calculs extrêmes.

6.2 Méthode consistant à ajouter des indices de densité électronique

Quand on réduit un modèle, sa capacité d'expression risque aussi de diminuer. Une idée pour compenser cette perte est d'introduire la densité électronique. La densité électronique est une carte qui indique dans quelle mesure les électrons sont répartis dans l'espace. C'est à l'origine une grandeur physique fondamentale traitée par la DFT. L'idée est d'ajouter directement cet indice dans le modèle afin de renforcer une capacité d'expression devenue insuffisante. Cette manière de mélanger des informations différentes est appelée hybride.

Il faut ici préciser brièvement les types de liaison. La liaison ionique est une liaison qui se forme par don et réception d'électrons. Le sel est constitué de ce type de liaison. La liaison métallique est une liaison dans laquelle les électrons circulent librement entre plusieurs atomes. C'est grâce à cette liaison que le fer conduit bien l'électricité. La liaison covalente est une liaison dans laquelle les atomes partagent des électrons. Ainsi, la forme des électrons varie selon le type de liaison.

L'information sur la densité électronique aide à distinguer les types de liaison. Dans un matériau, il existe plusieurs types de liaisons. Les liaisons ioniques, métalliques et covalentes sont différentes. En observant où et en quelle quantité les électrons se rassemblent, on peut reconnaître ces différences. Si l'on introduit cet indice dans le modèle, on peut mieux saisir le caractère des liaisons.

Cette méthode est aussi jugée utile pour rétablir des effets à longue portée. L'influence des électrons s'étend au-delà des proches voisins. Quand on allège un modèle, il devient facile de manquer ces effets lointains. On espère qu'un bon usage des indices de densité électronique permettra d'intégrer dans une certaine mesure ces influences éloignées. Cependant, introduire la densité électronique ne résout pas automatiquement l'électrostatique et les forces de dispersion à longue distance. Le choix de la densité à introduire, la manière de l'introduire et la méthode de validation font encore l'objet de recherches. Il vaut donc mieux comprendre cette direction non comme une solution établie, mais comme une proposition.

Dans les matériaux de fusée, les types de liaisons sont souvent mêlés de manière complexe. Les métaux et les céramiques sont utilisés ensemble, et des films d'oxyde se forment. Pour traiter ces matériaux, il faut distinguer correctement le caractère des liaisons. La méthode qui introduit la densité électronique peut aider cette distinction et renforcer les calculs de matériaux extrêmes.

La possibilité de calculs à grande échelle s'ouvre aussi. Une équipe de recherche récente a simulé à l'échelle d'un million d'atomes un alliage composé de plusieurs éléments. Elle a traité un grand système au moyen d'un potentiel interatomique capable de gérer plusieurs composants. Cette étude est une recherche préliminaire publiée en 2026. Les alliages à haute entropie sont des candidats importants pour les matériaux à haute température destinés aux fusées. Plus on peut traiter de grands systèmes, plus on peut observer des comportements proches de ceux des pièces réelles.

Replaçons le propos de cette section dans la réalité du développement des fusées. De nombreuses entreprises et de nombreux laboratoires du secteur spatial ne disposent pas de ressources de calcul abondantes. Si les grands modèles ne peuvent tourner que sur plusieurs machines, le seuil d'entrée est élevé. Quand les modèles deviennent plus légers, davantage d'équipes peuvent aborder les calculs atomiques. Elles filtrent rapidement les matériaux candidats et réduisent les objets à tester réellement. Ce va-et-vient entre calcul et expérience raccourcit la durée du développement.

Les deux idées de cette section visent le même objectif. Il s'agit d'alléger le calcul tout en préservant la précision. L'élagage enlève le superflu, tandis que les indices de densité électronique comblent la capacité d'expression manquante. En les utilisant ensemble, on peut créer un modèle utilisable même

avec de petits équipements. Cette direction est encore en développement et se trouve à un stade où les validations s'accumulent.

Résumé

Ce chapitre a raconté les règles qui permettent de traiter les atomes par ordinateur. Ces règles sont les potentiels interatomiques. Depuis longtemps, les scientifiques devaient choisir entre une méthode exacte et une méthode rapide. La DFT est exacte, mais lente, tandis que les champs de forces empiriques sont rapides, mais imprécis. Le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP) est un outil qui cherche à faire tomber le mur entre les deux.

Revenons brièvement sur ce parcours. Au début, l'être humain transformait l'environnement des atomes en nombres. Ensuite, le modèle a appris lui-même ces nombres. Puis on a fait en sorte que les atomes échangent de l'information entre eux. Aujourd'hui, de grands modèles ayant appris à l'avance sur un large ensemble de matériaux sont apparus. À chaque étape, la main humaine a reculé et la force des données a augmenté. Ce mouvement est la grande ligne de développement des MLIP.

Les premiers MLIP transformaient la forme de l'environnement atomique en nombres conçus par l'être humain. Cette approche par descripteurs comprenait les BPNN, les potentiels par approximation gaussienne et DeePMD. Ils ont obtenu de grands résultats, mais leurs limites sont aussi apparues. Quand le nombre d'éléments augmente, la charge de calcul grandit et il devient difficile d'intégrer les effets à longue distance.

La génération suivante est celle des réseaux de neurones graphiques équivariants. Cette méthode voit les atomes comme des points et les relations de voisinage comme des lignes, puis échange de l'information. Elle intègre dans le modèle les symétries adaptées aux rotations et aux translations, ce qui économise les données. De SchNet à NequIP puis MACE, l'exactitude et l'efficacité ont progressé ensemble. Les potentiels de fondation comme CHGNet, MatterSim et GRACE se sont imposés comme de grands modèles ayant appris à l'avance sur un large ensemble de matériaux.

Même les modèles exacts ont des faiblesses. Dans une situation inconnue qu'ils n'ont pas apprise, ils peuvent se tromper. C'est pourquoi il faut un apprentissage actif et une quantification de l'incertitude, afin que le modèle signale lui-même les moments où il ne sait pas. L'environnement des fusées est toujours extrême et comporte beaucoup d'événements inconnus. Il faut ce dispositif de sécurité pour faire confiance aux calculs de matériaux extrêmes.

Les recherches récentes poursuivent à la fois la vitesse, la régularité et la légèreté. Elles réduisent ou suppriment les produits tensoriels pour accélérer les calculs. Elles allègent les modèles par un élagage structural et renforcent leur pouvoir d'expression grâce à des indices tirés de la densité électronique. Une grande partie de ces méthodes reste encore au stade de recherche initiale sans évaluation par les pairs. Elles sont prometteuses, mais il est trop tôt pour les considérer comme des normes établies.

Voici cinq points qu'un lecteur général devrait retenir de ce chapitre. Le calcul atomique a longtemps reposé sur un compromis entre exactitude et rapidité. L'apprentissage automatique a jeté un pont pour atténuer ce compromis. Le respect des symétries est au cœur d'un bon modèle. Même le meilleur modèle doit signaler lui-même les moments où il ne sait pas pour rester sûr. Enfin, une grande partie des technologies les plus récentes reste encore une recherche initiale en cours de validation.

Ces cinq points valent aussi pour les chapitres qui suivent. Créer des structures cristallines, concevoir des alliages et traiter des céramiques reposent tous sur ce calcul atomique. Sans calcul atomique exact, la conception construite au-dessus devient instable. C'est pourquoi le contenu de ce chapitre sert de pierre de fondation à l'ensemble du livre.

Il faut aussi garder un regard équilibré. Le MLIP est un outil puissant, mais il n'est pas universel. Si les données d'apprentissage sont de mauvaise qualité, les prédictions le seront aussi. Si l'on néglige la validation, on peut se laisser tromper par des erreurs qui paraissent acceptables. Cette technologie ne remplace donc ni le jugement humain ni l'expérience. Le calcul réduit la liste des candidats, et l'expérience se charge de la vérification finale. Cette coopération est la voie qui permet de faire entrer de nouveaux matériaux dans le monde en toute sécurité.

Toutes ces technologies convergent vers un même objectif. Il s'agit de tester les matériaux de fusée et les nouveaux matériaux dans l'ordinateur, à grande échelle, sur de longues durées, avec exactitude et sécurité. Filtrer les candidats avant de fabriquer des pièces réelles permet d'économiser de l'argent et du temps. À partir du chapitre suivant, nous passerons à l'histoire de la création directe de nouveaux matériaux sur la base de ce calcul atomique ainsi consolidé.

Sources associées

- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Behler, J., & Parrinello, M. (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Physical Review Letters*, 98, 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>
- Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons. *Physical Review Letters*, 104, 136403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403>
- Bartók, A. P., Kondor, R., & Csányi, G. (2013). On representing chemical environments. *Physical Review B*, 87, 184115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.184115>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & E, W. (2018). Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Physical Review Letters*, 120, 143001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>
- Schütt, K. T., Sauceda, H. E., Kindermans, P. J., Tkatchenko, A., & Müller, K. R. (2018). SchNet: A deep learning architecture for molecules and materials. *Journal of Chemical Physics*, 148, 241722. <https://doi.org/10.1063/1.5019779>
- Gasteiger, J., Groß, J., & Günnemann, S. (2020). Directional message passing for molecular graphs (DimeNet). *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2003.03123>
- Batzner, S., Musaelian, A., Sun, L., Geiger, M., Mailoa, J. P., Kornbluth, M., Molinari, N., Smidt, T. E., & Kozinsky, B. (2022). E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials (NequIP). *Nature Communications*, 13, 2453. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29939-5>
- Batatia, I., Kovács, D. P., Simm, G. N. C., Ortner, C., & Csányi, G. (2022). MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35, 11423-11436. <https://arxiv.org/abs/2206.07697>
- Batatia, I., Batzner, S., Kovács, D. P., Musaelian, A., Simm, G. N. C., Drautz, R., Ortner, C., Kozinsky, B., & Csányi, G. (2025). The design space of E(3)-equivariant atom-centred interatomic potentials. *Nature Machine Intelligence*, 7, 56-67. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00956-x>
- Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C. J., & Ceder, G. (2023). CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. *Nature Machine Intelligence*, 5, 1031-1041. <https://doi.org/10.1038/s42256-023-00716-3>
- Yang, H., Hu, C., Zhou, Y., Liu, X., Shi, Y., Li, J., et al. (2024). MatterSim: A deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures. *arXiv:2405.04967*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>
- Deringer, V. L., Caro, M. A., & Csányi, G. (2021). Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science. *Advanced Materials*, 33, 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- Shapeev, A. V. (2016). Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials. *Multiscale Modeling and Simulation*, 14, 1153-1173. <https://doi.org/10.1137/15M1054183>
- Podryabinkin, E. V., & Shapeev, A. V. (2017). Active learning of linearly parametrized interatomic potentials. *Computational Materials Science*, 140, 171-180. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.08.031>

- Lysogorskiy, Y., Bochkarev, A., & Drautz, R. (2026). Graph atomic cluster expansion for foundational machine learning interatomic potentials (GRACE). *npj Computational Materials*, 12, 114. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-01979-1>
- Reschützegger, T., Aykent, S., Perin, G. J., Nunes, B. H., Cipcigan, F., Ferreira, R. N. B., Steiner, M., & Thiemann, F. L. (2026). Equivariant interatomic potentials without tensor products (Geodite). arXiv:2601.15492. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2601.15492>
- Wang, C., Hu, S., Tan, G., & Jia, W. (2026). Compact SO(3) equivariant atomistic foundation models via structural pruning. arXiv:2605.08885. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2605.08885>
- Tan, C. W., Descoteaux, M. L., Kotak, M., de Miranda Nascimento, G., Kavanagh, S. R., Zichi, L., Wang, M., Saluja, A., Hu, Y. R., Smidt, T. E., Johansson, A., Witt, W. C., Kozinsky, B., & Musaelian, A. (2026). High-performance training and inference for deep equivariant interatomic potentials. *Digital Discovery*, 5, 1558-1567. <https://doi.org/10.1039/d5dd00423c>
- Miklaucic, N., Wei, L., Dong, R., Fu, N., Omeo, S. S., Li, Q., Dey, S., Fung, V., & Hu, J. (2025). Facet: Highly efficient E(3)-equivariant networks for interatomic potentials. arXiv:2509.08418. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2509.08418>
- Han, K., Cong, H., Deng, B., & Barati Farimani, A. (2026). Smooth dynamic cutoffs for machine learning interatomic potentials. arXiv:2601.21147. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2601.21147>
- Xu, H., Cui, T., Tang, C., Ma, J., Zhou, D., Li, Y., Gao, X., Gong, X., Ouyang, W., Zhang, S., & Su, M. (2025). Evidential deep learning for interatomic potentials. *Nature Communications*, 16, 937. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67663-y>
- Kulichenko, M., Barros, K., Lubbers, N., Li, Y. W., Messerly, R., Tretiak, S., Smith, J. S., & Nebgen, B. (2023). Uncertainty-driven dynamics for active learning of interatomic potentials. *Nature Computational Science*, 3, 230-239. <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00406-5>
- Perez, D., Subramanyam, A. P. A., Maliyov, I., & Swinburne, T. D. (2025). Uncertainty quantification for misspecified machine learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 263. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01758-4>
- Yang, Z., Wang, X., Li, Y., Lv, Q., Chen, C. Y.-C., & Shen, L. (2025). Efficient equivariant model for machine learning interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 49. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01535-3>
- Shuang, F., Ying, P., Liu, K., Wei, Z., Liu, F., Fan, Z., Jiang, M., & Dey, P. (2026). Benchmarking chemically scalable machine-learning interatomic potentials for large-scale simulations of multicomponent alloys. arXiv:2604.01642. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2604.01642>
- Arnold, J. E., Woodgate, C. D., Hafizi, R., Harris, M. J., Mottura, A., García Fuentes, G., & Gurrutxaga-Lerma, B. (2026). Thermodynamics and phase stability of the AlTiCrMoW high-entropy alloy simulated using machine-learned interatomic potentials. *Physical Review Materials*, 10, 073605. <https://doi.org/10.1103/5tz1-zg9z>
- Chiang, Y., Kreiman, T., Zhang, C., Kuner, M. C., Weaver, E. J., Amin, I., Park, H., Lim, Y., Kim, J., Chrzan, D., Walsh, A., Blau, S. M., & Asta, M. (2025). MLIP Arena: Advancing fairness and transparency in machine learning interatomic potentials via an open, accessible benchmark platform. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 38. <https://arxiv.org/abs/2509.20630>

Chapitre 2. Prédiction de la structure cristalline (CSP) et conception inverse des matériaux fondées sur l'IA générative et les modèles de diffusion (Diffusion Models)

Introduction

Quand nous fabriquons un objet, nous choisissons en général d'abord le matériau. Supposons que nous fabriquons une casserole. Nous décidons d'abord si elle sera en fer ou en aluminium. Ensuite, nous fixons son épaisseur et sa forme. Enfin, nous la mettons sur le feu et vérifions quelles propriétés apparaissent.

L'ancienne façon de chercher de nouveaux matériaux ressemble à cela. On choisit d'abord une substance déjà connue. Ensuite, on mesure ses propriétés par ordinateur ou par expérience. Si elles sont bonnes, on la garde. Si elles sont mauvaises, on l'écarte. Cette méthode est fiable. Mais elle est lente, car il faut vérifier les candidats un par un.

Le problème tient à l'immensité du monde des substances. Il existe beaucoup d'éléments. On peut aussi changer le nombre d'atomes. On peut modifier la place des atomes et la taille du réseau. Si l'on combine tout cela, le nombre de cas augmente comme les étoiles dans le ciel. Un humain ne peut pas en venir à bout en les testant un par un.

Ce chapitre raconte un renversement de perspective. On ne choisit pas d'abord le matériau. On fixe d'abord les propriétés voulues. On décide que l'on veut un électrolyte solide qui conduit bien l'électricité. On décide que l'on veut un catalyseur qui résiste dans une tuyère de fusée brûlante. Alors l'intelligence artificielle dessine d'elle-même une structure cristalline adaptée à ces propriétés. Cette méthode s'appelle la conception inverse des matériaux (Inverse Design).

On peut comparer l'importance de la conception inverse à la cuisine. L'ancienne méthode consiste à cuisiner avec les ingrédients présents dans le réfrigérateur. Comme les ingrédients sont déjà fixés, les plats possibles le sont aussi. La conception inverse consiste à choisir d'abord le plat que l'on veut manger. On cherche ensuite, en sens inverse, les ingrédients nécessaires. On se procure même des ingrédients qui n'étaient pas dans le réfrigérateur. Ainsi, on ne reste pas enfermé dans les ingrédients disponibles et l'on se rapproche du plat imaginé.

Ici, le personnage principal est l'intelligence artificielle générative (Generative AI). Il est facile de penser à une IA qui dessine des images. Elle commence par un amas de points flous. Elle enlève peu à peu le bruit. À la fin, un visage humain ou un paysage apparaît. Le principe est le même pour la conception inverse des matériaux. Elle commence par un amas d'atomes flou. En supprimant le bruit, elle façonne un cristal régulier. Cette méthode de suppression du bruit s'appelle un modèle de diffusion (Diffusion Model).

Dans ce chapitre, nous verrons étape par étape comment un modèle de diffusion crée un cristal. Nous verrons comment il respecte les règles de symétrie. Nous verrons la technique d'appariement de flux (Flow Matching), qui accélère les calculs. Nous verrons aussi de nouvelles idées, comme l'inpainting qui comble les vides et les atomes mirages. Nous verrons également comment l'apprentissage par renforcement oriente le modèle vers de bonnes structures. Enfin, nous examinerons des cas où cette méthode a réellement été utilisée pour des électrolytes solides de batteries, des catalyseurs et des alliages aérospatiaux. Nous expliquerons pas à pas pourquoi les fusées et les nouveaux matériaux ont besoin de cette technologie.

1. De la méthode qui choisissait d'abord les matériaux à la conception inverse qui fixe d'abord les propriétés

Cette section porte sur le changement de direction dans la recherche de matériaux. L'ancienne méthode choisit d'abord un matériau et vérifie ensuite ses propriétés. La nouvelle méthode fixe d'abord les propriétés, puis crée le matériau. Nous verrons pourquoi ce changement est nécessaire et ce qu'il signifie pour les fusées et les nouveaux matériaux.

L'ancienne méthode s'appelle le criblage direct des propriétés (Forward Property Screening). Le mot direct signifie que l'on va du matériau vers les propriétés. Le criblage consiste à filtrer plusieurs candidats. Le chercheur extrait des candidats de bases de données cristallines déjà connues. Il existe deux grands entrepôts représentatifs. Ce sont le Materials Project et la base de données des structures cristallines inorganiques (ICSD).

Après avoir extrait les candidats, on calcule leurs propriétés. On utilise alors un calcul physique appelé théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT). Ce calcul résout le mouvement des électrons dans les atomes pour obtenir l'énergie et les propriétés. Les résultats sont précis. Mais le volume de calcul est élevé. L'ordinateur doit tourner longtemps. C'est pourquoi le nombre de candidats que l'on peut examiner en une journée est faible.

La limite fondamentale de cette méthode est qu'elle reste enfermée dans un espace étroit. Les vérifications ne portent que sur des substances déjà connues. Les nouvelles substances absentes des bases de données ne deviennent même pas candidates. Même s'il existe une substance inconnue aux propriétés excellentes, on ne peut pas l'atteindre. Ainsi, l'ancienne méthode a une faible capacité à créer du nouveau.

La conception inverse des matériaux brise cet espace fermé. Elle inverse l'ordre. Elle fixe d'abord les propriétés cibles. Elle décide que la conductivité ionique doit être élevée. Elle décide que la substance doit être stable du point de vue thermodynamique. Ensuite, l'intelligence artificielle dessine directement une structure qui satisfait ces conditions. Elle dessine même des structures absentes des bases de données. Le centre de gravité de la recherche de matériaux passe de la vérification à la création.

Prenons un exemple pour voir à quel point le nombre de possibilités est grand. On peut utiliser environ 90 éléments présents dans la nature. Supposons que l'on place seulement dix atomes dans une boîte. Pour chaque position, il faut choisir quel élément y mettre. On peut aussi modifier un peu la position des atomes. Rien qu'avec ces combinaisons, on atteint un nombre astronomique. Il apparaît plus de candidats que de grains de sable au bord de la mer. Même en y consacrant toute une vie, un humain ne pourrait pas les calculer un par un jusqu'au bout.

Le temps nécessaire à un seul calcul n'est pas négligeable. Les calculs DFT prennent plus de temps quand le nombre d'atomes augmente. Si le nombre d'atomes double, le calcul augmente de plusieurs fois. Pour résoudre une seule grande structure, un ordinateur peut tourner pendant plusieurs jours. On ne peut donc pas calculer aveuglément un grand nombre de candidats. Il faut bien choisir les candidats à l'avance. L'intelligence artificielle donne la capacité de sélectionner quels candidats calculer en premier.

Dessiner un cristal consiste à décider trois choses en même temps. Il faut d'abord fixer le réseau (Lattice). Le réseau est la forme et la taille de la boîte qui contient les atomes. Ensuite, il faut fixer les positions des atomes. Il s'agit de savoir où les atomes sont placés dans la boîte. Enfin, il faut fixer les types d'atomes. Il s'agit de savoir quel élément occupe chaque position. Ces trois éléments doivent s'accorder pour former un vrai cristal. Si un seul ne convient pas, les atomes se heurtent ou la structure s'effondre.

Il est difficile de traiter ces trois éléments en même temps. Le réseau est une valeur continue faite de longueurs et d'angles. Les positions atomiques sont elles aussi des valeurs continues. Mais les types d'atomes sont des valeurs discontinues. Après le chlore, il n'existe pas d'élément à moitié semblable au chlore. Il faut donc traiter ensemble des valeurs de nature différente. Le modèle de diffusion accomplit cette tâche difficile. Il restaure, à partir du bruit, des valeurs continues et des valeurs discontinues côte à côte.

Expliquons un peu plus le principe du modèle de diffusion. L'apprentissage a deux directions. D'abord, dans la direction directe, on ajoute peu à peu du bruit à un cristal propre. Après plusieurs ajouts, le cristal devient un amas de points désordonné. L'intelligence artificielle apprend à inverser ce processus. Elle s'entraîne à retrouver le cristal d'origine à partir d'un état bruité. Une fois cet entraînement terminé, elle façonne un nouveau cristal à partir de points désordonnés.

La force de cette méthode est qu'elle apprend bien les données. On montre au modèle plusieurs milliers de cristaux connus dans le monde. Le modèle acquiert le sens des arrangements plausibles. Il apprend les distances que les atomes doivent respecter entre eux. Il apprend quels éléments s'installent bien à quels endroits. Avec cette intuition acquise, il propose de nouveaux cristaux. Il l'apprend par lui-même, sans qu'un humain doive écrire chaque règle une par une.

La conception inverse ne se limite pas aux cristaux réguliers. Il existe aussi des substances dont les atomes sont désordonnés, comme le verre. On appelle ces substances amorphes (Amorphous). Une étude publiée en 2025 a créé des structures amorphes avec un modèle de diffusion. Elle les a créées des milliers de fois plus vite que les anciennes méthodes de calcul. Elle a produit diverses structures en modifiant la composition et les conditions de procédé. La conception inverse étend ainsi son action au-delà des cristaux.

Le modèle de conception inverse apprend aussi les règles chimiques. Chaque atome a un nombre de liaisons qu'il peut former avec ses voisins. Ce nombre s'appelle la valence (Valence). Si l'on viole la valence, on obtient une structure impossible. Une étude publiée en 2026 a intégré cette règle de valence au processus de génération. Elle a ainsi sélectionné uniquement des substances réellement possibles. Le mouvement qui consiste à implanter le bon sens de la physique et de la chimie dans les modèles se poursuit.

Pour les fusées et les nouveaux matériaux, ce changement a une grande signification. Une fusée exige des matériaux capables de résister à des environnements extrêmes. La chambre de combustion est brûlante. La tuyère est érodée par des gaz rapides. Les batteries doivent être légères et sûres. Les substances qui satisfont toutes ces conditions ne sont pas courantes dans la nature. C'est pourquoi il faut la conception inverse, qui dessine ce qui n'existe pas encore. L'intelligence artificielle parcourt à la place de l'humain l'espace des substances que celui-ci n'a jamais visité.

2. Des modèles génératifs qui respectent les règles de symétrie des cristaux

Cette section porte sur les règles de symétrie des cristaux. Un cristal n'est pas un tas d'atomes jetés n'importe où. C'est un ordre dans lequel les atomes se répètent selon des règles. Si l'intelligence artificielle ignore ces règles, elle dessine de faux cristaux. Nous verrons comment intégrer la symétrie dans le modèle, en distinguant deux générations de modèles.

Pour comprendre les cristaux, il faut d'abord saisir le mot symétrie. La symétrie est la propriété d'une forme qui reste la même après certaines opérations. Quand on plie une feuille en deux et que les deux côtés se superposent, il y a une symétrie gauche-droite. Dans un cristal, plusieurs couches de ce type de symétrie sont superposées. Il reste identique quand on le décale, quand on le tourne ou quand on le reflète.

L'ensemble de ces règles de symétrie, une fois rassemblées et classées, s'appelle le groupe d'espace (Space Group). Les cristaux tridimensionnels comptent exactement 230 groupes d'espace. Chaque cristal appartient à l'un de ces 230 groupes. Cette classification convient aux cristaux périodiques tridimensionnels idéaux. Les matériaux amorphes comme le verre et les quasi-cristaux s'en écartent. Connaître le groupe d'espace revient à connaître toutes les règles de répétition et de rotation de ce cristal.

Dans un groupe d'espace, il existe des positions déterminées où les atomes peuvent s'installer. Ces ensembles de positions s'appellent les positions de Wyckoff (Wyckoff Position). Une position de Wyckoff n'est pas une seule place, mais un groupe de places liées par symétrie. Si l'on place un atome à une position, la règle de symétrie place le même atome aux positions correspondantes. C'est comme lorsqu'on pose une balle devant un miroir et qu'une balle apparaît aussi dans le miroir. Ainsi, lorsqu'une seule position est fixée, les positions de plusieurs atomes sont fixées en même temps. Le nombre de positions attachées à cet ensemble s'appelle la multiplicité (Multiplicity). Si un modèle génératif reçoit cette règle, il peut éviter que les atomes se chevauchent.

La force du groupe d'espace est de dessiner l'ensemble avec peu d'informations. Pour un cristal à forte symétrie, il suffit de fixer quelques atomes. Le reste est automatiquement rempli par les règles de symétrie. Il est facile de penser à un cristal de neige. Sa forme qui s'étend dans six directions est identique. Si l'on dessine une seule direction, on obtient les cinq autres par rotation. Les cristaux déterminent eux aussi l'ensemble à partir d'un petit fragment.

Si le modèle génératif ignore cette règle, des problèmes apparaissent. Supposons que l'intelligence artificielle place librement les atomes un par un. Un faible bruit de calcul suffit à briser la symétrie. Un cristal presque dépourvu de symétrie s'appelle P1. P1 est bien un groupe d'espace officiel à part entière. Il existe réellement des substances qui appartiennent à P1. On ne peut donc pas dire qu'un cristal est faux seulement parce qu'il est P1. Le problème apparaît lorsqu'un cristal qui devrait avoir une forte symétrie s'effondre en P1. Dans ce cas, il faut vérifier séparément les distances entre atomes, l'énergie et la stabilité.

C'est pourquoi les recherches récentes cherchent à intégrer d'avance les règles de symétrie dans le modèle. Au lieu de placer les atomes un par un, elles suivent un autre ordre. Elles créent d'abord une petite unité de base qui contient toute la symétrie. Ensuite, elles appliquent les règles de symétrie pour déployer le cristal entier. De cette manière, le résultat généré a plus de chances de respecter la symétrie.

Une bonne manière de traiter la symétrie est une propriété appelée équivariance (Equivariance). L'équivariance signifie que si l'entrée tourne, la sortie tourne avec elle. L'exemple d'un gant est simple. Si l'on retourne un gant droit, il devient un gant gauche. La main et le gant se retournent ensemble. Si un modèle cristallin possède l'équivariance, ses propriétés restent les mêmes même lorsque la structure tourne. La symétrie est respectée d'elle-même, sans qu'il soit nécessaire de l'ajuster de force.

L'utilisation d'un réseau de neurones doté de cette équivariance facilite l'apprentissage. Le modèle connaît lui-même la symétrie. Il n'est pas nécessaire de lui montrer la même structure sous plusieurs angles. Il apprend bien même avec peu de données. C'est pourquoi les modèles récents de génération de cristaux font de l'équivariance un outil important. Cette propriété sera aussi centrale dans les modèles d'appariement de flux présentés plus loin.

Une revue générale des modèles de génération de cristaux publiée en 2026 résume bien cette tendance. Elle souligne que la capacité à respecter la symétrie est une condition essentielle d'un bon modèle génératif de cristaux. Elle considère que les modèles qui respectent la symétrie produisent davantage de candidats stables. Cette revue compare côte à côte les modèles de diffusion et les modèles d'appariement de flux.

2.1 Le point de départ de la diffusion générative de cristaux (CDVAE)

La recherche sur la diffusion générative de cristaux est partie d'un modèle initial. Ce modèle s'appelle CDVAE. Examinons pas à pas ce qu'il a bien fait et ce qui lui manquait.

CDVAE est l'abréviation de Crystal Diffusion Variational Autoencoder. Ce modèle a été publié en 2022 et a ouvert la voie à ce domaine. Il a établi le premier cadre de diffusion traitant ensemble le réseau cristallin, les positions atomiques et les types d'atomes.

Le grand apport de CDVAE est de tenir compte des conditions aux limites périodiques (Periodic Boundary Condition). Les conditions aux limites périodiques signifient qu'un cristal se répète sans fin avec la même forme. On peut penser à un motif de papier peint. Un morceau se prolonge vers le haut, le bas, la gauche et la droite, et couvre tout le mur. Dans un cristal aussi, une petite unité se répète et forme un bloc.

Ce modèle déplace peu à peu les positions des atomes par une méthode appelée dynamique de Langevin (Langevin Dynamics). La direction qui pousse les atomes est alors le gradient de la probabilité apprise par le modèle. Elle est différente des forces réelles entre atomes ou de l'énergie libre. Ce seul processus ne garantit donc pas une structure stable. Après avoir créé l'ossature par génération, on affine de nouveau la structure par DFT. Il faut distinguer ces deux étapes.

Cependant, CDVAE a une limite nette. Il ne peut pas fixer directement la symétrie du groupe d'espace. Comme les atomes sont déplacés librement, la symétrie se brise facilement. Par conséquent, les structures créées s'effondraient souvent vers un état P1 où la symétrie disparaissait. Pour les cristaux où la symétrie est indispensable, il fallait donc ajouter une vérification séparée.

Une autre limite tient au fait que le nombre d'atomes doit être fixé à l'avance. Ce modèle prédit d'abord le nombre d'atomes, puis crée une structure adaptée à ce nombre. Lorsque ce nombre est fixé, la souplesse diminue. Il devient difficile de traiter les situations où des atomes manquent ou sont ajoutés. Cette limite sera levée plus loin par la méthode des atomes mirage.

Ces insuffisances ne sont pas des défauts, mais des points d'appui. Les questions posées par CDVAE sont devenues les objectifs des modèles de la génération suivante. Comment préserver la symétrie ? Comment traiter librement le nombre d'atomes ? Ces deux questions ont guidé les recherches ultérieures. Connaître les limites des premiers modèles est le point de départ du progrès.

2.2 Modèles de diffusion conditionnels conscients de la symétrie

Les modèles de la génération suivante ont cherché à respecter les règles de symétrie dès le départ. Deux études aux noms proches seront expliquées séparément pour éviter toute confusion. Les chiffres de performance seront traités avec prudence, seulement dans la mesure où ils ont été vérifiés.

L'idée centrale d'un modèle conscient de la symétrie est simple. Il ne place pas les atomes un par un en toute liberté. Il crée d'abord une unité asymétrique (Asymmetric Unit). Une unité asymétrique est le plus petit ensemble d'atomes à partir duquel tout le cristal peut être construit au moyen des règles de symétrie. Les opérations de symétrie du groupe d'espace sont appliquées à cette petite graine. Après ces opérations, la graine se déploie en cristal complet.

L'avantage de cette méthode est que la symétrie est respectée d'elle-même. Comme la graine a été déployée selon les règles de symétrie, le résultat porte la symétrie en lui. Il n'est pas nécessaire d'ajuster les atomes séparément. On peut penser à l'origami. Si l'on plie une feuille puis que l'on découpe une forme, les deux côtés sont identiques une fois la feuille dépliée. Un modèle conscient de la symétrie découpe le cristal de cette manière.

Il faut ici distinguer deux études aux noms proches. La première est SymmCD. C'est un modèle de diffusion générative de cristaux qui préserve la symétrie. Levy et ses collègues l'ont présenté en 2025 à la Conférence internationale sur les représentations d'apprentissage (ICLR). Il s'agit d'un article officiel évalué par les pairs. Son identifiant est arXiv:2502.03638.

L'autre est une étude distincte qui traite des positions de Wyckoff. Ishii et ses collègues ont publié ce préarticle en 2026. Un préarticle (preprint) est une étude initiale qui n'a pas encore été évaluée par les pairs. Cet article propose une méthode appelée WyckoffDiff-Adaptor. Son identifiant est arXiv:2601.08115. Les deux articles ont des objectifs proches, mais leurs méthodes et leurs auteurs diffèrent. Ce livre les présente séparément, sans les mélanger.

Il existe aussi un pont intermédiaire entre CDVAE et les modèles conscients de la symétrie. DiffCSP en est un exemple. Ce modèle génère ensemble le réseau et les coordonnées fractionnaires par diffusion. Les coordonnées fractionnaires sont des positions relatives lorsque la taille de la boîte est prise comme égale à 1. DiffCSP a mieux préservé la symétrie que CDVAE. Il a ouvert la voie aux modèles plus récents qui intègrent directement la symétrie. Ainsi, les modèles progressent génération après génération en comblant leurs manques.

Il faut être prudent avec les chiffres de performance. Il existe un chiffre selon lequel le taux de préservation de la symétrie dépasse 98 %, mais il n'est pas confirmé dans le texte original. Ce livre n'utilise donc pas ce chiffre comme une performance établie. Il le comprend plutôt comme une tendance. Les modèles conscients de la symétrie préservent mieux la symétrie que les anciens modèles. Ils produisent donc davantage de candidats proches de cristaux réels.

Les modèles conscients de la symétrie traitent aussi bien la génération conditionnelle. La génération conditionnelle (Conditional Generation) consiste à donner une propriété souhaitée comme condition. Supposons que l'on fixe une valeur appelée bande interdite. La bande interdite est un seuil d'énergie qui détermine les propriétés d'un semi-conducteur. Le modèle ne dessine alors que les cristaux adaptés à cette bande interdite. En imposant ainsi une condition, seuls les candidats correspondant à l'objectif sont rassemblés. Cela réduit fortement le gaspillage lié aux candidats inutiles.

Un préarticle paru en 2026 a poussé plus loin cette génération conditionnelle. Il a généré ensemble la structure cristalline et les propriétés électroniques. Comme le modèle apprenait aussi les propriétés électroniques, il a mieux satisfait les propriétés visées. Dans des essais où la bande interdite et l'énergie de formation étaient données comme conditions, le taux de réussite a augmenté. La proportion de candidats stables et nouveaux a aussi progressé. Le courant qui traite ensemble la symétrie et les conditions se poursuit.

Voyons pourquoi cette technique est nécessaire pour les nouveaux matériaux. La symétrie est profondément liée aux propriétés de la matière. Une fausse structure dont la symétrie s'est effondrée conduit aussi à des prédictions de propriétés erronées. Les alliages destinés à l'aérospatial ou les matériaux de batterie n'ont de sens que s'ils peuvent mener à une synthèse réelle. Les modèles génératifs qui préservent la symétrie réduisent les candidats inutiles. La qualité des candidats qui passent à l'expérimentation s'en trouve améliorée.

3. L'appariement de flux pour créer des cristaux plus rapidement

Les modèles de diffusion sont précis, mais lents, car ils nécessitent de nombreuses étapes.

L'appariement de flux réduit le nombre d'étapes et augmente la vitesse. Nous verrons aussi comment traiter l'espace courbe dans lequel vivent les cristaux.

Il faut d'abord comprendre pourquoi les modèles de diffusion sont lents. Un modèle de diffusion crée une structure en retirant peu à peu le bruit. Il n'en retire qu'une petite quantité à chaque fois. Il faut donc des centaines à des milliers d'étapes pour arriver au résultat final. Plus il y a d'étapes, plus le calcul prend du temps. Créer un seul candidat demande du temps. Dans la recherche de matériaux, où il faut générer beaucoup de candidats, ce temps devient une charge.

L'appariement de flux (Flow Matching) résout ce problème sous un autre angle. Au lieu d'effacer peu à peu le bruit, il apprend un raccourci. Il apprend le chemin qui mène directement de l'état initial à l'état cible. On peut penser au courant d'une rivière. Une fois le chenal défini, une feuille suit ce chemin en flottant. L'appariement de flux apprend ce chenal lui-même, là où l'eau s'écoule.

Lorsque l'on exprime ce chenal par une formule, on obtient une équation différentielle ordinaire. Une équation différentielle ordinaire (Ordinary Differential Equation) est une formule qui décrit la variation d'une valeur. Elle montre comment cette valeur change avec le temps. L'appariement de flux suit cette formule du point de départ au point d'arrivée. La diffusion fluctue aléatoirement à chaque étape, mais ce trajet ne le fait pas. Une fois le point de départ fixé, il suit jusqu'au bout un chemin déterminé. Le chemin est donc plus droit et les étapes sont moins nombreuses. Toutefois, le point de départ lui-même reste tiré au hasard. Le fait que le trajet soit déterminé ne réduit pas automatiquement les distorsions des angles et du volume du réseau.

On peut comparer la différence entre diffusion et appariement de flux à une descente de montagne. La diffusion descend pas à pas dans le brouillard. Elle est prudente, mais lente. L'appariement de flux descend par un sentier déjà appris. Comme il connaît le chemin, il avance vite. Les deux méthodes arrivent à destination au pied de la montagne, mais le temps nécessaire diffère.

Dans le traitement des cristaux, une difficulté tient au fait que l'espace n'est pas plat. Le réseau possède des longueurs et des angles. Les coordonnées atomiques sont des positions dans une boîte répétée. Un tel espace n'est pas plat comme du papier, mais courbe comme une sphère. On appelle cet espace courbe une variété riemannienne (Riemannian Manifold).

Si l'on traite un espace courbe comme une feuille plane, des erreurs apparaissent. C'est comme lorsqu'on déplie un globe terrestre en carte plane : les surfaces sont déformées. Les régions polaires sont dessinées plus grandes qu'elles ne le sont réellement. Il en va de même pour les cristaux. Les angles et le volume du réseau se déforment. L'appariement de flux utilise donc dès le départ une règle adaptée à l'espace courbe. Cette règle s'appelle une métrique riemannienne (Riemannian Metric). Comme l'espace courbe est traité comme courbe, les distorsions diminuent.

3.1 Trouver un raccourci sur un espace courbe

Nous examinons comment l'appariement de flux traite l'espace courbe à travers des modèles représentatifs. La discussion se concentre sur des articles vérifiés.

Trouver un raccourci dans un espace courbe ressemble à un vol au-dessus de la Terre. Le raccourci entre Séoul et New York n'est pas une ligne droite sur une carte. C'est parce que la Terre est ronde. Le vrai raccourci est une courbe qui suit la surface terrestre. Cette courbe s'appelle une géodésique (Geodesic). La génération de cristaux se déplace elle aussi le long de géodésiques sur un espace courbe.

Le premier modèle qui a bien appliqué cette idée aux cristaux est FlowMM. FlowMM est un modèle qui étend l'appariement de flux riemannien aux cristaux. Il tient aussi compte de la symétrie propre aux cristaux. Il traite les translations latérales, les rotations, les permutations de l'ordre des atomes et les conditions aux limites périodiques. Ce modèle a fortement réduit le nombre d'étapes nécessaires pour

trouver des matériaux stables. L'article publié rapporte qu'il a trouvé des candidats stables avec environ trois fois moins d'étapes que les méthodes existantes.

FlowMM accomplit deux tâches. La première consiste à prédire une structure stable lorsque la composition est donnée. La seconde consiste à proposer ensemble une nouvelle composition et sa structure. La première tâche s'appelle prédiction de structure cristalline (Crystal Structure Prediction). La seconde correspond à la véritable découverte de nouveaux matériaux. L'appariement de flux réalise rapidement ces deux tâches. Il est donc utilisé dans de nombreuses parties de la recherche de matériaux.

CrystalFlow est un autre cas vérifié. Cette étude a été publiée en 2025 dans Nature Communications. Il s'agit d'un article officiel évalué par les pairs. CrystalFlow crée des matériaux cristallins au moyen d'un modèle génératif fondé sur les flux. Il génère ensemble le réseau et l'arrangement atomique. Il a montré que l'appariement de flux facilite l'apprentissage par rapport aux modèles de diffusion.

L'appariement de flux est aussi utilisé pour les cristaux organiques. Un préarticle paru en 2026 a utilisé l'appariement de flux de maille élémentaire (Unit Cell Flow Matching). Cette méthode a permis de prédire rapidement des structures cristallines organiques. Cette étude n'est pas un modèle réservé aux cristaux inorganiques. Il faut donc éviter d'étendre ses résultats aux matériaux inorganiques. Elle montre cependant que l'appariement de flux peut être utilisé pour divers cristaux.

Relions maintenant l'importance de la vitesse aux fusées. La conception inverse de matériaux doit générer beaucoup de candidats puis les filtrer. Même si l'on en produit dix mille, seuls quelques-uns peuvent être utiles. Si la création d'un candidat prend longtemps, toute la recherche est bloquée. L'appariement de flux lève ce goulet d'étranglement. Il génère davantage de candidats dans le même temps. Cette vitesse est d'autant plus utile dans les domaines aux conditions strictes, comme les matériaux destinés à l'aérospatial.

Dans quelle mesure l'appariement de flux réduit-il le nombre d'étapes ? L'article sur FlowMM rapporte qu'il réduit d'environ trois fois les étapes nécessaires pour trouver des candidats stables. Il parcourt en moins d'étapes le chemin que suivaient les modèles de diffusion. Le temps nécessaire pour créer un candidat est réduit d'autant. Les grands chiffres affirmant une réduction par cent, ou le passage d'une journée à quelques minutes, ne reposent pas sur des preuves. Même en s'en tenant aux valeurs rapportées, plus on génère de candidats, plus le temps économisé s'accumule.

L'appariement de flux conserve toutefois des défis. Pour apprendre un raccourci, il faut bien connaître la distribution cible. Si les données d'apprentissage manquent, le modèle apprend un mauvais chemin. Le calcul sur un espace courbe reste lui aussi difficile. L'appariement de flux ne remplace donc pas tous les modèles de diffusion. On choisit l'une ou l'autre méthode selon le problème. Si la précision est prioritaire, on utilise la diffusion ; si la vitesse est prioritaire, on utilise l'appariement de flux.

4. Redessiner seulement une partie et laisser le nombre d'atomes se déterminer

Il n'est pas toujours nécessaire de dessiner un cristal à partir d'une page blanche. On peut aussi ne modifier qu'une partie d'une structure existante. L'inpainting, qui remplit les lacunes et les défauts, est une méthode de ce type. Il existe aussi l'idée des atomes mirage pour traiter les problèmes où le nombre d'atomes n'est pas fixé.

Il faut d'abord définir le terme inpainting. L'inpainting est une technique qui remplit naturellement les parties vides. On le voit souvent dans la retouche photo. Si l'on efface un poteau électrique dans une photo, un vide apparaît à cet endroit. L'intelligence artificielle observe le ciel autour et comble ce vide.

Elle fait la même chose dans une structure cristalline. Dans un cristal, elle remplit naturellement les sites atomiques vides et les sites de défauts.

Créer un cristal à partir d'une page blanche et faire de l'inpainting sont deux choses différentes. La génération à partir d'une page blanche commence sans placer aucun atome. L'inpainting commence à partir d'une structure déjà existante. Il vide seulement une partie et redessine uniquement cette partie. Le reste est conservé. Les deux méthodes ont des usages différents. Pour chercher un matériau entièrement nouveau, on utilise la génération à partir d'une page blanche. Pour améliorer un bon matériau, on utilise l'inpainting.

Il y a une raison pour laquelle cette technique est nécessaire dans la recherche sur les matériaux. En pratique, il est rare de devoir redessiner tout un cristal. Il existe souvent déjà une bonne matrice hôte (Host Matrix). On en modifie les propriétés en y ajoutant ou en y retirant une petite quantité d'un autre élément. Le fait de remplacer ainsi une partie des atomes par d'autres atomes s'appelle le dopage (Doping). L'état dans lequel un atome manque ou occupe un autre site s'appelle un défaut (Defect).

Le dopage est une méthode utilisée depuis longtemps par l'industrie des semi-conducteurs. Le silicium pur conduit mal l'électricité. On y ajoute une très petite quantité de phosphore ou de bore. Les propriétés électriques changent alors fortement. Les puces des smartphones fonctionnent selon ce principe. L'inpainting cristallin confie cette conception du dopage à l'intelligence artificielle. Le modèle propose quel élément placer à quel site.

Ce petit changement modifie fortement les propriétés. Cela ressemble au fait qu'un aliment change de goût lorsqu'on mélange une petite quantité d'une autre substance au sel. Si l'on remplace un seul atome dans un cristal, la conductivité électrique change. Les performances catalytiques changent. Il faut donc concevoir avec précision quoi placer et où. L'inpainting aide cette conception précise. Il conserve la matrice hôte et ne redessine que les sites à modifier.

L'inpainting est plus pratique qu'une génération à partir d'une page blanche pour une raison simple. Trouver une bonne matrice hôte prend déjà beaucoup de temps. Lorsqu'une matrice déjà validée existe, il est plus rapide de l'améliorer. C'est comme réparer une seule pièce au lieu de construire une maison solide depuis le début. Comme les fondations ne bougent pas, le risque est plus faible. C'est pourquoi les chercheurs de terrain utilisent volontiers l'inpainting.

Pour remplir un site vide, il faut bien observer les atomes voisins. Si l'on place n'importe quel élément, la structure s'effondre. La taille doit convenir aux atomes voisins. L'équilibre électrique doit aussi être respecté. L'intelligence artificielle apprend les règles de la matrice hôte et satisfait ces conditions. Elle masque seulement les sites à modifier au moyen d'une méthode appelée masquage (Masking). Elle redessine seulement les sites masqués et fixe le reste.

4.1 Diffusion d'atomes mirages (MiAD), qui détermine elle-même le nombre d'atomes

Parmi les méthodes qui traitent librement le nombre d'atomes, il existe un modèle de prépublication appelé MiAD. Voyons pourquoi l'idée d'atomes mirages est utile.

MiAD est l'abréviation de Mirage Atom Diffusion. Il s'agit d'une prépublication parue fin 2025. C'est une recherche initiale, antérieure à l'examen par les pairs. Son titre officiel indique qu'il s'agit d'un modèle de diffusion qui crée de nouveaux cristaux à partir de zéro. Son identifiant est arXiv:2511.14426.

L'idée centrale de ce modèle est l'atome mirage. Mirage signifie mirage. Un atome mirage est un site virtuel qui peut devenir un atome réel ou disparaître. Le modèle remplit d'abord largement une boîte avec des sites virtuels. Ensuite, pendant le processus de diffusion, il décide si chaque site est un véritable

atome ou un site vide. Un élément s'installe sur les sites qui restent réellement, et les autres sites disparaissent.

L'avantage de cette méthode est qu'elle ne fixe pas à l'avance le nombre d'atomes. Les anciens modèles définissaient d'abord le nombre d'atomes, puis construisaient la structure. MiAD active et désactive des sites virtuels et détermine lui-même ce nombre. Ce que cet article a réellement montré, c'est une génération qui détermine elle-même le nombre d'atomes. Ce n'est pas une étude qui a validé la concentration de défauts, les sites de dopage ou même la non-stœchiométrie. Il reste toutefois possible d'appliquer cette méthode à des matériaux dont le nombre d'atomes est variable.

Un matériau dont le rapport entre les éléments ne tombe pas exactement juste s'appelle un composé non stœchiométrique. Ces matériaux sont fréquents dans les matériaux réels. Un site vide, où un atome manque, modifie les propriétés. Des amas de défauts formés par plusieurs défauts peuvent aussi apparaître. Il existe aussi des défauts interstitiels, où des atomes s'insèrent dans des sites disponibles. Ces légers désordres déterminent la conductivité et la résistance mécanique. Une méthode de génération qui traite librement le nombre d'atomes fournit une piste pour représenter ces désordres.

MiAD a publié des résultats lors d'essais de référence. Il a utilisé un jeu d'essai largement employé appelé MP-20. L'indicateur qui exprime la proportion de cristaux stables, uniques et nouveaux s'appelle le ratio SUN. L'article a rapporté des résultats réguliers pour cet indicateur. Toutefois, cette valeur est celle d'une prépublication. Elle doit donc être comprise comme un résultat initial, et non comme une performance établie.

Voyons ce que cette technique signifie pour les fusées et les nouveaux matériaux. Les matériaux réellement utilisés dans l'aérospatiale ne sont pas parfaitement réguliers. Il existe toujours des défauts, où certains atomes manquent légèrement ou changent de place. Ces défauts déterminent la résistance mécanique et la conductivité. Un modèle qui traite librement le nombre d'atomes représente mieux ces structures réelles. Il produit d'autant plus de candidats proches des résultats de laboratoire. Toutefois, cette méthode en est encore au stade de la prépublication, et ses performances pour la conception des défauts doivent encore être validées.

5. Guider vers de bons candidats par apprentissage par renforcement

Un modèle génératif produit de nombreux candidats. Mais tous ne sont pas utiles. L'apprentissage par renforcement permet d'orienter la recherche vers de bons candidats. Voyons le principe par lequel l'apprentissage par renforcement guide le modèle, ainsi que ses dispositifs de sécurité.

L'apprentissage par renforcement (Reinforcement Learning) est un apprentissage qui corrige les actions en fonction d'une récompense. Il est facile de penser au dressage d'un chien. S'il réussit, on lui donne une friandise. S'il échoue, on ne lui en donne pas. Le chien augmente les comportements qui lui procurent une friandise. L'intelligence artificielle augmente elle aussi les actions qui reçoivent une forte récompense.

Dans la génération de matériaux, les bonnes structures reçoivent une forte récompense. Les cristaux stables et dotés de bonnes propriétés reçoivent un score élevé. Les structures où les atomes entrent en collision ou sont instables reçoivent un faible score. Le modèle modifie ses habitudes de génération vers les scores élevés. Ainsi, plus les essais se répètent, plus le nombre de candidats utilisables augmente.

Le modèle génératif et l'apprentissage par renforcement ont des rôles différents. Le modèle génératif disperse largement des candidats plausibles. L'apprentissage par renforcement pousse ces candidats vers l'objectif. C'est comme si la main qui sème les graines et celle qui ouvre le passage à l'eau étaient différentes. Les deux mains doivent agir ensemble pour obtenir de bons fruits. La génération seule ne

suffit pas, pas plus que l'apprentissage par renforcement seul. C'est lorsqu'on les relie que l'on se rapproche des propriétés voulues.

Cette méthode est nécessaire pour une raison précise. Le modèle génératif produit bien des candidats plausibles. Mais la plausibilité et la stabilité réelle sont différentes. Même avec une bonne apparence, beaucoup de structures s'effondrent thermodynamiquement. La génération seule ne suffit donc pas. Il faut examiner ensemble la stabilité, la nouveauté et la possibilité de synthèse. L'apprentissage par renforcement inscrit ces trois éléments dans la récompense et guide le modèle.

La possibilité de synthèse est un objectif difficile à traiter. Un matériau stable sur le papier peut ne pas être réalisable en laboratoire. La voie de fabrication peut être trop difficile, ou les matières premières peuvent manquer. La stabilité seule ne suffit donc pas. Il faut aussi voir si le matériau peut réellement être fabriqué. La récompense de l'apprentissage par renforcement cherche à intégrer ces conditions réelles. C'est ainsi que l'on obtient des candidats capables de passer au laboratoire.

Il existe plusieurs façons d'associer l'apprentissage par renforcement à la génération de matériaux. Une technique représentative est l'optimisation proximale de politique (Proximal Policy Optimization). Cette technique ne modifie la politique que progressivement, par petites étapes. En effet, un changement brusque et important déstabilise l'apprentissage. Elle avance prudemment, petit à petit, et augmente la récompense. Elle améliore ainsi les performances de manière stable. Cette technique est aussi largement utilisée pour affiner les modèles de langage.

Une prépublication parue en 2025 illustre bien cette direction. Elle a affiné un modèle de diffusion par apprentissage par renforcement et augmenté le taux de réussite de la conception inverse. Elle a produit davantage de structures correspondant aux propriétés visées. Elle a aussi augmenté la proportion de candidats satisfaisant aux conditions de stabilité, d'unicité et de nouveauté. Cette recherche en est à un stade initial. Pour une application industrielle, des calculs DFT et des synthèses expérimentales restent donc nécessaires.

5.1 Dispositifs de sécurité et indicateurs de performance de l'apprentissage par renforcement

L'apprentissage par renforcement comporte deux dispositifs de sécurité. Le premier empêche le modèle de trop s'écarter. Le second stocke les bons candidats pour les réutiliser. Examinons aussi les indicateurs qui mesurent les performances.

L'apprentissage par renforcement comporte un risque caché. Si l'on poursuit seulement la récompense, le modèle se biaise vers des structures étranges. Il se retrouve enfermé dans une zone étroite qui donne un score élevé. Il perd la diversité des candidats et répète une seule réponse. Ce phénomène s'appelle l'effondrement des modes (Mode Collapse). Lorsque cet effondrement survient, l'exploration s'arrête.

Le dispositif qui l'empêche est la régularisation KL (KL Regularization). KL est une mesure qui évalue à quel point deux distributions sont différentes. Ce dispositif empêche le modèle affiné de trop s'éloigner de la distribution qu'il a apprise au départ. Cela ressemble à un élastique. Le modèle avance dans une nouvelle direction, mais il est tiré en arrière s'il s'éloigne trop de sa base. Il cherche ainsi de bons candidats tout en préservant la diversité.

Un autre dispositif est le rejeu d'expérience (Experience Replay). Les bons candidats ne sont pas jetés, mais stockés. Les candidats stockés sont ensuite repris et utilisés pour l'apprentissage. Cela ressemble au fait de rassembler dans un cahier d'erreurs les questions bien réussies, puis de les résoudre de nouveau. De cette manière, les bonnes structures trouvées difficilement ne sont pas oubliées. L'apprentissage se poursuit de façon plus stable.

Un indicateur souvent utilisé pour mesurer les performances est le ratio SUN. SUN désigne des cristaux stables (Stable), uniques (Unique) et nouveaux (Novel). C'est la proportion de candidats qui satisfont aux trois conditions. Stable signifie que le candidat ne se sépare pas facilement en d'autres substances. Unique signifie que les produits générés ne se répètent pas entre eux. Nouveau signifie que le matériau n'existait pas dans la base de données.

Pour mesurer la stabilité, on examine une valeur appelée énergie au-dessus de l'enveloppe convexe (Energy above Hull). Cette valeur est calculée par DFT au zéro absolu. Plus elle est basse, plus le matériau est stable selon le calcul. Si elle est proche de 0, la structure se maintient bien dans le cadre du calcul. Cependant, la température et la pression réelles, l'eau et l'oxygène, ainsi que la vitesse de réaction, n'y sont pas inclus. Il existe aussi des erreurs de calcul. Cette valeur doit donc être lue comme un indicateur qui désigne des candidats stables sur le plan du calcul. La récompense de l'apprentissage par renforcement utilise cette valeur comme un élément important.

La récompense place plusieurs objectifs sur la même balance. Si l'on poursuit seulement la stabilité, on obtient des matériaux aux propriétés ordinaires. Si l'on poursuit seulement les propriétés, on obtient des matériaux difficiles à synthétiser. On attribue donc un poids distinct à la stabilité, aux propriétés et à la nouveauté. Le poids permet de régler quel objectif compte davantage. Ce réglage des poids revient au concepteur. Lorsque la balance est ajustée à l'objectif, les candidats se rassemblent dans la direction voulue.

Voyons ce que ces dispositifs de sécurité signifient pour la conception de matériaux de fusée. Les matériaux aérospatiaux n'ont de sens que s'ils peuvent réellement être synthétisés. Une structure bonne seulement sur le papier est inutile. L'apprentissage par renforcement intègre la possibilité de synthèse dans la récompense. La régularisation KL et le jeu d'expérience maintiennent l'exploration stable. En conséquence, la proportion de candidats susceptibles de passer au laboratoire augmente.

6. Cas pratiques d'application du pipeline de conception inverse

Comment les techniques précédentes ont-elles été utilisées dans la recherche réelle ? Examinons les électrolytes solides pour batteries, les catalyseurs et les alliages aérospatiaux. Nous nous appuyons sur des recherches récentes validées. Voyons comment la génération, le calcul et l'expérimentation s'articulent.

Pour utiliser réellement les techniques étudiées plus haut, il faut relier plusieurs outils. Le modèle de diffusion et l'appariement de flux produisent des candidats. La prise en compte de la symétrie et l'inpainting améliorent la qualité des candidats. L'apprentissage par renforcement guide les candidats vers l'objectif. Ces outils déploient leur force lorsqu'ils s'enchaînent dans un même flux. Ce flux est appelé pipeline de conception inverse (Pipeline). Pipeline signifie que plusieurs procédés sont reliés comme par des conduites.

En pratique, la conception inverse suit généralement trois étapes. D'abord, à l'étape de génération, l'intelligence artificielle dessine des structures candidates correspondant aux propriétés visées. Ensuite, à l'étape de validation par calcul, la DFT et le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP) calculent la stabilité et les propriétés. Enfin, à l'étape de synthèse expérimentale, un laboratoire autonome ou un chercheur fabrique réellement le matériau et le vérifie.

Ces trois étapes ne vont pas seulement dans un seul sens. Les résultats obtenus par l'expérience sont renvoyés au modèle génératif. Grâce à ce retour, le modèle dessine mieux les candidats suivants. Cette méthode fondée sur une boucle de rétroaction s'appelle apprentissage actif (Active Learning). Une étude parue en 2025 a fortement augmenté l'efficacité de la conception inverse grâce à l'apprentissage actif. Elle s'est rapprochée des propriétés visées en répétant la génération et la validation des candidats.

Examinons un peu plus la deuxième étape, celle de la validation par calcul. Les candidats produits par le modèle génératif ne sont encore que des dessins sur le papier. Le calcul vérifie si ces dessins sont vraiment stables. La DFT est précise, mais lente. On l'utilise donc avec le potentiel interatomique par apprentissage automatique étudié dans le chapitre précédent. Cette méthode offre une précision proche de celle de la DFT, mais beaucoup plus rapidement. Elle filtre rapidement un grand nombre de candidats. Seule une petite partie prometteuse est ensuite vérifiée de nouveau par DFT.

Cette collaboration détermine la vitesse de l'exploration. Même si la génération est très rapide, elle ne sert à rien si la validation est lente. Si la validation devient un goulot d'étranglement, les candidats ne font que s'accumuler. Une génération rapide et une validation rapide doivent fonctionner ensemble. C'est pourquoi les recherches récentes relient les trois étapes dans un flux automatisé unique. Le laboratoire autonome, que nous traiterons au chapitre suivant, prend en charge la fin de ce flux.

6.1 Conception d'électrolytes solides halogénés pour batteries tout solide

Le premier exemple concerne la conception d'électrolytes solides pour batteries. Voyons pourquoi ce matériau est important et comment l'IA apporte son aide. Nous l'examinerons autour de valeurs validées.

Une batterie tout solide (All-Solid-State Battery) est une batterie qui utilise un électrolyte solide. Dans une batterie ordinaire, l'électrolyte est liquide. Un électrolyte liquide peut prendre feu. Un électrolyte solide réduit ce risque. Mais le fait qu'il soit solide ne le rend pas toujours sûr. Il peut aussi réagir avec le lithium métal, l'humidité ou les électrodes. Les électrolytes à base de sulfures et certains électrolytes à base d'halogénures peuvent produire des produits de décomposition nocifs, ou créer une résistance et des fissures à l'interface. Malgré cela, ils suscitent un grand intérêt, car ils réduisent fortement les risques de fuite et d'incendie.

Les propriétés exigées d'un électrolyte solide sont difficiles à réunir. Les ions lithium doivent traverser rapidement le solide. La facilité avec laquelle les ions passent s'appelle la conductivité ionique (Ionic Conductivity). Plus cette valeur est élevée, mieux c'est. En même temps, le matériau doit résister à une tension élevée. Il ne doit pas être fragile et doit bien adhérer sous pression. Il est difficile de satisfaire toutes ces conditions à la fois.

Les électrolytes solides à base d'halogénures (Halide Solid Electrolyte) sont considérés comme des candidats prometteurs. Les halogénures désignent des éléments comme le chlore, le brome et l'iode. Cette famille est relativement stable à haute tension. Elle offre aussi un bon équilibre entre malléabilité et conductivité. C'est pourquoi les recherches sont actives. Un matériau représentatif est un composé formé de lithium, d'yttrium et de chlore.

L'intelligence artificielle aide cette conception de matériaux de plusieurs façons. Une étude publiée en 2025 a associé l'apprentissage automatique et les calculs de théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Elle a prédit plusieurs propriétés à la fois afin de sélectionner de bons candidats à base d'halogénures. Elle a prédit ensemble la conductivité ionique, le module d'élasticité et la fenêtre de stabilité électrochimique. Cette approche, qui examine plusieurs propriétés en même temps, a renforcé l'intérêt pratique de la méthode.

Une autre étude publiée en 2026 a utilisé une méthode qui extrait des règles à partir des données. Elle a trouvé les caractéristiques chimiques essentielles qui déterminent la conductivité ionique. À partir de ces caractéristiques, elle a conçu de nouvelles compositions. L'article a rapporté qu'un matériau conçu présentait, à température ambiante, une conductivité ionique d'environ 12 millisiemens par centimètre. Cette valeur est élevée dans cette famille. Cela montre un mouvement qui part des règles extraites des données et les relie à la conception.

Il est difficile de calculer comment les ions se déplacent dans un solide. Les ions lithium se déplacent en sautant d'un site à un autre. Plus le seuil de ces sauts est bas, plus la conductivité est élevée. Pour calculer ce seuil, il faut suivre longtemps les mouvements des atomes. Ici aussi, on utilise le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP). Une étude de 2025 a rapporté que cette méthode pouvait servir aux calculs sur les conducteurs ioniques solides. On génère d'abord des candidats, puis on vérifie le déplacement des ions avec cette méthode.

Examinons ce que ce matériau signifie pour l'aérospatiale et les fusées. Les satellites et les sondes dépendent beaucoup des batteries. Quand il n'y a pas de Soleil, ils tiennent grâce à l'électricité stockée. Si la batterie est instable, toute la mission est menacée. Une batterie tout solide sûre et légère réduit ce risque. La rétroconception par IA aide à trouver plus vite ces matériaux de batterie.

6.2 Conception pour trouver des catalyseurs qui décomposent l'eau

L'exemple suivant concerne la conception de catalyseurs. Nous verrons ce qu'est un catalyseur et comment l'IA trouve de bons catalyseurs. Nous examinerons aussi des cas récents associés à des laboratoires robotisés.

Un catalyseur (Catalyst) est une substance qui accélère une réaction chimique. Lui-même change très peu. Il augmente seulement la vitesse de réaction. Un catalyseur est indispensable dans un dispositif qui produit de l'hydrogène et de l'oxygène à partir de l'eau. Ce dispositif s'appelle un électrolyseur de l'eau. Avec un bon catalyseur, on obtient plus d'hydrogène avec la même quantité d'électricité.

Les performances d'un catalyseur dépendent de l'arrangement des atomes à sa surface. La réaction se produit à la surface du catalyseur. Les substances réactives s'y fixent, s'en détachent et se transforment. Le fait qu'une substance se fixe à une surface s'appelle l'adsorption (Adsorption). Si elle se fixe trop fortement, c'est un problème. Elle ne se détache pas bien et bloque la réaction. Si elle se fixe trop faiblement, c'est aussi un problème. Elle se détache avant que la réaction ait lieu. Un bon catalyseur retient les substances avec une force adaptée.

La force d'adsorption est déterminée par l'arrangement des atomes de surface. Une faible variation de la distance entre atomes suffit à changer cette force. C'est pourquoi la manière d'organiser la surface est importante. L'intelligence artificielle ajuste la force d'adsorption en modifiant les positions des atomes à la surface. Elle cherche un arrangement qui retient correctement les intermédiaires de réaction. Cet arrangement est la clé d'un bon catalyseur.

La réaction qui produit de l'oxygène est difficile. Elle s'appelle la réaction de dégagement d'oxygène (Oxygen Evolution Reaction). Pour provoquer cette réaction, il faut appliquer une tension plus élevée que la tension théoriquement nécessaire. Cette tension supplémentaire s'appelle la surtension (Overpotential). La surtension est un concept différent de l'énergie d'activation, qui est la barrière de la vitesse de réaction. Plus la surtension est faible, meilleur est le catalyseur. Une faible surtension signifie que l'on consomme moins d'électricité. C'est pourquoi réduire la surtension est un grand objectif de la conception de catalyseurs.

Une étude publiée en 2026 a utilisé l'IA générative pour faire la rétroconception de catalyseurs. Elle portait sur des catalyseurs à haute entropie (High-Entropy Catalyst), formés par le mélange de plusieurs éléments. Elle a réuni des informations spectroscopiques, un modèle génératif et un dispositif expérimental robotisé. Le robot fabriquait des candidats, mesurait leurs performances et renvoyait les résultats au modèle. Cette boucle de rétroaction tournait rapidement.

Les chiffres rapportés par cette étude montrent son intérêt pratique. Elle a fortement réduit le temps nécessaire pour fabriquer et mesurer un échantillon. Un travail qui prenait environ 20 heures a été

réduit à 78 minutes. Le meilleur candidat trouvé a aussi abaissé la surtension de 32 millivolts. Ce cas relève de la recherche universitaire, mais il montre aussi l'automatisation robotisée. Il permet de comprendre à quel point la vitesse augmente quand le modèle génératif et l'expérience fonctionnent ensemble.

Ce mouvement transforme le travail humain. Autrefois, un chercheur passait toute une journée à fabriquer un échantillon. Aujourd'hui, un robot peut faire ce travail jour et nuit. L'humain réfléchit aux objectifs à fixer. Il juge quels résultats ont du sens. Le travail passe des mains à la pensée. La place de l'humain ne disparaît pas, elle se déplace vers le haut. Le chapitre suivant traitera en détail de ce laboratoire autonome.

Les catalyseurs à haute entropie, qui mélangent plusieurs éléments, attirent l'attention pour une raison précise. Quand on mélange plusieurs éléments, de nombreux sites différents apparaissent à la surface. La probabilité qu'un site adapté à la réaction apparaisse augmente. Mais le nombre de combinaisons est trop grand pour qu'un humain puisse tout tester. Le modèle génératif parcourt à sa place ce vaste espace. Il resserre les bonnes compositions et réduit le nombre d'expériences. Le robot fabrique ensuite rapidement ces candidats pour les vérifier.

Examinons ce que les catalyseurs signifient pour les fusées et l'exploration spatiale. Dans les longues missions spatiales, il faut produire soi-même de l'eau et de l'air. Des catalyseurs servent à obtenir de l'oxygène en décomposant l'eau. Ils servent aussi à fabriquer du carburant. Un bon catalyseur produit plus d'oxygène et de carburant avec la même quantité d'électricité. La charge que le vaisseau spatial doit emporter devient d'autant plus légère. La rétroconception par IA accélère l'arrivée de tels catalyseurs.

L'hydrogène sert aussi de carburant de fusée. L'hydrogène liquide produit une forte poussée. Si la technologie qui obtient de l'hydrogène en décomposant l'eau progresse, la production de carburant devient plus facile. Là encore, le catalyseur tient la clé de la réaction. Si l'on fabrique un bon catalyseur avec des éléments peu coûteux, le coût diminue. L'objectif est d'utiliser moins de platine précieux. L'IA générative est puissante dans cette recherche de catalyseurs non précieux.

6.3 Rétroconception d'alliages et de superalliages pour l'aérospatiale

Le dernier exemple concerne la conception d'alliages pour moteurs de fusée. Nous verrons pourquoi de nouveaux alliages sont nécessaires. Nous examinerons comment les modèles génératifs trouvent des compositions d'alliage. Nous nous appuyerons sur des recherches récentes vérifiées.

Un moteur de fusée doit résister à une chaleur extrême. L'intérieur de la chambre de combustion atteint plusieurs milliers de degrés. La tuyère est érodée par des gaz rapides. Pendant longtemps, les superalliages à base de nickel (Superalloy) ont tenu cette place. Un superalliage est un alliage qui ne perd pas sa résistance même à haute température. Mais les superalliages de nickel ont aussi une limite de température. Dans un environnement plus chaud, ils fondent ou se ramollissent.

Les alliages à haute entropie (High-Entropy Alloy) sont apparus comme une solution possible. Un alliage ordinaire mélange de petites quantités d'éléments à un élément principal. Un alliage à haute entropie mélange plusieurs éléments en quantités proches. Avec ce mélange, la structure devient étonnamment stable. Parmi eux, ceux qui sont fabriqués avec des éléments à haut point de fusion s'appellent alliages à haute entropie réfractaires (Refractory HEA). Ces alliages sont considérés comme des candidats capables de remplacer les superalliages de nickel dans des environnements dépassant 1100 degrés.

La stabilité des alliages à haute entropie tient au désordre. Quand plusieurs éléments sont mélangés uniformément, le nombre d'arrangements possibles augmente. Ces nombreux arrangements

maintiennent la structure. Cette propriété s'appelle le désordre configurationnel élevé. Le désordre protège donc l'ordre. Grâce à cette propriété, ces alliages résistent bien aux environnements extrêmes. Les tuyères et les chambres de combustion de fusée sont des lieux typiques qui exigent cette résistance.

Le problème est que le nombre de combinaisons est de nouveau aussi vaste que les étoiles dans le ciel. Même si l'on ne mélange que cinq éléments, les proportions possibles sont innombrables. Il est difficile de les fabriquer et de les tester une par une. C'est là qu'intervient le modèle génératif. Quand on fixe les propriétés visées, il cherche en sens inverse la composition correspondante. On lui donne comme conditions des valeurs de résistance et de ténacité. Le modèle propose alors des proportions d'éléments capables de produire ces valeurs.

Plusieurs études publiées en 2026 montrent cette direction. Une étude a organisé plusieurs méthodes génératives qui produisent des compositions d'alliage. Elle a examiné ensemble les autoencodeurs variationnels, les réseaux antagonistes génératifs et les modèles de diffusion. Une autre étude a rassemblé la littérature et les données pour resserrer la liste de candidats de superalliages à haute entropie pour haute température. Elle a choisi des compositions correspondant aux propriétés visées et réduit le nombre de candidats à tester. Dans les deux cas, il ne s'agissait pas encore de fabriquer des pièces réelles, mais de resserrer la liste des candidats.

Les propriétés d'un alliage ne sont pas déterminées par sa seule composition. Une même composition peut donner des résultats différents selon la méthode de fabrication. La manière de chauffer et de refroidir modifie la microstructure. La microstructure désigne la taille et l'arrangement des grains cristallins. La conception d'alliages doit donc considérer ensemble la composition et le procédé. Les modèles génératifs avancent eux aussi vers un traitement conjoint de ces deux aspects. Les chapitres suivants traiteront davantage de ces procédés.

Il faut toutefois rester prudent. Les alliages à haute entropie réfractaires ont encore des obstacles à franchir. Ils restent souvent cassants à température ambiante. À haute température, ils peuvent aussi réagir avec l'oxygène et voir leur surface se dégrader. Il existe donc une distance entre les promesses du laboratoire et les pièces réelles. Même si les modèles génératifs resserrent la liste des candidats, ces deux obstacles doivent être franchis par l'expérience. Maîtriser la fragilité à température ambiante et l'oxydation à haute température est la prochaine tâche.

6.4 Comparaison des modèles génératifs et importance de la validation

Comment comparer plusieurs modèles génératifs ? Nous verrons avec quels indicateurs les mesurer. Nous examinerons pourquoi la validation est plus importante que le résultat. Nous expliquerons aussi pourquoi il faut se méfier des chiffres non vérifiés.

Pour comparer des modèles génératifs, on regarde plusieurs critères ensemble. Le premier est la stabilité, qui vérifie si le cristal généré peut se maintenir de lui-même. On examine aussi la nouveauté. On vérifie si le matériau n'existait pas dans les bases de données. On mesure aussi la validité des distances atomiques. On confirme que les atomes ne sont pas trop proches. On examine aussi la conservation de la symétrie. On vérifie si la symétrie cristalline est respectée. Le dernier critère est la vitesse, qui mesure le temps nécessaire pour produire un candidat.

Un modèle n'est pas bon parce qu'un seul indicateur est bon. Même s'il est rapide, il sert peu si sa stabilité est faible. Même s'il respecte bien la symétrie, son intérêt est limité s'il n'apporte rien de nouveau. On regarde donc l'équilibre entre plusieurs indicateurs. Les indicateurs importants changent selon le problème. Pour un matériau de batterie, la stabilité et la conductivité passent en premier. Si l'urgence est d'explorer vite, la vitesse passe en premier.

Pour comparer équitablement, il faut utiliser le même sujet d'examen. Dans le domaine de la génération de cristaux, il existe des jeux de test largement utilisés. MP-20 en est un exemple représentatif. C'est un ensemble d'environ vingt mille cristaux tirés du Materials Project. Il existe aussi un jeu qui rassemble seulement des cristaux de pérovskite. Tous les modèles sont testés sur le même jeu. C'est ainsi que l'on peut comparer quel modèle est meilleur. Si les sujets d'examen diffèrent, les scores ne peuvent pas être placés côte à côte.

Il faut ici faire attention. Les chiffres qui alignent les performances de plusieurs modèles ne sont souvent pas vérifiés dans les textes originaux. Ce livre n'utilise donc pas les chiffres de tableaux non vérifiés. Les chiffres non confirmés peuvent égarer le lecteur.

À la place, prenons un résultat vérifié pour nous faire une idée. Il s'agit d'une étude de Microsoft sur un modèle génératif publiée en 2025 dans Nature. Le nom de ce modèle est MatterGen. Ce modèle produit des matériaux inorganiques sur l'ensemble du tableau périodique. Il peut aussi être ajusté finement selon les propriétés visées. L'article rapporte que les produits générés par ce modèle sont deux fois plus souvent stables et nouveaux que ceux des anciens modèles. Il rapporte aussi qu'ils sont dix fois plus proches d'un minimum d'énergie.

Ce modèle peut réapprendre selon plusieurs conditions. S'il apprend à partir de valeurs élastiques, il produit des matériaux durs. S'il apprend à partir de valeurs magnétiques, il produit des matériaux magnétiques. Il peut aussi apprendre à n'utiliser que les éléments souhaités. C'est une méthode qui adapte un modèle de base à plusieurs objectifs. Cette méthode s'appelle l'ajustement fin (Fine-tuning). On ne reconstruit pas la base ; on change seulement l'objectif que l'on y installe.

Cette étude est allée jusqu'à la validation expérimentale. Les chercheurs ont fixé le module de compressibilité cible à 200 gigapascals et ont créé une nouvelle structure de matériau. Ce matériau a effectivement été synthétisé. Toutefois, le produit synthétisé était une solution solide dans laquelle les atomes étaient mélangés de façon désordonnée. L'équipe a mesuré le module de Young par nano-indentation, puis a estimé le module de compressibilité en utilisant la valeur obtenue par calcul. L'estimation ainsi obtenue a atteint au maximum 169 gigapascals sur quatre essais, avec une moyenne de 158 ± 11 gigapascals. Il faut distinguer les valeurs mesurées des valeurs converties, ainsi que la structure calculée de la structure synthétisée. Cela reste pourtant une démonstration rare, qui va de la génération à la synthèse.

Il faut être encore plus prudent avec les prépublications. Plusieurs modèles présentés dans ce chapitre en sont au stade de la prépublication. Une prépublication précède l'évaluation par les pairs. Ses résultats peuvent changer par la suite. C'est pourquoi ce livre présente les prépublications comme des travaux initiaux. Même des chiffres remarquables ne sont pas traités comme établis avant validation. Cette attitude protège le lecteur contre de fausses certitudes.

Voyons pourquoi la validation compte plus que le résultat. Un modèle génératif peut produire une infinité de candidats. Mais tout ce qui est produit n'est pas réel pour autant. Il faut filtrer par le calcul. Il faut confirmer par l'expérience. La conception inverse de matériaux n'a de sens que lorsque la génération, le calcul et l'expérience fonctionnent ensemble. Plus le domaine touche à la sécurité, comme les matériaux pour l'aérospatiale, plus ce principe doit être strict. Un candidat ne peut être jugé fiable qu'après validation par calcul et synthèse expérimentale.

Synthèse

Ce chapitre expliquait comment inverser le sens de la recherche de matériaux. L'ancienne méthode choisissait d'abord un matériau, puis mesurait ensuite ses propriétés. La nouvelle méthode fixe d'abord les propriétés, puis dessine ensuite le matériau. Cette nouvelle méthode s'appelle la conception inverse de matériaux. Un simple changement de direction modifie fortement la puissance de recherche. Il ouvre la voie à la création de substances qui n'existaient pas.

Le personnage central de la conception inverse est l'intelligence artificielle générative. Le modèle de diffusion façonne un cristal en retirant le bruit d'un ensemble d'atomes flou. Son principe ressemble à celui de l'IA qui génère des images. La génération de cristaux est plus difficile. Elle doit ajuster à la fois le réseau, la position des atomes et les types d'atomes.

Les cristaux obéissent à une règle stricte appelée symétrie. Un cristal tridimensionnel appartient à l'un des 230 groupes d'espace. CDVAE, un modèle initial, ne pouvait pas fixer directement la symétrie, si bien que les structures s'effondraient parfois. Les modèles de diffusion conditionnels conscients de la symétrie ont réduit ce problème en créant une petite graine, puis en la déployant par symétrie. Il est important de ne pas mélanger des travaux aux noms proches et de les examiner séparément.

Les efforts pour accroître la vitesse se sont poursuivis. Le flow matching apprend un raccourci au lieu d'effacer le bruit petit à petit. FlowMM et CrystalFlow en sont des exemples représentatifs. Ils génèrent rapidement des cristaux en suivant des géodésiques sur un espace courbe. Cette vitesse est très utile dans la recherche de matériaux, où il faut produire beaucoup de candidats.

Les techniques qui modifient seulement une partie de la structure ont aussi progressé. L'inpainting comble les lacunes et les défauts. La diffusion à atomes mirage traite librement le nombre d'atomes. Elle place des sites virtuels qui peuvent exister ou non, puis détermine elle-même leur nombre. Elle représente mieux les structures de défauts des matériaux réels.

L'apprentissage par renforcement guide le modèle génératif vers de bons candidats. Il intègre dans la récompense la stabilité, la nouveauté et la possibilité de synthèse. La régularisation KL et le rejou d'expérience maintiennent la recherche stable. Les résultats sont mesurés par le ratio SUN et l'énergie au-dessus de l'enveloppe de stabilité.

Les cas pratiques montrent que cette technologie ne se limite pas au papier. Dans la conception d'électrolytes solides halogénés, l'analyse des données et la conception se sont enchaînées. Dans la conception de catalyseurs à haute entropie, les expériences robotisées et le modèle génératif se sont articulés, réduisant fortement le temps nécessaire. Le modèle génératif de Microsoft a synthétisé réellement le matériau conçu et en a vérifié les propriétés.

Une idée traverse tout ce chapitre. L'intelligence artificielle est un guide qui parcourt à notre place le vaste espace des matériaux. Elle explore en quelques jours des chemins qu'un être humain ne pourrait pas parcourir en une vie. Elle sélectionne des candidats prometteurs et les présente. Mais ce sont le calcul et l'expérience qui décident si ces candidats sont fiables. Le guide resserre le chemin, et l'être humain ouvre la dernière porte.

Pour finir, revenons au principe de validation. Un modèle génératif produit une infinité de candidats. Mais tout ce qui est produit n'est pas réel pour autant. Les chiffres non vérifiés ne doivent pas être utilisés. Il faut filtrer par le calcul et confirmer par l'expérience. La conception inverse de matériaux n'a de sens que lorsque la génération, le calcul et l'expérience fonctionnent ensemble. Dans les domaines où la sécurité est en jeu, comme les fusées et l'exploration spatiale, ce principe doit être encore plus strict. La structure dessinée par l'IA n'est pas la réponse finale, mais un candidat expérimental bien choisi.

Sources associées

- Xie, T., Fu, X., Ganea, O. E., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2022). Crystal diffusion variational autoencoder for periodic material generation. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2110.06197>
- Jiao, R., Huang, W., Lin, P., Han, J., Chen, P., Lu, Y., & Liu, Y. (2023). Crystal structure prediction by joint equivariant diffusion. Advances in Neural Information Processing Systems. <https://openreview.net/forum?id=DNdN26m2Jk>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. Nature, 624, 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- Zeni, C., Pinsler, R., Zugner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., et al. (2025). A generative model for inorganic materials design. Nature, 639, 624-632. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>
- Levy, D., Panigrahi, S. S., Kaba, S. O., Zhu, Q., Lee, K. L. K., Galkin, M., Miret, S., & Ravanbakhsh, S. (2025). SymmCD: Symmetry-preserving crystal generation with diffusion models. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2502.03638>
- Ishii, T., Hisama, K., & Shinohara, K. (2026). Symmetry-aware conditional generation of crystal structures using diffusion models. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2601.08115>
- Okhotin, A., Nakhodnov, M., Kazeev, N., Lazarev, M., Ustyuzhanin, A. E., & Vetrov, D. (2025). MiAD: Mirage atom diffusion for de novo crystal generation. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.14426>
- Chen, J., Guo, J., Fako, E., & Schwaller, P. (2025). Accelerating inverse materials design using generative diffusion models with reinforcement learning. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.03112>
- Miller, B. K., Chen, R. T. Q., Sriram, A., & Wood, B. M. (2024). FlowMM: Generating materials with Riemannian flow matching. Proceedings of Machine Learning Research, 235. <https://arxiv.org/abs/2406.04713>
- Luo, X., Wang, Z., Wang, Q., Shao, X., Lv, J., Wang, L., Wang, Y., & Ma, Y. (2025). CrystalFlow: A flow-based generative model for crystalline materials. Nature Communications, 16, 9267. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-64364-4>
- Lo, A., Mucko, L., Cheng, A. H., Cai, A., Price, A. J. A., & Matusik, W. (2026). Fast organic crystal structure prediction with unit cell flow matching. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2606.03199>
- Lipman, Y., Chen, R. T. Q., Ben-Hamu, H., Nicklas, M., & Le, M. (2022). Flow matching for generative modeling. International Conference on Learning Representations. <https://openreview.net/forum?id=PqvMRDCJT9t>
- Hoogeboom, E., Satorras, V. G., Vignac, C., & Welling, M. (2022). Equivariant diffusion for molecule generation in 3D. International Conference on Machine Learning, 8867-8887. <https://arxiv.org/abs/2203.17003>
- Schulman, J., Wolski, F., Dhariwal, P., Radford, A., & Klimov, O. (2017). Proximal policy optimization algorithms. arXiv. <https://arxiv.org/abs/1707.06347>
- Metni, H., Ruple, L., Walters, L. N., Torresi, L., Teufel, J., Schopmans, H., Ceder, G., & Friederich, P. (2026). Generative models for crystalline materials. Advanced Materials, 38(18), e23620. <https://doi.org/10.1002/adma.202523620>
- Mal, S., Ahmed, N., Jami, J., Mishra, S., & Sen, P. (2025). DiffCrysGen: A generative diffusion model for accelerated design of inorganic crystalline materials. arXiv:2510.12329. <https://arxiv.org/abs/2510.12329>
- Okuda, I., Takahara, I., & Mizoguchi, T. (2026). Inverse materials design via joint generation of crystal structures and local electronic descriptors. arXiv:2605.01286. <https://arxiv.org/abs/2605.01286>
- Yang, K., & Schwalbe-Koda, D. (2025). A generative diffusion model for amorphous materials. npj Computational Materials, 12(1), 29. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01901-1>
- Han, X.-Q., Guo, P.-J., Gao, Z.-F., Sun, H., & Lu, Z.-Y. (2025). InvDesFlow-AL: Active learning-based workflow for inverse design of functional materials. npj Computational Materials, 11(1), 364. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01830-z>
- Cheng, M., Luo, W., Tang, H., Yu, B., Cheng, Y., Xie, W., Li, J., Kulik, H. J., & Li, M. (2026). Enhancing materials discovery with valence-constrained design in generative modeling. Nature Computational Science. <https://doi.org/10.1038/s43588-026-01037-2>
- Choong, L. Y. A., Chen, Z., & Ng, M.-F. (2025). Discovery of effective halide solid electrolytes for solid-state rechargeable batteries via machine learning and DFT calculations. ACS Applied Energy Materials, 9(1), 507-520. <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c03277>
- Li, D., Lin, Z., Luo, F., Xiao, C., Dai, Z., Ye, Z., Wang, Q., Guo, Y.-G., & Yang, C. (2026). Data-driven chemical feature extraction and material design for halide solid-state electrolytes. eScience, 100590. <https://doi.org/10.1016/j.esci.2026.100590>
- Zhou, D., Yang, R., Jia, Z., Cai, Y., Zhao, L., Guo, L., Ye, G., Wang, S., Chen, L., Liu, D., Smith, P. E. S., Huang, Y., Zhu, Q., & Jiang, J. (2026). A practical inverse design approach for high-entropy catalysts using generative AI. Nature Synthesis, 5(5), 730-739. <https://doi.org/10.1038/s44160-025-00983-5>

- Li, C., Xian, Y., Zhou, Y., Ding, X., Sun, J., & Xue, D. (2026). Generative design for alloys: Harnessing generative models for faster discovery. *Advanced Materials*, 38(29), e20478. <https://doi.org/10.1002/adma.202520478>
- Rousseau, F., Belmonte, T., Sur, F., & Nominé, A. (2026). Inverse design of high-entropy superalloys using machine learning and generative artificial intelligence. *Materials & Design*, 266, 116097. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2026.116097>
- Du, H., Hui, J., Zhang, L., & Wang, H. (2025). Universal machine learning interatomic potentials are ready for solid ion conductors. arXiv:2502.09970. <https://arxiv.org/abs/2502.09970>

Chapitre 3. Laboratoire autonome et systèmes scientifiques multi-agents

Introduction

Imaginons que l'on fait du pain à la maison. On fixe la quantité de farine et d'eau. On mélange la pâte et on règle la température du four. On coupe le pain cuit et on le goûte. S'il est trop dur, on ajoute de l'eau et on baisse la température. La fois suivante, le pain est un peu meilleur. On répète ainsi plusieurs fois le choix des ingrédients, la fabrication, la dégustation et la correction.

La recherche de nouveaux matériaux ressemble à cela. Le chercheur fixe les proportions des composants. Il mélange des poudres et les cuit à haute température. Il mesure la structure et les propriétés de la matière obtenue. Si le résultat est mauvais, il change les conditions. Il faut répéter ce processus des centaines de fois pour obtenir un bon matériau.

Le problème est le temps. Si une personne fait ce travail à la main, elle ne peut le faire que quelques fois par jour. La nuit, les expériences s'arrêtent. Il faut des années pour explorer un vaste domaine en modifiant peu à peu les composants. Les matériaux destinés aux fusées doivent supporter des conditions difficiles. Le nombre de matériaux candidats est donc très élevé, et il est difficile de tous les tester seulement à la main.

Un laboratoire autonome (Self-Driving Laboratory) est un laboratoire qui confie cette répétition à des machines. L'intelligence artificielle (AI) choisit les conditions à tester ensuite. Le robot pèse, mélange et cuit les poudres. Les instruments d'analyse mesurent les résultats. Ces résultats reviennent à l'intelligence artificielle. Les expériences se poursuivent d'elles-mêmes sans instruction humaine à chaque étape. Comme un robot aspirateur qui nettoie seul, le laboratoire fonctionne de lui-même toute la nuit.

Cette structure, dans laquelle le résultat revient vers le choix suivant, s'appelle une boucle fermée (Closed-loop). Une boucle fermée signifie un circuit refermé comme un anneau. L'expérience, la mesure, l'apprentissage et l'expérience suivante tournent sans rupture. Ce chapitre explique comment fonctionne ce laboratoire autonome. Il examine comment l'intelligence artificielle choisit l'expérience suivante. Il montre comment une machine lit les phrases d'un article scientifique. Il explique comment les robots et l'intelligence artificielle dialoguent en sécurité. Enfin, il présente des exemples réels de laboratoires autonomes dans le monde.

Il faut aussi comprendre pourquoi les laboratoires autonomes émergent maintenant. Récemment, l'intelligence artificielle prédit rapidement les propriétés des matériaux. Le calcul produit chaque jour des milliers de bons candidats. Mais la vitesse de fabrication et de vérification réelles reste lente. La prédiction est devenue rapide, mais la vérification ne suit pas. Le laboratoire autonome comble cet écart. Les robots fabriquent et vérifient rapidement les candidats proposés par le calcul. C'est un pont qui aligne la vitesse de la prédiction et celle de la vérification.

Beaucoup de systèmes présentés dans ce chapitre en sont encore aux premières recherches. Certains sont des prépublications tout juste présentées dans des conférences. Une prépublication est une recherche initiale qui n'a pas encore été évaluée par les pairs. Ce chapitre examine donc les principes et les limites, plutôt que de mettre en avant des chiffres de performance. Le but d'un laboratoire autonome n'est pas de faire des expériences rapides, mais de faire des expériences fiables.

3.1 De quels éléments se compose un laboratoire autonome

Ce que traite cette section

Cette section examine les éléments qui composent un laboratoire autonome dans son ensemble. Il y a quatre grandes parties. La tête, qui décide de l'expérience suivante ; la main, qui fabrique réellement ; les yeux, qui mesurent les résultats ; et la mémoire, qui met à jour ce qui a été appris. Ces quatre parties sont reliées comme un anneau et transmettent les résultats d'une expérience à l'expérience suivante.

Commençons par reprendre le sens du mot boucle fermée. Nous examinerons ensuite le rôle de chaque partie. Enfin, nous verrons pourquoi cette structure est nécessaire à la recherche sur les matériaux pour fusées.

Un laboratoire autonome fonctionne grâce à quatre parties emboîtées. Dans la couche de planification, l'intelligence artificielle choisit les composants et les conditions de procédé à tester ensuite. Ici, les conditions de procédé désignent la température de cuisson, le temps de maintien, la vitesse de chauffage et le gaz d'atmosphère. Dans la couche d'exécution, le robot pèse les poudres, les mélange et les presse pour en faire des granules. Il les place ensuite dans un four électrique pour les cuire. Dans la couche de mesure, des outils comme un appareil de diffraction des rayons X mesurent la structure du matériau obtenu. Dans la couche d'apprentissage, les résultats de mesure entrent dans le modèle d'intelligence artificielle et mettent à jour les connaissances.

Ce qui relie ces quatre parties, c'est le flux d'information. La couche de planification envoie une fiche de travail à la couche d'exécution. Cette fiche indique quoi faire, en quelle quantité et comment. La couche d'exécution envoie l'échantillon fabriqué à la couche de mesure. La couche de mesure envoie à la couche d'apprentissage des valeurs comme la pureté de phase et les constantes de réseau. La pureté de phase signifie dans quelle mesure le cristal voulu a été obtenu sous forme pure. La couche d'apprentissage affine le plan suivant avec ces valeurs. Quand l'information a fait un tour complet, une expérience est terminée.

La force de la boucle fermée réside dans la répétition rapide. Même si une expérience échoue, les données restent. Les conditions qui ont échoué indiquent aussi ce qui ne fonctionne pas. L'intelligence artificielle apprend à la fois des réussites et des échecs. Les conditions suivantes s'améliorent donc peu à peu. L'humain examine seulement la grande direction tous les quelques jours, et la machine prend en charge les répétitions détaillées.

Voyons pourquoi cette structure est nécessaire aux matériaux pour fusées. Les tuyères et les chambres de combustion des fusées supportent des conditions extrêmes. La température monte jusqu'à plusieurs milliers de degrés. La pression et les vibrations sont fortes. Les matériaux destinés à ces lieux doivent satisfaire à des conditions très strictes. Une petite modification de composition peut changer fortement les propriétés. Il existe donc des dizaines de milliers de candidats à tester. Il est impossible d'explorer tout cet espace à la main. Un laboratoire autonome peut réduire rapidement ce vaste espace.

En 2026, les recherches visant à porter les laboratoires autonomes à un niveau supérieur se sont poursuivies. La Royal Society of Chemistry du Royaume-Uni a formulé le concept de laboratoire autonome 2.0. La première génération de laboratoires autonomes ne résolvait qu'un seul problème défini. La génération suivante cherche à traiter avec souplesse plusieurs types d'équipements et de problèmes. Un article de synthèse de 2025 a aussi examiné largement les laboratoires autonomes. Il analyse à la fois le degré de maturité de la technologie et les obstacles qui restent. Un média de l'American Chemical Society rapporte que les laboratoires autonomes changent la façon de travailler des chimistes.

Cette structure a aussi des limites nettes. L'équipement coûte cher. Relier les robots et les instruments d'analyse est difficile. Même peser précisément des poudres n'est pas simple. Détecter automatiquement une expérience ratée est aussi difficile. Les laboratoires autonomes actuels conviennent donc surtout à certains groupes de matériaux. Il n'existe pas encore de laboratoire universel capable de traiter tous les matériaux. Les autres sections de ce chapitre examinent comment ces obstacles sont franchis un par un.

3.1.1 L'apprentissage actif bayésien qui choisit l'expérience suivante

Cette sous-section traite de la partie qui correspond à la tête du laboratoire autonome. Le point central est la manière dont l'intelligence artificielle choisit l'expérience suivante. La méthode utilisée ici est l'apprentissage actif bayésien. Nous expliquons en termes simples ce qu'est cette méthode et pourquoi elle réduit le nombre d'expériences.

Une hypothèse est une idée sur la raison pour laquelle la prochaine expérience sera bonne. Un bon laboratoire autonome formule de bonnes hypothèses. Tester n'importe quelles conditions au hasard fait perdre du temps. Il faut choisir et tester les zones prometteuses. L'apprentissage actif bayésien (Bayesian Active Learning) est une méthode qui aide ce choix. L'apprentissage actif désigne une méthode dans laquelle la machine choisit elle-même les données à apprendre.

Cette méthode construit d'abord un modèle de substitution (Surrogate Model). Un modèle de substitution est un petit modèle de calcul qui imite une expérience coûteuse. Il est construit à partir des résultats expérimentaux déjà obtenus. Le modèle de substitution prédit les propriétés de conditions qui n'ont pas encore été testées. Deux valeurs sortent ensemble de cette prédiction. L'une est la performance attendue. L'autre indique le degré d'incertitude de cette prédiction.

L'essentiel est de regarder ces deux valeurs ensemble. Les zones où la performance attendue est élevée valent la peine d'être testées. Les zones où l'incertitude est grande valent aussi la peine d'être testées. Un matériau étonnamment bon peut se cacher dans un endroit mal connu. Si l'on ne poursuit que la performance, on tourne autour des zones déjà connues. Si l'on ne poursuit que l'incertitude, on erre dans des zones inutiles. Une bonne méthode équilibre ces deux intentions. C'est ce que l'on appelle l'équilibre entre exploration et exploitation. Ici, l'exploration consiste à examiner ce que l'on ne connaît pas, et l'exploitation consiste à approfondir ce que l'on connaît.

La fonction d'acquisition (Acquisition Function) mesure cet équilibre par un nombre. Elle attribue un score à chaque condition candidate. Si l'on classe les conditions par score décroissant, la première devient l'expérience suivante. Une fonction d'acquisition représentative est l'amélioration attendue (Expected Improvement). L'amélioration attendue mesure dans quelle mesure la prochaine expérience pourrait dépasser le meilleur résultat obtenu jusqu'ici. Une autre méthode est la borne supérieure de confiance (Upper Confidence Bound). Elle permet de regarder en même temps les hautes performances et les zones inconnues. Le laboratoire autonome fixe ainsi les composants, la température et le temps suivants à partir de ces scores.

Voyons pourquoi cette méthode est importante pour les matériaux de fusées. Les céramiques à très haute température et les alliages spéciaux coûtent cher à chaque expérience. Ils utilisent des matières premières coûteuses et demandent une longue cuisson. Réduire le nombre d'expériences revient donc à économiser du temps et de l'argent. L'apprentissage actif bayésien choisit seulement les conditions prometteuses à tester. Le nombre d'expériences diminue beaucoup par rapport à un test exhaustif sans stratégie. Certains laboratoires autonomes rapportent avoir réduit de plusieurs dizaines de fois le nombre d'expériences nécessaires.

Des cas réels montrent cet effet. En 2026, une équipe de recherche a créé un laboratoire qui fait croître de façon autonome des films minces. Un film mince se fabrique en empilant des atomes couche par

couche. Ce laboratoire lisait les motifs de diffraction électronique avec une caméra en temps réel. Les motifs de diffraction sont des signaux qui indiquent si les atomes s'empilent bien. L'intelligence artificielle observait ces motifs et choisissait les conditions suivantes. Le nombre d'expériences nécessaires a ainsi fortement diminué. L'équipe a indiqué qu'il avait été réduit de plus de trente fois par rapport à un balayage condition par condition. Les bonnes conditions ont donc été trouvées beaucoup plus vite. Cette recherche reste initiale, mais elle montre bien la direction.

En 2026, les recherches qui adaptent cette méthode aux laboratoires autonomes ont été actives. Une prépublication a synthétisé l'optimisation bayésienne pour les laboratoires autonomes de matériaux. Elle explique le chemin qui va de l'algorithme au déroulement réel des expériences. Une autre prépublication a proposé une méthode qui réduit d'elle-même l'espace de recherche. Elle a réduit d'environ la moitié l'espace des candidats par apprentissage actif tout en conservant la plupart des bonnes solutions. Cette approche permet de rencontrer plus vite de bons matériaux. Un guide pratique de l'optimisation bayésienne pour les sciences expérimentales est aussi paru en 2026.

Cette méthode a aussi des limites. Au début, le modèle de substitution dispose de peu de données, et ses prédictions sont approximatives. Les premières expériences peuvent prendre une mauvaise direction. Si l'espace de composition est très vaste, le volume de calcul augmente. Si les mesures comportent beaucoup de bruit, les prédictions deviennent instables. L'humain ne croit donc pas aveuglément les prédictions du modèle de substitution. Il s'y réfère, mais les vérifie toujours par des mesures réelles. Dans un laboratoire autonome aussi, la supervision humaine demeure.

3.2 Extraire les méthodes de synthèse des articles et les transformer en plans sûrs

Ce que traite cette section

Cette section traite deux points. Le premier consiste à faire lire par la machine les méthodes de synthèse présentes dans les articles. Le second consiste à transformer ces méthodes en plans que le robot peut exécuter en sécurité.

Les humains lisent un article et se représentent mentalement l'ordre des expériences. Les machines ne peuvent pas faire cela ainsi. Il faut donc transformer les phrases en une forme que la machine peut traiter. Cette section examine ce processus de traduction et la planification sûre.

Dans les articles, les méthodes de synthèse sont écrites en phrases. Elles indiquent quelles poudres sont mélangées et en quelles quantités. Elles indiquent à quelle température et pendant combien d'heures la cuisson est effectuée. Elles indiquent dans quel gaz le traitement a lieu. Les articles accumulés pendant des décennies contiennent des millions de ces méthodes. Ce savoir est une base importante pour la recherche de nouveaux matériaux. Mais il est le plus souvent dispersé dans le langage humain.

Le problème est que ces phrases varient d'une personne à l'autre. Certains articles écrivent que l'échantillon a été cuit toute la nuit. D'autres écrivent seulement qu'il a été traité à haute température. Ils ne précisent pas exactement combien d'heures signifie toute la nuit, ni combien de degrés signifie haute température. Les humains comblent ces lacunes par l'expérience. Les machines ne le peuvent pas. Il faut donc transformer ces phrases dispersées en nombres précis.

Ce travail a une grande valeur pour la recherche sur les matériaux de fusées. Les méthodes de synthèse des céramiques à très haute température et des alliages spéciaux sont dispersées dans d'anciens articles. Les lire et les organiser tous à la main prendrait longtemps. Si une machine extrait et organise automatiquement les phrases, elle fait gagner beaucoup de temps. Le laboratoire autonome transforme

aussitôt les méthodes ainsi réunies en instructions pour le robot et réduit la distance entre l'article et l'expérience.

Quand ce savoir reste dispersé, des recherches répétées apparaissent. Un autre chercheur teste de nouveau des conditions qui ont déjà échoué. Il ignore une méthode déjà réussie et recommence depuis le début. Si l'on rassemble les méthodes des articles en un seul endroit, ce gaspillage diminue. Il est difficile pour une personne de lire des millions d'articles. C'est pourquoi l'extraction et l'organisation des phrases par la machine ont de la valeur. Une méthode bien organisée devient un bon point de départ pour un laboratoire autonome.

Il y a ici deux étapes. La première consiste à extraire la méthode des phrases. Ce travail est confié à un grand modèle de langage (Large Language Model). Un grand modèle de langage est une intelligence artificielle qui apprend et traite les textes humains. La seconde consiste à transformer la méthode extraite en un plan sûr. Ce travail est confié à un langage de planification. Les deux sous-sections suivantes examinent chaque étape en détail.

3.2.1 Le modèle de langage qui établit un plan de synthèse à partir d'articles (MSP-LLM)

Cette sous-section traite de la manière d'extraire les méthodes de synthèse à partir des articles scientifiques. Elle examine l'étude MSP-LLM comme exemple représentatif. Elle regarde quel problème cette étude cherche à résoudre et par quelles étapes elle fonctionne.

MSP-LLM est une étude sur un grand modèle de langage qui établit des plans de synthèse de matériaux. Son nom vient du titre « cadre intégré de grand modèle de langage pour un plan complet de synthèse de matériaux ». Il s'agit d'une étude préliminaire publiée en 2026. Les chercheurs sont Roh Hee-woong, Na Kyung-soo, Lee Nam-kyung et Park Chan-young. Cette étude est un préarticle présenté dans une conférence. Il faut donc la voir comme une tentative avancée, non comme une norme de terrain.

Le problème que cette étude résout est la planification de la synthèse. La planification de la synthèse consiste à établir toute la suite d'étapes permettant de fabriquer un matériau cible. Ce travail se divise en deux problèmes plus petits. Le premier est la prédiction des précurseurs. Un précurseur est la matière première que l'on introduit au départ pour fabriquer le matériau cible. Le second est la prédiction des opérations de synthèse. Les opérations de synthèse sont la suite des gestes consistant à mélanger, chauffer et refroidir. Il faut résoudre ces deux problèmes ensemble pour obtenir un plan complet.

MSP-LLM relie ces deux problèmes dans un seul flux. Il détermine d'abord à quel type appartient le matériau cible. Ce type sert de critère intermédiaire de décision. Il choisit ensuite les précurseurs adaptés à ce type. Enfin, il construit la suite des opérations adaptées à ces précurseurs. Il crée ainsi une chaîne qui va du type aux matières premières, puis des matières premières à l'ordre des opérations. Reliée en chaîne, la planification devient chimiquement cohérente du début à la fin.

On peut comprendre ce flux avec un exemple plus simple. Décider quel plat préparer correspond au type de matériau cible. C'est comme décider de préparer un kimchi jjigae. Déterminer ensuite quoi acheter correspond à la prédiction des précurseurs. C'est comme choisir du kimchi, du porc et du tofu. Déterminer enfin dans quel ordre cuisiner correspond à la prédiction des opérations. C'est comme fixer l'ordre consistant à faire revenir, verser de l'eau, puis faire bouillir. MSP-LLM relie ces trois étapes pour achever le plan.

Voyons pourquoi cette planification automatique est précieuse pour les matériaux de fusée. Pour créer un nouvel alliage ou une nouvelle céramique, le choix des matières premières est déjà difficile. Même avec le même objectif, le résultat change si l'on modifie les matières premières. Le résultat change aussi si l'on modifie l'ordre de cuisson. Il faut beaucoup de temps à une personne pour examiner toutes ces

combinaisons. Un planificateur automatique produit rapidement un bon point de départ à partir des connaissances contenues dans les articles. Le laboratoire autonome peut commencer les expériences à partir de ce point de départ.

Cette méthode a aussi des limites claires. Un grand modèle de langage invente parfois des faits qui n'existent pas. On appelle cela une hallucination. Si l'on expérimente directement avec des matières premières ou des conditions inventées, des ressources sont gaspillées. Il peut aussi proposer des combinaisons dangereuses. Le plan extrait doit donc toujours être vérifié par une personne ou par un autre outil de validation. Il faut d'abord examiner s'il respecte les règles chimiques et s'il est sûr. La planification automatique est un outil qui aide l'être humain, non un outil qui l'écarte.

3.2.2 Empêcher les accidents de robot avec un langage de planification (PDDL)

Cette sous-section traite de la conversion des méthodes de synthèse extraites en plans robotiques sûrs. L'outil utilisé ici est le langage de planification PDDL. Elle explique en termes simples comment ce langage empêche les accidents de robot.

Un plan expérimental n'est pas une simple liste d'étapes. Chaque action exige des conditions préalables. Il faut que le four électrique soit vide pour y placer un échantillon. Il faut que le four électrique ait refroidi pour en retirer l'échantillon. Il faut que le pesage des poudres soit terminé pour procéder au mélange. Si ces conditions d'ordre ne sont pas respectées, un accident se produit. Il est dangereux qu'un robot ouvre sans précaution la porte d'un four électrique chaud.

PDDL (Planning Domain Definition Language) est un langage qui sert à décrire ce type de plan. En français, cela signifie langage de définition de domaine de planification. Ce langage décrit deux éléments pour chaque action. Le premier est la condition préalable. Il indique ce qui doit être vrai avant d'exécuter cette action. Le second est l'effet d'exécution. Il indique ce qui change lorsque cette action est exécutée. Par exemple, les conditions préalables de l'action de cuisson sont que le four électrique soit en attente et que sa température soit basse. Et l'effet d'exécution, une fois cette action terminée, est que l'échantillon a subi un traitement thermique.

Lorsque ces conditions sont écrites, la machine trouve elle-même un ordre sûr. Une action dont les conditions ne sont pas réunies n'est pas exécutée. Une commande d'approche vers un four électrique chaud est bloquée. Un échantillon dont le pesage n'est pas terminé ne passe pas à l'étape de mélange. Cette règle devient une barrière qui empêche à l'avance les accidents du robot. C'est comme traduire les règles de sécurité du laboratoire humain en langage machine.

Cependant, cette barrière ne garantit pas la sécurité par elle-même. Les conditions préalables ne fonctionnent que si une personne les saisit une par une avec précision. Si une condition est oubliée ou mal écrite, une faille apparaît dans la barrière. PDDL n'est donc pas un dispositif qui garantit une exécution sûre. C'est un outil qui permet à l'être humain d'anticiper les risques et de les traduire en règles. La densité des règles n'est dense qu'à la mesure du jugement humain.

Ce plan peut être représenté sous forme de schéma. Chaque action est placée comme un point, et les relations d'ordre sont reliées par des flèches. Ce type de schéma s'appelle un graphe orienté acyclique. Cela signifie que les flèches ne vont que dans une seule direction et ne reviennent pas en arrière. Ce schéma permet de voir quelles tâches peuvent être effectuées en même temps. Par exemple, pendant qu'un échantillon est chauffé, on pèse la poudre d'un autre échantillon. Lorsque des tâches qui ne se gênent pas sont menées en parallèle, tout le laboratoire fonctionne d'autant plus vite.

Dans les expériences sur les matériaux de fusée, cette planification sûre est précieuse. Un four électrique à très haute température devient très dangereux s'il est mal manipulé. Les matières premières très réactives ne doivent pas entrer en contact avec l'air. Plusieurs équipements fonctionnent

en même temps dans un même laboratoire. Dans un laboratoire qui tourne toute la nuit sans présence humaine, des règles permettant d'empêcher les accidents sont indispensables. Un langage de planification comme PDDL permet de construire ces règles de manière serrée. La vitesse d'un laboratoire autonome n'a de sens que sur cette base de sécurité.

Cette approche a aussi des limites. Il est difficile d'écrire sous forme de règles toutes les conditions du monde réel. Une situation non prévue peut effectivement se produire. Si les règles sont trop nombreuses, la quantité de calcul nécessaire pour trouver un plan augmente. Une panne imprévue ne peut pas être empêchée par les seules règles. Le langage de planification ne suffit donc pas. Il faut aussi un autre dispositif qui surveille en temps réel l'état des équipements, et ce dispositif sera traité dans la section suivante.

3.3 La communication standard qui relie l'intelligence artificielle aux équipements expérimentaux (MCP)

Cette section traite de la manière dont l'intelligence artificielle et les équipements expérimentaux communiquent. Le modèle de langage traite des phrases. La balance, le four électrique et le bras robotique exigent des commandes précises. Il faut une couche intermédiaire qui relie les deux. Cette section examine cette couche intermédiaire. Elle étudie les règles de communication standard et les dispositifs de sécurité placés au-dessus d'elles.

Un modèle de langage traite bien les textes humains. Il comprend aussi une phrase demandant d'augmenter lentement la température. Mais un four électrique ne comprend pas les phrases. Il doit recevoir un signal précis indiquant de combien de degrés par minute il faut augmenter la température. Il en va de même pour la balance et le bras robotique. Il faut donc un interprète qui traduise les phrases dans le langage des équipements.

Autrefois, cet interprète était fabriqué séparément pour chaque équipement. On écrivait un interprète pour la balance, un interprète pour le four électrique et un interprète pour le robot. Lorsqu'un équipement était remplacé, il fallait aussi réécrire l'interprète. Plusieurs laboratoires répétaient le même travail. C'était un grand gaspillage. En l'absence de norme, il était aussi difficile de partager le code entre laboratoires.

Les règles de communication standard cherchent à résoudre ce problème. Avec des règles standard, chaque équipement est relié de la même manière. Un nouvel équipement peut être connecté immédiatement s'il respecte les règles. Le partage de code entre laboratoires devient aussi plus facile. Les recherches récentes sur les laboratoires autonomes trouvent cette norme dans le Model Context Protocol.

Il existe une règle ouverte appelée Model Context Protocol. On l'abrège en MCP. Un protocole est une méthode de communication convenue entre plusieurs parties. MCP est une règle qui relie l'intelligence artificielle aux outils logiciels. Il indique à l'intelligence artificielle, selon une méthode standard, quels outils sont disponibles. L'intelligence artificielle reconnaît elle-même ces outils et les appelle.

Il faut ici préciser un point facile à mal comprendre. MCP est une règle de niveau supérieur qui relie des logiciels entre eux. Il ne peut pas actionner directement des équipements réels comme une balance ou un four électrique. La mise en mouvement des moteurs et des vannes relève des pilotes propres à chaque équipement. Un pilote est un programme de niveau inférieur qui traite directement les signaux de l'équipement. MCP se place au-dessus de ce pilote et le relie à l'intelligence artificielle. Les équipements ne se connectent donc pas immédiatement avec MCP seul. MCP n'est pas non plus une norme industrielle de contrôle en temps réel ni une norme de sécurité. Pour connecter un équipement, il faut placer séparément une couche de pilotes en dessous.

Un exemple d'introduction de cette règle dans un laboratoire autonome est le contrôleur NIMO. Il s'agit d'une étude préliminaire publiée en 2026. Les chercheurs sont Yoshikawa Naruki et Tamura Ryo. Cette étude expose plusieurs fonctions du laboratoire autonome sous forme de serveurs MCP. Ici, NIMO est un moteur de décision qui choisit l'expérience suivante. Le contrôleur est une couche de coordination qui relie ce moteur et plusieurs outils au moyen de MCP. Dans cet exemple, l'intelligence artificielle pilotait un laboratoire autonome chargé d'ajuster une couleur. Elle modifiait elle-même les composants et expérimentait jusqu'à obtenir la couleur cible. Ce que cette étude a effectivement montré, c'est cette coordination et cette expérience d'ajustement de couleur.

L'objectif de NIMO présenté par cette étude est clair. Il existe plusieurs méthodes d'optimisation dans un laboratoire autonome. Il existe aussi plusieurs types d'outils. Relier une par une les méthodes et les outils constitue un goulet d'étranglement majeur. Le contrôleur NIMO relie ces deux éléments selon une méthode commune. Une personne peut construire un flux expérimental sans écrire de code. Elle choisit des outils à l'écran et les relie entre eux. Toutefois, cette étude en est encore à un stade préliminaire, et il est trop tôt pour la considérer comme une norme largement utilisée.

Voyons pourquoi cette couche de communication est importante dans un laboratoire de matériaux pour fusées. Dans un laboratoire de matériaux, des équipements de sociétés différentes sont mélangés. Les fabricants de la balance, du four électrique et de l'équipement de diffraction sont tous différents. Pour qu'une seule intelligence artificielle les manipule, il faut un langage commun. Les règles de communication standard rassemblent ces nombreux équipements dans un même flux. Même lorsqu'un nouvel équipement est introduit, il peut être connecté sans gros travaux. Il devient plus facile d'agrandir ou de modifier le laboratoire.

La communication standard présente un autre avantage. Elle permet de construire une expérience même sans connaître le code. L'intelligence artificielle reconnaît elle-même les outils disponibles. Elle peut les disposer à l'écran. La personne n'a plus qu'à choisir les outils et à les relier dans l'ordre. Elle construit comme un schéma un flux qui consiste à peser avec la balance, mélanger, chauffer, puis mesurer par diffraction. Lorsque le seuil d'entrée pour construire une expérience baisse, davantage de chercheurs utilisent le laboratoire autonome.

Cette couche a aussi des limites. Les règles de communication sont encore nouvelles et en cours d'installation. Le degré de respect de ces règles varie selon les fabricants d'équipements. Les équipements anciens sont difficiles à adapter aux règles. Si la communication est interrompue ou si le signal arrive en retard, l'expérience dévie. La couche de communication elle-même a donc besoin d'un dispositif de sécurité. Ce dispositif n'exécute pas immédiatement les commandes, mais les vérifie d'abord : c'est la machine à états.

3.3.1 La dernière ligne de sécurité protégée par la machine à états

Cette sous-section traite de la machine à états qui protège la sécurité des équipements. Elle examine ce qu'est une machine à états et comment elle bloque les commandes dangereuses. Elle explique pourquoi ce dispositif constitue la dernière ligne de sécurité dans un laboratoire autonome. La machine à états présentée ici n'est pas une fonction déjà entièrement intégrée à un produit particulier. Le contrôleur NIMO vu plus haut est une étude centrée sur la coordination qui relie les outils. La machine à états et les interverrouillages sont une conception de sécurité commune qu'il faut placer séparément au-dessus de cette coordination. Ce livre considère cette conception de sécurité comme une couche que le laboratoire autonome doit posséder.

Une machine à états est une méthode qui divise l'état actuel d'un équipement en cases définies. Une machine à états finis (Finite State Machine) définit à l'avance les cases possibles. Par exemple, il peut y

avoir des cases comme attente, préparation, pesage, transfert, réaction, analyse, erreur et arrêt d'urgence. L'équipement se trouve toujours dans l'une de ces cases. Le passage d'une case à la suivante est aussi défini à l'avance.

Le point essentiel est que seules les actions autorisées dans un état donné sont exécutées. En état de réaction, le four électrique est chaud. À ce moment-là, une commande demandant au bras robotique d'ouvrir la porte du four électrique est bloquée. La porte ne s'ouvre que lorsqu'un signal indique que la température est descendue sous une valeur sûre. Ce signal est confirmé par un capteur. Tant que le signal de confirmation n'est pas arrivé, la commande est bloquée au niveau de la machine à états. Ce type de blocage s'appelle un interverrouillage. Un interverrouillage est un verrou de sécurité qui se ferme lorsque les conditions ne sont pas réunies.

On peut voir simplement pourquoi cette méthode est sûre. Un four à micro-ondes s'arrête lorsque la porte s'ouvre. Il ne fonctionne que lorsque la porte est fermée. Tant que la porte reste ouverte, il ne s'allume pas, même si l'on appuie sur les boutons. C'est une limitation des actions selon l'état. La machine à états du laboratoire autonome fonctionne selon le même principe. Dans un état dangereux, une commande dangereuse n'est tout simplement pas exécutée.

Les commandes formulées en phrases par l'intelligence artificielle doivent obligatoirement passer par cette règle. Même si l'intelligence artificielle donne une commande avec assurance, la règle passe d'abord. Seules les commandes qui passent la règle sont envoyées au pilote de l'équipement. Le pilote est le programme qui actionne les moteurs et les vannes réels. Une commande arrêtée par la règle n'est pas exécutée et seule une trace est conservée. Cette trace devient plus tard une donnée permettant d'en trouver la cause.

Dans les expériences sur les matériaux pour fusées, cette ligne de sécurité est précieuse. On y manipule en effet des fours électriques à très haute température et des matières premières réactives. Une petite erreur peut entraîner un grave accident. Le danger est plus grand la nuit, quand personne n'est présent. La machine à états est la dernière barrière de sécurité entre l'intelligence artificielle et l'équipement. Même si l'intelligence artificielle se trompe, l'équipement n'exécute pas d'action dangereuse. La liberté du laboratoire autonome n'est permise qu'à l'intérieur de cette barrière.

Ce dispositif a lui aussi ses limites. Il traite difficilement les états qui n'ont pas été définis à l'avance. Une panne inattendue n'entre pas dans une case prévue. Si un capteur envoie un signal erroné, le jugement devient lui aussi erroné. C'est pourquoi la machine à états ne suffit pas à elle seule. Il faut aussi un œil qui observe l'équipement en temps réel et détecte les anomalies. Cet œil est la fusion de capteurs, que nous verrons dans la section suivante.

3.4 Cadre d'exécution robotique résistant aux environnements expérimentaux perturbés (PUDA)

Cette section traite des difficultés que les robots rencontrent dans un environnement expérimental réel. Un laboratoire est différent d'une usine. Les poudres s'écoulent, s'agglomèrent et se chargent d'électricité statique. Les creusets se décalent peu à peu. Les capteurs contiennent du bruit. Cette section examine un cadre d'exécution robotique capable de résister à ce type d'environnement perturbé. Elle prend l'étude PUDA comme exemple représentatif.

Les robots de laboratoire rencontrent des tâches plus difficiles que les robots d'usine. Dans une usine, les mêmes pièces arrivent à un emplacement défini. Dans un laboratoire, les propriétés des poudres changent à chaque fois. Certaines poudres s'écoulent bien. D'autres s'agglomèrent et bouchent la buse. D'autres encore se chargent d'électricité statique et adhèrent un peu partout. Les creusets aussi se décalent légèrement à chaque placement.

Ces perturbations s'appellent des perturbations externes. Une perturbation externe est un obstacle qui n'était pas prévu dans le plan. Lorsqu'il y en a une, des gestes prédéfinis ne suffisent plus pour travailler. Le robot doit avoir des yeux et des sensations. Les yeux sont les caméras, et les sensations sont les capteurs de force. Le robot lit ces informations en temps réel et corrige ses gestes.

PUDA est un exemple qui traite ce type d'environnement d'exécution robotique. Son nom signifie Physical Unified Device Architecture, c'est-à-dire architecture physique unifiée des dispositifs. On l'appelle aussi harnais matériel adapté à l'intelligence artificielle pour les laboratoires autonomes. Un harnais est un cadre qui relie plusieurs équipements pour les traiter comme un ensemble. Il s'agit d'une étude initiale publiée en 2026. Les chercheurs sont Zenkun Ren, Hongzhao Tan, Jiaen Yi et Kedar Hippalgaonkar. Ce que cette étude a réellement montré est un environnement d'exécution en ligne de commande facile à utiliser par l'intelligence artificielle, ainsi que son système d'enregistrement. La fusion de capteurs et la récupération d'erreurs que nous verrons ci-dessous ne sont pas des performances démontrées par cet article. Elles indiquent la direction vers laquelle ce type de cadre d'exécution cherche à avancer.

La méthode de PUDA diffère quelque peu des systèmes précédents. Elle ne met pas en avant une interface destinée aux humains. Elle crée plutôt un environnement en ligne de commande facile à utiliser par les agents d'intelligence artificielle. Chaque équipement apparaît comme un outil accessible depuis la ligne de commande. Les commandes et les réponses restent dans des journaux standard. On peut suivre, comme une chaîne, quelle commande a été envoyée à quel échantillon et quel résultat a été obtenu. Cet historique s'appelle la provenance. La provenance est l'histoire qui indique d'où viennent les données et comment elles ont été produites.

Voyons pourquoi cet enregistrement de l'historique est précieux dans la recherche sur les matériaux pour fusées. Les pièces aérospatiales exigent un suivi strict de la qualité. Il faut conserver la trace des matières premières utilisées et des conditions de fabrication. Si un problème apparaît plus tard, ces enregistrements servent à en trouver la cause. Un système comme PUDA conserve automatiquement cet historique. Il comporte moins d'oublis que les notes prises à la main par une personne. Les données produites par un laboratoire autonome peuvent ainsi être utilisées avec confiance.

PUDA a choisi l'approche par ligne de commande pour une raison. Une interface destinée aux humains est agréable à regarder. Mais elle est peu pratique pour un agent d'intelligence artificielle. Les boutons affichés à l'écran sont difficiles à actionner pour une machine. Les outils en ligne de commande sont faciles à appeler directement par l'intelligence artificielle. L'intelligence artificielle observe la situation, juge et donne des ordres. L'équipement exécute ces ordres de manière précise et réversible. C'est comme si l'on séparait le cerveau qui conçoit l'expérience et la main qui fait bouger l'équipement. Avec cette séparation, même si l'on change le cerveau, la main reste la même.

Cette méthode a elle aussi ses limites. Un environnement en ligne de commande est peu commode à consulter directement pour une personne. Il faut créer de nouveaux outils en ligne de commande pour chaque équipement. Les anciens équipements sont difficiles à adapter à ce cadre. Pour conserver des journaux standard, il faut consacrer des efforts au stockage et à la gestion. Cette étude en est encore à un stade initial. Il faudra encore du temps avant qu'elle soit largement utilisée dans de nombreux laboratoires.

3.4.1 Combiner plusieurs capteurs pour juger et revenir en arrière après un échec

Cette sous-section traite de la fusion de capteurs, qui consiste à combiner les informations de plusieurs capteurs pour juger. Elle examine aussi le processus de récupération qui permet de revenir en arrière après un échec. Elle étudie pourquoi ces deux fonctions protègent la qualité des expériences. Ces deux fonctions sont des méthodes largement étudiées en robotique. Un cadre d'exécution comme PUDA, présenté dans la section précédente, est un réceptacle destiné à accueillir ces méthodes. Ici, nous n'examinons pas les performances d'un système particulier, mais le principe de la méthode.

La fusion de capteurs consiste à combiner les informations de plusieurs capteurs pour juger. La caméra observe la position et la forme. Le capteur de force mesure la force exercée sur le poignet du robot. Les capteurs de température et de pression vérifient si l'équipement est sûr. Avec un seul type de capteur, beaucoup de choses échappent à l'observation. En utilisant plusieurs capteurs ensemble, le jugement devient plus exact.

Prenons l'exemple d'un robot qui saisit un creuset. Si la caméra est masquée, elle ne peut pas voir la position. Dans ce cas, le capteur de force détecte la collision. Si la force est trop faible pour être ressentie, la caméra observe l'écoulement de poudre. Des capteurs différents comblent les lacunes les uns des autres. Cela ressemble à l'usage conjoint de la main et des yeux chez l'humain. Dans une pièce sombre, on tâtonne avec la main, et dans un lieu éclairé, on regarde avec les yeux.

Lorsque le robot heurte quelque chose, la valeur du capteur de force augmente brusquement. Si elle dépasse une limite définie, le robot arrête aussitôt son mouvement. Après l'arrêt, il examine de nouveau la situation. Il vérifie avec la caméra si de la poudre s'est renversée ou si le creuset a glissé. Ce processus de réexamen marque le début de la récupération d'erreur.

La récupération d'erreur suit généralement trois étapes. D'abord, elle détecte l'anomalie pour savoir ce qui s'est mal passé. Ensuite, elle ramène le robot dans un état sûr juste avant l'échec. Enfin, elle modifie légèrement la position de préhension ou la force, puis essaie une fois de plus. Grâce à ces trois étapes, les petites erreurs peuvent être surmontées sans intervention humaine.

La récupération d'erreur est importante aussi pour la qualité des expériences. Si l'on poursuit avec un échantillon mal dosé, de mauvaises données s'accumulent. Les mauvaises données orientent le modèle d'intelligence artificielle dans une mauvaise direction. C'est pourquoi le laboratoire autonome n'efface pas les échecs, mais les enregistre. Les échecs enregistrés deviennent des données pour l'apprentissage suivant. Si l'on sait où et pourquoi l'échec s'est produit, on évite cette erreur la fois suivante.

Cette fonction a elle aussi ses limites. Les valeurs des capteurs contiennent du bruit. Si le bruit est interprété à tort comme une anomalie, une expérience normale s'arrête. Si les arrêts sont trop fréquents, l'expérience ralentit. À l'inverse, si la limite est trop souple, un véritable accident peut passer inaperçu. Il faut donc bien régler la sensibilité de ce dispositif. Ce réglage repose encore beaucoup sur l'expérience humaine. La récupération autonome n'est pas un dispositif destiné à retirer l'humain. C'est un dispositif qui réduit les répétitions dangereuses et appelle l'humain lorsque c'est nécessaire.

3.5 Un laboratoire autonome qui a réellement fonctionné, le Berkeley A-Lab

Cette section examine un exemple représentatif de laboratoire autonome qui a réellement fonctionné. Il s'agit de l'A-Lab du Lawrence Berkeley National Laboratory, aux États-Unis. Nous verrons ce que cet exemple a accompli et quels obstacles il a rencontrés. Nous préciserons aussi comment lire les chiffres de ses résultats.

A-Lab est une plateforme autonome de synthèse de matériaux inorganiques créée par le Lawrence Berkeley National Laboratory. Les matériaux inorganiques sont des substances composées d'éléments

comme les métaux et l'oxygène. Les oxydes et les phosphates en font partie. A-Lab a choisi, à partir de données de calcul, des candidats pouvant être fabriqués. Il a ensuite manipulé les poudres avec des robots et les a traitées thermiquement. Les résultats ont été vérifiés au moyen d'un appareil de diffraction des rayons X. Ce processus s'est poursuivi presque sans intervention manuelle humaine.

Il est important de lire correctement les chiffres des résultats. A-Lab a été présenté en 2023 dans un article de Nature. Le taux de succès annoncé au départ a été réexaminé par la suite et revu à la baisse. D'autres chimistes des matériaux ont réanalysé les motifs de diffraction. En 2026, Nature a publié une correction. Après correction, le chiffre est de trente-six réussites sur cinquante-sept objectifs. Ce livre retient les chiffres corrigés. Il n'utilise pas le chiffre plus élevé annoncé au départ.

Ce processus de correction lui-même apporte une leçon précieuse. Le cœur de la correction tient en deux points. Le premier est l'erreur de jugement subie par l'analyse automatique. La décision de succès reposait sur une analyse automatique par diffraction des rayons X. Cette analyse a confondu le signal de matières premières restées sans réaction avec le signal du nouveau matériau visé. En apparence, on aurait dit qu'un nouveau cristal avait été formé. Ce n'est qu'après une réanalyse humaine des motifs de diffraction que cette erreur de jugement est apparue. Le second point concerne le sens de l'expression nouveau matériau. Au départ, cela pouvait se lire comme la fabrication d'un matériau qui n'existait pas dans le monde. Après réexamen, il s'est avéré que, dans bien des cas, cela signifiait un matériau absent des données de ce laboratoire. Ce n'est pas la même chose qu'un matériau nouveau pour toute la communauté scientifique. La correction indique que les réussites annoncées ont été revérifiées par des humains et que certaines sont restées incertaines. Ainsi, le jugement d'un laboratoire autonome n'est pas une réponse finale. Il ne devient un véritable succès qu'après analyse précise et essais de reproduction. Si l'on saute la vérification au motif que l'expérience autonome est rapide, les erreurs s'accumulent au contraire.

Voyons ce que cet exemple signifie pour la recherche sur les matériaux pour fusées. A-Lab a montré que la synthèse autonome n'est pas une simple imagination extérieure au laboratoire. Les oxydes et les céramiques sont liés aux matériaux de protection thermique des fusées. Une voie s'est ouverte pour explorer ces matériaux plus vite que par le travail humain. Mais la rigueur du jugement de succès doit suivre. Dans les pièces aérospatiales, même une petite impureté peut devenir un problème grave. La vérification est donc aussi importante que la vitesse.

A-Lab a révélé trois obstacles nets. La sous-section suivante les examine un par un. Ces obstacles sont des problèmes communs aux autres laboratoires autonomes. Les connaître avec précision devient la base de construction du système suivant.

3.5.1 Composition du système et résultats d'exploitation

Cette sous-section examine de quels éléments A-Lab est composé. Elle observe aussi comment ces éléments se sont articulés pour fonctionner. Elle dessine concrètement l'image réelle d'un laboratoire autonome.

La structure d'A-Lab peut être divisée en trois parties. La couche de calcul choisit les matériaux candidats et les méthodes de synthèse. Dans la couche d'exécution, les robots et les équipements fabriquent réellement les échantillons. Dans la couche de mesure, l'appareil de diffraction des rayons X vérifie les résultats. Ces trois couches forment une boucle, du calcul à l'exécution, puis de l'exécution à la mesure.

La couche de calcul a choisi des candidats dans une grande base de données. Elle a utilisé des données publiques appelées Materials Project. Elle a aussi utilisé des données de calcul de Google. Ces données prédisent des matériaux susceptibles d'être thermodynamiquement stables. Dire qu'un matériau est

stable signifie qu'il se maintient sans se disperser facilement. A-Lab a pris pour objectifs les matériaux ainsi prédits.

La couche d'exécution comportait plusieurs bras robotisés. Les robots déplaçaient les échantillons entre les postes de pesée, de mélange, de pressage et de cuisson. Ils pesaient précisément les poudres et les mélangeaient au broyeur à boulets. Un broyeur à boulets est un appareil qui broie et mélange des poudres dans un récipient contenant de petites billes. La poudre mélangée était pressée pour former de petits granulés. Ces granulés étaient ensuite cuits dans un four électrique à haute température.

L'appareil central de la couche de mesure est le diffractomètre à rayons X. La diffraction des rayons X (X-ray Diffraction) est une méthode qui consiste à projeter des rayons X pour observer la structure cristalline. Chaque cristal produit un motif différent de rayons X diffractés. Ce motif ressemble à l'empreinte digitale d'un matériau. L'intelligence artificielle lit ce motif pour déterminer si le matériau visé a été fabriqué. Si le motif correspond à la cible, le résultat est compté comme un succès.

A-Lab a fait tourner ce processus pendant plusieurs jours. Les expériences se poursuivaient même pendant que les humains dormaient la nuit. Cela montre que le laboratoire autonome est passé de l'idée contenue dans les articles à un équipement réel. Plusieurs matériaux cibles ont été fabriqués sans intervention humaine. Ce résultat reste un exemple qui a ouvert la voie à la synthèse autonome de matériaux.

Toutefois, il ne s'agissait pas d'une exploitation entièrement sans humains. Des chercheurs humains préparaient et surveillaient le système. Les expériences ratées étaient examinées avec des humains. Les décisions de succès ont elles aussi été revérifiées par des humains par la suite. Le laboratoire autonome réduit le travail humain, mais il n'efface pas l'humain. L'humain se charge des jugements de niveau supérieur et de la vérification. La machine prend en charge les répétitions détaillées. Cette division du travail est l'image réelle des laboratoires autonomes actuels.

3.5.2 Les trois obstacles révélés par A-Lab

Cette sous-section examine un par un les trois obstacles révélés par A-Lab. Ces obstacles sont des défis communs que les laboratoires autonomes doivent surmonter. Il faut comprendre précisément le problème pour construire correctement le système suivant.

Le premier obstacle est la difficulté de juger le résultat de la synthèse. Certains matériaux comptés comme des succès n'étaient pas monophasés. Monophasé signifie qu'un seul cristal souhaité est présent à l'état pur. Certains échantillons contenaient encore des matières premières qui n'avaient pas réagi. D'autres contenaient une phase secondaire. Une phase secondaire est un autre cristal qui n'est pas la cible. Même si le motif de diffraction ressemble à celui de la cible, des impuretés peuvent être présentes. Il faut donc vérifier strictement si le matériau est monophasé.

Le deuxième mur est le traitement des poudres. Les poudres ont des propriétés différentes selon leur type. Certaines poudres portent une charge électrostatique. C'est le cas du dioxyde de titane ou des nanopoudres. Ces poudres adhèrent à l'intérieur de la buse. La buse de dosage se bouche alors. Les matières premières qui absorbent facilement l'humidité sont aussi difficiles à manipuler. Les doseurs automatiques s'arrêtent souvent devant cette diversité de poudres. Une personne réglerait parfois le problème en tapotant à la main, mais la machine se bloque.

Le troisième mur est le contrôle de l'environnement. A-Lab fonctionnait dans un environnement ouvert à l'air. L'air contient de l'oxygène et de l'humidité. Les matériaux sensibles à l'oxygène et à l'humidité ne peuvent pas être manipulés dans un tel environnement. C'est parce que leurs propriétés changent ou qu'ils se décomposent dès qu'ils sont fabriqués. Les sulfures et les matériaux halogénés destinés aux

batteries tout-solide rencontrent ce problème. Ces matériaux deviennent inutilisables au contact de l'air. C'est pourquoi A-Lab, ouvert à l'air, n'a pas pu explorer ces matériaux.

Ces murs montrent bien pourquoi l'automatisation est difficile. L'être humain surmonte ces problèmes par l'expérience des yeux et des mains. Si une poudre s'agglomère, il tapote le récipient. Si un échantillon semble anormal, il s'en aperçoit à l'odeur et à la couleur. Il faut enseigner une à une ces expériences à la machine. Ce qu'une personne fait sans y penser est difficile pour une machine. Le progrès du laboratoire autonome consiste à transférer ces petites sensations à la machine.

Ces trois murs sont liés entre eux. Si le traitement des poudres est mauvais, le dosage est faux. Si le dosage est faux, l'évaluation du résultat devient incertaine. Si l'environnement n'est pas contrôlé, certains matériaux ne peuvent même pas être fabriqués. Pour élargir le laboratoire autonome, il faut franchir ces murs ensemble. Corriger un seul mur ne suffit pas pour obtenir un grand progrès.

Dans la recherche sur les matériaux pour fusées, ces murs deviennent encore plus importants. Les nouveaux matériaux de batteries ou les composés spéciaux destinés aux fusées sont souvent très réactifs. Beaucoup sont aussi sensibles à l'air. Pour manipuler ces matériaux, le contrôle de l'environnement doit passer en premier. Un laboratoire ouvert à l'air ne permet guère d'aborder cette famille de matériaux. C'est pourquoi le troisième mur, le contrôle de l'environnement, pèse particulièrement lourd dans la recherche sur les matériaux pour fusées.

Les efforts pour franchir ce mur sont le sujet de la section suivante. Pour manipuler des matériaux sensibles à l'air, il faut un environnement fermé. Cet environnement est la boîte à gants. La section suivante examine un laboratoire autonome qui fonctionne dans un environnement fermé. C'est un système qui vise directement le troisième mur d'A-Lab.

3.6 Trouver des matériaux sensibles à l'air dans un environnement fermé (A-Lab GPSS)

Cette section traite d'un laboratoire autonome qui fonctionne dans un environnement fermé. C'est un système conçu pour franchir le troisième mur vu dans la section précédente. Elle examine la façon de manipuler les matériaux sensibles à l'air.

Une boîte à gants est une enceinte fermée munie de gants. Des gants épais en caoutchouc sont fixés à la paroi de la boîte. La personne introduit ses mains dans les gants depuis l'extérieur et manipule ce qui se trouve à l'intérieur. L'intérieur de la boîte est généralement rempli d'un gaz inerte comme l'argon. Un gaz inerte est un gaz qui réagit peu avec les autres substances. Il y a donc très peu d'oxygène et d'humidité dans la boîte.

Ce système s'appelle A-Lab GPSS. GPSS signifie système de synthèse protégé par boîte à gants. C'est une génération suivante conçue pour dépasser les limites d'A-Lab, qui était ouvert à l'air. Les équipements ont été placés dans une grande boîte à gants remplie d'argon de très haute pureté. L'humidité et l'oxygène y sont maintenus sous le seuil d'une partie par million. Le stockage des matières premières, le dosage, la mise en forme, le scellement et le traitement thermique se font tous à l'intérieur. L'essentiel est de supprimer tout moment où l'échantillon entre en contact avec l'air.

Ce cas est attesté par une prépublication de 2026. L'équipe de recherche est celle de Feiyu et ses collègues. Il s'agit d'une étude initiale sur des conducteurs spinelles à halogénures de lithium sensibles à l'air. L'article indique que trois cent cinquante-deux échantillons ont été fabriqués. Les combinaisons possibles de paires métalliques étaient au nombre de cent soixante et onze. Parmi elles, soixante-douze pour cent ont été traitées expérimentalement. Ici, soixante-douze pour cent n'est pas un taux de

réussite. C'est la part des combinaisons possibles couvertes par l'expérience. Il ne faut pas lire ce chiffre à tort comme un taux de réussite.

L'article indique que les résultats se sont améliorés au fil des expériences. Dans les soixante-quinze premiers échantillons, la proportion de bons résultats était faible. Dans les soixante-quinze derniers échantillons, cette proportion a augmenté. L'intelligence artificielle a appris des premières expériences pour améliorer les expériences suivantes. Cela montre que l'apprentissage en boucle fermée fonctionne réellement. Toutefois, cette étude reste à un stade initial, et il ne faut donc pas en tirer des conclusions trop larges.

Voyons pourquoi ce laboratoire autonome fermé est précieux pour l'industrie des fusées. Les engins spatiaux ont besoin de batteries performantes. Les batteries tout-solide sont des candidates sûres et à haute énergie. Leur élément central est l'électrolyte solide. Or les bons électrolytes solides sont souvent sensibles à l'air. Le laboratoire autonome fermé explore ces matériaux en sécurité. Le même environnement sert aussi à la recherche sur les matériaux de fusées très réactifs.

3.6.1 Électrolytes solides à halogénures de lithium sensibles à l'air

Cette sous-section examine plus en détail les matériaux traités ici. Elle explique en termes simples ce qu'est un électrolyte solide à halogénures de lithium. Elle examine pourquoi ce matériau est sensible à l'air et pourquoi il est précieux.

Commençons par les termes utilisés dans les batteries. Un ion lithium est une petite particule qui transporte une charge dans la batterie. Lorsque la batterie se charge et se décharge, ces ions se déplacent. L'électrolyte est le chemin par lequel passent ces ions. Les batteries courantes utilisent un électrolyte liquide. Un liquide peut fuir ou s'enflammer.

Un électrolyte solide remplace ce chemin par un solide. Un électrolyte solide doit bien laisser passer les ions lithium. Mais il doit bien bloquer les électrons. Un solide qui laisse passer les ions et bloque les électrons est un bon électrolyte. Un solide ne fuit pas et résiste bien au feu. C'est pourquoi les batteries tout-solide sont considérées comme des batteries plus sûres.

Un électrolyte à halogénures de lithium est un électrolyte solide contenant des éléments halogènes. Les halogènes sont des éléments comme le chlore, le brome et l'iode. Dans la formule chimique, le lithium, un métal et un halogène sont liés selon un rapport déterminé. Ce matériau peut bien s'accorder avec des électrodes à haute tension. Avec une tension élevée, on stocke plus d'énergie pour une même taille. C'est pourquoi il attire l'attention comme matériau de batterie de prochaine génération.

Le problème est que ce matériau est très sensible à l'eau. Cette propriété s'appelle la déliquescence. La déliquescence est la propriété d'absorber l'humidité de l'air et de se dissoudre par soi-même. Même au contact d'une quantité infime d'humidité, la phase se décompose. Lors de la décomposition, des gaz nocifs comme le chlorure d'hydrogène peuvent se dégager. Le stockage des matières premières, la synthèse et les mesures doivent donc tous se faire dans un environnement fermé.

Cette condition rend le laboratoire autonome difficile à construire. L'intérieur de l'enceinte fermée est étroit et peu commode à utiliser. Le robot doit se déplacer avec précision dans un espace restreint. Il ne faut permettre aucune exposition à l'air, même un instant. L'intelligence artificielle propose des compositions candidates et des conditions de synthèse. Le robot répète la même procédure sans exposition à l'air. Les instruments d'analyse vérifient rapidement la conductivité ionique et la phase cristalline. Toutes ces opérations doivent fonctionner ensemble à l'intérieur de l'enceinte fermée.

Mesurer la conductivité ionique est aussi important. La conductivité ionique est une valeur qui indique à quel point les ions lithium passent bien. Cette valeur doit être élevée pour que la batterie fournisse

bien sa puissance. Le laboratoire autonome mesure aussitôt la conductivité de l'échantillon fabriqué. Il utilise ensuite cette valeur comme objectif de l'intelligence artificielle. Il choisit l'expérience suivante en visant une composition à conductivité élevée. Il réduit progressivement le champ des bons électrolytes en observant ensemble la phase cristalline et la conductivité.

Cette exploration des matériaux garde aussi des limites. Dans un environnement fermé, il est difficile d'introduire et de retirer des équipements. L'espace restreint limite les appareils que l'on peut utiliser. Un matériau déliquescent devient inutilisable à la moindre erreur. Chaque expérience demande donc beaucoup de prudence. Même si l'automatisation augmente la vitesse, cette prudence ne diminue pas. Le laboratoire autonome fermé couvre encore une gamme étroite de matériaux.

3.6.2 Une double boucle entre induction et abduction

Cette sous-section traite de deux modes de pensée utilisés par le laboratoire autonome. Il s'agit de l'induction et de l'abduction. Elle examine pourquoi l'exploration s'accélère lorsque ces deux modes sont utilisés tour à tour. Cette méthode est la structure de raisonnement mise en évidence par l'étude A-Lab GPSS de cette section.

L'induction est une façon de penser qui cherche des règles communes dans plusieurs résultats expérimentaux. Elle rassemble les motifs de diffraction et les mesures de conductivité. Elle examine quelles compositions ont été bien formées. Elle place plusieurs échantillons côte à côte et lit les tendances. Elle vérifie comment la conductivité change lorsque le réseau s'élargit. Les règles ainsi accumulées deviennent la base de l'expérience suivante.

L'abduction est une façon de penser qui cherche la cause d'un résultat inattendu. L'abduction est un raisonnement qui choisit la cause expliquant le mieux un résultat étrange. Supposons qu'une phase d'impureté imprévue apparaisse dans un échantillon. On examine si la matière première a réagi de façon incomplète ou si la température était trop basse. Parmi ces possibilités, on choisit la cause la plus plausible et l'on modifie l'expérience suivante. L'abduction trouve immédiatement le coup suivant à partir d'un résultat surprenant. Sa direction est différente de celle de l'induction, qui tire des règles de plusieurs résultats.

Le laboratoire autonome utilise ces deux modes de pensée tour à tour. Les calculs de théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory) resserrent à l'avance les candidats possibles. Ce calcul détermine l'énergie des matériaux à l'échelle atomique. Les candidats ainsi choisis sont testés par l'expérience. Lorsque les résultats expérimentaux s'accumulent, l'induction cherche des règles. Lorsqu'un résultat inattendu apparaît, l'abduction en repère la cause et change la direction. Ainsi, le calcul et l'expérience s'améliorent mutuellement. La pensée ne va pas dans une seule direction, mais tourne comme une boucle.

Prenons un exemple simple. Imaginons que l'on cherche son chemin dans une ville inconnue. Marcher plusieurs fois et trouver les règles des raccourcis relève de l'induction. Quand la route est soudain bloquée, deviner la cause et faire un détour relève de l'abduction. Si l'on ne croit qu'aux règles, on s'arrête devant une situation inattendue. Si l'on ne suit que les suppositions sur les causes, on perd la vue d'ensemble. En utilisant les deux, on atteint plus vite sa destination. Le laboratoire autonome utilise aussi ces deux modes de pensée pour atteindre plus vite de bons matériaux.

Voyons pourquoi cette double boucle est précieuse dans la recherche sur les matériaux pour fusées. Un nouveau matériau ne peut pas être entièrement compris par le seul calcul. Le calcul suppose des conditions idéales. Dans la synthèse réelle, il y a des impuretés et du bruit. L'expérience seule ne peut pas non plus tout révéler. L'expérience demande beaucoup de temps et d'argent. En liant les deux

méthodes, on réduit le champ par le calcul et on confirme par l'expérience. Dans l'exploration coûteuse des matériaux pour fusées, cette combinaison a une grande force.

Cette méthode a aussi des limites. Le calcul et l'expérience ne parlent pas le même langage. Il est délicat de faire correspondre les résultats de calcul aux résultats expérimentaux. Si le calcul est faux, les expériences sont gaspillées sur de mauvais candidats. Si le bruit expérimental est élevé, on corrige mal le calcul. Il faut donc bien construire le pont entre les deux boucles. La construction de ce pont dépend encore beaucoup du jugement humain.

3.6.3 Une coopération où plusieurs intelligences artificielles se partagent les rôles

Cette sous-section traite de la manière dont plusieurs intelligences artificielles coopèrent en se partageant les rôles. On appelle cela un système multi-agents. Elle examine pourquoi plusieurs intelligences artificielles valent mieux qu'une seule et quels risques existent.

Un système multi-agents est une structure dans laquelle plusieurs intelligences artificielles se partagent les rôles. Un agent est une unité d'intelligence artificielle qui juge et agit par elle-même. C'est comme une équipe qui répartit le travail au lieu de confier toutes les tâches à une seule personne. Dans un laboratoire autonome, cette répartition des rôles est naturelle. C'est parce qu'une expérience exige à la fois des connaissances chimiques, de la planification, de la sécurité et de l'analyse.

Lorsque les rôles sont répartis, chaque agent se concentre sur une tâche. L'agent chimique vérifie si l'équation de réaction est correcte. Il examine si la masse est conservée et si les nombres d'oxydation correspondent. Il vérifie aussi si la matière première réagit mal avec le creuset. L'agent de planification organise l'ordre d'utilisation des équipements. Il répartit à l'avance les tâches qui créent des goulets d'étranglement, comme les longs traitements thermiques. Il détermine aussi quelles tâches peuvent être menées en parallèle.

L'agent de sécurité est l'œil qui surveille le laboratoire. Il observe les concentrations d'oxygène et d'humidité dans la boîte à gants. Il suit aussi les variations de pression et le débit d'eau de refroidissement du four électrique. Il vérifie ces valeurs de façon répétée à des intervalles très courts. Si une valeur anormale apparaît, il émet une alerte et laisse une trace. Toutefois, cet agent ne déclenche pas directement l'arrêt d'urgence réel. C'est parce qu'un agent génératif peut répondre tardivement ou se tromper dans son jugement. Si l'oxygène ou la pression atteint une valeur dangereuse, des capteurs indépendants et un contrôleur de sécurité validé arrêtent aussitôt l'équipement. Ce verrouillage matériel n'attend pas le jugement du modèle de langage. L'agent se charge de la surveillance et des enregistrements, tandis que l'arrêt relève d'un dispositif de sécurité validé. L'agent d'analyse interprète les résultats de mesure. Il compare les motifs de diffraction avec une base de données. Il quantifie la quantité d'impuretés. Il introduit ce nombre comme valeur cible dans l'apprenant.

En 2026, les recherches sur ce type de laboratoire multi-agents ont fortement augmenté. Une étude a assemblé plusieurs agents d'intelligence artificielle sous un coordinateur. Chaque agent utilisait des outils différents. Ils étaient répartis en groupes chargés de chercher des connaissances, de transformer la conception en procédure d'exécution, de manipuler les robots et d'interpréter les données. Ainsi, ils ont réalisé une exploration de matériaux en boucle fermée par groupes. Une autre étude, ChatMat, a relié automatiquement un flux de prédiction des propriétés de matériaux au moyen de plusieurs agents. Des articles ont aussi traité du sens des systèmes multi-agents dans la gestion des laboratoires autonomes.

La répartition des rôles présente des avantages clairs. On voit distinctement ce dont chaque agent est chargé. Lorsqu'un problème survient, il est facile de trouver à quelle étape il est apparu. Même si l'on

corrige un agent, il n'est pas nécessaire de changer l'ensemble. Il est aussi facile d'ajouter de nouveaux outils. Cela ressemble aux avantages du travail en équipe chez les humains.

Les systèmes multi-agents changent aussi la manière même de faire de la science. Autrefois, les chercheurs humains consignaient chaque expérience une par une. Désormais, les agents laissent sous forme de données le processus de décision. Il reste une trace des raisons pour lesquelles telle condition a été choisie et des raisons pour lesquelles tel résultat a été considéré comme un succès. Ces traces servent plus tard à revenir sur la recherche. Toutefois, le jugement de l'intelligence artificielle n'est pas toujours transparent. Il est difficile pour l'être humain de savoir entièrement pourquoi une telle décision a été prise. Cette opacité reste une tâche à résoudre à l'avenir.

Cependant, les risques augmentent aussi. Les grands modèles de langage peuvent inventer des faits inexistantes. L'erreur d'un agent peut se propager à un autre agent. Si plusieurs agents se font confiance et se transmettent les tâches, ils peuvent ne pas détecter l'erreur. C'est pourquoi l'autorité finale doit revenir aux règles de sécurité et au superviseur humain. Même lorsque l'intelligence artificielle s'exprime avec assurance, les équipements peuvent rester dangereux. Plus le nombre d'agents augmente, plus la vérification croisée par l'être humain et les dispositifs de sécurité matériels deviennent importants.

Synthèse

Ce chapitre a examiné le fonctionnement d'un laboratoire autonome. Le point central est la structure en boucle appelée boucle fermée. L'intelligence artificielle choisit l'expérience suivante. Le robot la réalise. Les équipements mesurent. Le résultat revient ensuite vers l'intelligence artificielle. Cette boucle tourne jour et nuit et réduit rapidement un vaste espace de matériaux.

La méthode par laquelle l'intelligence artificielle choisit l'expérience suivante est l'apprentissage actif bayésien. Cette méthode examine à la fois la performance attendue et l'incertitude. Elle choisit de manière équilibrée les zones prometteuses et les zones inconnues. Elle permet donc d'atteindre de bons matériaux avec peu d'expériences. Ce point devient un grand atout dans la recherche coûteuse de matériaux pour les fusées.

Les méthodes de synthèse contenues dans les articles sont extraites par de grands modèles de langage. Des recherches comme MSP-LLM accomplissent ce travail. Les méthodes extraites sont ensuite converties de manière sûre dans un langage de planification comme PDDL. Le langage de planification devient une barrière qui prévient à l'avance les accidents du robot. L'intelligence artificielle et les équipements sont reliés par des standards comme le protocole de contexte de modèle. Le contrôleur NIMO en est un exemple. La machine à états est le dernier point de contrôle qui bloque les commandes dangereuses.

Le robot doit résister à un environnement expérimental désordonné. La fusion de capteurs, qui lit plusieurs capteurs ensemble, l'y aide. La récupération d'erreurs, qui annule d'elle-même les échecs, fonctionne aussi avec elle. Des systèmes comme PUDA conservent les commandes et les résultats sous forme de traces. Ces traces sont précieuses pour le suivi de la qualité des pièces aérospatiales.

Nous avons étudié A-Lab et A-Lab GPSS comme cas réels. A-Lab a produit 36 des 57 objectifs en 17 jours. Ce chiffre est celui qui a été corrigé en 2026. Ce cas montre que les décisions d'un laboratoire autonome nécessitent aussi une révision humaine. A-Lab GPSS a traité des matériaux sensibles à l'air dans un environnement fermé. Avec 352 échantillons, il a couvert 72 % des combinaisons possibles de paires métalliques. Ce chiffre n'est pas un taux de réussite, mais une couverture des combinaisons.

En 2026, ce domaine s'est rapidement élargi. Les laboratoires multi-agents, où plusieurs intelligences artificielles se répartissent les rôles, se sont multipliés. Les tentatives de relier les équipements par une communication standardisée se sont poursuivies. Les recherches visant à adapter l'optimisation bayésienne au déroulement des expériences ont aussi été actives. Des articles de synthèse et des guides examinant largement les laboratoires autonomes ont également été publiés. La grande tendance est claire. Elle consiste à libérer l'être humain des répétitions minutieuses. Cependant, la décision et la vérification restent toujours du côté de l'être humain.

Les systèmes présentés dans ce chapitre relèvent pour la plupart de recherches initiales. Les prépublications sont nombreuses et les standards de terrain restent encore rares. C'est pourquoi nous avons examiné ensemble les principes et les limites, plutôt que de mettre les chiffres de performance au premier plan. Le laboratoire autonome n'est pas un outil qui efface l'être humain. Il confie les répétitions dangereuses à la machine, tandis que l'être humain prend en charge la décision et la vérification. Le véritable sens du laboratoire autonome n'est pas l'expérience rapide, mais l'expérience fiable. C'est seulement sur ce principe que l'automatisation de la recherche sur les matériaux pour fusées peut se développer en sécurité.

Sources associées

- King, R. D., Rowland, J., Oliver, S. G., Young, M., Aubrey, W., Byrne, E., Liakata, M., Markham, M., Pir, P., Soldatova, L. N., Sparkes, A., Whelan, K. E., & Clare, A. (2009). The automation of science. *Science*, 324(5923), 85-89. <https://doi.org/10.1126/science.1165620>
- MacLeod, B. P., Parlane, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., Moreira, R., Yunker, L. P. E., Rooney, M. B., Deeth, J. R., Lai, V., Ng, G. J., Situ, H., Zhang, R. H., Elliott, M. S., Haley, T. H., Dvorak, D. J., Aspuru-Guzik, A., Hein, J. E., & Berlinguette, C. P. (2020). Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, 6(20), eaaz8867. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 624(7990), 86-91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Author correction: An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 650, E1. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-09992-y>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- McDermott, M. J., Dwaraknath, S. S., & Persson, K. A. (2021). A graph-based network for predicting chemical reaction pathways in solid-state materials synthesis. *Nature Communications*, 12, 3097. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23339-x>
- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., Yoshikawa, N., Corapi, S., Akkoc, G. D., Strieth-Kalthoff, F., Seifrid, M., & Aspuru-Guzik, A. (2024). Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews*, 124(16), 9633-9732. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
- Boiko, D. A., MacKnight, R., Kline, B., & Gomes, G. (2023). Autonomous chemical research with large language models. *Nature*, 624, 570-578. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06792-0>
- Noh, H., Na, G. S., Lee, N., & Park, C. (2026). MSP-LLM: A unified large language model framework for complete material synthesis planning. *arXiv preprint*, arXiv:2602.07543. <https://arxiv.org/abs/2602.07543>
- Yoshikawa, N., & Tamura, R. (2026). NIMO Controller: a self-driving laboratory orchestrator based on the Model Context Protocol. *arXiv preprint*, arXiv:2605.15227. <https://arxiv.org/abs/2605.15227>
- Tamura, R., & Yoshikawa, N. (2026). NIMO: A software platform for closed-loop materials exploration with diverse AI algorithms. *arXiv preprint*, arXiv:2606.15522. <https://arxiv.org/abs/2606.15522>
- Ren, Z., Tan, H., Yee, J., & Hippalgaonkar, K. (2026). PUDA: An AI-native hardware harness for self-driving laboratories. *arXiv preprint*, arXiv:2607.26464. <https://arxiv.org/abs/2607.26464>

- Fei, Y., Rendy, B., Yang, X., Woo, J., Huang, X., Li, C., Wang, S., Milsted, D., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Agentic LLM reasoning in a self-driving laboratory for air-sensitive lithium halide spinel conductors. arXiv preprint, arXiv:2604.11957. <https://arxiv.org/abs/2604.11957>
- Kusne, A. G., & McDannald, A. (2026). Managing autonomous materials labs with multi-agent AI and its implications for the science of science. *Communications Materials*, 7, 173. <https://doi.org/10.1038/s43246-026-01219-5>
- Lv, S., Peng, L., Jiao, S., Yao, Y., Wu, W., & Hu, W. (2026). ChatMat: a multi-agent chemist for autonomous material prediction and exploration. *Digital Discovery*, 5(7), 2886-2898. <https://doi.org/10.1039/d5dd00582e>
- Lee, H., Yoo, H. J., Jang, H. S., Park, B., Park, Y. J., & Han, S. S. (2026). Toward self-driving laboratory 2.0 for chemistry and materials discovery. *Materials Horizons*, 13(10), 4712-4739. <https://doi.org/10.1039/d5mh01984b>
- Zhu, J., Zhang, L., Zhu, Y., Lin, X., Wu, Y., Di, S., Liu, B., Luo, Y., & Zhang, T. (2026). A survey of agentic materials science and engineering: where are we and where are we going? *Journal of Materials Informatics*, 6, 7. <https://doi.org/10.20517/jmi.2026.07>
- Tobias, A. V., & Wahab, A. (2025). Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications. *Royal Society Open Science*, 12(7), 250646. <https://doi.org/10.1098/rsos.250646>
- Wakabayashi, Y. K., & Otsuka, T. (2026). Bayesian optimization for self-driving materials laboratories: From algorithms to physics-informed workflows. arXiv preprint, arXiv:2608.26016. <https://arxiv.org/abs/2608.26016>
- Ntagiantas, A., Tsilimidos, P., Giannakopoulos, G., Rekatsinas, C., & Krokidas, P. (2026). Active learning guided design space refinement for scalable multi-objective Bayesian optimization in materials discovery. arXiv preprint, arXiv:2608.04651. <https://arxiv.org/abs/2608.04651>
- He, C., Singull, M., & Jacobsson, T. J. (2026). Bayesian optimisation for the experimental sciences: A practical guide to data-efficient optimisation of laboratory workflows. *Advanced Intelligent Systems*, 8(5), e202501149. <https://doi.org/10.1002/aisy.202501149>
- Liang, H., Sun, Y., Paxson, R., Lee, C.-Y., Hall, A. T., Warecki, Z., Cumings, J., Koinuma, H., Kusne, A. G., Lippmaa, M., & Takeuchi, I. (2026). Autonomous epitaxial atomic-layer synthesis via real-time computer vision of electron diffraction. arXiv preprint, arXiv:2602.20432. <https://arxiv.org/abs/2602.20432>
- Anthropic. (2025). Model Context Protocol specification (version 2025-06-18). <https://modelcontextprotocol.io/specification/2025-06-18>
- Anthropic. (2024). Introducing the Model Context Protocol. <https://www.anthropic.com/news/model-context-protocol>

Chapitre 4. Prédiction à cohérence physique et optimisation de la composition des alliages à haute entropie (HEA) et des superalliages

Introduction

Quand on utilise longtemps une casserole dans la cuisine, son fond noircit. Les parties souvent exposées au feu s'abîment les premières. Plus un métal est chaud, plus il devient mou et faible. Cette tendance à s'affaiblir sous l'effet de la chaleur est commune à tous les métaux.

Les moteurs de fusée subissent ce problème plus durement que toute autre machine. Dans la chambre de combustion, le carburant brûle et produit des gaz à plusieurs milliers de degrés. Ces gaz sont expulsés rapidement par un passage étroit appelé tuyère. La paroi de la tuyère doit résister à ces gaz brûlants juste à côté d'eux. C'est un emplacement d'une sévérité sans commune mesure avec le fond d'une casserole.

Les véhicules qui rentrent dans l'atmosphère rencontrent le même problème. Quand ils avancent en poussant l'air à grande vitesse, l'air se comprime et chauffe. La face avant du véhicule devient rougeoyante. Si la structure ne résiste pas à cette chaleur, elle fond ou se brise.

On peut sentir cet échauffement de l'air avec la paume de la main. Quand on roule vite à vélo, le vent frappe fortement le visage. Si l'on passe la main par la fenêtre, le vent pousse la main. Un véhicule aérien reçoit ce vent à une vitesse des milliers de fois plus élevée. L'air repoussé se comprime, chauffe, puis transmet cette chaleur à la face avant. La température du point d'arrêt d'une surface de rentrée dépasse 1 600 degrés Celsius.

Les véhicules hypersoniques rencontrent la même chaleur. L'hypersonique désigne une vitesse plus de cinq fois supérieure à celle du son. À cette vitesse, le bord d'attaque des ailes devient plus chaud que les autres parties. La chaleur se concentre sur les zones étroites et pointues. C'est pourquoi ces parties utilisent des matériaux ayant une excellente résistance aux hautes températures.

C'est pourquoi on cherche des métaux qui ne perdent pas leur résistance même dans des endroits très chauds. Le métal qui a longtemps occupé cette place est le superalliage à base de nickel (Nickel-based superalloy). Un superalliage est un alliage spécialement conçu pour bien résister à haute température. Mais ce métal a lui aussi une température limite.

Ce chapitre porte sur de nouveaux métaux qui cherchent à dépasser cette limite. Le principal sujet est l'alliage à haute entropie (High-Entropy Alloy, HEA). C'est un alliage dans lequel plusieurs métaux sont mélangés en quantités similaires. Si l'on choisit uniquement des métaux à point de fusion élevé, on obtient un nouveau candidat pour les matériaux de fusée. On appelle ce type d'alliage alliage réfractaire à haute entropie (Refractory High-Entropy Alloy, RHEA).

Ce chapitre explique une nouvelle méthode pour trouver ces métaux. Au lieu de mener les expériences une par une, l'intelligence artificielle (IA) sélectionne rapidement des candidats. Nous verrons pas à pas comment l'agencement des atomes, les lois de la thermodynamique et les calculs atomiques à grande échelle rencontrent l'intelligence artificielle. Il s'agit de métaux, mais l'explication les rapprochera d'exemples familiers, comme les saisons et l'école.

Imaginons d'abord pourquoi l'intelligence artificielle est nécessaire. Pour fabriquer un bon alliage, il faut choisir les éléments et leurs proportions. Avec seulement cinq éléments, le nombre de combinaisons de proportions devient déjà difficile à compter. Si l'on fabrique et teste chaque

combinaison une par une, une vie entière ne suffit pas. L'intelligence artificielle réduit à l'avance ce vaste ensemble de candidats.

Le rôle de l'intelligence artificielle ressemble à celui d'un guide. Dans la montagne, un guide qui connaît le chemin indique les raccourcis. Mais atteindre le sommet revient finalement aux personnes qui marchent. Quand l'intelligence artificielle resserre la liste des candidats, les chercheurs les vérifient par l'expérience. Ce chapitre montre, à travers des exemples, comment cette collaboration se réalise.

4.1 Exigences des environnements aérospatiaux extrêmes et limites structurales des alliages à haute température

Ce que traite cette section

Cette section commence par décrire la dureté de l'environnement thermique rencontré par les fusées et les véhicules de rentrée. Elle examine ensuite où les superalliages à base de nickel, utilisés depuis longtemps, atteignent leurs limites. Enfin, elle explique pourquoi les alliages réfractaires à haute entropie apparaissent comme une nouvelle solution possible.

En termes simples, cette section sert à définir le problème. Il faut connaître précisément le problème pour comprendre l'utilité des outils d'intelligence artificielle présentés ensuite. C'est pourquoi l'accent est mis d'abord sur la situation, plus que sur les chiffres.

La chambre de combustion d'une fusée est un récipient soumis à une pression très élevée. Le carburant et l'oxydant y brûlent ensemble et créent une forte pression. Cette pression atteint plusieurs dizaines de mégapascals. La pression d'un pneu de voiture est d'environ 0,2 mégapascal. Une chambre de combustion de fusée supporte une pression des centaines de fois plus élevée.

Les gaz produits dans la chambre de combustion sortent par la tuyère. Leur température monte jusqu'à plusieurs milliers de degrés selon les matériaux. Toutefois, la température du métal de la paroi n'atteint pas celle des gaz. Le refroidissement et la couche limite bloquent une partie de la chaleur et maintiennent le métal à une température plus basse. Pourtant, la quantité de chaleur reçue par la paroi reste énorme. Si la paroi ne la supporte pas, elle fond, un trou apparaît, et le moteur devient inutilisable.

La chaleur ne survient pas une seule fois. Le moteur s'allume et s'éteint à répétition. Il chauffe brusquement à l'allumage et refroidit brusquement à l'arrêt. Ces montées et descentes de température s'appellent un choc thermique (Thermal shock). Le principe est le même que lorsqu'un verre se fissure si l'on y verse soudain de l'eau chaude.

À cela s'ajoutent les forces mécaniques. Quand un métal chaud subit une force pendant longtemps, il s'allonge lentement. Ce phénomène s'appelle le fluage (Creep). Il ressemble à une barre de caramel mou qui s'affaisse d'elle-même quand on la tient longtemps. À haute température, ce fluage et les charges répétées agissent ensemble et usent le matériau.

Les superalliages à base de nickel sont des métaux qui ont longtemps résisté à ces environnements. Leur résistance vient de leur microstructure. Dans la phase gamma (γ), qui forme la matrice, de petites particules appelées gamma prime (γ') sont serrées les unes contre les autres. Ces particules jouent le rôle d'obstacles qui empêchent la déformation du métal. C'est comme de petits morceaux de noix dans une pâte, qui empêchent la pâte de s'étirer facilement.

Selon les superalliages, la nature de ces obstacles varie légèrement. L'Inconel 718, riche en niobium (Nb), en est un exemple. Dans cet alliage, une phase appelée gamma double prime (γ'' , Ni_3Nb) contribue davantage à la résistance que la phase gamma prime. Même si le nom de l'obstacle change, le principe est le même. De petites particules empêchent la déformation et durcissent le métal.

Une fusée utilise des métaux différents selon les emplacements. Dans une chambre de combustion dont la paroi est refroidie par le carburant, on emploie souvent des alliages de cuivre. C'est parce qu'ils évacuent très bien la chaleur. Les superalliages à base de nickel servent aux pièces exposées longtemps à de hautes températures, comme les turbines. Pour les cols de tuyère encore plus chauds ou les surfaces de rentrée, les métaux réfractaires ou les céramiques deviennent des candidats. Ce chapitre porte, parmi eux, sur de nouveaux métaux destinés aux zones les plus chaudes.

Le problème apparaît quand la température augmente encore. Au-delà d'environ 1 150 degrés, ces petites particules grossissent ou se déforment. On appelle cela le grossissement microstructural. Si les obstacles disparaissent, le métal s'allonge facilement et sa résistance chute rapidement. Comme le point de fusion d'un superalliage à base de nickel est d'environ 1 350 degrés, sa limite effective d'utilisation est donc bien inférieure à son point de fusion.

Des phases nuisibles peuvent aussi se former. Quand le métal reste longtemps à haute température, les atomes se rassemblent selon certains ordres et forment des masses dures et cassantes. On appelle ces phases des phases nuisibles. Lorsqu'elles apparaissent, le métal se casse facilement. Les meilleurs superalliages sont conçus pour empêcher la formation de ces phases.

Ces problèmes rendent le refroidissement nécessaire dans les superalliages à base de nickel. Dans les moteurs réels, de petits canaux sont aménagés à l'intérieur des pièces. Du carburant froid y circule pour refroidir la paroi. Grâce à ce refroidissement, les pièces sont utilisées à une température inférieure à leur point de fusion. Mais ces canaux rendent la structure plus complexe et augmentent aussi le poids.

L'objectif des alliages réfractaires à haute entropie est de réduire ce refroidissement. Si le matériau lui-même résiste à des zones plus chaudes, le besoin de refroidissement diminue. Quand le refroidissement diminue, la structure devient plus légère et plus simple. Les chercheurs visent donc des matériaux capables de résister sans refroidissement au-delà de 1 400 degrés.

C'est pourquoi on a cherché une voie tout à fait différente. L'idée est de construire l'ossature avec des métaux dont le point de fusion est lui-même élevé. Le niobium (Nb), le molybdène (Mo), le tantale (Ta) et le tungstène (W) appartiennent à cette catégorie. Leur point de fusion dépasse largement 2 000 degrés. On appelle ces métaux des métaux réfractaires (Refractory metal).

Un alliage réfractaire à haute entropie est un alliage qui mélange plusieurs de ces métaux réfractaires en quantités similaires. Des études récentes rapportent que ces alliages présentent, même lors d'essais de compression à 1 600 degrés, une résistance supérieure à celle des superalliages à base de nickel. Ils sont donc considérés comme de nouveaux candidats pour la propulsion des fusées, les bords d'attaque des véhicules hypersoniques et les boucliers thermiques de rentrée.

Mais ils n'ont pas que des avantages. Ces alliages ont tendance à se casser facilement à température ambiante. C'est ce qu'on appelle une faible ductilité. À haute température, lorsqu'ils rencontrent l'oxygène, leur surface subit aussi une oxydation qui s'effrite. Ces deux points sont des problèmes à résoudre absolument avant une utilisation dans de vraies pièces. L'intelligence artificielle sert précisément à accélérer leur résolution.

Examinons un peu plus le problème de l'oxydation. Les alliages riches en tungstène ou en molybdène réagissent fortement avec l'oxygène à haute température. La couche d'oxyde de surface n'adhère pas fermement et tombe comme une poudre. Cette oxydation qui s'effrite s'appelle l'oxydation pestifère (Pest oxidation). Ce nom vient de l'idée qu'elle ronge la surface comme un parasite qui ronge les céréales.

La solution consiste à former une couche d'oxyde protectrice. Si l'on ajoute une quantité appropriée d'aluminium ou de chrome, une couche d'oxyde dense se forme à la surface. Cette couche empêche

l'oxygène de pénétrer à l'intérieur. Cela ressemble à une pellicule attachée au fond d'une casserole, qui protège au contraire le métal intérieur. Le cœur de la conception consiste à savoir combien en ajouter et de quelle manière pour obtenir une bonne couche.

La compatibilité avec les revêtements est elle aussi importante. On applique généralement un revêtement antioxydation sur l'alliage. Le problème est que le métal et le revêtement se dilatent différemment selon la température. Le degré de cette dilatation s'appelle le coefficient de dilatation thermique. Si les coefficients de dilatation thermique des deux matériaux sont très différents, l'interface se fissure quand la température monte. L'alliage doit donc être conçu non seulement pour sa résistance, mais aussi pour sa compatibilité avec le revêtement.

Ainsi, un alliage de chemise de tuyère doit satisfaire plusieurs conditions à la fois. Il lui faut un point de fusion élevé, une faible densité, une résistance à haute température, une résistance à l'oxydation et une bonne compatibilité avec le revêtement. Ces conditions se contredisent souvent. Il est difficile de résoudre un tel problème imbriqué par l'expérience seule. L'intelligence artificielle intervient comme un outil qui organise rapidement ce problème complexe.

4.2 Modélisation physique des quatre effets de base et thermodynamique des équilibres de phases

Ce que traite cette section

Cette section présente le premier cadre explicatif qui a servi à comprendre pourquoi les alliages à haute entropie sont particuliers. Au début de ce domaine, les chercheurs ont mis en avant quatre effets. On les appelle les quatre effets de base. Il s'agit de l'entropie configurationnelle, de la distorsion du réseau, de la diffusion lente et de l'effet cocktail.

Ces quatre effets ne sont pas des lois physiques établies, mais plutôt des hypothèses initiales. Comme nous le verrons plus loin, la diffusion lente et la stabilisation d'une phase unique par une entropie élevée n'ont pas été démontrées comme des lois générales. Il faut pourtant connaître ce cadre pour comprendre ce que l'intelligence artificielle cherche à calculer. Nous les expliquerons un par un à partir d'exemples de la vie quotidienne.

Commençons par préciser ce qu'est un alliage à haute entropie. Un alliage ordinaire ajoute une petite quantité d'un autre métal à un métal principal. Dans l'acier, le fer est l'élément principal et le carbone est présent en petite quantité. Les alliages à haute entropie fonctionnent autrement. Ils mélangent cinq métaux ou plus en quantités similaires. Il y a donc plusieurs éléments principaux.

Ce concept a été présenté en 2004 par deux équipes de recherche distinctes. Il s'agit de l'équipe taïwanaise de Yeh et de l'équipe britannique de Cantor. Elles ont montré qu'il était possible de fabriquer un métal stable sans dépendre d'un seul élément principal. Cette découverte a ouvert la voie à une nouvelle conception des alliages.

Le premier principe est l'entropie configurationnelle (Configurational entropy). L'entropie est une grandeur liée au nombre de façons de mélanger les choses. Plus il y a de manières de ranger des objets dans un casier, plus le désordre est grand. Quand plusieurs métaux sont mélangés en quantités similaires, les façons de disposer les atomes deviennent très nombreuses. Ce grand désordre aide le métal à rester dans un état mélangé en une seule masse.

Cet état mélangé s'appelle une solution solide (Solid solution). Une solution solide est un état dans lequel plusieurs éléments sont répartis uniformément dans un même réseau cristallin. Elle ressemble au sucre qui se dissout dans l'eau pour former un seul liquide. Quand l'entropie est élevée, elle empêche les

éléments de se regrouper séparément pour former des composés durs. C'est pourquoi les alliages à haute entropie ont tendance à former des solutions solides plutôt que des composés.

Le deuxième principe est la distorsion du réseau (Lattice distortion). Les atomes métalliques ont des tailles différentes. Quand de gros atomes et de petits atomes se mélangent dans un même réseau, celui-ci se déforme de façon irrégulière. Cela ressemble à un mur construit avec des pierres de tailles différentes au lieu de briques régulières. Ce réseau déformé devient une barrière contre la déformation.

La déformation se produit lorsqu'un petit défaut appelé dislocation (Dislocation) glisse dans le réseau. Quand le réseau est irrégulier, la dislocation glisse difficilement. C'est comme tirer une charrette sur un terrain de gravier. Ainsi, les alliages dont la distorsion du réseau est importante s'allongent peu et sont durs.

Le troisième principe est la diffusion lente (Sluggish diffusion). La diffusion est le mouvement par lequel les atomes changent de place. Dans un alliage à haute entropie, chaque atome a un environnement voisin différent. Certains emplacements sont faciles à quitter, d'autres sont difficiles. On considère que cette irrégularité ralentit en moyenne le déplacement des atomes.

Si les atomes se déplacent lentement, la microstructure change peu, même à haute température. Les grains cristallins peuvent donc croître lentement et mieux résister au fluage. Cependant, cet effet n'apparaît pas toujours avec force dans tous les alliages à haute entropie. La vitesse réelle de diffusion dépend de la combinaison des éléments, de la température et de la structure cristalline. Les recherches récentes traitent donc cet effet non comme une loi générale, mais comme une propriété à vérifier selon les cas.

Le quatrième principe est l'effet cocktail (Cocktail effect). Un cocktail est une boisson qui crée une saveur nouvelle en mélangeant plusieurs ingrédients. La somme des goûts de chaque ingrédient n'est pas identique au goût obtenu après mélange. Il en va de même pour les métaux. Lorsque plusieurs éléments sont présents ensemble, des propriétés difficiles à expliquer par la simple addition des propriétés de chaque élément apparaissent.

Ces propriétés non linéaires apparaissent dans la résistance mécanique, la résistance à la corrosion et la ténacité. Le problème est qu'il est difficile pour l'être humain de connaître à l'avance ces effets de combinaison. Le nombre de combinaisons d'éléments est trop grand. L'intelligence artificielle sert d'outil pour trouver dans les données ces effets de combinaison cachés.

Ces quatre principes se rattachent directement aux matériaux des fusées. L'entropie configurationnelle aide la microstructure à ne pas se séparer à haute température. La distorsion du réseau augmente la résistance. La diffusion lente peut être favorable au fluage. L'effet cocktail apporte des avantages inattendus, comme la résistance à l'oxydation. Les quatre principes doivent agir ensemble pour résister aux milieux extrêmes.

Toutefois, ces principes ne sont pas une clé universelle. Ils apparaissent fortement dans certaines combinaisons et faiblement dans d'autres. C'est pourquoi, même si l'on connaît les principes, il faut vérifier chaque composition réelle une par une. Les principes indiquent la direction, et la vérification revient au calcul et à l'expérience. L'intelligence artificielle accélère fortement cette vérification.

Ces quatre principes convergent finalement vers une seule question. Quelle composition restera stable sous forme d'une seule phase ? La discipline qui répond à cette question est la thermodynamique des équilibres de phases. Dans les deux sous-sections suivantes, nous examinons deux indicateurs qui aident ce jugement.

4.2.1 Le paramètre oméga, qui mesure la possibilité de rester en une seule phase

La thermodynamique est la science qui traite de l'énergie et de la stabilité. La stabilité d'un état se juge par l'énergie libre (Free energy). L'état dont l'énergie libre est basse est plus stable. Comme l'eau coule d'un lieu élevé vers un lieu bas, la matière tend à aller vers l'état où son énergie libre est basse.

L'énergie libre est déterminée par deux valeurs. L'une est l'enthalpie (Enthalpy). L'enthalpie est une valeur liée au fait que les atomes se plaisent ou non entre eux. Les atomes qui s'accordent bien cherchent à se mélanger, tandis que ceux qui ne s'apprécient pas cherchent à se séparer. L'autre est l'entropie vue plus haut. L'entropie représente le désordre du mélange.

Le rapport de force entre les deux change avec la température. Plus la température est élevée, plus la force de l'entropie devient grande. C'est comme des personnes qui se dispersent plus librement dans une pièce chaude. Ainsi, à haute température, une solution solide désordonnée devient plus facilement stable. C'est pour cette raison qu'un alliage à haute entropie reste facilement en une seule phase à température élevée.

L'entropie configurationnelle augmente lorsque les éléments sont mélangés en proportion équimolaire. La proportion équimolaire signifie que chaque élément est ajouté en même quantité. Si l'on mélange cinq éléments en quantités égales, l'entropie configurationnelle atteint sa valeur maximale. Plus le nombre d'éléments augmente, plus cette valeur augmente. Le nom d'alliage à haute entropie vient de cette propriété de grande entropie configurationnelle.

Le paramètre oméga est une valeur qui permet d'estimer simplement la possibilité d'une solution solide monophasée. Cette valeur examine trois éléments à la fois. Ce sont la température moyenne de fusion, l'entropie configurationnelle et l'ampleur de l'enthalpie de mélange. Si l'influence favorable de l'entropie dépasse l'influence défavorable de l'enthalpie, la valeur oméga augmente. Lorsque l'oméga est grand, on considère qu'il est plus facile de rester en une seule phase.

On vérifie aussi la différence de taille atomique. Si les tailles atomiques diffèrent trop, le réseau ne tient pas et se sépare. La différence de taille doit donc rester inférieure à une certaine valeur pour qu'une solution solide monophasée se forme facilement. Les chercheurs utilisent une règle empirique selon laquelle une solution solide monophasée se forme lorsque l'oméga est grand et que la différence de taille est petite.

Cette règle est pratique, mais ce n'est pas un outil définitif. Un alliage réel est influencé par l'ordre local, la vitesse de refroidissement, les impuretés et le traitement thermique. Même avec la même composition, la microstructure varie selon la méthode de fabrication. La règle de l'oméga sert donc seulement au premier tri.

Le jugement précis revient à des méthodes qui demandent plus de calculs. La méthode représentative est CALPHAD. CALPHAD est une méthode qui calcule les équilibres de phases en accumulant des données sur l'énergie libre de plusieurs phases. À cela s'ajoutent les calculs de théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT) et les expériences. La théorie de la fonctionnelle de la densité est une méthode de calcul quantique qui calcule l'énergie à partir du comportement des électrons.

Transformons le rapport de force entre enthalpie et entropie en exemple de la vie quotidienne. Supposons que des garçons et des filles soient assis ensemble dans une classe. La force qui pousse les groupes d'amis à se rassembler ressemble à l'enthalpie. La force qui pousse à mélanger librement les places ressemble à l'entropie. Pendant un moment calme, les groupes se rassemblent. Pendant un moment animé, les élèves se mélangent librement. C'est comme la force de mélange qui devient plus forte lorsque la température augmente.

L'intelligence artificielle rend ce processus plus rapide. Des indicateurs simples comme l'oméga servent de caractéristiques d'entrée pour l'intelligence artificielle lorsqu'il existe beaucoup de données. L'intelligence artificielle examine ces caractéristiques et trie rapidement les compositions susceptibles de rester en une seule phase. Seuls les candidats ainsi réduits sont ensuite vérifiés par CALPHAD et par l'expérience. Cette collaboration est la clé pour traiter un vaste espace de compositions.

Les recherches récentes ont fortement amélioré cette précision de prédiction. Lorsque plusieurs caractéristiques physiques sont intégrées ensemble, la précision de prédiction des phases passe d'environ 70 % à plus de 90 %. À ce niveau, on peut trier rapidement plus d'un million de compositions. L'intelligence artificielle réduit donc beaucoup le travail humain. Le temps et les ressources sont concentrés sur le petit nombre de candidats ainsi filtrés.

4.2.2 Estimer la structure cristalline avec la concentration en électrons de valence

Cette sous-section traite d'un indicateur qui permet d'estimer la structure cristalline d'un alliage. Cet indicateur est la concentration en électrons de valence (Valence Electron Concentration, VEC). Elle désigne le nombre moyen d'électrons externes. Commençons par préciser ce qu'est une structure cristalline. Les atomes métalliques ne se placent pas au hasard. Ils s'empilent selon un réseau régulier. C'est comme des briques empilées selon une règle. Les propriétés changent selon la manière d'empiler.

Deux structures sont importantes pour les matériaux des fusées. L'une est la structure cubique centrée (Body-Centered Cubic, BCC). C'est un arrangement dans lequel des atomes se trouvent aux huit sommets d'un cube et en son centre. L'autre est la structure cubique à faces centrées (Face-Centered Cubic, FCC). C'est un arrangement dans lequel des atomes se trouvent aux huit sommets et au centre des six faces.

Ces deux structures ont des propriétés différentes. La structure cubique centrée est souvent favorable à la résistance à haute température. En revanche, elle tend à présenter une fragilité qui la fait se rompre facilement à température ambiante. La structure cubique à faces centrées présente souvent une bonne ductilité, c'est-à-dire une bonne capacité à s'étirer. Si l'on sait à l'avance quelle structure apparaîtra, la conception devient plus facile.

La concentration en électrons de valence est un indicateur qui permet d'estimer cette structure. Les électrons de valence sont les électrons situés à l'extérieur de l'atome. Ces électrons participent aux liaisons. La concentration en électrons de valence est la moyenne, pondérée par la proportion de composition, du nombre d'électrons externes fournis par chaque élément. Cette valeur indique la direction de la structure cristalline.

La règle empirique est la suivante. Si cette valeur est environ inférieure à 6.87, la structure cubique centrée est stable. Si elle est supérieure à 8, la structure cubique à faces centrées est stable. Entre les deux, les deux structures se mélangent. Les alliages à haute entropie réfractaires ont souvent une structure cubique centrée, car cette valeur est basse. Le célèbre alliage de Cantor a une structure cubique à faces centrées, car cette valeur est élevée.

L'utilité de cette règle se voit aussi dans les recherches récentes en intelligence artificielle. Une préétude publiée au début de 2026 en est un exemple. Une préétude est une recherche initiale qui n'a pas encore été évaluée par les pairs. Cette étude a prédit le point de fusion d'alliages à haute entropie réfractaires. Elle n'a pas introduit directement la structure cristalline, mais seulement des caractéristiques obtenues à partir de la composition élémentaire. Des caractéristiques physiquement interprétables, comme la concentration en électrons de valence, ont beaucoup contribué à la prédiction. Les connaissances physiques accumulées par l'être humain et les caractéristiques sélectionnées par l'intelligence artificielle se rejoignent ainsi.

Cet exemple montre deux choses. La première est que des indicateurs simples restent utiles aujourd'hui. La seconde est que l'intelligence artificielle peut apprendre sans s'écarter de la physique. Ces deux idées traversent tout ce chapitre.

Précisons ici un peu plus pourquoi la structure détermine les propriétés. La déformation se produit lorsque les dislocations glissent à l'intérieur du réseau. La structure cubique à faces centrées possède des plans où les atomes sont densément disposés, si bien que les dislocations passent de manière fluide. Elle s'étire donc bien et se rompt difficilement. La structure cubique centrée ne possède pas de tels plans denses. Ce n'est pas parce que le nombre de chemins de glissement est faible, mais parce que la barrière d'énergie à franchir pour qu'une dislocation passe est élevée. Cette barrière est sensible à la température. C'est pourquoi la structure cubique centrée se rompt facilement à température ambiante, tandis que, lorsque la température augmente, les dislocations se déplacent plus facilement et la résistance se maintient.

Cette différence se prolonge directement dans le choix des matériaux de fusée. Pour une paroi interne de tuyère, la résistance à haute température est prioritaire. Les alliages à haute entropie réfractaires de type cubique centré deviennent donc des candidats. En contrepartie, ils portent aussi la faiblesse de la fragilité à température ambiante. Pour réduire cette faiblesse, il faut ajuster finement la composition. La concentration en électrons de valence devient le premier compas de cet ajustement.

Cependant, la règle de la concentration en électrons de valence a aussi ses limites. Les frontières de 6.87 et de 8 sont des valeurs empiriques issues d'un groupe particulier d'alliages de métaux de transition. Elles ne s'appliquent pas telles quelles à d'autres groupes d'alliages. Cette valeur est une moyenne et ne reflète donc pas l'environnement local. Même avec la même valeur moyenne, la structure réelle peut varier selon la combinaison des éléments. De plus, cette règle n'indique pas quand apparaissent des composés intermétalliques durs et cassants. La phase de Laves et la phase sigma en sont des exemples. Si de telles phases se mélangent, l'alliage s'affaiblit. Cet indicateur sert donc aussi au premier tri, puis une vérification par calcul précis est nécessaire. L'intelligence artificielle rend ce tri beaucoup plus rapide et beaucoup plus large.

4.3 Extraire les caractéristiques des matériaux dans les articles scientifiques

L'intelligence artificielle ne peut pas voir les métaux avec ses yeux. Elle ne connaît les matériaux qu'à travers des caractéristiques transformées en nombres. Ces caractéristiques sont appelées descripteurs (Descriptor). Cette section examine la manière d'extraire ces caractéristiques des textes d'articles scientifiques. Commençons par mesurer l'ampleur de l'espace de composition. Lorsque l'on mélange cinq éléments ou plus et que l'on modifie chaque proportion, le nombre de cas explose. Si deux ingrédients peuvent être ajoutés au café, il n'existe que quelques combinaisons. S'il y a dix ingrédients, les combinaisons deviennent difficiles à compter. Les alliages multicomposants se trouvent exactement dans cette situation.

Il est impossible de parcourir tout cet espace par l'expérience. Fabriquer et tester un alliage demande du temps et de l'argent. Les calculs CALPHAD prennent aussi du temps pour chaque composition. Il faut donc un guide qui réduise rapidement ce vaste espace. Ce guide est l'intelligence artificielle.

Pour utiliser l'intelligence artificielle, il faut transformer les matériaux en nombres. Le descripteur est ce nombre. Le rayon atomique, l'électronégativité, le point de fusion et le nombre d'électrons externes sont des descripteurs représentatifs. L'électronégativité est la force avec laquelle un atome attire les électrons. Ces valeurs sont calculées selon la composition, puis introduites dans l'intelligence artificielle.

Le problème est que ces nombres ne suffisent pas. Même avec la même composition, les propriétés varient beaucoup selon la manière dont le matériau a été fabriqué. La température de traitement

thermique, le temps de maintien et la méthode de refroidissement modifient la microstructure. Ces informations de procédé sont difficiles à enfermer dans un seul nombre. Or elles sont écrites en texte dans les articles.

Le descripteur dérivé du langage naturel (Natural language-derived descriptor) comble cette lacune. Il s'agit d'une valeur de caractéristique obtenue lorsque l'intelligence artificielle lit les phrases d'un article et les transforme en nombres. En somme, elle convertit un texte lu par l'être humain en nombres lus par la machine. Des recherches récentes ont intégré de cette manière jusqu'aux descriptions de procédés dans les caractéristiques.

Une préétude publiée en 2026 en donne un bon exemple. Il s'agit d'un résultat d'une équipe de recherche de l'Université d'État de Pennsylvanie, aux États-Unis. Les chercheurs ont introduit dans un grand modèle de langage des phrases décrivant un procédé de traitement thermique. À partir de la représentation numérique de ces phrases, ils ont pu retrouver presque tels quels les paramètres de procédé d'origine. En utilisant cette représentation comme caractéristique, ils ont amélioré d'environ 20 % la prédiction de la dureté d'un alliage. Cette étude est encore une recherche initiale qui n'a pas été évaluée par les pairs.

La fouille de la littérature consiste à rassembler ces caractéristiques à grande échelle. Elle extrait automatiquement, dans de nombreux articles sur les métaux, les températures de transformation de phase, les limites de solubilité, la résistance mécanique et les valeurs de ductilité. Autrefois, les personnes construisaient les tableaux à la main. Aujourd'hui, les grands modèles de langage lisent les phrases et remplissent les tableaux. Les données ainsi réunies deviennent la base de l'apprentissage de l'intelligence artificielle.

Certaines recherches ont aussi utilisé directement des modèles de langage pour prédire les propriétés. C'est un résultat publié dans une revue scientifique en 2025. Cette étude a utilisé une architecture de modèle de langage appelée transformeur. Le transformeur est une intelligence artificielle qui lit les relations entre les mots d'une phrase. Il a traité la composition et les conditions d'un alliage comme un texte pour en prédire les propriétés. C'est un cas où une technologie issue du traitement du langage est passée à la recherche sur les matériaux.

Récemment, une étude a aussi construit une base de données sur les alliages à haute entropie à l'aide de grands modèles de langage. C'est un résultat publié dans une revue scientifique en 2026. Cette base de données organise automatiquement les compositions et les propriétés extraites d'articles scientifiques. Elle a fortement accéléré un travail qui prenait longtemps à la main. Les données ainsi accumulées deviennent le terreau des modèles prédictifs que nous verrons dans la section suivante.

Cette méthode a aussi des limites. Les conditions de mesure et les modes de notation varient selon les articles. Si la machine lit mal une phrase, des valeurs fausses se mêlent aux données. Les données recueillies doivent donc être revues par un humain. Aujourd'hui, la norme est une coopération où l'intelligence artificielle collecte les données et où l'humain les vérifie.

La qualité des données détermine la qualité des prédictions. Si l'on apprend à partir de données fausses, on obtient des réponses fausses. Si le plan est faux, même un menuisier habile ne peut pas bâtir une maison solide. L'étape de collecte des données est donc aussi importante que la prédiction. De bonnes données sont la base d'une bonne intelligence artificielle.

Récemment, l'intelligence artificielle élargit aussi elle-même les règles. Une étude publiée en 2026 dans une revue scientifique a présenté un cadre d'intelligence artificielle enrichi par les connaissances. Cette étude s'est affranchie de la contrainte selon laquelle les éléments doivent être mélangés en quantités égales. Elle a conçu un alliage à haute entropie monophasé en faisant varier librement les proportions

des éléments selon l'objectif. C'est un résultat obtenu en ajoutant à l'intelligence artificielle les connaissances métallurgiques accumulées par les humains.

Cette évolution montre la coopération entre l'intelligence artificielle et les connaissances humaines. Si l'on utilise seulement l'intelligence artificielle, elle devient instable hors des données. Si l'on utilise seulement les règles humaines, il est difficile de parcourir un vaste espace. En combinant les deux, chacun compense les faiblesses de l'autre. La conception devient solide lorsque l'exploration de la littérature et l'enrichissement par les connaissances avancent ensemble.

Le lien avec CALPHAD est aussi important. L'intelligence artificielle peut imiter rapidement les calculs CALPHAD ou choisir les prochains candidats à calculer. Si l'on relie les données recueillies dans la littérature, les calculs CALPHAD, la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et les expériences, la conception des candidats s'accélère. Ce pipeline intégré est la méthode concrète pour traiter un vaste espace de compositions.

4.4 Les réseaux de neurones graphiques pour représenter les alliages désordonnés

Voyons comment l'intelligence artificielle représente le désordre des alliages à haute entropie. L'outil central est le réseau de neurones graphique (Graph Neural Network, GNN). C'est une méthode qui transforme un matériau en dessin fait de points et de lignes pour l'apprentissage. Il faut d'abord préciser ce qu'est un graphe. Un graphe est un dessin qui représente des relations par des points et des lignes. Un plan de métro est un graphe. Les stations sont les points et les voies sont les lignes. Un cristal peut aussi être dessiné sous forme de graphe. Les atomes sont les points et les liaisons entre atomes sont les lignes.

Le réseau de neurones graphique lit ce dessin et prédit les propriétés du matériau. Chaque point contient les informations d'un atome. Chaque ligne contient la distance et la direction entre deux atomes. Le réseau de neurones comprend le matériau en faisant échanger des informations entre points voisins. Cet échange d'informations s'appelle le passage de messages (Message passing). C'est comme comprendre l'ambiance de toute une classe en échangeant des billets avec son voisin.

Cette méthode convient bien aux monocristaux idéaux. Un monocristal est un cristal dans lequel chaque site est occupé par un seul élément. Les règles y sont nettes, comme dans un cristal de sel. Les réseaux de neurones graphiques cristallins existants ont été construits sur cette hypothèse. Le calcul est propre lorsque l'on place un seul élément sur chaque point.

Le problème est que les alliages à haute entropie ne sont pas ainsi. Dans ces alliages, plusieurs éléments se mélangent avec une certaine probabilité sur un même site. Un site peut être du niobium, du molybdène ou du tantale. C'est ce qu'on appelle l'occupation fractionnaire (Fractional occupancy). C'est un état dans lequel un seul site possède plusieurs possibilités en même temps.

Il existe aussi un ordre local à courte distance (Short-Range Order, SRO). Les atomes ne se mélangent pas de façon totalement arbitraire. Certains éléments aiment être voisins, tandis que d'autres s'évitent. Cette préférence à courte distance influe fortement sur les propriétés. Les modèles existants ne peuvent pas contenir cet ordre subtil.

Le réseau de neurones graphique cristallin fractionnaire est une tentative pour résoudre ce problème. L'idée suivie dans cette direction est la suivante. On place sur chaque point non pas un seul élément, mais un vecteur de composition. Un vecteur de composition est une liste de nombres indiquant la probabilité que chaque élément se trouve à ce site. Par exemple, un site peut être représenté comme 25

pour cent de niobium, 25 pour cent de molybdène et 50 pour cent de tantale. Cette méthode contient naturellement l'occupation fractionnaire.

Ce que l'étude préliminaire qui a donné ce nom a réellement montré est limité et clair. Cette étude a prédit l'énergie d'un cristal en introduisant à la fois un environnement local d'environ 16 atomes et la fraction élémentaire de l'ensemble de l'alliage. C'est le résultat d'un apprentissage sur environ mille structures. Elle n'a pas ajusté en une seule fois l'ordre à courte distance, le point de fusion, l'enthalpie de mélange et la résistance à haute température. Prédire ensemble ces propriétés est une direction à explorer, et non un résultat déjà acquis. La méthode qui ajoute aux lignes des informations sur les paires d'éléments afin d'inclure l'ordre à courte distance en est elle aussi au stade de proposition.

Il faut préciser comment le passage de messages mène à l'apprentissage. Au début, chaque point ne connaît que ses propres informations. Après un échange d'informations, il connaît aussi ses voisins. En répétant plusieurs fois ce processus, il connaît des zones plus éloignées. Les propriétés de l'ensemble du matériau sont prédites à partir de ces informations élargies. Si la prédiction s'écarte de la valeur réelle, les valeurs du réseau de neurones sont corrigées. En répétant cette correction un très grand nombre de fois, le modèle devient plus intelligent.

Prédire plusieurs propriétés avec un seul modèle est aussi un avantage. C'est ce qu'on appelle la prédiction multiobjectif. Le point de fusion et la résistance sont liés. Les informations obtenues en apprenant une propriété aident à prédire une autre propriété. C'est comme approfondir sa compréhension en étudiant plusieurs matières ensemble.

Cependant, cette direction en est encore à ses débuts. Le réseau de neurones graphique cristallin fractionnaire n'a été proposé que récemment dans une étude préliminaire. Les grandes cellules, l'ordre à courte distance complexe et les historiques réels de traitement thermique restent des problèmes difficiles. Les prédictions de ce modèle doivent donc être vérifiées par l'expérience et par des simulations atomiques.

Par ailleurs, d'autres recherches d'intelligence artificielle sur l'ordre à courte distance augmentent rapidement. Une étude publiée en 2025 dans une revue scientifique a comparé des méthodes pour reproduire l'ordre à courte distance avec un potentiel par apprentissage automatique. Un potentiel par apprentissage automatique est un outil qui calcule par intelligence artificielle les forces entre atomes. Cette étude a montré qu'une grande précision énergétique peut ne pas suffire à bien prédire les propriétés. Cela signifie que le choix des données d'apprentissage détermine la prédiction des propriétés.

La même année, une autre étude a accéléré les calculs de Monte Carlo au moyen de l'intelligence artificielle. Monte Carlo est une méthode de calcul qui trouve un état d'équilibre par des essais aléatoires. Cette étude a utilisé un modèle de substitution par intelligence artificielle pour révéler des nanostructures à l'échelle de plusieurs milliards d'atomes. Elle a ainsi ouvert la voie à l'observation à grande échelle de l'ordre fin dans les alliages à haute entropie. Le réseau de neurones graphique cristallin fractionnaire se développe lui aussi sur cette évolution.

Il faut voir pourquoi cette représentation du désordre est importante pour les matériaux de fusée. La résistance de la chemise de tuyère dépend de la manière dont les dislocations sont bloquées. L'ordre à courte distance modifie la difficulté du chemin que suivent les dislocations. Lorsque certains éléments se regroupent, ils bloquent plus fortement les dislocations. Ainsi, même pour une même composition, la résistance varie selon l'ordre à courte distance.

Cet ordre fin change selon la méthode de fabrication. Un refroidissement rapide fige le désordre. Un refroidissement lent permet aux atomes de prendre leur place et de former un ordre. La température et

la durée du traitement thermique changent aussi l'ordre. Il faut donc examiner non seulement la composition, mais aussi le procédé pour obtenir les propriétés visées.

L'intelligence artificielle sert à apprendre ces relations entremêlées. Elle relie d'un seul tenant la composition, le procédé, l'ordre et les propriétés. Il est difficile pour l'humain de traiter autant de variables en même temps. Si les données sont suffisantes, l'intelligence artificielle trouve ces liens. Le réseau de neurones graphique cristallin fractionnaire est une tentative pour contenir ces liens au niveau de l'arrangement atomique.

Cette direction en est encore à ses débuts. À ce stade, la précision des prédictions et la quantité de données sont toutes deux insuffisantes. Les prédictions s'amélioreront à mesure que les données expérimentales s'accumuleront et que les calculs deviendront plus rapides. Jusque-là, une procédure de vérification expérimentale des prédictions de l'intelligence artificielle est indispensable.

4.5 La dynamique moléculaire à grande échelle qui observe jusqu'à chaque atome

La méthode qui imite par ordinateur le mouvement de chaque atome s'appelle la dynamique moléculaire (Molecular Dynamics, MD). C'est un outil qui permet d'observer au niveau atomique le processus de rupture d'un métal. La clé pour porter ce calcul à très grande échelle est une intelligence artificielle appelée potentiel par neuroévolution (Neuroevolution Potential, NEP). Il faut d'abord voir pourquoi une grande échelle est nécessaire. La fissure d'un métal commence au niveau de quelques atomes. Cette petite ouverture grandit, s'étend aux frontières des grains cristallins et finit par rompre la structure. Pour comprendre ce processus, il faut observer ensemble le très petit et le relativement grand. On appelle ce type de phénomène un phénomène multiéchelle (Multi-scale).

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) traditionnelle permet difficilement de faire cela. Ce calcul est précis, mais il demande une grande quantité de calcul. Il est difficile de dépasser quelques centaines d'atomes. La microstructure réelle dans laquelle une fissure se propage contient plus de plusieurs dizaines de milliards d'atomes. Les seuls calculs quantiques précis ne permettent donc pas de voir l'image d'ensemble.

Les potentiels empiriques ont le problème inverse. Un potentiel est une règle qui calcule les forces agissant entre atomes. Un potentiel empirique est léger et rapide. Mais dans un alliage complexe contenant plus de cinq éléments, sa précision diminue. Chaque élément a un environnement voisin différent, et il ne peut pas contenir cette subtilité.

Il faut donc un outil qui combine seulement les avantages des deux méthodes. C'est un outil qui possède à la fois la précision du calcul quantique et la rapidité des règles empiriques. Ce rôle est rempli par le potentiel par apprentissage automatique. L'intelligence artificielle apprend à partir des données de calcul quantique et prédit les forces. Dans cette famille, le potentiel par neuroévolution est un outil fort par sa vitesse.

Il faut aussi préciser ce qu'est la dynamique moléculaire. Ce calcul applique les lois du mouvement de Newton à tous les atomes. Il détermine la force agissant sur chaque atome, puis le déplace pendant un temps très court. Ce processus est répété un très grand nombre de fois. On peut alors voir, comme dans un film, comment les atomes se déplacent au fil du temps.

4.5.1 Le potentiel par neuroévolution qui combine précision et vitesse

Le potentiel par neuroévolution est un outil qui combine deux idées. La première est le réseau de neurones. Un réseau de neurones est une intelligence artificielle qui apprend des règles à partir de données. La seconde est la stratégie évolutive. Une stratégie évolutive est une méthode qui crée plusieurs candidats, puis choisit les meilleurs et les améliore. C'est une méthode d'apprentissage qui imite la sélection naturelle.

Ce potentiel transforme d'abord l'environnement autour d'un atome en nombres. Il crée des caractéristiques à partir des distances entre un atome et ses voisins et des angles selon lesquels ils sont disposés. Ces caractéristiques sont introduites dans le réseau de neurones pour prédire l'énergie d'un atome. En additionnant l'énergie de tous les atomes, on obtient l'énergie totale. Puis, à partir de la variation de l'énergie, on obtient la force qui agit sur les atomes.

Il faut voir pourquoi on considère ensemble les distances et les angles. Avec les seules distances, on sait seulement à quel point les atomes sont proches les uns des autres. Avec les angles aussi, on sait sous quelle forme les atomes sont disposés. Même à distance identique, un arrangement triangulaire et un arrangement en ligne droite ont des propriétés différentes. Il faut donc introduire ensemble les distances et les angles pour représenter correctement l'environnement.

Cette méthode touche à la nature même de la liaison chimique. Les atomes se lient différemment selon leur environnement. Si les voisins sont serrés, la liaison est forte ; s'ils sont clairsemés, elle est faible. Le potentiel par neuroévolution apprend cette relation à partir des données. Grâce à la relation apprise, il estime rapidement l'énergie d'un nouvel arrangement.

L'avantage de cette méthode est de combiner précision et vitesse. Le réseau de neurones apprend une précision proche de celle du calcul quantique. Le calcul lui-même est aussi léger qu'une règle empirique. On obtient donc rapidement des forces précises. C'est la clé qui ouvre les calculs à grande échelle.

Le secret de cette vitesse réside dans l'unité de traitement graphique (Graphics Processing Unit, GPU). Ce dispositif a d'abord été conçu pour dessiner les images des jeux vidéo. Il excelle à colorer en même temps les très nombreux points d'une image. Cette capacité de traitement parallèle convient aussi très bien au calcul atomique. C'est parce qu'elle permet de calculer simultanément les forces d'un très grand nombre d'atomes.

Le potentiel par neuroévolution a été conçu pour bien fonctionner sur ce dispositif. Il s'utilise avec un programme pour unités de traitement graphique appelé GPUMD. Cette combinaison a été largement utilisée dans les recherches sur la conductivité thermique, les défauts et la déformation à haute température. Plus récemment, des études de suivi ont aussi rendu la méthode d'apprentissage plus rapide. Ces améliorations permettent des calculs plus grands.

Il faut aussi préciser le processus de création de ce potentiel. On calcule d'abord, avec la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), l'énergie et les forces de plusieurs arrangements atomiques. Ces valeurs deviennent le manuel de l'intelligence artificielle. L'intelligence artificielle affine ses prédictions en étudiant ce manuel. La stratégie évolutive choisit progressivement les valeurs dans la direction où les prédictions correspondent bien aux données. Une fois cet apprentissage terminé, un calculateur de forces rapide et précis est achevé.

L'apprentissage actif est aussi utilisé pendant l'apprentissage. L'intelligence artificielle repère elle-même les arrangements sur lesquels elle manque de confiance. Seuls ces arrangements sont choisis et recalculés avec la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les données ainsi obtenues sont réintroduites dans l'apprentissage. C'est une méthode intelligente qui couvre un large domaine avec peu de calculs.

Cependant, une réponse rapide n'est pas toujours une réponse juste. Un potentiel d'intelligence artificielle est précis dans le domaine qu'il a appris. Il peut se tromper pour une composition ou une température absente des données d'apprentissage. Dans un alliage à haute entropie, même un léger changement de combinaison d'éléments peut modifier fortement l'environnement. La représentativité des données d'apprentissage est donc plus importante que tout. Il faut une procédure distincte pour vérifier l'incertitude des prédictions.

4.5.2 Déformation et fissures vues par le calcul à grande échelle

1 billion est un nombre difficile à imaginer. Si l'on aligne 1 billion d'atomes, on obtient une taille proche d'une microstructure réelle. Cela signifie que l'on peut dessiner un échantillon à l'échelle du micromètre jusqu'à chaque atome. Dans un petit calcul, on ne voit qu'une fissure et quelques frontières. Dans un grand calcul, on voit de nombreuses frontières et de nombreux défauts s'influencer les uns les autres.

Une étude préliminaire publiée en 2026 a franchi ce seuil. Cette étude a calculé 1,6 billion d'atomes avec un potentiel neuroévolutif. Elle a utilisé ensemble environ 45 000 unités de calcul sur un nouveau superordinateur chinois. Ce que cette étude a montré, c'est l'échelle et la vitesse du calcul. Elle rapporte que le même calcul a été exécuté beaucoup plus vite que le précédent record. Ce n'est pas une étude qui a réellement produit, à cette échelle, une analyse des dislocations et des fissures dans un alliage à haute entropie. Démontrer l'ouverture d'une échelle et établir ce que l'on révèle à cette échelle sont deux questions différentes. Cette étude est encore un travail initial qui n'a pas été soumis à l'évaluation par les pairs.

Comparons brièvement ce que signifie ce chiffre. Autrefois, calculer 1 million d'atomes était déjà une grande affaire. Il y a quelques années, on a dépassé 100 millions, puis on est vite arrivé à 10 milliards. On dépasse maintenant 1 billion d'atomes. La taille que l'on peut calculer augmente rapidement. Toutefois, le calcul de 1 billion d'atomes est une démonstration symbolique qui pousse un très grand superordinateur jusqu'à ses limites. Dans la conception réelle des alliages, les calculs utilisés au quotidien portent sur quelques milliers à quelques centaines de milliers d'atomes. Les potentiels d'intelligence artificielle et les ordinateurs rapides tirent cette croissance.

L'avantage des grandes échelles se trouve dans les statistiques. Plus il y a d'atomes, plus on peut saisir des événements rares. Les germes de fissure apparaissent très rarement. Dans un petit calcul, on peut ne pas voir ces germes. Dans un grand calcul, on observe plusieurs germes ensemble. La prédiction se rapproche d'autant plus du réel.

Il faut d'abord voir pourquoi ce calcul est utile pour les matériaux de fusée. La microstructure réelle d'un revêtement interne de tuyère contient un nombre incalculable d'atomes. Il faut savoir ce qui se passe dans cette grande microstructure pour connaître la durée de vie. Un grand calcul donne une image proche de cette microstructure réelle. Il peut donc servir à estimer quelle composition tiendra longtemps.

La dynamique moléculaire à cette grande échelle peut, en principe, suivre trois types d'événements. Ce qui suit décrit les objectifs visés par cette méthode, et non les résultats déjà établis par la démonstration précédente. Le premier est la nucléation des dislocations. Une dislocation est un petit défaut par lequel la déformation commence. On suit en temps réel comment une dislocation apparaît et comment elle glisse dans un réseau cubique centré. Dans un alliage à haute entropie, les fluctuations locales de composition accrochent les dislocations. Cet accrochage est le principe qui augmente la résistance.

Le deuxième est le glissement des joints de grains. Un joint de grains est la frontière entre des grains cristallins. À haute température, lorsqu'une force s'exerce, cette frontière glisse. Un grand calcul mesure

à l'échelle atomique ce glissement et l'agrégation des vides. Ce comportement détermine la durée de vie au fluage.

Le troisième est la propagation des fissures. La pointe de fissure est l'extrémité avant de la fente. C'est là que l'arrangement des atomes change et que la déformation se produit. Un grand calcul observe comment la fissure croît et comment elle s'arrête. Il fournit des indices pour estimer quelle composition résiste bien aux fissures.

Ces trois événements sont liés entre eux. Les dislocations s'accumulent et se concentrent vers les joints de grains. Les joints de grains glissent et des vides se forment. Ces vides se relient et deviennent une fissure. Dans un petit calcul, ce lien est difficile à voir. Dans un grand calcul, on peut saisir d'un seul regard le processus du début à la fin.

Il faut voir pourquoi l'observation de ce lien est utile. La durée de vie d'un matériau se décide à son maillon faible. Une chaîne se rompt au maillon faible. Si l'on sait quelle étape cède en premier, on peut la renforcer. Le calcul à grande échelle aide à trouver à l'avance où se trouve ce maillon faible.

Cette information est utile pour la recherche sur les revêtements internes de tuyères de fusée. Un revêtement interne de tuyère subit à la fois des gaz à haute température et des chocs thermiques. Si l'on estime avant l'expérience quelle composition tiendra longtemps, on gagne du temps. Le calcul à grande échelle joue le rôle d'une balance qui réduit le nombre de candidats.

Toutefois, ce calcul comporte aussi des conditions. L'exactitude du résultat dépend de la qualité du potentiel d'intelligence artificielle. Dans une situation que le potentiel n'a pas apprise, le calcul se trompe aussi. Les résultats des grands calculs doivent donc être vérifiés par des calculs précis à plus petite échelle et par l'expérience. Une grande échelle et une réponse correcte sont deux questions différentes.

4.6 Intelligence artificielle pour concevoir des métaux sans contredire les lois physiques

L'apprentissage fondé uniquement sur les données peut produire des prédictions dangereuses. La méthode qui empêche ce risque au moyen des lois physiques s'appelle réseau de neurones informé par la physique (Physics-Informed Neural Network, PINN). Voyons comment appliquer cette méthode à la métallurgie, c'est-à-dire la science des métaux. Commençons par les faiblesses de l'apprentissage pur sur données. L'intelligence artificielle répond bien dans les données qu'elle a apprises. Mais dans les zones où il n'y a pas de données, elle donne des réponses absurdes. On appelle ces zones hors distribution (Out-of-Distribution). C'est comme un élève qui rencontre une question hors du programme d'examen.

Dans la conception des métaux, cette réponse absurde viole les lois physiques. Par exemple, une valeur de stabilité peut évoluer à l'envers alors que la température augmente. Le modèle peut aussi prédire que l'énergie de réseau diminue alors que le volume augmente. De telles réponses ne peuvent pas se produire dans la nature. Si l'on croit telles quelles ces prédictions, la conception se dérègle.

Le réseau de neurones informé par la physique bloque ce problème au stade de l'apprentissage. La méthode consiste à intégrer les lois physiques dans la fonction de perte. La fonction de perte est la mesure qui indique à quel point l'intelligence artificielle se trompe. D'ordinaire, elle mesure seulement l'écart entre la prédiction et les données réelles. On y ajoute ici le degré de violation des lois physiques.

Ainsi, l'intelligence artificielle tente de respecter deux choses à la fois. L'une consiste à correspondre aux données. L'autre consiste à respecter les lois physiques. Même dans les zones sans données, les lois donnent la direction de la réponse. C'est comme un élève qui essaie de résoudre une question hors programme à partir des principes de base.

Quelles lois faut-il intégrer dans la conception des métaux ? La manière dont l'énergie libre doit varier avec la température en est un exemple. On intègre aussi la relation selon laquelle la résistance résulte de la somme de plusieurs contributions de renforcement. On intègre encore les conditions que doit respecter l'équilibre de phases. Ces lois réduisent la liberté de l'intelligence artificielle. Cette liberté réduite produit au contraire des réponses fiables.

Expliquons un peu plus la manière d'intégrer les lois dans la fonction de perte. Les lois physiques s'écrivent le plus souvent sous forme d'équations. Si l'on insère les valeurs prédites dans ces équations, les deux côtés doivent coïncider. S'ils ne coïncident pas, il reste une différence. Cette différence s'appelle un résidu. La méthode consiste à donner une pénalité lorsque le résidu est grand.

Ainsi, l'intelligence artificielle s'efforce d'éviter la pénalité. Elle cherche à correspondre aux données tout en respectant l'équation. C'est comme un élève qui, lorsqu'il rend une réponse, vérifie aussi la formule de calcul et les unités. Il est plus solide face aux problèmes d'application qu'un élève qui a seulement mémorisé les réponses. C'est pourquoi le réseau de neurones informé par la physique est robuste hors des données.

La valeur de cette méthode augmente lorsque les données sont rares. Les matériaux extrêmes pour fusées disposent de peu de données expérimentales. Un seul essai coûte beaucoup d'argent et de temps. Quand les données sont rares, l'apprentissage pur devient facilement instable. Les lois physiques comblent le manque de données.

Il faut distinguer ces deux méthodes. L'étude de prédiction du point de fusion vue dans la section précédente n'est pas un réseau de neurones informé par la physique. Cette étude est un modèle de régression dans lequel on a choisi des caractéristiques qui ont un sens physique. Elle n'a pas intégré directement des équations physiques dans la fonction de perte. La régression qui utilise de bonnes caractéristiques et l'apprentissage qui intègre les lois physiques dans la fonction de perte sont deux méthodes différentes. Elles visent toutefois le même objectif. Il s'agit d'empêcher que les prédictions de l'intelligence artificielle contredisent la métallurgie. Lorsque de bonnes caractéristiques et des contraintes physiques avancent ensemble, on se rapproche davantage de cet objectif.

4.6.1 Réunir les outils pour concevoir un revêtement interne de tuyère à très haute température

Cette sous-section examine comment les outils précédents s'emploient ensemble dans la conception réelle. L'objectif est un alliage réfractaire à haute entropie destiné à un revêtement interne de tuyère à très haute température. L'accent porte sur la procédure de conception et de vérification plutôt que sur un résultat achevé unique. Elle examine aussi jusqu'où les recherches récentes sont arrivées et ce qui reste à faire. Un bon alliage pour revêtement interne de tuyère doit satisfaire plusieurs propriétés à la fois. Son point de fusion doit être élevé. Si sa densité est trop grande, la fusée devient lourde. Sa résistance doit se maintenir à haute température. Sa surface doit bien tenir même au contact de l'oxygène. Il doit bien s'accorder avec le revêtement et la dilatation thermique. Si une seule propriété est bonne, le matériau ne peut pas être utilisé comme pièce.

Saisir ensemble ces nombreux objectifs est difficile pour l'être humain. Ajouter beaucoup de tungstène élève le point de fusion. Mais la densité augmente et le matériau peut devenir cassant. Ajouter de l'aluminium ou du chrome augmente la résistance à l'oxydation. Mais d'autres propriétés peuvent devenir instables. Le traitement de tels objectifs liés entre eux s'appelle optimisation multiobjectif.

Dans une fusée, la densité est un problème très sensible. Si une pièce est lourde, toute la fusée devient lourde. Une fusée lourde va moins loin avec le même carburant. Ainsi, même si la résistance est bonne,

un matériau trop lourd ne peut pas être utilisé. Il faut peser ensemble le point de fusion, la résistance et la masse.

Dans cette mise en balance, il n'y a pas une seule bonne réponse. Si l'on accepte de céder un peu de résistance, on peut réduire la masse. Si l'on accepte de céder un peu de masse, on peut augmenter la résistance. On obtient ainsi un ensemble de candidats qui s'échangent des avantages. Face à cet ensemble, l'être humain choisit celui qui correspond à son objectif. L'intelligence artificielle trace rapidement cet ensemble.

L'intelligence artificielle traite ensemble ces objectifs imbriqués. Elle transforme la composition en nombres au moyen des descripteurs vus plus haut. Un modèle prédictif filtre rapidement le point de fusion et la résistance. Des contraintes physiques éliminent les candidats qui n'ont pas de sens. Des calculs atomiques à grande échelle examinent la déformation et les fissures. Ce flux réduit fortement le nombre de candidats.

Les recherches récentes montrent l'utilité de ce flux. Une étude publiée dans une revue scientifique en 2024 a conçu, par apprentissage automatique, un alliage réfractaire à haute entropie pour très haute température. L'intelligence artificielle a réduit un vaste espace de compositions et choisi des candidats prometteurs. Il s'agissait de tenter d'augmenter à la fois la résistance et la ductilité. Ces recherches montrent que la conception par intelligence artificielle fonctionne au stade du laboratoire.

L'intelligence artificielle entre aussi dans le problème de l'oxydation. Une étude préliminaire publiée à la fin de 2025 existe sur ce sujet. Cette étude a exploré, par apprentissage actif, des alliages réfractaires concentrés complexes résistants à l'oxydation à haute température. L'apprentissage actif est une méthode dans laquelle l'intelligence artificielle choisit elle-même la composition à tester ensuite. C'est une voie pour trouver de bons candidats avec peu d'expériences. Cette étude aussi est encore un travail initial qui n'a pas été soumis à l'évaluation par les pairs.

Il est cependant trop tôt pour en parler comme d'un résultat établi. Les chiffres indiquant exactement quelle résistance une composition donnée produit à une température donnée exigent une vérification dans le texte original. Les valeurs de performance non vérifiées ne sont pas utilisées dans ce livre. Cette section met plutôt l'accent sur la procédure de vérification que la conception doit suivre.

La vérification se fait en trois étapes. On examine d'abord si la composition candidate est stable dans le calcul. On confirme l'équilibre de phases au moyen de CALPHAD et de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ensuite, on examine si l'alliage peut réellement être fabriqué. Même s'il est bon dans le calcul, il ne sert à rien s'il ne peut pas être fabriqué. Enfin, on mesure la résistance et la résistance à l'oxydation à haute température. L'essai proche de l'environnement réel est le dernier seuil.

Il ne faut pas oublier que l'erreur circule avec ces étapes. Une petite erreur du calcul atomique se propage à la prédiction de la microstructure, puis s'amplifie dans la prédiction de la résistance de la pièce. Si l'oxydation enlève de la surface et déplace les frontières, la prédiction devient plus instable. Les variations propres à chaque procédé de fabrication s'y ajoutent. Une bonne conception ne donne donc pas une seule valeur, mais aussi une plage de durée de vie. À la fin, il faut passer par un essai de qualification dans les mêmes conditions que la pièce réelle.

Ces trois étapes ne se déroulent pas seulement dans l'ordre. Si l'essai révèle une faiblesse, on corrige à nouveau la composition. On recalcule la composition corrigée et on la fabrique à nouveau. On répète ainsi un processus qui tourne en boucle. Cette boucle s'appelle conception en boucle fermée. Le laboratoire autonome est une tentative pour faire tourner automatiquement cette boucle.

L'intelligence artificielle intervient à chaque étape de cette boucle. Elle choisit la composition à tester ensuite, apprend les résultats, puis choisit à nouveau. La boucle tourne même si une personne ne la

surveille pas toute la nuit. Le chemin vers une bonne composition devient d'autant plus court. Ce flux transforme l'avenir du développement des alliages à haute température.

La conception par intelligence artificielle est aussi active du côté des superalliages à base de nickel. Des études de 2025 ont prédit par apprentissage automatique la durée de vie au fluage des superalliages monocristallins. Elles ont utilisé les informations de composition et de microstructure pour choisir des compositions capables de tenir longtemps. La fraction volumique et la forme des grains gamma prime ont été utilisées comme caractéristiques importantes. Ces recherches montrent que l'intelligence artificielle donne une nouvelle utilité à des métaux anciens.

Il existe aussi des études qui combinent ici le calcul de champ de phase et l'intelligence artificielle. Le champ de phase est une méthode de calcul qui représente les changements de microstructure sous forme de champs continus. Une étude de 2025 a relié ce calcul à l'apprentissage automatique. Elle a prédit ensemble l'influence de la composition et de la microstructure sur la déformation par fluage. Ces méthodes qui relient le calcul et l'intelligence artificielle se multiplient.

Ces exemples donnent une leçon commune. L'intelligence artificielle est puissante lorsqu'elle dispose de bonnes caractéristiques et de données suffisantes. Si les caractéristiques sont liées à la physique, la prédiction est solide. Si les données sont concentrées dans une zone particulière, elles deviennent instables en dehors de cette zone. Il faut donc d'abord rassembler des données larges et bien choisir les caractéristiques.

Dans cette procédure, la place de l'intelligence artificielle est claire. L'intelligence artificielle est un guide qui réduit l'espace des compositions. Si elle ramène 100 candidats à 3, l'être humain n'examine en profondeur que ces 3 candidats. Lorsque les rôles sont ainsi répartis, le développement s'accélère et les échecs diminuent. Voilà l'aspect réel de l'intelligence artificielle pour concevoir des métaux sans contredire les lois physiques.

Synthèse

Ce chapitre a traité des métaux qui doivent protéger les endroits où la température monte le plus dans une fusée. Ces endroits sont la tuyère de la chambre de combustion et les surfaces de rentrée. Ici, la chaleur, la pression et les forces sollicitent ensemble les matériaux.

Les superalliages à base de nickel utilisés depuis longtemps atteignent leur limite vers 1 150 degrés. Le nouveau candidat visé pour des températures supérieures est l'alliage réfractaire à haute entropie. Cet alliage consiste à mélanger, en proportions proches, plusieurs métaux à point de fusion élevé.

Les premières recherches ont expliqué les propriétés de cet alliage par quatre effets. Il s'agit de l'entropie de configuration, de la distorsion du réseau, de la diffusion lente et de l'effet cocktail. Certains de ces effets ont ensuite été contestés, si bien qu'il est difficile d'en faire des lois générales. Ce cadre reste pourtant un point de départ pour réfléchir aux compositions qui peuvent rester stables sous forme d'une seule phase. Le paramètre oméga et la concentration en électrons de valence sont des indicateurs simples qui aident ce jugement.

Pour traiter un vaste espace de compositions, l'intelligence artificielle est nécessaire. L'intelligence artificielle lit les matériaux sous forme de nombres appelés descripteurs. Les grands modèles de langage extraient ces caractéristiques du texte des articles scientifiques. Les réseaux de neurones graphiques apprennent les matériaux sous forme de points et de lignes. Le réseau de neurones graphique à fractions cristallines est une nouvelle tentative pour représenter le désordre des alliages à haute entropie.

Le comportement à l'échelle atomique s'observe par la dynamique moléculaire. Une intelligence artificielle appelée potentiel neuroévolutif rend ce calcul plus rapide. Des recherches récentes ont atteint une échelle dépassant 1 billion d'atomes. Ce grand calcul permet d'observer à l'échelle atomique les dislocations, le glissement aux joints de grains et les fissures.

L'idée qui relie tous ces outils est la cohérence physique. Un apprentissage fondé uniquement sur les données peut produire des réponses contraires à la physique. Le réseau de neurones informé par la physique (PINN) empêche cela en intégrant des lois dans la fonction de perte. L'intelligence artificielle sert de guide pour réduire le nombre de candidats, et le jugement final revient à l'expérience.

La plupart des cas présentés dans ce chapitre relèvent encore de recherches initiales. Les chiffres des études préliminaires ne sont pas des valeurs définitives. Les cas d'entreprise sont seulement des exemples industriels, et non des démonstrations académiques. C'est pourquoi une bonne conception passe toujours par une vérification à la fois par le calcul et par l'expérience. L'état actuel de ce domaine est une collaboration où l'intelligence artificielle resserre le chemin et où l'humain le choisit.

On peut résumer ce chapitre en une phrase. L'intelligence artificielle change la vitesse de conception des métaux à haute température. Autrefois, tester un seul candidat prenait beaucoup de temps. Aujourd'hui, l'intelligence artificielle filtre à l'avance un grand nombre de candidats. Seule une petite partie restante est vérifiée par des calculs précis et par des essais.

Les défis à venir sont eux aussi clairs. Il faut rassembler des données expérimentales plus larges et plus équilibrées. Il faut indiquer en même temps l'incertitude des prédictions de l'intelligence artificielle. Il faut intégrer plus finement les lois physiques dans l'apprentissage. Plus ces trois conditions seront réunies, plus la conception des matériaux pour fusées deviendra rapide.

Sources associées

- Yeh, J. W., Chen, S. K., Lin, S. J., Gan, J. Y., Chin, T. S., Shun, T. T., Tsau, C. H., & Chang, S. Y. (2004). Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*, 6(5), 299-303. <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
- Cantor, B., Chang, I. T. H., Knight, P., & Vincent, A. J. B. (2004). Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, 375-377, 213-218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Miracle, D. B., Chuang, C. P., & Liaw, P. K. (2010). Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics*, 18(9), 1758-1765. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Scott, J. M., & Miracle, D. B. (2011). Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, 19(5), 698-706. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.004>
- Zhang, Y., Zuo, T. T., Tang, Z., Gao, M. C., Dahmen, K. A., Liaw, P. K., & Lu, Z. P. (2014). Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science*, 61, 1-93. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001>
- Miracle, D. B., & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, 122, 448-511. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
- George, E. P., Raabe, D., & Ritchie, R. O. (2019). High-entropy alloys. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 515-534. <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0121-4>
- Rao, Z., Tung, P. Y., Xie, R., Wei, Y., Zhang, H., Ferrari, A., Klaver, T. P. C., Kormann, F., Sukumar, P. T., da Silva, A. K., Chen, Y., Li, Z., Ponge, D., Neugebauer, J., Gutfleisch, O., Bauer, S., & Raabe, D. (2022). Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery. *Science*, 378(6615), 78-85. <https://doi.org/10.1126/science.abo4940>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Dong, H., Chen, Y., & Ala-Nissila, T. (2021). Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. *Physical Review B*, 104, 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>

- Fan, Z., Wang, Y., Ying, P., Song, K., Wang, J., Wang, Y., Zeng, Z., Xu, K., Lindgren, E., Rahm, J. M., Gabourie, A., Liu, J., Dong, H., Wu, J., Chen, Y., Zhong, Z., Sun, J., Erhart, P., Su, Y., & Ala-Nissila, T. (2022). GPUMD: A package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations. *Journal of Chemical Physics*, 157, 114801. <https://doi.org/10.1063/5.0106617>
- He, Q., Wu, D., Wang, H., et al. (2024). Machine learning assisted design of refractory high-entropy alloy for ultrahigh temperature applications. *Materials & Design*, 246, 113326. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113326>
- Divilov, S., et al. (2024). A comparative study of predicting high entropy alloy phase fractions with traditional machine learning and deep neural networks. *npj Computational Materials*, 10, 68. <https://www.nature.com/articles/s41524-024-01335-1>
- Hasnain, M. (2026). Physically Consistent Machine Learning for Melting Temperature Prediction of Refractory High-Entropy Alloys. arXiv Prépublication (non encore évaluée par les pairs), arXiv:2601.03801. <https://arxiv.org/abs/2601.03801>
- Suo, P., Cao, W., Wu, X., Zhang, W., Fan, Z., Xian, S., et al. (2026). Trillion-atom molecular dynamics simulations with ab initio accuracy. arXiv Prépublication (non encore évaluée par les pairs), arXiv:2604.24816. <https://arxiv.org/abs/2604.24816>
- Hsiao, L. C., Liu, Z. K., & Reinhart, W. (2026). Modeling High Entropy Alloys' Mechanical Property through Natural Language-Derived Descriptors. arXiv Prépublication (non encore évaluée par les pairs), arXiv:2604.21807. <https://arxiv.org/abs/2604.21807>
- Kotama, T., & Huang, Y. (2026). Crystal Fractional Graph Neural Network for Energy Prediction of High-Entropy Alloys. arXiv Prépublication (non encore évaluée par les pairs), arXiv:2605.08103. <https://arxiv.org/abs/2605.08103>
- Bejjipurapu, A., Karumuri, S., Flanagan, J. C., Tucker, V., Bilonis, I., Strachan, A., Sandhage, K. H., & Titus, M. S. (2025). Active Learning Discovery of High Temperature Oxidation Resistant Refractory Complex Concentrated Alloys. arXiv Prépublication (non encore évaluée par les pairs), arXiv:2512.15958. <https://arxiv.org/abs/2512.15958>
- Cao, Y., Sheriff, K., & Freitas, R. (2025). Capturing short-range order in high-entropy alloys with machine learning potentials. *npj Computational Materials*, 11, 268. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01722-2>
- Liu, X., Yang, K., Liu, Y., Zhou, F., Fan, D., Pei, Z., Xu, P., & Tian, Y. (2025). Revealing nanostructures in high-entropy alloys via machine-learning accelerated scalable Monte Carlo simulation. *npj Computational Materials*, 11, 267. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01762-8>
- Huang, H., Yu, Y., Deng, W., Qian, Q., & Zheng, H. (2026). Breaking equiatomic constraints: knowledge-enhanced AI framework for function-oriented single-phase high-entropy alloy design. *npj Computational Materials*, 12, 209. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-02071-4>
- Kamnis, S., & Delibasis, K. (2025). High entropy alloy property predictions using a transformer-based language model. *Scientific Reports*, 15, 11861. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-95170-z>
- Chizhevskiy, V., Marković, G., Benrazzouq, S., Cvelbar, U., Nominé, A., & Zavašnik, J. (2026). High Entropy Alloys Database generated with Large Language Model. *Scientific Data*, 13, 612. <https://doi.org/10.1038/s41597-026-06930-z>
- Yao, J., Yu, W., Wang, J., Zhang, L., Liu, F., Li, W., Tan, L., Huang, L., & Liu, Y. (2025). Integrating Machine Learning and Thermodynamic Descriptors for Enhanced Ni-Based Single Crystal Superalloys Creep Life Prediction and Alloy Design. *Metals and Materials International*, 31, 2730-2748. <https://doi.org/10.1007/s12540-025-01906-x>
- Song, J., Shan, Y., Zhang, Z., Wang, S., Zhang, H., Muhammad, S., Huang, H., & Li, Y. (2025). Phase-field-informed machine learning on creep behavior of Ni-based single-crystal superalloys. *Journal of Materials Informatics*, 5, 2. <https://doi.org/10.20517/jmi.2025.02>

Chapitre 5. Contrôle de la microstructure et évaluation de la durée de vie sous échauffement des composites pour l'aérospatiale (CMC) et des céramiques à ultra-haute température (UHTC)

Introduction

Un bol en céramique ne fond pas, même placé dans un four chaud. Mais si l'on plonge aussitôt ce bol chaud dans l'eau froide, il se fissure. Il résiste bien à la chaleur, mais il est faible face aux changements brusques de température et aux chocs. Les matériaux qui protègent la surface des fusées et des véhicules hypersoniques cherchent eux aussi une réponse entre ces deux propriétés. Toutefois, les températures et les forces en jeu n'ont rien de comparable avec celles d'une cuisine.

L'intérieur de la chambre de combustion d'un moteur-fusée se remplit de gaz brûlants à plusieurs milliers de degrés. L'avant d'un véhicule hypersonique s'échauffe de lui-même en heurtant l'air. Dans ces zones, les surfaces subissent en même temps la chaleur, l'oxydation, l'usure et de fortes contraintes. L'oxydation est le phénomène par lequel l'oxygène rencontre le matériau et le ronge.

Les métaux sont solides, mais ils ramollissent à très haute température. C'est un peu comme une tige de caramel qui se plie dans la main. C'est pourquoi les chercheurs se tournent vers les céramiques. Comme la porcelaine, les céramiques résistent bien à la chaleur et tiennent bien à haute température.

Les deux matériaux traités dans ce chapitre sont les composites à matrice céramique (CMC) et les céramiques à ultra-haute température (UHTC). Un composite à matrice céramique se fabrique en plaçant de fines fibres dans une base céramique. Les céramiques à ultra-haute température sont des céramiques dont le point de fusion est très élevé. Dans les deux cas, l'objectif est de conserver leur forme dans des zones très chaudes.

Le problème est qu'il est difficile de prévoir quand ces matériaux vont se dégrader. Il est difficile de reproduire en laboratoire les conditions réelles de vol. Le coût d'un seul essai est aussi élevé.

L'intelligence artificielle (IA) apparaît donc comme un outil pour réduire cette difficulté.

L'intelligence artificielle sert à lire les petites structures présentes dans le matériau et à prévoir sa durée de vie. Ces petites structures sont les grains, les fibres, les pores et les formes des frontières visibles au microscope. Ce chapitre explique pas à pas comment transformer ces petites structures en nombres et comment prévoir l'avenir. Les équations ne sont pas utilisées ; l'explication se fait avec des mots.

Ce chapitre suit un fil directeur. Il s'agit de transformer le petit monde du matériau en nombres. Les images au microscope, l'orientation des cristaux et les vibrations des atomes sont toutes concernées. Ces informations sont converties sous une forme lisible par l'intelligence artificielle. L'intelligence artificielle peut alors prévoir l'avenir et façonner la structure.

L'ordre de ce chapitre est le suivant. Nous verrons d'abord comment les matériaux se détériorent dans des milieux extrêmes. Nous verrons ensuite comment transformer les grains cristallins en graphes afin de prévoir leur durée de vie. Puis nous verrons comment concevoir à rebours l'architecture des fibres. Enfin, nous verrons comment relier les flux de chaleur du très petit monde aux flux de chaleur de la pièce entière.

Un principe doit être précisé d'emblée. Dans ce chapitre, l'intelligence artificielle ne remplace pas les essais. Les valeurs de performance produites par l'intelligence artificielle doivent être vérifiées sur des objets réels. Les valeurs non vérifiées ne sont que des références. Ce livre ne met dans le corps du texte

que des données vérifiées. Ce principe constitue la base de la sécurité dans le développement des matériaux.

5.1 Milieux extrêmes du vol hypersonique et de la propulsion des fusées de nouvelle génération, et mécanismes de dégradation des structures thermiques

Ce que traite cette section

Cette section décrit d'abord à quel point l'environnement que le matériau doit supporter est rude. Elle prend pour exemples un véhicule volant à vitesse hypersonique et l'intérieur d'un moteur-fusée à haute pression. Elle explique pourquoi les métaux ordinaires ne suffisent pas et pourquoi les céramiques sont nécessaires.

Nous verrons ensuite comment les matériaux céramiques se dégradent réellement. L'oxydation des composites à fibres de carbone, puis la fusion-érosion et les changements de phase des céramiques à ultra-haute température, seront examinés dans cet ordre. La fusion-érosion est le phénomène par lequel la surface fond ou est arrachée par des gaz chauds. Il faut comprendre ce processus d'endommagement pour saisir ce que les prédictions par intelligence artificielle apprennent dans la section suivante.

5.1.1 Échauffement aérodynamique hors équilibre et milieu de gaz de combustion à haute enthalpie

L'échauffement aérodynamique est le phénomène par lequel l'air chauffe la surface à cause du vol rapide. Le frottement avec la surface ajoute aussi de la chaleur. Mais à vitesse hypersonique, la part la plus importante vient de l'air fortement comprimé qui s'échauffe. Plus la vitesse augmente, plus cette chaleur croît rapidement et chauffe la surface.

L'hypersonique désigne une vitesse supérieure à cinq fois la vitesse du son. Mach 7 signifie une vitesse sept fois supérieure à celle du son. À cette vitesse, l'air ne s'écoule pas normalement. Une onde de choc se forme devant le véhicule. Une onde de choc est une mince paroi de pression créée lorsque l'air est brusquement comprimé.

L'air qui traverse l'onde de choc ralentit et s'échauffe en un instant. Lorsque la température devient très élevée, les molécules d'air se brisent. Les molécules d'oxygène et d'azote se séparent en atomes isolés. L'oxygène atomique ainsi formé est plus réactif que l'oxygène ordinaire et attaque plus facilement les matériaux.

Dans un véhicule, les zones qui reçoivent le plus de chaleur sont le bord d'attaque et le nez. Le bord d'attaque est l'arête de l'aile qui rencontre l'air en premier. Le nez est l'avant pointu du véhicule. La surface de ces zones peut atteindre plusieurs milliers de degrés. À cela s'ajoute une force de cisaillement qui pousse la surface sur le côté.

L'intérieur d'un moteur-fusée est tout aussi rude. Lorsque le méthane et l'oxygène liquide brûlent, ils produisent des gaz chauds. Ces gaz contiennent de l'eau, du dioxyde de carbone et du monoxyde de carbone. Il reste aussi de l'oxygène. La pression de la chambre de combustion atteint plusieurs dizaines d'atmosphères. Ce gaz à haute pression frappe sans arrêt la paroi de la chambre de combustion.

Un tel milieu est appelé milieu à haute enthalpie. L'enthalpie est la quantité d'énergie thermique contenue dans un gaz. Une haute enthalpie signifie que le gaz possède une très grande quantité de chaleur. Ce gaz déverse de la chaleur sur la paroi. Toutefois, la température de la paroi est plus basse que celle du gaz. C'est parce que la chaleur se diffuse dans le matériau et que le refroidissement intervient aussi.

Le temps ajoute une autre difficulté. Une fusée brûle pendant plusieurs centaines de secondes entre le lancement et l'orbite. Un véhicule hypersonique plane longtemps dans l'atmosphère. Cela signifie qu'il reçoit de la chaleur non pas pendant un court instant, mais pendant une longue durée. Il ne suffit donc pas qu'un matériau tienne brièvement.

Prenons la mesure de cette chaleur. Le point d'arrêt du bord d'attaque hypersonique est proche de la limite du matériau. Le point d'arrêt est l'endroit où l'écoulement s'arrête et où la chaleur se concentre le plus. La charge thermique à cet endroit n'a rien de comparable avec une flamme de gaz de cuisine. La force de cisaillement qui pousse la surface sur le côté s'y applique en même temps.

Un seul matériau doit supporter toutes ces conditions. Chaleur, oxydation, force de cisaillement et longue durée d'exposition se superposent. Une revue publiée en 2024 sur les matériaux pour le vol hypersonique désigne ce milieu combiné comme une difficulté centrale dans le choix des matériaux. Cette difficulté est le point de départ de la recherche sur les matériaux céramiques.

Le rôle de l'intelligence artificielle est clair ici. Les essais réels sont coûteux et rares. Il faut donc prévoir un large éventail de conditions à partir des données de quelques essais. L'intelligence artificielle est efficace pour extraire des règles à partir de peu de données. Mais sans l'aide des lois physiques, elle donne des réponses erronées. C'est pourquoi les méthodes de ce chapitre utilisent ensemble la physique et l'intelligence artificielle.

5.1.2 Processus d'endommagement des composites à fibres de carbone par l'oxygène (C/SiC)

Le carbure de silicium renforcé par fibres de carbone (C/SiC) est un matériau thermostuctural représentatif. Les fibres de carbone sont fines, légères et difficiles à rompre. Le carbure de silicium (SiC) résiste relativement bien aux hautes températures et à l'oxydation. En les associant, on obtient un composite léger et solide. Ce matériau sera noté C/SiC ci-dessous.

Il existe principalement deux méthodes pour fabriquer ce matériau. La première est l'infiltration chimique en phase vapeur. Elle fait pénétrer un gaz afin de remplir les espaces entre les fibres avec une céramique. La seconde est l'infiltration de résine liquide suivie de carbonisation. Elle introduit une résine puis la chauffe pour la transformer en céramique. Dans les deux méthodes, les espaces entre les faisceaux de fibres sont remplis de céramique.

Le problème commence dès la fabrication. Les fibres de carbone et la matrice de carbure de silicium ne se dilatent pas de la même façon sous l'effet de la chaleur. C'est ce qu'on appelle une différence de coefficient de dilatation thermique. Lorsqu'elles refroidissent depuis l'état chaud jusqu'à la température ambiante, elles se contractent différemment. Il en résulte un réseau de fines fissures dans la matrice. Ces microfissures apparaissent inévitablement pendant la fabrication.

Les fissures deviennent des voies d'entrée pour l'oxygène. Même si l'extérieur semble intact, l'oxygène pénètre à l'intérieur. C'est un peu comme l'eau qui s'infiltre par une petite fente dans un papier peint. L'oxygène entré à l'intérieur attaque les fibres de carbone et la couche d'interface. La couche d'interface est la fine frontière située entre la fibre et la matrice.

La matrice de carbure de silicium réagit avec l'oxygène de deux façons. Lorsque la température n'est pas très élevée et que l'oxygène est abondant, une couche vitreuse se forme à la surface. Cette couche est une fine protection composée de dioxyde de silicium. On appelle cela l'oxydation passive. Cette couche vitreuse bloque la pénétration de l'oxygène et protège l'intérieur du matériau.

À l'inverse, lorsque la température est très élevée ou que la pression d'oxygène est faible, la situation change. La couche vitreuse protectrice ne peut pas se former. Le carbure de silicium passe alors

directement à l'état gazeux. On appelle cela l'oxydation active. Dans l'oxydation active, la surface est continuellement érodée sans couche protectrice. Ce risque augmente lors du vol hypersonique à haute altitude.

Si la couche d'interface disparaît, la force du composite s'effondre. À l'origine, lorsque la fissure progresse, les fibres la retiennent comme un pont. On appelle cela le pontage par fibres. Si l'interface disparaît par oxydation, cette force de retenue disparaît. Le matériau devient alors susceptible de se rompre soudainement. Des dommages de délamination, où les couches se séparent les unes des autres, se produisent aussi.

Cet endommagement apparaît difficilement à la surface. Même si la surface semble intacte, l'interface se dégrade d'abord à l'intérieur. Une simple inspection visuelle ne suffit donc pas. Il faut examiner la pénétration de l'oxygène dans le matériau et l'état de l'interface. Le modèle de durée de vie par intelligence artificielle lit cet endommagement caché à l'intérieur, et non seulement l'extérieur.

Une étude publiée en 2026 montre cet endommagement en chiffres. L'équipe de Wu a prédit, à l'aide d'un modèle physique, les dommages par oxydation d'un C/SiC tissé en 2,5 dimensions. Dans cette étude, la résistance à la traction à température ambiante était d'environ 264 mégapascals. Lorsqu'elle est montée à 1100 degrés, la résistance est tombée à environ 184 mégapascals. Le module d'élasticité a aussi diminué d'environ 23 pour cent dans le même intervalle. Cette étude utilise un modèle constitutif fondé sur la physique, et non un modèle d'intelligence artificielle.

Il existe une autre voie pour bloquer l'oxygène. Elle consiste à appliquer un revêtement protecteur sur la surface. On appelle cela un revêtement barrière environnementale. Ce revêtement empêche l'oxygène et la vapeur d'eau de pénétrer à l'intérieur. Dans la recherche hypersonique, l'objectif est de créer des revêtements capables de résister à plus de 2000 degrés Celsius. L'intelligence artificielle sert à déterminer l'épaisseur et la composition du revêtement.

Que suggère ce résultat ? Si l'on ne regarde que les propriétés moyennes du matériau, on manque l'endommagement de l'interface. Il faut examiner où l'oxygène entre et en quelle quantité. Il faut aussi tenir compte de l'historique de température et de l'historique de charge. Le modèle de durée de vie par intelligence artificielle présenté plus loin se charge précisément de ce travail.

Il faut aussi préciser la limite ici. Le modèle de l'équipe de Wu est un calcul fondé sur la physique. Il prédit l'endommagement sans intelligence artificielle. L'intelligence artificielle sert à apprendre les données de tels modèles physiques afin d'accélérer le calcul. Les modèles physiques et l'intelligence artificielle ne sont pas des concurrents, mais des partenaires qui compensent leurs faiblesses respectives.

5.1.3 Processus de fusion et d'écaillage des céramiques à ultra-haute température (UHTC)

Les céramiques à ultra-haute température sont des céramiques dont le point de fusion est très élevé. Les matériaux représentatifs sont le diborure de zirconium et le diborure d'hafnium. Le diborure de zirconium est un composé de zirconium et de bore. Le point de fusion de ces matériaux dépasse 3000 degrés Celsius. Ils sont donc étudiés comme candidats pour les bords d'attaque hypersoniques et les pièces de fusées.

Un point de fusion élevé ne suffit pas à rassurer. Le vrai problème est l'oxydation. Lorsque le diborure de zirconium rencontre l'oxygène, deux oxydes se forment. L'un est un oxyde dur appelé zircone. L'autre est un oxyde de bore appelé trioxyde de dibore.

Le trioxyde de dibore présente une propriété intéressante à basse température. Il fond vers environ 450 degrés Celsius et devient liquide. Ce liquide remplit les petites fentes de la surface. Il agit comme une

pommade appliquée sur une plaie qui comble les creux. On appelle cela un film auto-cicatrisant. Au stade initial de l'oxydation, ce film protège le matériau.

Mais lorsque la température augmente encore, cette défense s'effondre. Au-delà d'environ 1100 degrés Celsius, le trioxyde de dibore s'évapore peu à peu. Autour de 1500 degrés Celsius, ce film disparaît pratiquement. La température limite exacte varie selon la pression d'oxygène, la vitesse du gaz et la pression. Il est donc difficile de l'exprimer par une valeur fixe unique.

L'ajout de carbure de silicium améliore la situation. Le verre liquide issu de l'oxydation du carbure de silicium se mélange au trioxyde de dibore. Les deux composants forment une phase vitreuse appelée borosilicate. Ce verre couvre la surface jusqu'à une température plus élevée.

Si la température augmente encore, même ce verre ne tient plus. Au-delà d'environ 1700 degrés Celsius, sa viscosité diminue. Le verre s'évapore et est arraché par l'écoulement rapide du gaz. Lorsque cette couche protectrice disparaît, la surface s'érode rapidement. À la fin, il ne reste à la surface qu'une ossature poreuse de zircone. Cette ossature percée de pores laisse encore mieux passer l'oxygène vers l'intérieur.

La zircone présente un autre piège. Sa structure cristalline change selon la température. Pendant le refroidissement, elle passe du système quadratique au système monoclinique. Ces deux noms désignent des différences dans la manière dont les atomes sont empilés. Lorsque cette transformation se produit, le volume augmente d'environ 4,5 pour cent.

Si le volume augmente brusquement, de fortes contraintes apparaissent dans la couche d'oxyde. C'est un peu comme l'eau qui gèle en hiver et brise une bouteille. Cette force crée des fissures dans la couche d'oxyde. Lorsque les fissures se rejoignent, la couche d'oxyde se détache en morceaux. On appelle cela la spallation. À l'endroit détaché, une nouvelle surface apparaît et l'oxydation recommence.

Les borures à haute entropie offrent une nouvelle approche de ce problème. Une céramique à haute entropie est une céramique où plusieurs éléments métalliques sont mélangés en quantités proches. On peut même placer cinq métaux dans un même cristal. Comme l'éventail des compositions est large, ce domaine convient bien à l'exploration par intelligence artificielle. L'ordinateur peut d'abord filtrer les combinaisons qui résistent bien à l'oxydation.

Une revue de 2026 consacrée aux céramiques à très haute température montre bien cette évolution. Cette revue traite ensemble l'expérimentation, la simulation multi-échelle et la conception fondée sur les données. Le multi-échelle est une méthode qui relie plusieurs niveaux, de la taille des atomes à celle des pièces. La conception fondée sur les données est une méthode dans laquelle l'intelligence artificielle choisit la composition et la microstructure.

L'intelligence artificielle sert aussi à prédire l'épaisseur des couches d'oxyde. Une équipe de recherche a prédit par apprentissage automatique les dommages d'oxydation des borures à très haute température. Elle a estimé l'épaisseur de la couche d'oxyde au moyen d'une méthode appelée forêt aléatoire. La forêt aléatoire est une méthode qui réunit plusieurs règles de décision pour produire une réponse. Toutefois, le comportement réel de la couche d'oxyde doit être confirmé par des essais en soufflerie et en arc-jet. L'arc-jet est un dispositif qui projette un gaz à très haute température pour reproduire un environnement de vol.

Le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP) sert aussi à prédire le point de fusion. C'est une méthode par laquelle l'intelligence artificielle calcule rapidement les forces entre les atomes. En 2025, une équipe de recherche a prédit avec un MLIP le point de fusion de céramiques à haute entropie. Elle a d'abord filtré par ordinateur les combinaisons ayant un point de fusion élevé. Cette

méthode réduit le nombre de candidats avant l'expérience. Le nombre de synthèses et d'essais coûteux diminue ainsi. Lorsque le calcul filtre ainsi en amont, toute l'exploration des matériaux s'accélère.

Une question demeure pourtant. Les combinaisons choisies par l'ordinateur résistent-elles vraiment à l'oxydation ? Le calcul suppose des conditions idéales. En réalité, la surface contient des impuretés et des défauts. L'écoulement et la pression du gaz diffèrent aussi du calcul. C'est donc l'essai sur pièce réelle qui fournit le jugement final. L'intelligence artificielle se limite à choisir avec intelligence les candidats à tester.

5.2 Prévoir la durée de vie en transformant les grains cristallins en graphe

Ce que traite cette section

Cette section traite de la manière de transformer l'intérieur d'un matériau en une forme lisible par l'intelligence artificielle. L'outil utilisé est le réseau de neurones graphique spatio-temporel. Un graphe est une représentation qui dessine des relations au moyen de points et de lignes. Le plan d'un réseau de métro en est un bon exemple. Les stations sont des points et les tronçons sont des lignes.

On transforme les grains cristallins du matériau en points, et les frontières entre grains en lignes. On y ajoute ensuite l'écoulement du temps. En effet, les dommages s'accumulent lorsque le matériau subit de façon répétée la chaleur et les forces. Cette section explique comment construire ce graphe, comment les dommages se développent et comment intégrer les lois physiques à l'apprentissage. On parle de modèle spatio-temporel parce qu'il observe ensemble le temps et l'espace.

5.2.1 Transformer la microstructure en graphe

Un grain cristallin est un petit cristal à l'intérieur d'un matériau. Les métaux et les céramiques ne sont pas un seul grand cristal. Ils sont formés par l'assemblage d'un très grand nombre de petits grains. Dans chaque grain, l'orientation des atomes diffère légèrement. Cette orientation s'appelle l'orientation cristallographique.

L'un des principaux équipements qui lisent l'orientation cristallographique est la diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD). Dans un microscope électronique, on envoie des électrons pour lire l'orientation de chaque grain. Cet équipement balaie la surface et enregistre l'orientation de chaque grain. Le résultat prend la forme d'une carte d'orientation colorée.

La frontière de grains est la limite où deux grains se rencontrent. Cette frontière devient facilement un maillon faible du matériau. L'oxygène s'infiltre le long de ce chemin. Les fissures se développent aussi le long de cette frontière. Connaître les propriétés des frontières est donc essentiel pour prévoir la durée de vie.

La méthode de transformation en graphe repose sur une idée simple. On prend un grain comme un point, c'est-à-dire un nœud. Si deux grains sont en contact, on les relie par une ligne, c'est-à-dire une arête. Une image microscopique complexe devient ainsi une carte claire de relations. L'intelligence artificielle lit mieux cette carte de relations qu'une photographie.

Les nœuds contiennent les informations des grains. On y place la taille, la forme et l'orientation du grain. On y ajoute aussi la température et la contrainte à cet endroit. La contrainte est l'intensité d'une force qui comprime ou tire un objet. Un point résume ainsi l'état de ce grain.

Les arêtes contiennent les informations des frontières. On y place la différence d'orientation entre deux grains. On y ajoute aussi la largeur et l'orientation de la frontière. On y indique aussi le degré de dommage dû à l'oxydation. Plus la différence d'orientation est grande, plus l'oxygène tend à pénétrer facilement.

Cette méthode a déjà été testée sur d'autres matériaux. En 2023, une équipe de recherche l'a appliquée à l'acier. Elle a classé, grain par grain, les zones où les dommages de fatigue étaient importants. La fatigue est un dommage causé par des forces répétées. La carte EBSD a été transformée en graphe pour l'apprentissage. Dans cette étude, la méthode par graphe s'est montrée utile pour repérer les zones endommagées grain par grain. Toutefois, cette étude portait sur la classification de la fatigue dans l'acier. Elle ne prédisait pas la durée de vie des céramiques, la rupture par fluage ni les changements au fil du temps.

Appliquer cette méthode par graphe à la prévision de la durée de vie des céramiques est l'orientation proposée par ce livre. La démonstration expérimentale sur les céramiques n'a pas encore été réalisée. L'explication ci-dessous ne présente pas un fait vérifié, mais trace une voie de recherche.

De nouvelles méthodes apparaissent aussi pour traiter les informations de frontière. En 2026, une équipe de recherche a comblé les zones vides d'une carte EBSD par apprentissage sur graphe. C'est une technique qui remplit les zones manquantes de la mesure selon les règles de la cristallographie. Cette méthode introduit les règles cristallographiques dans l'intelligence artificielle afin d'éviter de remplir les zones avec des orientations aberrantes. Comme les données sur les matériaux ne sont pas toujours complètes, ce type de technique complémentaire est utile.

La méthode par graphe présente un avantage sur les photographies. Une photographie traite chaque pixel séparément. Elle ne sait donc pas d'elle-même où un grain commence et où il se termine. Le graphe regroupe le grain comme une unité. Il se rapproche de la manière dont une personne observe un matériau. Il est donc plus facile d'apprendre les relations entre les grains.

Un graphe se traite facilement même quand sa taille change. Une photographie doit avoir une taille définie. Un graphe se traite de la même manière, que le nombre de grains augmente ou diminue. Cette propriété est utile parce que le nombre de grains varie selon les matériaux. On peut essayer de transférer à une grande pièce des règles apprises sur une petite éprouvette. Toutefois, lorsque la taille augmente, la distribution des défauts et le gradient thermique changent aussi. Une étape de validation sur grande pièce est donc nécessaire.

Le graphe ainsi construit peut aussi être appliqué aux céramiques. Les céramiques sont elles aussi formées de grains cristallins et de frontières. L'oxydation et le fluage des céramiques à très haute température commencent aussi aux frontières. Le fluage est le phénomène par lequel un matériau s'allonge lentement sous l'effet d'une force appliquée pendant longtemps. Cette méthode par graphe devient donc une base pour prévoir la durée de vie des céramiques.

5.2.2 Apprentissage par graphe observant ensemble les voisins et le temps

On ajoute maintenant l'écoulement du temps au graphe. Le dommage ne se termine pas en un instant. Il s'accumule peu à peu lorsque la chaleur et les forces se répètent. Ainsi, même pour un même matériau, le graphe change avec le temps. Suivre ce changement est le rôle du modèle spatio-temporel.

On observe d'abord la dimension spatiale. L'état d'un grain est influencé par ses voisins. Si le grain voisin subit une forte force, cette force se transmet aussi à mon grain. Le calcul qui rassemble ces informations de voisinage s'appelle convolution de graphe. Chaque nœud reçoit les informations des nœuds voisins et met à jour son propre état.

Tous les voisins ne sont pas traités de la même manière. Certaines frontières contribuent fortement aux dommages, tandis que d'autres y contribuent moins. Le modèle attribue donc un poids différent à chaque voisin. La méthode qui détermine ces poids s'appelle l'attention. Elle consiste à accorder davantage d'attention aux voisins importants.

Le point essentiel est d'introduire des connaissances physiques dans l'attention. Si la différence d'orientation d'une frontière est grande, son énergie de frontière est élevée. Si l'énergie de frontière est élevée, l'oxygène entre plus facilement. Ces règles physiques sont prises en compte dans le calcul des poids. Le modèle évite ainsi les conclusions erronées même lorsque les données sont peu nombreuses.

La dimension temporelle est traitée de manière semblable. L'état passé produit l'état suivant. Les dommages d'aujourd'hui s'ajoutent aux dommages accumulés jusqu'à hier. Le modèle apprend cette chaîne temporelle. Pour cela, on utilise une structure de réseau de neurones qui traite l'ordre du temps.

Les dommages importants traités dans cette section ont une direction. Dans les composites céramiques, de fines fissures apparaissent d'abord dans la matrice. Le long de ces fissures, l'interface entre la fibre et la matrice se décolle. L'oxygène entre à cet endroit et une couche d'oxydation se développe. Les dommages se propagent généralement dans la direction des forces et du gaz.

Ces dommages directionnels ont une forte influence sur la durée de vie du matériau. Si les fissures et le décollement d'interface se prolongent dans une direction, cette direction s'affaiblit. Si les pores se rejoignent, le passage de l'oxygène s'élargit. Une phase vitreuse coincée aux frontières peut aussi se déplacer et transmettre les dommages. Ces changements modifient la vitesse de fluage et avancent la rupture. La rupture désigne le moment où le matériau ne résiste plus et se rompt.

Le glissement des frontières de grains est aussi un dommage important dans cette section. À haute température, les grains glissent les uns par rapport aux autres le long de leurs frontières. Cela ressemble à des briques humides qui se repoussent. Ce glissement accroît la déformation par fluage. L'orientation et les propriétés des frontières déterminent l'ampleur du glissement. Les arêtes contenant les informations de frontière sont donc importantes.

Les gaz chauds s'écoulent en général dans une direction et poussent la surface. Les dommages de la céramique se développent donc eux aussi avec une direction. Le modèle graphique spatio-temporel cherche à intégrer cette directionnalité dans l'apprentissage. Il peut alors prévoir dans quelle direction les dommages se développeront. Les données manquent encore pour valider ce type de prévision directionnelle.

Il existe deux manières de traiter le temps. La première consiste à lire l'ordre temporel étape par étape. Elle ressemble à la lecture d'une phrase depuis le début. La seconde consiste à traiter directement la vitesse du changement. Elle apprend à quelle vitesse les dommages grandissent. Les deux méthodes décrivent le processus d'accumulation des dommages.

L'attention est aujourd'hui un outil central de l'intelligence artificielle. Les intelligences artificielles qui traduisent des textes utilisent aussi cette méthode. Le principe consiste à se concentrer davantage sur les mots importants d'une phrase. Dans un graphe de matériau, elle se concentre sur les voisins importants pour les dommages. Le même principe d'attention sert donc à la traduction des langues et à l'analyse des matériaux.

Cette méthode de graphe spatio-temporel est encore en développement. Les démonstrations à grande échelle sur les composites céramiques ne sont pas nombreuses. Pour bien prédire, il faut beaucoup de bonnes données. Rassembler des données d'essais à très haute température est en soi difficile. C'est pourquoi l'aide des lois physiques, traitées dans le sous-titre suivant, est nécessaire.

5.2.3 Rupture par fluage selon la direction et apprentissage intégrant les règles physiques

Le fluage est le phénomène par lequel un matériau s'allonge lentement sous l'effet d'une force appliquée pendant longtemps. C'est comme une corde à linge suspendue longtemps qui s'affaisse peu à peu. À haute température, ce phénomène s'accélère. Les pièces de fusée subissent des forces pendant longtemps à l'état chaud. Le fluage devient donc une variable majeure qui détermine la durée de vie des pièces de fusée.

Les dommages de fluage s'accumulent différemment selon la direction. C'est ce qu'on appelle l'anisotropie. L'anisotropie est une propriété par laquelle les caractéristiques diffèrent selon les directions. C'est comme le bois qui se fend facilement dans le sens des fibres. Un matériau reçoit des forces simultanément dans plusieurs directions. C'est ce qu'on appelle un chargement multiaxial.

Les chercheurs résument ces dommages par une seule variable. On l'appelle variable d'endommagement. Si la variable d'endommagement vaut 0, le matériau est intact. Si elle vaut 1, cela signifie que cet endroit s'est rompu. Plus les dommages augmentent, plus la partie restante supporte de force. Les dommages grandissent alors plus vite. À cause de cette rétroaction, les dommages augmentent de manière incontrôlable et avancent la rupture.

Quand la température augmente, le fluage s'accélère. C'est parce que les atomes se déplacent plus activement. Cette dépendance à la température est décrite par une fonction exponentielle. Même une faible hausse de température peut faire fortement augmenter la vitesse d'endommagement. Il est donc important d'abaisser la température maximale de surface. Le revêtement de la section précédente et l'écoulement de chaleur de cette section se rejoignent ici.

L'oxydation accélère encore ces dommages. Plus la couche d'oxyde s'épaissit, plus les frontières s'affaiblissent. On introduit donc l'épaisseur d'oxydation dans la loi d'endommagement. Cela signifie que le fluage et l'oxydation ne sont pas observés séparément, mais traités ensemble. Dans l'environnement d'une fusée, les deux se produisent toujours ensemble.

Il existe ici une règle physique importante. Les dommages ne grandissent que dans une seule direction. Une fissure déjà formée ne se referme pas d'elle-même. Même avec le temps, la variable d'endommagement ne diminue pas. Cette règle s'appelle l'irréversibilité de l'endommagement. Elle relève du même ordre d'idées que la deuxième loi de la thermodynamique.

Si l'intelligence artificielle enfreint cette règle, la prévision est fausse. Une réponse dans laquelle les dommages diminuent contredit la réalité. On lui applique donc une pénalité pendant l'apprentissage. Si une réponse viole la règle, on augmente fortement la perte. La méthode qui introduit cette pénalité dans la fonction de perte est l'apprentissage informé par la physique.

L'apprentissage informé par la physique intègre aussi d'autres règles. L'équilibre des forces en fait partie. En un point donné, la somme des forces qui poussent et qui tirent doit être cohérente. On ajoute aussi la règle selon laquelle la masse ne disparaît pas et n'apparaît pas. Ces règles sont ajoutées à la fonction de perte. Le modèle évite ainsi les réponses contraires à la physique.

Le critère de rupture tient aussi compte de la direction. Le matériau est faible face à la traction. On examine donc séparément la direction où la force de traction est la plus grande. On prend aussi en compte la pression qui gonfle le matériau de l'intérieur. Les forces dans plusieurs directions sont regroupées en un seul niveau de risque. Ce risque détermine la vitesse à laquelle les dommages se développent.

Cette méthode trouve son origine dans les réseaux de neurones informés par la physique. En 2019, l'équipe de Raissi a formulé ce concept. Elle a intégré directement les équations physiques dans l'apprentissage du réseau de neurones. L'idée est que les règles physiques combleraient les lacunes même lorsque les données sont rares. Cette idée se prolonge telle quelle dans la prédiction de la durée de vie des céramiques.

La vraie valeur des règles physiques apparaît dans l'extension des prédictions. Les données d'essai sont en général concentrées aux basses températures. Ce que l'on veut vraiment connaître, c'est le comportement autour de 2000 degrés Celsius. Les données à cette haute température sont presque inexistantes. Avec des règles physiques, on peut aussi prévoir de manière valable les domaines sans données.

Cependant, cette méthode a aussi ses limites. Si l'on introduit de mauvaises règles physiques, la prédiction se dégrade au contraire. Il est aussi difficile de fixer le poids relatif des règles. On ne peut pas sauter l'étape de validation par des données réelles de rupture. C'est pourquoi la prédiction par intelligence artificielle ne remplace pas les essais, mais sert d'outil pour en réduire le nombre.

5.3 Modèles génératifs pour concevoir l'architecture des fibres et les revêtements

La section précédente a prévu la durée de vie de matériaux déjà fabriqués. Cette section change de direction. On fixe d'abord la performance souhaitée, puis on cherche à rebours la structure qui produit cette performance. C'est ce qu'on appelle la conception inverse. Dans une analogie culinaire, cela revient à choisir le goût désiré, puis à chercher le mélange d'ingrédients correspondant.

Cette section porte sur les structures fibreuses tissées en trois dimensions et sur les revêtements d'interface. Il s'agit de décider sous quel angle tisser les fibres et quelle épaisseur de revêtement appliquer. Pour cela, on utilise une intelligence artificielle générative appelée modèle de diffusion. Un modèle de diffusion est une méthode qui façonne une structure nette à partir d'un bruit flou. On y ajoute une propriété qui empêche le résultat de varier lorsque l'orientation change.

5.3.1 Structures fibreuses tissées en volume et apprentissage insensible à l'orientation

Un composite tressé en 3D est un matériau formé par le tissage en volume de faisceaux de fibres. Il ressemble à un panier tressé serré dans trois directions. Un composite ordinaire est fabriqué par empilement de couches minces. Dans ce cas, les zones entre les couches sont faibles et s'ouvrent facilement. C'est ce qu'on appelle le délaminage interlaminaire.

Le tressage en 3D supprime cette faiblesse. Les fibres s'entrelacent dans plusieurs directions et il n'existe pas de frontière entre couches. Les dommages liés à l'ouverture des couches apparaissent donc difficilement. Cela est avantageux dans des zones soumises à de forts chocs thermiques, comme le bord d'attaque hypersonique. Le choc thermique est un dommage qui survient lorsqu'un matériau chauffe ou refroidit brusquement.

Il existe plusieurs types de tressage. On peut tresser les fibres dans quatre directions ou dans un plus grand nombre de directions. Plus les directions sont nombreuses, plus le matériau résiste de manière équilibrée à diverses charges. En contrepartie, le tressage devient plus difficile. Il faut donc choisir l'architecture adaptée à l'usage de la pièce. Ce choix d'architecture relève aussi de la conception inverse.

Le problème est que l'architecture n'est pas toujours parfaite. Dans la fabrication réelle, les fibres se tordent. Elles peuvent aussi être comprimées et voir leur section se déformer. L'angle de tressage fluctue également un peu. L'épaisseur du revêtement n'est pas uniforme selon les endroits. Ces fluctuations concentrent les efforts en certains points.

Ces fluctuations se traitent par les probabilités. Tous les produits ne sont pas identiques et diffèrent légèrement. On ne traite donc pas une structure unique correcte, mais une distribution de structures. Le modèle de diffusion convient bien à cette distribution. Il peut produire plusieurs structures plausibles.

La propriété d'équivariance est ici importante. L'équivariance est la propriété selon laquelle, si l'on fait tourner un objet, le résultat tourne de la même manière. Si l'on tourne une pièce vers la gauche, la force prédite doit elle aussi tourner vers la gauche. Sans cette propriété, une même structure serait jugée différemment selon son orientation, ce qui contredit la physique.

Dans l'espace en trois dimensions, un objet peut tourner ou se déplacer. Il existe une mathématique qui traite ces deux mouvements ensemble. On l'appelle groupe euclidien spécial. Le nom est difficile, mais le sens est simple. C'est un ensemble de règles qui traite ensemble la rotation et la translation. On conçoit l'intelligence artificielle de façon qu'elle respecte toujours ces règles de rotation et de translation.

Ces modèles de diffusion équivariants se sont d'abord développés dans la conception moléculaire. En 2025, l'équipe de Chen a proposé un modèle de diffusion équivariant reliant des graphes à plusieurs échelles. Elle a conçu des molécules en 3D avec ce modèle. Une molécule est aussi un objet qui tourne et se déplace en trois dimensions. La même mathématique peut donc être transposée aux structures fibreuses. Toutefois, cette étude portait sur des molécules, non sur l'architecture de fibres céramiques. Les faisceaux de fibres, les contraintes de tressage, les pores et la fabricabilité n'ont pas encore été validés avec ce modèle. La transposition au tressage céramique est la direction que dessine ce livre.

Voyons par un exemple pourquoi l'équivariance est importante. On pose la même vis dans différentes orientations sur un bureau. La résistance de la vis ne dépend pas de son orientation. L'intelligence artificielle doit elle aussi respecter ce fait. Sans équivariance, elle juge la même vis différemment selon l'orientation. Il faut alors collecter des données séparées pour chaque orientation, ce qui gaspille beaucoup l'apprentissage.

Respecter l'équivariance permet d'économiser les données. Les données d'une seule orientation suffisent à traiter toutes les orientations. Cette économie est importante lorsque les données sur les matériaux sont rares. Elle convient donc aux domaines pauvres en données, comme les céramiques à très haute température. On peut y voir une manière d'inscrire les lois physiques dans la structure.

En résumé, trois éléments se rencontrent. Ce sont la structure tridimensionnelle, les fluctuations probabilistes et la propriété qui ne dépend pas de l'orientation. Ces trois éléments sont intégrés dans un même modèle. C'est nécessaire pour refléter telle quelle la diversité de la fabrication réelle. Le sous-titre suivant examine comment ce modèle façonne les structures.

5.3.2 Modèle de diffusion qui restaure la structure à partir du bruit

L'idée de base d'un modèle de diffusion se divise en deux étapes. La première est le processus qui brouille la structure en bruit. La seconde est le processus qui restaure la structure à partir du bruit. L'intelligence artificielle apprend le processus de restauration. C'est comme si l'on inversait la diffusion d'une goutte d'encre dans l'eau.

Examinons d'abord la première étape. On ajoute peu à peu du bruit à une structure fibreuse nette. Avec le temps, la structure devient floue. À la fin, il ne reste qu'un bruit complet. Ce processus avance lentement selon des règles. Ces règles s'appellent le calendrier de bruit.

La seconde étape suit ce processus en sens inverse. Elle commence par le bruit et restaure peu à peu la structure. À chaque pas, elle retire un peu de bruit. Il existe alors une valeur qui indique dans quelle direction le retirer. On l'appelle le score. Le score indique la direction dans laquelle la structure devient plus plausible.

L'intelligence artificielle apprend précisément ce score. Elle observe une structure floue et devine la direction vers la netteté. Une fois l'apprentissage terminé, elle peut façonner une structure même à partir d'un bruit pur. Cette méthode s'appelle diffusion fondée sur le score. Les intelligences artificielles actuelles de génération d'images dessinent selon le même principe.

Cette méthode convient à la conception de matériaux pour une raison précise. Une structure de matériau n'a pas une seule bonne réponse. Plusieurs structures peuvent produire la même performance. Le modèle de diffusion génère ces différents candidats. L'humain choisit ensuite celui qui est le plus facile à fabriquer. Son utilité tient au fait qu'il ne donne pas une réponse unique, mais plusieurs options.

L'ajout de conditions est au cœur de la conception inverse. Produire n'importe quelle structure ne sert à rien. Il faut produire une structure dotée des performances souhaitées. On introduit donc les performances cibles comme conditions. Ces objectifs comprennent notamment la conductivité thermique, la résistance à la traction, la ténacité à la rupture et la vitesse d'ablation.

La ténacité à la rupture est la capacité à résister à la croissance d'une fissure. La vitesse d'ablation est la rapidité avec laquelle la surface s'érode. On fixe ces valeurs au niveau souhaité. Le modèle façonne alors une structure conforme à ces conditions. On peut aussi régler la force avec laquelle les objectifs sont pris en compte.

Cette technique de prise en compte des conditions est déjà utilisée pour divers matériaux. En 2025, une équipe de recherche a proposé un modèle de diffusion en 3D intégrant des contraintes physiques. Elle a conçu des composites polymères renforcés de fibres en fonction de performances cibles. Elle a défini une courbe contrainte-déformation souhaitée et a recherché la structure correspondante à rebours. Cette méthode imposait le respect direct des règles physiques pendant le processus génératif.

Si l'on impose trop fortement les conditions, un autre problème apparaît. En poursuivant seulement la performance cible, on obtient des structures impossibles à fabriquer. Elles sont séduisantes sur le papier, mais impossibles à tresser en réalité. Il faut donc chercher la réponse dans le domaine fabricable. Cela consiste à intégrer aussi les règles de fabrication parmi les conditions. Trouver cet équilibre entre performance et fabricabilité est l'un des points difficiles de la conception inverse.

Pour appliquer cette méthode aux composites céramiques, il reste des obstacles à franchir. Il faut collecter beaucoup de données sur les structures tridimensionnelles des céramiques. Ces données s'obtiennent par tomographie aux rayons X. La tomographie aux rayons X repose sur le même principe que le scanner médical. Elle permet de voir l'intérieur d'une pièce en volume sans la découper. Les structures ainsi obtenues deviennent la base du modèle.

La collecte des données prend du temps. L'imagerie d'une éprouvette demande longtemps. La segmentation des données acquises en grains et en fibres exige aussi beaucoup de travail. Les données sont donc toujours insuffisantes. L'équivariance vue plus haut atténue ce manque. Elle permet d'apprendre davantage de cas avec moins de données.

5.3.3 Déterminer ensemble l'angle des fibres et l'épaisseur du revêtement

Le modèle de conception inverse produit deux décisions. La première concerne l'angle de tressage des fibres. La seconde concerne l'épaisseur du revêtement d'interface. Ces deux éléments influencent fortement la résistance du matériau et sa tenue à la chaleur.

Commençons par l'angle des fibres. Les efforts s'appliquent souvent fortement dans une direction. Une tuyère de fusée reçoit une force qui pousse depuis l'intérieur. Un bord d'attaque hypersonique subit des

efforts de cisaillement dans la direction de l'écoulement. Lorsque les fibres sont placées dans la direction de l'effort, le matériau y résiste bien. Le modèle fixe donc l'angle en tenant compte des efforts.

L'épaisseur du revêtement est tout aussi importante. Il faut ici distinguer deux types de films. Le premier est une fine couche d'interface placée entre la fibre et la matrice. Cette couche d'interface est faite de nitrure de bore ou de carbone pyrolytique. Ce film empêche une fissure de couper directement la fibre. La fissure glisse le long du film et disperse l'effort. Si la couche d'interface est trop mince, cet effet est faible ; si elle est trop épaisse, d'autres problèmes apparaissent.

Le second est le revêtement de barrière environnementale appliqué à l'extérieur du matériau. Ce revêtement empêche l'oxygène et la vapeur d'eau de pénétrer à l'intérieur. Les disilicates de terres rares sont des candidats pour ce revêtement externe. Ces matériaux bloquent bien l'oxygène à haute température. La couche d'interface et le revêtement externe ont des emplacements et des rôles différents. On empile parfois plusieurs couches de ces deux films pour confier un rôle différent à chaque couche.

Le modèle de conception inverse traite ces deux décisions en même temps. Il cherche à augmenter la résistance tout en réduisant les contraintes thermiques. Ces deux objectifs entrent souvent en conflit. Gagner d'un côté fait perdre un peu de l'autre. Ce type de problème s'appelle optimisation multiobjectif. Le modèle trouve un bon point d'équilibre entre résistance et contrainte thermique.

La concentration des efforts en un seul endroit s'appelle concentration de contraintes. C'est comme lorsqu'un vêtement commence à se déchirer par un fil. Les fissures apparaissent d'abord aux endroits où la concentration de contraintes est forte. La conception cherche donc à répartir les efforts uniformément. C'est pourquoi on affine l'angle des fibres et l'épaisseur du revêtement.

Lorsqu'on cherche l'équilibre, on examine aussi la continuité. Si une fibre se plie brusquement, les efforts se concentrent à cet endroit. Il en va de même si l'épaisseur du revêtement change brutalement. Le modèle guide donc les angles et les épaisseurs pour qu'ils s'enchaînent en douceur. Il pénalise les conceptions où l'angle ou l'épaisseur varie brusquement.

Cette conception inverse reste proche du stade de preuve de concept. Les affirmations sur l'amélioration d'une valeur de performance précise doivent être accueillies avec prudence. Il faut vérifier si la structure produite par le modèle atteint réellement cette performance. Cette vérification passe à nouveau par la fabrication et les essais. L'intelligence artificielle a pour rôle de réduire le nombre de candidats.

En 2026, des recherches génératives utilisant des conditions données sous forme de texte sont aussi apparues. Une équipe de recherche a créé des microstructures à partir de phrases décrivant les propriétés cibles. Il s'agit encore d'une étude initiale non soumise à l'évaluation par les pairs. La direction est toutefois claire. L'humain exprime la performance voulue, et l'intelligence artificielle façonne la structure. Ce mouvement peut se prolonger dans la conception des composites céramiques.

5.4 Relier le monde minuscule au flux thermique de la pièce entière

Cette section traite du flux de chaleur dans le matériau. La chaleur est la clé qui détermine la durée de vie du matériau. Il faut savoir où et à quelle vitesse la chaleur circule pour prédire la température. Il faut connaître la température pour prédire ensuite la vitesse d'oxydation et de fluage.

Le problème est que le flux de chaleur se décide dans un monde minuscule. Les vibrations des atomes transportent la chaleur. Pourtant, ce que nous voulons connaître, c'est la température de la pièce entière. Il faut relier le monde minuscule au monde très grand. Ce lien s'appelle le couplage

multi-échelle. Cette section explique comment réaliser ce lien au moyen d'un réseau de neurones opérateur profond.

5.4.1 Calculer la conduction thermique à partir des vibrations atomiques (dynamique moléculaire de Green-Kubo)

Dans les céramiques, la chaleur se transmet par les vibrations des atomes. Les quanta de ces vibrations s'appellent phonons. On peut les comprendre simplement comme les quanta du son. Les vibrations se propagent le long du réseau cristallin et transportent la chaleur. La conductivité thermique dépend de la qualité de propagation de ces vibrations.

À haute température, ces vibrations se heurtent entre elles. Lorsque les phonons entrent en collision, le flux de chaleur se désorganise. Les joints de grains, les défauts et les atomes mélangés dispersent aussi les vibrations. Plus cette dispersion est forte, plus la chaleur circule lentement. Pour comprendre la conduction thermique des céramiques à très haute température, il faut comprendre cette dispersion.

Les céramiques à haute entropie sont particulières sur ce point. Plusieurs éléments y sont mélangés, et le réseau cristallin n'est pas uniforme. Cette irrégularité disperse fortement les vibrations. En conséquence, la chaleur se propage mal. Si l'objectif est la barrière thermique, cette propriété est utile. La chaleur de la surface pénètre moins vers l'intérieur.

La méthode qui permet de calculer ce petit monde est la dynamique moléculaire. Dans l'ordinateur, on fait bouger les atomes un par un. On suit la manière dont les atomes vibrent et se heurtent. Ce calcul traite des durées très courtes, de l'ordre de la nanoseconde. Une nanoseconde est un milliardième de seconde. C'est un monde aussi petit que rapide.

La formule qui permet d'extraire la conductivité thermique est la formule de Green-Kubo. Cette formule consiste à observer longtemps les fluctuations du flux de chaleur. C'est un peu comme observer les rides d'une eau calme pour en comprendre les propriétés. On rassemble les oscillations du flux de chaleur que les atomes produisent d'eux-mêmes. À partir de ces oscillations, on calcule la conductivité thermique. Cette formule a été établie dans les années 1950 par Green et Kubo.

La précision du calcul dépend de la qualité avec laquelle on connaît les forces entre les atomes. Les règles qui décrivent ces forces sont appelées potentiels interatomiques. Autrefois, on utilisait des règles simples fabriquées à la main par les chercheurs. Ces règles étaient rapides, mais peu précises. À l'inverse, les calculs quantiques étaient précis, mais beaucoup trop lents.

C'est ici que le potentiel interatomique par apprentissage automatique (MLIP) fait le lien. L'intelligence artificielle apprend les résultats des calculs quantiques et prédit les forces. Elle fournit une précision proche de celle des calculs quantiques, mais à grande vitesse. Cette méthode est traitée en détail dans les chapitres précédents de ce livre. Le MLIP est aussi utilisé pour calculer la conductivité thermique à très haute température.

Les recherches récentes montrent la force de cette combinaison. En 2021, une équipe de recherche a étudié la zircone avec un MLIP. Elle a calculé en même temps les changements de phase selon la température et la conduction thermique. Elle a extrait le flux de chaleur par la méthode de Green-Kubo. Cette méthode prend en compte sans omission les effets complexes des vibrations atomiques.

Ce calcul a une limite qu'il faut relever. La méthode de Green-Kubo donne la conductivité thermique lorsque le matériau est à l'équilibre. Cette valeur renseigne sur la propriété fondamentale de l'intérieur du matériau. Mais la surface où se produit l'ablation n'est pas à l'équilibre. Là, le rayonnement et les réactions chimiques de surface dominent fortement la chaleur. La valeur de Green-Kubo ne suffit donc

pas à expliquer toute la chaleur en surface. Il convient de l'utiliser comme donnée d'entrée pour la conduction thermique à l'intérieur de la pièce.

Pourquoi faut-il descendre jusqu'à ce petit monde ? Ne pourrait-on pas mesurer directement la conductivité thermique ? À très haute température, la mesure est difficile. Il n'est pas simple de mesurer l'intérieur d'une céramique à 2000 degrés Celsius. L'oxydation progresse et le matériau lui-même change. Il faut donc une voie qui permette d'obtenir ces valeurs par le calcul.

Le calcul présente un autre avantage. On peut examiner à l'avance des compositions qui n'ont pas encore été fabriquées. Les céramiques à haute entropie offrent un nombre immense de combinaisons. Il est impossible de les fabriquer et de les mesurer toutes. Le calcul indique à l'avance la conduction thermique des candidats. On ne fabrique alors réellement que les combinaisons prometteuses.

Cette évolution se poursuit encore aujourd'hui. En 2026, une étude a prédit une conductivité thermique très faible avec Green-Kubo et le MLIP. Cette combinaison s'installe dans plusieurs matériaux. Le calcul exige toutefois encore de gros ordinateurs. Il faut aussi traiter des erreurs comme la coupure temporelle ou les fluctuations statistiques. C'est pourquoi on effectue plusieurs calculs et on en prend la moyenne.

Le principe de validation reste ici le même. Les valeurs calculées doivent être comparées aux valeurs expérimentales. On teste le calcul sur quelques matériaux déjà connus. Si le calcul correspond bien à l'expérience, il inspire confiance pour les nouveaux matériaux. Une valeur qui n'a pas suivi ce processus d'ajustement reste seulement une référence. Le calcul et l'expérience sont deux yeux qui se vérifient l'un l'autre.

5.4.2 Équation du flux de chaleur dans toute la pièce

Le sous-titre précédent traitait d'un monde très petit. Élargissons maintenant le regard à toute la pièce. La température d'une pièce varie selon l'endroit et selon le temps. La règle qui décrit cette évolution est l'équation de la conduction thermique. L'équation s'écrit en formules, mais son sens peut s'expliquer avec des mots.

Le sens de l'équation de la conduction thermique est simple. Le changement de température en un point est déterminé par la différence entre la chaleur qui entre et la chaleur qui sort. La chaleur circule du côté chaud vers le côté froid. La vitesse de ce flux est la conductivité thermique. La valeur calculée plus haut entre ici dans l'équation.

Cette équation est difficile pour plusieurs raisons. D'abord, la conductivité thermique varie avec la température. Quand la température augmente, la conductivité thermique change. On appelle cela une non-linéarité. La non-linéarité désigne une relation où la cause et l'effet ne sont pas directement proportionnels. À cela s'ajoute le fait que le matériau n'a pas les mêmes propriétés dans toutes les directions. La chaleur circule mieux dans la direction où les fibres sont disposées.

À cela s'ajoute le problème du changement du matériau lui-même. Quand l'oxydation progresse, la conductivité thermique change. Quand la surface s'use, l'épaisseur diminue. Les valeurs de l'équation changent donc avec le temps. L'oxydation et le fluage de la section précédente s'entremêlent avec le flux de chaleur de cette section. Il faut donc résoudre ces phénomènes ensemble, sans les séparer.

Ce qui se produit aux frontières est aussi complexe. Sur une surface hypersonique, plusieurs sources de chaleur se superposent. La chaleur due à l'air entre dans la surface. Il y a aussi le rayonnement, par lequel la surface émet de la chaleur sous forme de lumière. C'est le phénomène par lequel un objet chaud rougit et perd de la chaleur. À cela s'ajoute encore la chaleur produite par les réactions chimiques.

La chaleur chimique apparaît lorsque des atomes se regroupent à la surface. En régime hypersonique, les molécules d'air se divisent en atomes. Lorsque ces atomes se recombinent à la surface, ils dégagent de la chaleur. On appelle cela la recombinaison catalytique. L'ampleur de cette chaleur varie selon le matériau de surface. Le choix du matériau influence donc fortement la température de surface.

Toute cette chaleur est intégrée dans les conditions aux limites d'une même équation. On y place ensemble la chaleur entrante, le rayonnement sortant et la chaleur chimique. Le temps s'écoule lui aussi. La chaleur change continuellement le long de la trajectoire de vol. On appelle cela un état transitoire. Cela signifie que l'on traite un processus en cours, et non un instant immobile.

La méthode traditionnelle pour résoudre cette équation est la méthode des éléments finis. On divise la pièce en petits morceaux. On résout l'équation pour chaque morceau, puis on les relie. Cette méthode est précise, mais le calcul prend longtemps. Il faut répéter le calcul à chaque instant. Il est difficile de résoudre en temps réel toute une trajectoire à Mach 7.

Le développement des fusées et des véhicules hypersoniques exige des réponses rapides. Chaque modification de conception impose de recalculer la température. Pendant les essais, il faut des prévisions presque en temps réel. Un calcul lent ne peut pas répondre à ces besoins. C'est pourquoi l'opérateur d'intelligence artificielle du sous-titre suivant apparaît.

5.4.3 Réseau neuronal qui transforme une fonction en une fonction (DeepONet)

Le réseau neuronal opérateur profond est une intelligence artificielle qui apprend une relation transformant une fonction en une autre fonction. On l'appelle DeepONet. En général, un réseau neuronal reçoit des nombres et produit des nombres. DeepONet reçoit une fonction et produit une fonction. Ici, une fonction désigne par exemple une entrée thermique qui varie avec le temps.

Cette idée a été formalisée en 2021 par l'équipe de Lu. Ces chercheurs ont établi la théorie et la structure des réseaux neuronaux qui apprennent des opérateurs. Cette recherche s'appuie sur un théorème mathématique. Il affirme qu'un opérateur peut être approché par un réseau neuronal. Ce théorème d'approximation constitue la base théorique qui soutient DeepONet.

DeepONet se compose de deux réseaux. L'un lit la fonction d'entrée. L'autre lit le lieu et le moment où l'on veut observer la réponse. Les résultats des deux réseaux sont multipliés pour produire la réponse. Le premier réseau est appelé branche, et le second tronc. La branche et le tronc se rencontrent pour donner la température.

Pourquoi est-il important de transformer une fonction en une fonction ? Dans un problème thermique, l'entrée n'est pas un seul nombre. L'entrée est un échauffement aérodynamique qui varie avec le temps. La sortie est aussi un champ de température qui varie selon le lieu et le temps. Ce type de problème relie une fonction à une autre fonction. DeepONet apprend cette relation dans son ensemble.

La force de DeepONet est sa vitesse. Une fois entraîné, il donne immédiatement une réponse à une nouvelle entrée. Il ne résout pas chaque cas depuis le début comme la méthode des éléments finis. Il peut parcourir rapidement de nombreuses conditions de vol. Il convient donc bien pour observer la température en modifiant la conception.

Le problème est celui des données d'apprentissage. Pour apprendre de bonnes réponses, il faut beaucoup de données précises. Or les données précises coûtent cher à produire. Les calculs par éléments finis et les calculs de dynamique moléculaire prennent longtemps. Si les données sont peu nombreuses, l'intelligence artificielle apprend mal. La méthode multifidélité résout ce problème.

La fidélité désigne le degré de précision d'un calcul. La haute fidélité correspond à un calcul précis, mais coûteux. La basse fidélité correspond à un calcul approximatif, mais peu coûteux. La multifidélité utilise

les deux ensemble. On rassemble beaucoup de données peu coûteuses et seulement un petit nombre de données coûteuses.

L'idée de cette méthode ressemble à une esquisse suivie d'une couche de finition. Le calcul peu coûteux trace d'abord la vue d'ensemble. Le calcul coûteux ajoute ensuite une couche précise par-dessus. L'intelligence artificielle apprend la différence entre la réponse de basse fidélité et la réponse de haute fidélité. Cette différence est appelée résidu. En apprenant le résidu, on améliore la précision même avec peu de données coûteuses.

En 2022, l'équipe de Lu a appliqué ce DeepONet multifidélité au transfert thermique à l'échelle nanométrique. Le problème traité concernait le flux de chaleur dans un monde très petit. Avec la même quantité de données coûteuses, la méthode multifidélité a fortement réduit l'erreur. Elle a aussi fortement réduit la quantité de données coûteuses nécessaires. Toutefois, cette étude portait sur le transfert thermique nanométrique. Elle ne constitue pas une démonstration reliant l'oxydation ou l'ablation des céramiques à très haute température à une charge thermique à Mach 7.

Il faut aussi expliquer le terme homogénéisation. Un composite céramique contient des fibres et des pores entremêlés. Si l'on traite cette structure complexe élément par élément, le calcul devient trop lourd. On remplace donc une petite zone par des propriétés moyennes. C'est ce qu'on appelle l'homogénéisation. Le calcul de basse fidélité trace la vue d'ensemble à partir de ces propriétés moyennes.

Il faut aussi souligner pourquoi il est difficile de relier ces deux mondes. Le monde atomique évolue à l'échelle de la nanoseconde. Le monde de la pièce traite des durées de plusieurs centaines de secondes. Les échelles de temps diffèrent de plus de dix ordres de grandeur. Les échelles de taille diffèrent tout autant. Il est impossible de calculer cet écart d'un seul bloc.

Relier ces deux mondes de cette manière dans une structure thermique céramique est la voie proposée par ce livre. La basse fidélité devient un modèle simple d'homogénéisation. La haute fidélité devient une analyse précise reliant dynamique moléculaire et éléments finis. L'intelligence artificielle relie ces deux niveaux. Ainsi, la conduction thermique du très petit monde peut se prolonger jusqu'à la température de la pièce. Ce lien n'a pas encore été largement validé dans les structures thermiques céramiques.

5.4.4 Apprentissage intégrant les règles physiques et accélération

Le fait que l'intelligence artificielle soit rapide ne signifie pas qu'elle peut produire n'importe quelle réponse. La réponse doit respecter les lois physiques. On intègre donc des règles physiques dans l'apprentissage. Cette méthode a la même racine que la prédiction de durée de vie présentée dans la section précédente.

On commence par un apprentissage qui ajuste les données. Il ajuste à la fois les données de basse fidélité et celles de haute fidélité. On guide l'intelligence artificielle pour que ses réponses se rapprochent des données. On pénalise l'écart entre la réponse et les données. Cette pénalité est appelée perte.

On ajoute ensuite un apprentissage qui respecte l'équation. On insère la réponse de l'intelligence artificielle dans l'équation de la conduction thermique. Si la réponse satisfait bien l'équation, la pénalité est faible. Si elle s'en écarte, la pénalité est forte. Ainsi, même là où il n'y a pas de données, l'intelligence artificielle produit une réponse conforme à la physique.

L'intégration des règles physiques permet de tenir même avec peu de données. Un apprentissage purement fondé sur les données exige beaucoup de données. Si les données sont rares, il remplit les intervalles de manière erronée. Les règles physiques combler ces vides avec l'équation. Cette approche

convient aux problèmes céramiques, où les données à très haute température sont rares. Le fait de tenir avec peu de données est un grand avantage de l'apprentissage informé par la physique.

Les conditions aux limites sont intégrées de la même manière. On impose le respect de l'équilibre thermique de surface. La chaleur entrante et le rayonnement sortant doivent correspondre. Si cette règle est violée, une pénalité est appliquée. Comme la température de surface a une grande influence sur la durée de vie du matériau, cette condition est capitale.

On rassemble ces différentes pénalités en une seule. On additionne la pénalité liée aux données, la pénalité liée à l'équation et la pénalité liée aux limites. On attribue un poids à chaque pénalité. L'intelligence artificielle apprend à rendre cette pénalité totale aussi faible que possible. Elle produit alors des prévisions rapides et conformes à la physique.

Pour intégrer les règles physiques, il faut calculer des dérivées. Il faut mesurer comment la température varie selon le lieu et le temps. Il existe une technique qui calcule automatiquement ces dérivées. On l'appelle différentiation automatique. Mais ce calcul est lourd et ralentit la vitesse.

C'est pourquoi on utilise plusieurs méthodes pour alléger les opérations. On divise le calcul afin de réduire les parties qui se recouvrent. On transforme les coordonnées avec des fonctions lisses pour faciliter la différentiation. Ces optimisations permettent une inférence beaucoup plus rapide que les calculs traditionnels. Toutefois, les facteurs d'accélération précis et les valeurs d'erreur dépendent de chaque problème. Ces valeurs ne doivent être citées que dans des cas validés.

La valeur de cette méthode apparaît au stade de la conception. Quand on modifie la forme d'une tuyère, la répartition de la température change. Avec un calcul traditionnel, il faut attendre longtemps à chaque modification. Un opérateur d'intelligence artificielle montre immédiatement la nouvelle température. On peut alors comparer des dizaines de formes en une journée. Le concepteur parvient plus vite à une meilleure réponse.

Elle est aussi utile sur un site d'essai. Pendant un essai moteur, il faut des prévisions presque en temps réel. Il faut savoir à l'avance quelle zone atteindra une température dangereuse. L'opérateur d'intelligence artificielle produit rapidement cette prévision. Mais il doit être continuellement corrigé avec les données d'essai pour rester fiable. Il faut continuer à réduire l'écart entre prévision et mesure réelle.

Les limites de cette méthode sont également claires. Si les règles physiques sont mal intégrées, la réponse se dégrade. Déterminer les poids entre les règles demande aussi beaucoup de travail. Comme les données réelles à très haute température sont rares, la validation est difficile. Cette technologie en est donc encore au stade où la recherche avance avec les essais. Elle sert à réduire le nombre d'essais plutôt qu'à les remplacer.

Synthèse

Ce chapitre a traité des surfaces chaudes des fusées et des véhicules hypersoniques. Les matériaux utilisés à cet endroit doivent résister en même temps à la chaleur, à l'oxydation, aux efforts mécaniques et à une longue durée d'usage. Les métaux ne suffisent pas, et des matériaux céramiques sont nécessaires. Les composites à fibres de carbone et les céramiques à ultra-haute température en sont les candidats. Connaître à l'avance la durée de vie de ces matériaux est la clé du développement.

Nous avons d'abord examiné comment les matériaux se dégradent. Les composites à fibres de carbone se dégradent lorsque l'oxygène pénètre le long des fissures. Le carbure de silicium gagne ou perd une couche protectrice selon la température et la pression d'oxygène. Les céramiques à ultra-haute température voient leur surface se détacher sous l'effet de l'évaporation de la couche d'oxyde et des

changements de phase. Ce processus d'endommagement est l'objet de la prévision de durée de vie. Comme l'endommagement commence le plus souvent silencieusement à l'intérieur du matériau, il faut lire non pas la surface, mais l'intérieur.

Nous avons ensuite vu comment l'intelligence artificielle traite cet endommagement. Elle transforme les grains cristallins en points et les frontières en lignes pour construire un graphe. Elle y ajoute le temps pour suivre l'accumulation des dommages. Elle intègre les lois physiques dans l'apprentissage afin de prévoir même les domaines à très haute température où les données sont rares. La règle selon laquelle l'endommagement ne revient pas en arrière en est un exemple représentatif.

Nous avons ensuite examiné la conception inverse. On fixe d'abord les performances voulues, puis on cherche à rebours la structure correspondante. Un modèle de diffusion façonne une structure à partir d'un bruit flou. Il intègre des propriétés qui ne varient pas selon la direction afin de rester conforme à la physique. Il détermine ensemble l'angle des fibres et l'épaisseur du revêtement d'interface. Le modèle de diffusion ne donne pas une seule réponse, mais plusieurs candidats. L'être humain choisit alors, parmi ces candidats, la structure la plus facile à fabriquer.

Enfin, nous avons examiné la mise en cohérence multi-échelle des flux de chaleur. Il faut relier le monde des vibrations atomiques à celui de la pièce entière. La dynamique moléculaire de Green-Kubo calcule la conduction thermique du petit monde. Le réseau de neurones opérateur profond transfère cette valeur vers la température de la pièce. La méthode multifidélité relie des données peu coûteuses et des données coûteuses. Grâce à cette mise en cohérence, on peut prévoir rapidement la température des pièces. Cette prévision rapide est utile à la fois au stade de la conception et sur les sites d'essai.

Tous ces outils ont un point commun. L'intelligence artificielle ne remplace pas les essais. Elle réduit le nombre de candidats et avance le moment de la prévision. La vérification finale revient à la soufflerie, au jet d'arc et aux essais de combustion. Le développement ne s'accélère vraiment que lorsque l'intelligence artificielle et les essais réels avancent ensemble.

Un autre point commun est leur association avec la physique. L'intelligence artificielle présentée dans ce chapitre n'apprend pas seulement à partir des données. Elle intègre dans l'apprentissage les lois de la thermodynamique et l'équilibre des forces. Elle peut ainsi traiter même les domaines à très haute température où les données sont rares. C'est un mur difficile à franchir avec un apprentissage fondé uniquement sur les données. La rencontre entre la physique et l'intelligence artificielle est la clé centrale de ce chapitre.

Les méthodes de ce chapitre sont liées les unes aux autres. La prévision des flux de chaleur donne la température de surface. La température de surface détermine la vitesse d'oxydation et de fluage. L'oxydation et le fluage mènent à la prévision de durée de vie. La prévision de durée de vie devient l'objectif de la conception inverse. Elles forment ainsi une seule chaîne.

Il reste aussi de nombreux défis. Les données réelles à très haute température manquent encore. Les performances revendiquées par les modèles de conception inverse doivent être vérifiées sur des objets réels. La manière d'intégrer les règles physiques doit aussi être affinée. Plus ces défis seront résolus, plus la conception des systèmes de protection thermique de prochaine génération progressera. Un système de protection thermique désigne l'ensemble de la structure qui protège le véhicule contre les surfaces chaudes.

La Corée entre elle aussi dans ce domaine. Nuri et le lanceur de prochaine génération traitent des pièces chaudes. Une fusée réutilisable doit employer ses pièces plusieurs fois. La prévision de durée de vie devient donc d'autant plus importante. Ces méthodes qui associent intelligence artificielle et physique en constituent la base. Le regard qui lit le petit monde des matériaux protège la sécurité des grands vols.

Sources associées

- Binner, J., Porter, M., Baker, B., Zou, J., Venkatachalam, V., Rubio Diaz, V., D'Angio, A., Ramanujam, P., Zhang, T., & Murthy, T. S. R. C. (2020). Selection, processing, properties and applications of ultra-high temperature ceramic matrix composites. *International Materials Reviews*, 65(7), 389-444. <https://doi.org/10.1080/09506608.2019.1652006>
- Fahrenholtz, W. G., & Hilmas, G. E. (2017). Ultra-high temperature ceramics: Materials for extreme environments. *Scripta Materialia*, 129, 94-99. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.10.018>
- DiCarlo, J. A., Yun, H. M., Morscher, G. N., & Bhatt, R. T. (2004). SiC/SiC composites for 1200°C and above. NASA Technical Reports Server, 20040191405. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20040191405>
- NASA. (2008). Ceramic Matrix Composite (CMC) thermal protection systems and hot structures for hypersonic vehicles. NASA Technical Reports Server, 20080017096. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20080017096>
- Wu, T., Wang, Y., Qi, W., Luo, X., Luo, P., Gao, X., & Song, Y. (2026). Predictive constitutive modelling of oxidation-induced degradation in 2.5D woven C/SiC composites. *Materials*, 19(2), 307. <https://doi.org/10.3390/ma19020307>
- Qu, N., Zhou, W., Zhang, W., Liu, Y., Zheng, L., Cao, D., Tan, M., Zhu, J., & Zhang, X. (2026). Research progress and prospects of ultra-high-temperature ceramics: Experimentation, multiscale simulation and data-driven design. *Nanomaterials*, 16(11), 693. <https://doi.org/10.3390/nano16110693>
- Baier, L., Frieß, M., Hensch, N., & Leisner, V. (2024). Development of ultra-high temperature ceramic matrix composites for hypersonic applications via reactive melt infiltration and mechanical testing under high temperature. *CEAS Space Journal*, 17(4), 635-644. <https://doi.org/10.1007/s12567-024-00562-y>
- Peters, A. B., Zhang, D., Chen, S., Ott, C., Oses, C., Curtarolo, S., McCue, I., Pollock, T. M., & Eswarappa Prameela, S. (2024). Materials design for hypersonics. *Nature Communications*, 15, 3328. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46753-3>
- Bianco, G., Nisar, A., Zhang, C., Boesl, B., & Agarwal, A. (2022). Predicting oxidation damage in ultra high-temperature borides: A machine learning approach. *Ceramics International*, 48(20), 29763-29769. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.06.236>
- Meng, H., Liu, Y., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2025). Machine-learning-potential-driven prediction of high-entropy ceramics with ultra-high melting points. *Cell Reports Physical Science*, 6, 102449. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102449>
- Liu, Y., Meng, H., Zhu, Z., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2024). Exploring mechanical and thermal properties of high-entropy ceramics via general machine learning potentials. *arXiv*, 2406.08243. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2406.08243>
- Thomas, A., Durmaz, A. R., Alam, M., Gumbsch, P., Sack, H., & Eberl, C. (2023). Materials fatigue prediction using graph neural networks on microstructure representations. *Scientific Reports*, 13, 12562. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39400-2>
- Zheng, B., Wen, J., Choy, Y.-S., & Fei, C. (2026). Physics-constrained EBSD image inpainting via adversarial graph learning: Bridging crystallographic rules and multimodal deep learning. *Expert Systems with Applications*, 298, 129667. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2025.129667>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Chen, L., Li, Y., Ma, Y., Gao, L., & Yu, L. (2025). Multiscale graph equivariant diffusion model for 3D molecule design. *Science Advances*, 11(16), eadv0778. <https://doi.org/10.1126/sciadv.adv0778>
- Xu, P., Wu, Y., Zarei, A., Ahmed, S., Pilla, S., Li, G., & Luo, F. (2025). Physically constrained 3D diffusion for inverse design of fiber-reinforced polymer composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 303, 112515. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2025.112515>
- Dai, B., Wang, H., & Gui, J. (2026). Property-informed diffusion-based text-to-microstructure generation. *arXiv*, 2606.08150. Prépublication non encore évaluée par les pairs. <https://arxiv.org/abs/2606.08150>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Pestourie, R., Johnson, S. G., & Romano, G. (2022). Multifidelity deep neural operators for efficient learning of partial differential equations with application to fast inverse design of nanoscale heat transport. *Physical Review Research*, 4, 023210. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023210>

- Green, M. S. (1954). Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. *Journal of Chemical Physics*, 22, 398-413. <https://doi.org/10.1063/1.1740082>
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12, 570-586. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>
- Verdi, C., Karsai, F., Liu, P., Jinnouchi, R., & Kresse, G. (2021). Thermal transport and phase transitions of zirconia by on-the-fly machine-learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 7, 156. <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00630-5>
- Zhang, X., Liu, N., Guo, Q., Shi, G., & Wang, Y. (2026). Beyond Boltzmann transport: Green-Kubo prediction of lattice thermal conductivity with machine-learned potentials. *Journal of Chemical Physics*, 164(7), 074101. <https://doi.org/10.1063/5.0297462>
- Mandal, S., Srivastava, A., Das, T., Singh, A. K., & Maiti, P. K. (2025). Probing lattice anharmonicity and thermal transport in ultralow- κ materials using machine learning interatomic potentials. *Small*, 22(8), 2513476. <https://doi.org/10.1002/sml.202513476>
- Arabha, S., Shokri Aghbolagh, Z., Ghorbani, K., Hatam-Lee, S. M., & Rajabpour, A. (2021). Recent advances in lattice thermal conductivity calculation using machine-learning interatomic potentials. *Journal of Applied Physics*, 130(21), 210903. <https://doi.org/10.1063/5.0069443>

Chapitre 6. Modélisation des contraintes thermiques dans les procédés de fabrication additive métallique (LPBF/DED) et détection in situ des défauts

Introduction

Imaginons que l'on fasse cuire un gâteau dans une cuisine. On verse la pâte dans un moule, puis on la met au four, et l'on obtient un seul bloc. Cette façon de fabriquer un objet en versant la matière dans un moule en une seule fois est une méthode ancienne. Les pièces de fusée ont longtemps été fabriquées ainsi. On usinait un grand bloc de métal, ou bien on fabriquait plusieurs morceaux séparés avant de les assembler.

Cependant, des centaines de canaux de refroidissement très fins traversent l'intérieur de la chambre de combustion et de la tuyère d'un moteur-fusée. Pour protéger la paroi contre les flammes brûlantes, il faut faire circuler du carburant froid dans ces canaux. Une structure interne aussi complexe est difficile à fabriquer par usinage. Si l'on assemble des morceaux, les joints deviennent des zones fragiles.

La fabrication additive métallique ouvre une autre voie. Cette méthode fabrique une pièce en empilant le métal couche par couche. Comme une imprimante 3D dépose du plastique ligne après ligne, elle fait fondre puis empile de la poudre métallique ou un fil métallique. Des canaux internes creux et complexes peuvent être fabriqués en un seul procédé. Comme il n'y a pas de joints, les zones fragiles diminuent.

Cette méthode donne de la liberté, mais elle apporte aussi de nouvelles inquiétudes. Pendant que le métal est fondu et empilé couche après couche, de très petits pores peuvent apparaître. À chaque couche, la pièce chauffe puis refroidit, ce qui peut aussi la déformer. La forme des cristaux peut varier selon les directions, ce qui peut rendre la résistance plus forte dans un sens que dans un autre. Ces défauts se voient mal à l'œil nu. Pourtant, dans une pièce de fusée, un seul petit défaut peut entraîner un accident grave.

Ce chapitre examine comment l'intelligence artificielle aide à résoudre ce problème. L'intelligence artificielle accomplit trois tâches. Elle détecte rapidement les défauts pendant la fabrication. Elle remplace des calculs lents pour prédire vite les contraintes thermiques et les déformations. Elle aide à modifier les conditions du procédé au fur et à mesure. En suivant ces trois tâches dans l'ordre, on voit se dessiner l'image d'une usine capable de fabriquer par elle-même des pièces de fusée presque sans défauts.

Une idée se trouve à la base des techniques étudiées dans ce chapitre. L'intelligence artificielle seule ne suffit pas, et la physique seule ne suffit pas non plus. Une intelligence artificielle qui n'apprend que des données est sensible au bruit. Si l'on n'utilise que des calculs physiques, le processus est trop lent. En les combinant, chacune compense les faiblesses de l'autre. Cette combinaison est au cœur de l'apprentissage automatique informé par la physique, et plusieurs techniques de ce chapitre en sont des exemples.

6.1 Deux façons de fabriquer des pièces de fusée par empilement

Ce que traite cette section

Il existe deux méthodes représentatives pour fabriquer des pièces de moteur-fusée en empilant du métal. La première consiste à envoyer un laser sur une fine couche de poudre métallique. La seconde consiste à faire fondre et empiler de la poudre ou un fil métallique en les introduisant dans le foyer du laser. Ces deux méthodes diffèrent par la taille et la précision des pièces qu'elles permettent de fabriquer.

Cette section présente aussi trois métaux utilisés dans les fusées. Ces trois métaux ont des propriétés différentes. Les points à surveiller pendant leur fabrication diffèrent eux aussi. Il faut savoir ce qui se passe à l'intérieur du métal pendant qu'il fond puis se solidifie. C'est ainsi que l'on peut comprendre pourquoi les techniques d'intelligence artificielle présentées plus loin sont nécessaires. Cette section présente les propriétés de ces trois métaux et pose ainsi les bases.

6.1.1 Propulsion des fusées de nouvelle génération et fabrication additive métallique (Additive Manufacturing)

Un moteur-fusée fonctionne dans des conditions extrêmes. La pression dans la chambre de combustion atteint plusieurs centaines de fois celle d'un pneu de voiture. La température de la zone où brûle le carburant dépasse 3 000 degrés. À l'inverse, un carburant liquide proche de moins 200 degrés circule dans les canaux de refroidissement. Une même pièce doit supporter en même temps cette chaleur et ce froid.

Fabriquer ce type de pièce avec les anciennes méthodes demande beaucoup de travail. Il faut usiner les canaux de refroidissement un par un, puis assembler plusieurs morceaux par une méthode appelée brasage. Le brasage consiste à faire fondre un autre métal entre deux pièces métalliques pour les joindre. Plus il y a de morceaux, plus les joints se multiplient, et la fabrication peut prendre plusieurs mois. Les joints risquent ensuite de devenir des zones de fuite ou de fissuration.

La fabrication additive métallique réduit fortement ce processus. La fusion laser sur lit de poudre (Laser Powder Bed Fusion; LPBF) étale une fine couche de poudre métallique. Un laser est ensuite envoyé dessus. Seules les zones nécessaires sont fondues et soudées, puis une nouvelle fine couche de poudre est étalée et fondue à son tour. Lorsque ce processus est répété des milliers de fois, la pièce est achevée. Cette méthode convient bien aux petites pièces précises, comme les chemises de chambre de combustion remplies de canaux rapprochés.

Le dépôt d'énergie dirigée (Directed Energy Deposition; DED) fonctionne un peu autrement. De la poudre métallique ou un fil métallique est introduit dans le foyer du laser, puis fondu et empilé. L'image la plus proche est celle d'une couche de peinture que l'on ajoute au pinceau. La vitesse de dépôt est élevée et la méthode convient aux grandes pièces. On l'utilise pour fabriquer des jupes de tuyère dont le diamètre dépasse 1 mètre.

Les deux méthodes ont chacune des avantages et des limites. La fusion laser sur lit de poudre est très précise, mais lente. C'est parce qu'il faut déposer de fines couches des milliers de fois. La taille des pièces que l'on peut fabriquer reste aussi limitée par la taille de la chambre. À l'inverse, le dépôt d'énergie dirigée permet de fabriquer vite et grand, mais la surface est rugueuse. Après fabrication, il faut davantage d'usinage de finition.

La qualité de la poudre détermine aussi le résultat. Les grains de poudre doivent être ronds et réguliers pour bien former une fine couche. Si leur taille est irrégulière, des vides apparaissent. Si la poudre

absorbe l'humidité, des bulles se forment pendant la fabrication. C'est pourquoi la poudre est conservée et contrôlée à l'état sec. Une bonne pièce commence par une bonne poudre.

Les deux méthodes ont la capacité de fabriquer une pièce en un seul bloc. Une chemise de chambre de combustion, une tête d'injecteur, une roue de turbopompe ou une grande tuyère peuvent être formées sans joints. Le programme Rocket propulsion technology project (RAMPT) de la National Aeronautics and Space Administration (NASA) a fabriqué de grandes tuyères avec cette méthode. Selon les documents publics, une tuyère à canaux de refroidissement d'environ 1,5 mètre de diamètre et d'environ 1,8 mètre de longueur a été empilée en 90 jours. Cette tuyère correspond à 65 pour cent de la taille d'une grande tuyère de moteur pour lanceur spatial.

Le même programme rapporte aussi des résultats d'essais. Lors d'essais de développement combinant plusieurs injecteurs, chambres de combustion et tuyères, les pièces ont résisté longtemps à la combustion. Le temps cumulé de combustion dépasse largement 10 000 secondes, et l'allumage a été répété plusieurs centaines de fois. Cela signifie que des pièces fabriquées par empilement de matière peuvent supporter une vraie combustion de fusée. Ce résultat montre que la fabrication additive dépasse le laboratoire et passe vers les pièces destinées au vol.

Le bénéfice de cette méthode se trouve dans le temps et dans le nombre de pièces. L'ancienne méthode fabriquait séparément des centaines de morceaux avant de les assembler. La fabrication additive réduit ces centaines de morceaux à quelques pièces. Quand le nombre de morceaux diminue, les joints diminuent et le temps de fabrication aussi. Si l'on veut modifier la conception, on peut aussi fabriquer rapidement une nouvelle version d'essai. Cette rapidité accélère le développement de nouveaux moteurs.

6.1.2 Caractéristiques métallurgiques et comportement de transformation de phase selon les alliages

Les métaux utilisés dans les pièces de fusée ont chacun une mission différente. Cette section examine trois métaux représentatifs. Il s'agit de l'Inconel 718, du GRCo-42 et du C-103. La métallurgie est la science qui étudie la structure interne des métaux et ses transformations. Même pour un même métal, la structure interne change selon la façon dont il refroidit.

Ces trois métaux occupent chacun une place différente. L'Inconel 718 sert aux pièces solides qui reçoivent des efforts. Le GRCo-42 sert aux parois de chambre de combustion qui doivent évacuer rapidement la chaleur. Le C-103 sert à l'extrémité de la tuyère qui est directement exposée aux flammes. Dans un même moteur, ces trois métaux se partagent les rôles. Il faut donc aussi une métallurgie adaptée à chacun d'eux.

L'Inconel 718 est un superalliage à base de nickel. Un superalliage est un alliage conçu pour conserver sa résistance même à haute température. Ce métal est largement utilisé dans les turbopompes, les soupapes et les conduites à haute pression. Il est solide, se soude bien et résiste bien à la chaleur. Il convient donc aux pièces du moteur qui supportent des efforts.

Le problème apparaît lors d'un refroidissement rapide. Le métal fondu par le laser se solidifie en un clin d'œil. À ce moment-là, des éléments comme le niobium et le molybdène se concentrent aux frontières entre les cristaux. Cette concentration s'appelle la microségrégation. Si la ségrégation est forte, un composé fragile appelé phase de Laves (Laves phase) se forme à cet endroit. Ce composé capte les éléments qui renforcent le métal et réduit ainsi sa résistance.

C'est pourquoi l'Inconel 718 nécessite un traitement thermique après fabrication. La pièce est de nouveau chauffée à haute température pour dissoudre et éliminer les composés fragiles. Ensuite, la température est abaissée afin de favoriser la formation de très petits grains de renforcement bien

répartis. Ce n'est qu'après ce processus que la pièce devient résistante à la fatigue. La fatigue est un phénomène dans lequel un matériau se fissure peu à peu après avoir reçu plusieurs fois des efforts.

Ces grains de renforcement ont un nom. Il s'agit d'une très petite phase formée par le nickel et le niobium, appelée gamma double prime. Sa formule chimique associe trois atomes de nickel à un atome de niobium. La résistance de l'Inconel 718 vient en grande partie de cette phase. Elle est différente de la phase gamma prime, courante dans d'autres superalliages de nickel. Bien maîtriser le niobium est donc la clé de ce métal.

Le GRCop-42 est un alliage de cuivre développé par la NASA pour les chambres de combustion de fusée. Le cuivre conduit très bien la chaleur. Cette propriété est nécessaire pour évacuer rapidement la chaleur brûlante de la paroi de la chambre de combustion. Cependant, le cuivre pur ramollit lorsqu'il devient chaud. On ajoute donc un peu de chrome et de niobium dans le cuivre. Ces deux éléments forment de très petits grains qui maintiennent le cuivre.

La fabrication du GRCop-42 au laser présente des difficultés. Le cuivre réfléchit bien la lumière. Comme un miroir, il renvoie une grande partie de la lumière du laser. Pour le faire fondre suffisamment, il faut donc un laser puissant ou un laser vert. Après fabrication, la pièce passe par un procédé qui supprime les pores internes au moyen d'une forte pression et d'une température élevée. Après ce procédé, elle conduit bien la chaleur et conserve sa résistance même dans un environnement chaud dépassant 800 degrés.

Voyons pourquoi la paroi de la chambre de combustion doit évacuer la chaleur aussi efficacement. D'un côté de la paroi, une flamme de plus de 3 000 degrés vient au contact. De l'autre côté, un carburant froid circule. Cette paroi mince sépare ces deux températures. Si elle n'évacue pas vite la chaleur, elle fond ou se fissure. C'est pourquoi un alliage de cuivre très conducteur est utilisé comme matériau de paroi.

Cet alliage fonctionne avec les canaux de refroidissement. De fins canaux sont placés de manière serrée dans la paroi. Le carburant y circule et emporte la chaleur de la paroi. Plus les canaux sont complexes, plus l'évacuation de la chaleur est régulière. La capacité de fabriquer ces canaux complexes en une seule fois appartient à la fabrication additive. Le matériau et la méthode de fabrication se renforcent mutuellement.

Le C-103 est un alliage à haute température à base de niobium. Le point de fusion du niobium dépasse largement 2 000 degrés. Il est donc utilisé à l'extrémité des tuyères directement exposées aux flammes ou dans les propulseurs de contrôle d'attitude. On y ajoute un peu de hafnium, de titane et de zirconium pour ajuster ses propriétés. Pour fabriquer de grandes tuyères en tôle mince, on utilise la méthode DED.

Lors de la fabrication du C-103, il faut faire attention à l'air. Le niobium fondu absorbe rapidement l'oxygène et l'azote présents dans l'air. Si la quantité d'oxygène dépasse un certain niveau, le métal devient cassant. Il se transforme en un matériau qui se brise net, comme du verre. C'est pourquoi la chambre de fabrication est remplie d'un gaz protecteur comme l'argon afin de maintenir l'oxygène à un niveau très bas.

L'oxydation est aussi un grand problème pendant l'utilisation. L'oxygène contenu dans les gaz d'échappement chauds attaque continuellement le niobium. On applique donc à la surface un revêtement protecteur de siliciure contenant du silicium. Cette couche empêche l'oxygène d'atteindre le métal. Il faut à la fois contrôler l'atmosphère pendant la fabrication et protéger la surface pendant l'utilisation. Ces deux mesures déterminent la réussite ou l'échec d'une pièce en C-103.

Les recherches récentes examinent en détail le procédé de fabrication de ce métal. Une étude de 2025 a fabriqué des tôles minces de C-103 par dépôt laser de fil et en a étudié les propriétés. Une autre étude a tracé une carte des défauts au moyen d'un modèle de bain de fusion qui résout plusieurs phénomènes

physiques ensemble. Il s'agit de dessiner à l'avance les conditions dans lesquelles les défauts apparaissent. Avec une telle carte, on peut choisir de bonnes conditions de fabrication. On cherche ainsi la voie permettant d'éviter les défauts avant même de fabriquer la pièce.

6.2 Mécanismes de détection in situ des défauts et modèles d'imagerie informés par la physique

Ce que traite cette section

In situ signifie que l'on observe directement à l'endroit même où l'on fabrique. Si l'on cherche les défauts seulement après la fin de la fabrication, il est déjà trop tard. Si l'on détecte les défauts pendant la fabrication, on peut les corriger sur place ou arrêter le procédé. Cette section traite des méthodes permettant d'observer les défauts pendant la fabrication.

Nous examinerons d'abord pourquoi et comment les défauts se forment. Nous présenterons ensuite les dispositifs qui observent le petit bassin créé par le laser. Enfin, nous verrons comment l'intelligence artificielle lit les images observées. C'est ici qu'apparaît une méthode qui utilise ensemble les lois de la physique et l'intelligence artificielle. Cette méthode est un exemple d'apprentissage automatique informé par la physique, qui traverse l'ensemble de ce livre.

6.2.1 Mécanismes thermo-fluidodynamiques de formation des défauts dans le bain de fusion

Quand le laser fait fondre la poudre métallique, un petit bassin apparaît. Ce bassin s'appelle le bain de fusion (Melt pool). Son diamètre est aussi petit que quelques cheveux. Lorsque le laser avance, ce bassin se déplace avec lui. La qualité de la pièce dépend fortement de l'état de ce petit bassin.

Dans ce bassin, le métal bouge sans cesse. La tension de surface n'est pas la même entre les zones chaudes et les zones moins chaudes. Cette différence pousse le métal fondu dans différentes directions. Cet écoulement s'appelle la convection de Marangoni. Il ressemble à la surface tourbillonnante d'une casserole remplie de bouillon. Ce tourbillon peut à la fois créer des défauts et les faire disparaître.

Un défaut est la porosité en trou de serrure (Keyhole porosity). Elle apparaît lorsque le laser est trop puissant ou avance trop lentement. La lumière intense pénètre profondément dans le métal et forme une cavité étroite et profonde, comme un trou de serrure. Cette cavité est instable et s'effondre soudainement. Au moment de l'effondrement, le gaz qu'elle contient reste piégé dans le métal et devient une bulle ronde. Cette bulle piégée est la porosité en trou de serrure.

Le trou de serrure n'est pas seulement néfaste. Un trou de serrure d'une profondeur adaptée fait fondre le métal en profondeur et assure une bonne liaison. Le problème apparaît quand le trou de serrure est trop profond et instable. Le procédé cherche donc à maintenir sa profondeur à un niveau adapté. Il ne faut ni trop augmenter ni trop réduire la puissance du laser, mais trouver une fenêtre adaptée. Trouver cette fenêtre adaptée est le cœur du contrôle du procédé.

Un autre défaut est le manque de fusion (Lack-of-Fusion; LoF). À l'inverse du trou de serrure, il apparaît lorsque le laser est faible ou lorsque l'écart entre les trajectoires est trop grand. Les trajectoires laser voisines ou la couche inférieure ne fondent pas et ne se lient pas correctement. Un vide reste entre elles. Ce vide a une forme aiguë et contient de la poudre non fondue.

Les deux défauts n'ont pas la même nature de danger. La porosité en trou de serrure est ronde et donc relativement moins dangereuse. Le manque de fusion est aigu, si bien que les efforts se concentrent à son extrémité. C'est le même principe que l'extrémité pointue d'un éclat de verre qui se fissure

facilement. Le manque de fusion devient donc facilement le point de départ d'une fissure de fatigue. Les pièces de fusée subissent d'innombrables vibrations, ce qui rend ce défaut très dangereux.

Les recherches récentes classent les défauts plus finement. Une étude de 2026 a divisé les pores en trois catégories. Absence de pore, pore de moins de 15 micromètres, et pore plus grand. Ces 15 micromètres sont la frontière de classification définie par cette étude. Dans cette étude, les grands pores en trou de serrure étaient plus nocifs. Les petits pores gazeux étaient moins nocifs dans ces conditions. Cette étude a entraîné cette distinction en utilisant à la fois des signaux de photodiode et des images aux rayons X de haute précision.

Toutefois, cette frontière ne doit pas être prise immédiatement comme critère d'acceptation. Le danger d'un pore ne dépend pas seulement de sa taille. Il dépend à la fois de son emplacement, de sa forme, des efforts reçus, du matériau et de la durée de vie exigée. À taille égale, un pore proche de la surface est plus dangereux. Il faut donc distinguer la frontière de classification et le critère de sécurité structurelle.

Il y a une raison à cette classification fine des défauts. Si l'on traite tous les pores de la même manière, même des pièces correctes seront rejetées comme défectueuses. À l'inverse, si l'on les ignore tous, on passe à côté de pores dangereux. Il faut distinguer le type et la taille des défauts pour répondre de manière adaptée. L'intelligence artificielle prend en charge cette distinction fine.

Les défauts laissent des signes précurseurs visibles. Juste avant la formation d'un trou de serrure, la forme du bain de fusion oscille. Un motif apparaît, où le bain devient plus profond et plus étroit. L'œil humain ne peut pas suivre ces changements rapides. Des caméras qui prennent des dizaines de milliers d'images par seconde et l'intelligence artificielle lisent ces signes précurseurs. L'objectif est de les détecter avant la formation du défaut.

Les projections de poudre sont aussi liées aux défauts. La projection est le phénomène par lequel le métal fondu éclabousse lorsque le laser frappe fortement. Les gouttelettes projetées tombent sur de la poudre qui n'a pas encore fondu. Lorsque le laser repasse à cet endroit, la fusion ne se fait pas correctement. Ainsi, lorsque les projections sont fréquentes, le manque de fusion augmente. Le degré de projection devient lui aussi un signal annonçant les défauts.

6.2.2 L'œil qui mesure la température du bain de fusion et la ligne de référence physique

Pour observer le bain de fusion, il faut un œil particulier. Le bain est très brillant et change très rapidement. La pyrométrie (Pyrometry) est une méthode qui mesure la température à partir de la lumière émise par un objet chaud. Elle utilise le principe selon lequel un objet émet une lumière différente lorsqu'il devient plus chaud. Cette méthode mesure la température sans toucher l'objet.

La pyrométrie coaxiale (Coaxial) observe la lumière dans la même direction que la trajectoire du laser. C'est comme si le laser et la caméra partageaient le même objectif. Ainsi, quel que soit le passage du laser, le bain peut toujours être vu de face. Une caméra rapide, capable de prendre des dizaines de milliers d'images par seconde, enregistre les variations de luminosité et de forme du bain. En comparant la lumière de deux longueurs d'onde, on obtient une température moins sensible à l'état de surface.

Cette méthode à deux longueurs d'onde n'est pas parfaite. L'émissivité désigne le degré auquel un objet émet de la lumière. Cette méthode suppose que le rapport d'émissivité entre les deux longueurs d'onde reste constant. Si cette hypothèse ne tient pas, la température mesurée contient une erreur. La vapeur métallique projetée ou une lentille salie perturbent aussi les valeurs. C'est pourquoi les valeurs mesurées sont régulièrement corrigées.

La caméra seule ne suffit pas. Il faut un critère de comparaison pour savoir ce qui est normal et ce qui est anormal. Le modèle de conduction thermique de Rosenthal (Rosenthal) en est un exemple. Ce modèle est une ancienne théorie physique datant de 1946. C'est une formule résolue à la main qui décrit la distribution de température lorsqu'une source de chaleur mobile chauffe un métal.

Le modèle de Rosenthal n'est qu'une esquisse grossière. Il considère le métal comme un solide semi-infini et place la source de chaleur en un point. Il suppose que les propriétés du métal restent constantes quelle que soit la température. Il ignore aussi la chaleur latente qui entre en jeu lors de la fusion et de l'ébullition. Il ne peut pas représenter l'écoulement du métal fondu ni l'évaporation.

Cette formule ne donne donc qu'une température de référence approximative. Elle ne peut pas expliquer les mouvements rapides d'effondrement d'un trou de serrure. Lorsqu'un critère plus précis est nécessaire, on utilise l'analyse par éléments finis ou le calcul des fluides. Les cas où la valeur de Rosenthal est utilisée directement comme ligne de référence pour la surveillance en temps réel restent rares. Ici, elle sert d'exemple pour l'idée de disposer d'un critère physique.

L'intelligence artificielle peut recevoir ce type d'écart comme entrée. Elle apprend la différence entre le champ de température réel et le critère physique pour prédire les défauts. Lorsqu'il existe un critère physique, la charge d'apprentissage de l'intelligence artificielle diminue. En effet, même avec peu de données, la physique sert de guide. Le critère physique allège ainsi la charge d'apprentissage de l'intelligence artificielle.

Pourquoi le temps réel est-il si important ? Le laser se déplace à plusieurs mètres par seconde. Le temps nécessaire pour construire une couche est court. L'endroit où un défaut apparaît est bientôt recouvert par la couche suivante. Il faut le détecter avant qu'il soit recouvert pour pouvoir le corriger. Le jugement doit donc être rapide, à l'échelle de la milliseconde.

Les dispositifs d'observation continuent eux aussi de progresser. Des recherches récentes ont proposé une méthode qui capte simultanément deux longueurs d'onde avec une seule caméra. Cette méthode enregistre les variations de température du bain de fusion jusqu'à 100 000 images par seconde. Les images thermiques précises ainsi obtenues servent de base pour distinguer les pores de plusieurs manières. Il faut un œil aussi précis pour distinguer correctement les pores.

6.2.3 Principes de conception d'un modèle d'image informé par la physique

Il faut maintenant lire les images observées. Cette section propose les principes de conception d'un modèle d'image qui intègre la physique. Examinons d'abord les réseaux neuronaux d'image largement utilisés. Le transformeur de vision (Vision Transformer) est un réseau neuronal qui divise une image en petites cases et examine leurs relations. Il découpe une photo comme un patchwork et observe comment chaque morceau est relié aux autres. Dans les images du bain de fusion, la partie brillante au centre, la queue tirée vers l'arrière et la lumière de la poudre projetée sont toutes différentes. Le modèle lit ces relations pour distinguer les défauts.

La force de ce réseau neuronal réside dans sa capacité à relier des zones éloignées. La température à l'avant du bain de fusion et la queue à l'arrière sont liées. On ne peut pas comprendre comment la chaleur circule en regardant un seul morceau. Le transformeur de vision compare tous les morceaux à la fois. Il lit ainsi le flux thermique de l'ensemble du bain. Ce large champ de vision aide à capter les signes précurseurs des défauts.

Ce livre propose d'y ajouter la loi de conduction thermique. Il faut faire en sorte que l'intelligence artificielle vérifie elle-même si sa réponse est conforme à la physique. La fonction de perte (Loss function) est le score qui mesure à quel point l'intelligence artificielle se trompe. L'idée est d'inclure

dans ce score l'erreur de classification des défauts, l'erreur du champ de température et le résidu physique. Le résidu est une valeur qui indique à quel point une équation n'est pas respectée.

Intégrer ainsi la physique présente un avantage. Les images de caméra contiennent toujours du bruit. La poudre projetée peut aussi masquer la lumière. Un modèle qui apprend seulement à partir des données est facilement perturbé par ce bruit. Un modèle qui apprend aussi la physique dispose d'un appui : la loi de conduction thermique. Même si l'image est un peu floue, il conserve un jugement conforme à la physique.

Les études réelles confirment aussi la force des caractéristiques physiques. Une étude a extrait des caractéristiques fondées sur la physique à partir de signaux de caméra infrarouge. Avec ces caractéristiques, elle a détecté les pores dans des pièces en Inconel 718. C'est parce que la forme même des variations de température contient des indices sur les défauts. Les caractéristiques tirées de la physique résistent bien au bruit et ont un sens clair. Il est donc plus facile d'expliquer le fondement du jugement.

La rapidité est également importante. Pour juger pendant la fabrication, la réponse doit arriver en un clin d'œil. Une étude de 2026 a combiné un réseau neuronal préentraîné et un classificateur traditionnel. Cette méthode a classé des images du bain de fusion d'un alliage de nickel avec une précision d'environ 0,95. Le temps nécessaire pour juger une image était de 1,15 milliseconde. Cette étude est encore une étude préliminaire qui n'a pas fait l'objet d'une évaluation par les pairs. Elle montre toutefois qu'un jugement assez rapide pour l'usine est possible.

La manière d'intégrer la physique implique un réglage des poids. Si le résidu physique pèse trop lourd, le modèle apprend moins bien les données. S'il suit trop les données seules, il s'éloigne de la physique. Il faut bien équilibrer ces deux forces pour obtenir un bon modèle. Trouver ce point d'équilibre est le réglage de l'apprentissage informé par la physique. Le poids adapté varie selon la pièce et l'équipement.

Il faut ici distinguer ce qui a été vérifié de ce qui est proposé. La détection des pores à partir de caractéristiques infrarouges et le modèle hybride rapide sont des résultats montrés par des études réelles. La structure qui ajoute un résidu de conduction thermique au transformeur de vision est la direction dessinée par ce livre. Ce n'est pas encore une méthode vérifiée sur des pièces réelles. Les jugements produits par l'intelligence artificielle doivent être confirmés par des coupes observées et par tomographie.

6.3 Réduire la déformation des grandes tuyères

La jupe de tuyère est une grande pièce en forme de pavillon fixée à l'arrière du moteur. Elle est fabriquée en empilant une mince paroi arrondie comme un cône. Les pièces aussi grandes et minces se déforment facilement pendant la fabrication. Cette section traite des causes de cette déformation et des méthodes pour l'empêcher.

Nous examinons d'abord pourquoi des forces s'accumulent à l'intérieur de la pièce. Nous présentons ensuite un modèle rapide d'intelligence artificielle qui remplace des calculs lents. Enfin, nous verrons comment ce modèle permet d'ajuster le mouvement du laser pour réduire la déformation. Plus une pièce est grande, plus cette gestion de la déformation est difficile et importante.

6.3.1 Accumulation de contraintes thermiques et déformation par flambage lors de la fabrication additive de grandes parois minces

La contrainte résiduelle (Residual stress) est l'effort de traction et de compression qui reste à l'intérieur d'une pièce. Elle ne se voit pas, mais agit toujours de l'intérieur. Imaginons comment cette force apparaît. Lorsque le laser chauffe une ligne de métal, cette partie se dilate. C'est parce que le métal chauffé gonfle.

Lorsque le laser est passé, cette ligne refroidit de nouveau. En refroidissant, elle cherche à reprendre sa taille d'origine. Mais la couche inférieure est déjà solidifiée et retient ce mouvement. La force qui cherche à se contracter et la force qui retient s'opposent, et une contrainte reste à l'intérieur. Une force de traction s'accumule en haut, et une force de compression en bas.

Dans une jupe de tuyère grande et mince, cette force provoque de sérieux problèmes. C'est un peu comme une feuille de papier qui se froisse lorsqu'on la tire d'un seul côté. La pièce se déforme dans la direction radiale ou la mince paroi se courbe soudainement. Cette courbure soudaine s'appelle le flambage (Buckling). Dans les cas graves, la pièce peut même se détacher de son support.

Plus une pièce est grande, plus sa gestion est difficile. En effet, lorsque les couches atteignent plusieurs centaines, la chaleur continue de s'accumuler. L'état thermique n'est pas le même lors des premières couches et lors des dernières. Même avec les mêmes conditions laser, le résultat change. Il faut donc suivre l'état thermique des grandes pièces et modifier les conditions au fur et à mesure.

Pour un alliage de niobium comme le C-103, ce problème est plus délicat. Comme son point de fusion est élevé, il faut apporter beaucoup de chaleur pour le faire fondre. Une forte chaleur conduit à de fortes contraintes. Lorsqu'on fabrique une grande tuyère avec ce métal, la gestion de la déformation décide du succès ou de l'échec. L'analyse thermique et la conception de la trajectoire doivent être pensées ensemble dès le départ.

La déformation est difficile à corriger après fabrication. Si l'on force une pièce déjà solidifiée à se redresser, de nouvelles fissures apparaissent. Il vaut donc mieux empêcher l'accumulation des contraintes pendant la fabrication. C'est comme prévenir une maladie plutôt que la soigner après l'avoir contractée. Cette prévention relève de la prédiction par intelligence artificielle et du contrôle actif. Le modèle de substitution présenté plus loin aide à cette prévention.

6.3.2 Modèle de substitution fondé sur la thermodynamique (Surrogate Model)

Pour connaître à l'avance les contraintes dans une pièce, il faut des calculs. L'analyse par éléments finis (Finite Element Analysis) est une méthode qui divise la pièce en petites parties et calcule la température et les forces. Elle est très précise, mais prend beaucoup de temps pour les grandes pièces. C'est parce qu'il faut résoudre un par un des millions de petits éléments. L'analyse d'une seule grande tuyère peut parfois prendre plusieurs jours.

Ce qui remplace ce calcul lent est le modèle de substitution (Surrogate model). Un modèle de substitution est un modèle rapide qui apprend à l'avance les résultats d'un calcul lent. Le perceptron multicouche (Multilayer Perceptron; MLP) est souvent utilisé. C'est un réseau neuronal de base qui transforme les entrées en sorties en passant par plusieurs couches. Après avoir appris de nombreux résultats d'analyses précises, il estime les résultats pour de nouvelles conditions.

Que reçoit ce modèle et que produit-il ? Les entrées sont la puissance du laser, la vitesse de déplacement, le trajet suivi par le laser et le temps d'attente entre les couches. Les sorties sont la répartition des contraintes résiduelles dans toute la pièce et sa forme finale déformée. Ce modèle estime en peu de

temps un travail qu'une analyse précise mettrait plusieurs jours à accomplir. Il devient possible de comparer rapidement plusieurs conditions.

La rapidité ouvre une nouvelle voie. S'il faut attendre plusieurs jours chaque fois que l'on change une condition, il est difficile de trouver une bonne conception. Même approximative, une estimation rapide permet de filtrer à l'avance des milliers de conditions. On ne retient que les bons candidats, puis on les vérifie de nouveau par une analyse précise. Le modèle de substitution joue le rôle d'un filet qui réduit un large ensemble de candidats.

Pour qu'un modèle de substitution apprenne bien, il faut beaucoup de bonnes données. On lance à l'avance des analyses précises sous plusieurs conditions pour rassembler les données. On y ajoute aussi des valeurs mesurées sur des pièces réellement fabriquées. Plus les données sont larges et régulières, plus l'estimation devient exacte. Dans des conditions inconnues qu'il n'a jamais apprises, l'estimation devient instable. C'est pourquoi on utilise un modèle de substitution seulement dans le domaine où il a appris.

Des recherches récentes ont obtenu des résultats dans cette direction. Une étude de 2025 a estimé rapidement les contraintes résiduelles par apprentissage automatique et réduit la déformation. Cette étude a indiqué que la flexion d'une éprouvette en forme de pont avait fortement diminué. L'écart entre les contraintes prédites et l'analyse précise était aussi faible. Cela signifie que le modèle rapide s'est rapproché de l'analyse précise.

L'ajout d'informations physiques améliore encore le résultat. Une autre étude de 2025 a intégré des lois physiques dans un réseau de neurones pour prédire presque en temps réel la déformation de grandes pièces. Elle a utilisé une structure appelée opérateur neuronal (Neural Operator), afin d'apprendre sur un large éventail de conditions. Cette étude est encore une recherche préliminaire qui n'a pas été évaluée par les pairs. Elle montre toutefois une voie permettant d'obtenir à la fois une prédiction rapide et une cohérence physique.

6.3.3 Optimisation active de la trajectoire de balayage et du temps de refroidissement entre les couches

Il est maintenant temps de modifier le procédé réel à partir des prédictions. La trajectoire de balayage (Scan path) désigne la direction et l'ordre de déplacement du laser. Si le laser passe toujours dans une seule direction, la chaleur se concentre d'un côté. Cette chaleur concentrée laisse de fortes contraintes. On change donc la direction pour répartir la chaleur de manière plus uniforme.

Plusieurs trajectoires ingénieuses ont été proposées. On peut diviser une grande surface en petites zones et les remplir en alternance. On peut aussi faire tourner légèrement la direction du laser dans chaque zone. On utilise aussi des trajectoires courbes qui remplissent l'espace de manière dense. Le but est unique. Il s'agit de disperser le flux de chaleur dans toutes les directions pour éviter sa concentration d'un seul côté.

Le temps d'attente entre les couches est aussi important. Si l'on dépose la couche suivante alors que la couche précédente est encore chaude, la chaleur s'accumule par couches successives. Cette chaleur accumulée entraîne une forte déformation. On attend donc que la couche précédente refroidisse jusqu'à un certain point. Cette attente s'appelle le temps de refroidissement entre les couches.

L'optimisation active (Active optimization) est une méthode qui modifie ces conditions pendant le procédé. La pyrométrie indique à quel point la pièce est chaude à l'instant présent. Le modèle de substitution prédit rapidement le risque de contrainte pour la trajectoire suivante. En observant ces deux informations, on ajuste à chaque instant la puissance du laser, la vitesse et le temps d'attente. C'est un processus qui transforme la longue expérience humaine en nombres et en règles.

Les méthodes d'ajustement deviennent aussi plus intelligentes. L'optimisation bayésienne (Bayesian Optimization) est une méthode qui trouve de bonnes conditions avec peu d'essais. Elle choisit intelligemment les conditions à essayer ensuite à partir des résultats déjà obtenus. L'algorithme génétique (Genetic Algorithm) est une méthode qui mélange de bonnes conditions entre elles pour en trouver de meilleures. Ces méthodes permettent de modifier le temps d'attente selon l'état thermique de la couche précédente.

Cet ajustement se fait différemment pour chaque couche. Les couches inférieures refroidissent vite, car le support leur retire de la chaleur. Plus on monte, plus la chaleur peut avoir du mal à s'évacuer. Dans ce cas, on allonge le temps d'attente dans les couches supérieures. Ce n'est toutefois qu'un exemple. Le degré d'accumulation de chaleur dépend de la forme de la pièce, du support, de la largeur des couches et de l'ordre de dépôt. On détermine donc le temps d'attente en observant avec des capteurs l'état thermique de chaque couche.

Si cette méthode fonctionne bien, la déformation diminue de manière visible. Les contraintes se répartissent plus uniformément et la contrainte maximale baisse. La pièce entre dans les tolérances admises. Toutefois, cet ajustement doit toujours rester dans une plage de procédé sûre. Il faut traiter en même temps le retard des capteurs, l'erreur du modèle et les limites de réaction de l'équipement. On ne peut l'appliquer à une vraie pièce qu'après l'avoir d'abord vérifié sur une éprouvette.

L'idée de jumeau numérique se développe aussi ici. Un jumeau numérique consiste à placer dans l'ordinateur le double de la pièce réelle. On alimente constamment ce double avec les valeurs des capteurs du procédé réel. Le double montre ce qui se passe à l'intérieur de la pièce à l'instant présent. Il indique aussi à l'avance ce qui sera risqué dans la couche suivante. Le modèle de substitution est le cerveau qui aide ce double à réfléchir vite.

6.4 Maîtriser la forme des cristaux

Quand le métal se solidifie, des cristaux se développent à l'intérieur. La forme de ces cristaux détermine la résistance de la pièce. Si les cristaux s'allongent seulement dans une direction, la résistance varie selon la direction. Cette section traite des méthodes permettant de maîtriser la forme des cristaux comme on le souhaite.

Nous examinons d'abord deux formes de cristaux et leurs différences. Nous présentons ensuite un modèle génératif qui dessine la forme des cristaux à partir des conditions du procédé. Enfin, nous étudions le contrôle par apprentissage par renforcement, qui maîtrise lui-même la forme des cristaux pendant la fabrication. Le monde invisible des cristaux décide du destin de la pièce.

6.4.1 Transition des grains colonnaires aux grains équiaxes (CET) et anisotropie mécanique

Quand le métal se solidifie, les cristaux se développent sous deux formes. Le grain colonnaire (Columnar grain) est un cristal qui s'allonge dans une direction comme une colonne. Il ressemble à plusieurs poteaux de bois dressés côte à côte. Le grain équiaxe (Equiaxed grain) est un cristal qui grandit avec une taille semblable dans toutes les directions. Il ressemble à une couche régulière de gravier.

Cette différence sépare les propriétés de la pièce. S'il y a beaucoup de grains colonnaires, la pièce est forte dans la direction des colonnes et faible sur le côté. La résistance et la durée de vie en fatigue varient selon la direction. Cette propriété s'appelle l'anisotropie (Anisotropy). Le principe est le même que pour le bois, qui se fend facilement dans le sens des fibres, mais beaucoup moins dans le sens transversal.

Dans les pièces de fusée, l'anisotropie peut devenir une source d'inquiétude. Ces pièces reçoivent des forces venant de plusieurs directions. Si une seule direction est forte, la direction faible se fissure d'abord. Les grains équiaxes réduisent ce problème. Ils sont résistants de manière uniforme dans toutes les directions et résistent aussi mieux aux fissures pendant la solidification. C'est pourquoi les grains équiaxes sont avantageux dans les pièces qui reçoivent des forces de plusieurs directions.

Cependant, les grains équiaxes ne sont pas toujours préférables. Dans les pièces où le fluage ou la fatigue thermique posent problème, les cristaux de type colonnaire peuvent parfois être meilleurs. Le fluage est un phénomène dans lequel un matériau s'allonge lentement lorsqu'il subit une force pendant longtemps. Dans les pièces où la chaleur circule seulement dans une direction, des cristaux orientés peuvent être avantageux. La forme de cristal souhaitée change selon les forces que reçoit la pièce.

Dans la fabrication additive, les grains colonnaires se forment facilement. C'est parce que la chaleur s'évacue dans la direction de dépôt du laser. Les cristaux grandissent comme des colonnes le long de la direction d'évacuation de la chaleur. En conséquence, les cristaux s'alignent dans la direction de dépôt. Un groupe de cristaux ainsi orienté vers un côté s'appelle une texture cristallographique. L'objectif de cette section est de modifier cette orientation selon les besoins.

La forme des cristaux dépend fortement de deux valeurs. Le gradient de température (Temperature gradient ; G) désigne le degré de variation rapide de la température. Il indique à quelle vitesse la température change selon la position. La vitesse de solidification (Solidification rate ; R) est la vitesse à laquelle se déplace la frontière entre le liquide et le solide. Ces deux valeurs jouent chacune un rôle différent.

Le rapport G divisé par R détermine la forme des cristaux. Si ce rapport est grand, la forme tend vers le type colonnaire ; s'il est petit, elle tend vers le type équiaxe. Le produit G multiplié par R devient la vitesse de refroidissement. Plus cette valeur est grande, plus les cristaux se fragmentent finement. On peut donc maîtriser séparément la forme et la taille. Lorsque l'on modifie la puissance et la vitesse du laser, ces deux valeurs changent ensemble.

Ces deux valeurs ne sont pas les seules à déterminer la forme. Les petits grains qui servent de germes, l'écoulement du métal fondu et le degré de refusion ont aussi une influence. La direction des cristaux déjà formés en dessous est également héritée. Ainsi, plus le gradient de température est faible et plus la solidification est rapide, plus les grains équiaxes se forment facilement, mais ce n'est pas toujours le cas. Il faut considérer plusieurs valeurs ensemble pour bien maîtriser la forme des cristaux.

Il existe un point où les grains colonnaires se transforment en grains équiaxes. Ce changement s'appelle la transition colonnaire-équiaxe (Columnar-to-Equiaxed Transition ; CET). Lorsque le gradient de température et la vitesse de solidification dépassent certaines conditions, cette transition se produit. Connaître ces conditions permet de se rapprocher de la forme de cristal souhaitée. Des théories anciennes ont tracé cette frontière sous forme d'équations.

Des recherches récentes affinent cette frontière avec plus de précision. Une étude de 2025 a établi un critère permettant de prédire la CET à partir de la composition de l'alliage. Elle a montré par apprentissage automatique quels éléments influencent fortement la forme des cristaux. Cela signifie que l'on peut modifier la forme des cristaux en changeant légèrement la composition. Si l'on traite ensemble le procédé et la composition, l'étendue du contrôle des cristaux s'élargit.

L'apprentissage automatique qui examine la composition se poursuit aussi. Il distingue par les données quels éléments influencent fortement la forme des cristaux. Des résultats indiquent que la quantité d'éléments comme le silicium ou le carbone modifie la forme des cristaux. Ces recherches complètent peu à peu la carte du contrôle des cristaux.

6.4.2 Modèle génératif dessinant la forme des cristaux à partir des conditions du procédé

On veut voir à l'avance la forme des cristaux à partir des conditions du procédé. Pour cela, il faut un outil qui dessine l'image de la microstructure lorsque l'on entre les conditions. On peut citer comme outil le réseau antagoniste génératif conditionnel (Conditional GAN). Ce réseau de neurones est un modèle génératif qui produit l'image souhaitée à partir de conditions données. Ici, les conditions sont des valeurs comme la puissance du laser, la vitesse, le gradient de température et la vitesse de solidification. L'utilisation de ce modèle pour le contrôle de la microstructure en est encore au stade de la proposition.

Ce modèle apprend par la compétition entre deux parties. Le générateur (Generator) produit des images de microstructure. Le discriminateur (Discriminator) distingue si l'image est vraie ou fausse. Le générateur essaie de tromper le discriminateur, et le discriminateur essaie de ne pas se laisser tromper. Si cette compétition se répète, le générateur dessine peu à peu des images qui ressemblent à des images réelles. Cela ressemble à un faussaire et à un expert qui améliorent chacun leur compétence.

Ici, les vraies images sont des images de diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD). Cette méthode lit l'orientation des cristaux au microscope électronique. Elle colore l'orientation de chaque cristal et la présente comme une carte. Le générateur apprend à imiter cette carte. Lorsqu'on lui donne des conditions, il dessine la carte cristalline qui peut en résulter.

Si ce modèle apprend bien, il est utile. Le concepteur voit à l'avance comment les cristaux changeront lorsqu'il modifie les conditions du procédé. Il peut l'estimer sans fabriquer réellement une pièce et la découper. Cela économise beaucoup de temps et de matériau. Il compare plusieurs conditions à l'écran et choisit la meilleure.

Obtenir réellement une carte cristalline demande beaucoup de travail. Il faut découper la pièce et polir soigneusement sa surface. Il faut lire l'orientation des cristaux point par point au microscope électronique. Lire toute une grande surface prend beaucoup de temps. Le modèle génératif devient un raccourci qui réduit ce processus lent. Bien sûr, il faut parfois reprendre ce raccourci à rebours et le vérifier par des mesures réelles.

Il faut aussi être prudent. Le modèle génératif sait très bien produire des images plausibles. Mais la plausibilité n'est pas la vérité physique. Même si l'image est belle, elle peut différer du réel. On examine donc aussi des indicateurs physiques comme la taille des grains, la distribution des orientations et la proportion des phases. Ce n'est que si ces indicateurs correspondent au réel que l'on peut faire confiance à l'image.

La confiance augmente si l'on intègre la physique dans la fonction de perte. Si la taille des cristaux de l'image générée s'écarte de la distribution réelle, on applique une pénalité. Cela guide le générateur pour qu'il dessine une image conforme à la physique. On réduit ainsi l'écart entre une belle image et une image juste. Un modèle génératif doit lui aussi être mesuré avec la règle de la physique pour pouvoir être utilisé dans les pièces de fusée.

6.4.3 Apprentissage par renforcement pour maîtriser la forme des cristaux pendant la fabrication

Il est maintenant temps de maîtriser automatiquement la forme des cristaux pendant la fabrication. L'apprentissage par renforcement (Reinforcement Learning) est une méthode qui apprend les bonnes actions par essais et récompenses. Il ressemble au processus par lequel un bébé apprend à marcher en tombant. On donne une récompense quand il réussit, et une pénalité quand il échoue. Les actions qui reçoivent beaucoup de récompenses augmentent peu à peu.

Dans la fabrication additive, l'action est le réglage du laser. L'action consiste à savoir de combien augmenter ou diminuer la puissance du laser, et de combien modifier la vitesse. Cependant, la forme des cristaux ne peut pas être observée directement pendant la fabrication. On observe donc à la place la température et la forme du bain de fusion. À partir de ces valeurs, on déduit approximativement la forme des cristaux. La pyrométrie indique cet état en temps réel.

La récompense est définie selon la proximité avec l'objectif. Plus la forme des cristaux se rapproche de la forme souhaitée, plus la récompense est grande. Lorsque la proportion de grains équiaxes atteint l'objectif, la récompense augmente. À l'inverse, on applique une pénalité si un keyhole ou un défaut de fusion apparaît. En suivant cette récompense, l'intelligence artificielle apprend à régler le laser.

La manière de structurer la récompense décide du succès ou de l'échec. Si la récompense est trop mal conçue, le système part dans une mauvaise direction. Il peut aussi gaspiller de l'énergie en ne poursuivant que la forme des cristaux. C'est pourquoi on construit la récompense en y intégrant à la fois la forme des cristaux, les défauts et l'énergie. Il s'agit de placer plusieurs objectifs sur une même balance et de les équilibrer. Bien concevoir cette balance est le cœur de la conception de l'apprentissage par renforcement.

Pourquoi ce contrôle en temps réel est-il nécessaire ? Parce que la forme de la pièce varie d'un endroit à l'autre. Les coins, les parois minces et les parties saillantes évacuent la chaleur à des vitesses différentes. Même avec les mêmes paramètres laser, la forme des cristaux change selon l'endroit. Le contrôle en temps réel cherche à modifier les conditions localement pour maintenir une forme cristalline régulière.

Cette approche n'est pas encore une norme industrielle. Beaucoup de propositions restent au stade de la simulation et des éprouvettes. Les cas où la forme des cristaux est contrôlée en boucle fermée pendant le procédé sont rares. Cela tient au fait qu'il est difficile de mesurer directement la forme des cristaux en cours de fabrication. Il faut aussi surmonter le retard des capteurs, les erreurs des modèles et les limites de réponse des équipements.

L'apprentissage par renforcement est puissant pour expérimenter à l'avance des essais risqués. Si l'on teste de mauvaises conditions sur une vraie machine, on jette la pièce. Dans une expérience simulée sur ordinateur, on peut échouer autant que nécessaire. Le système apprend à l'avance de bons réglages à partir d'innombrables échecs. Après cet apprentissage, on le transfère prudemment à la vraie machine, dans une plage sûre. C'est comme si l'ordinateur payait à la place le coût de l'échec.

L'ordre des étapes est donc important. On apprend d'abord le contrôle en simulation. Puis on le vérifie sur des éprouvettes limitées. On l'utilise ensuite comme outil d'aide dans une plage de procédé déjà validée. C'est en suivant ces étapes que l'on peut introduire prudemment le contrôle par apprentissage par renforcement dans de vraies pièces. Après fabrication, la forme des cristaux est de nouveau vérifiée par EBSD afin de contrôler si le réglage était correct.

6.5 Surveiller les défauts en écoutant l'intérieur par le son

Jusqu'ici, nous avons cherché les défauts par la lumière. Mais la lumière ne voit que la surface. Les fissures qui apparaissent en profondeur dans une pièce sont difficiles à saisir avec une caméra. Cette section traite d'une méthode qui écoute l'intérieur par le son.

Nous examinons d'abord le son produit par les défauts. Nous voyons ensuite comment transformer ce son en image. Enfin, nous étudions comment mieux juger en utilisant ensemble le son et la lumière. Lorsque l'on réunit des sens différents, chacun compense ce que l'autre a manqué.

6.5.1 Mécanisme physique des signaux d'émission acoustique (AE) à large bande

L'émission acoustique (Acoustic Emission; AE) est le son produit lorsqu'un changement soudain se produit dans un matériau. Plus exactement, il s'agit d'une très petite onde élastique. Le principe est le même que le bruit sec entendu lorsqu'un verre se fissure. Il ressemble aussi au craquement d'un morceau de bois qui plie puis se casse. Un événement interne au matériau s'échappe sous forme de son.

Dans la fabrication additive, plusieurs événements produisent chacun un son différent. Une fissure à chaud libère une grande énergie en un instant. Elle produit donc un son aigu de haute fréquence. Il ressemble à un claquement bref et sec. Ce type de son a une forte amplitude et monte brusquement.

L'effondrement d'un keyhole produit aussi un son. Le vide présent dans le bain de fusion s'affaisse soudainement et crée un choc. Ce son oscille de manière répétée à une fréquence un peu plus basse que celle d'une fissure. Il ressemble au remous produit lorsqu'une bulle éclate dans l'eau. Sa texture sonore diffère de celle d'une fissure.

La projection de poudre ou le frottement d'un équipement produisent aussi des sons. Ces sons se situent à des fréquences plus basses. Des bruits normaux, qui ne sont pas des défauts, se mélangent aussi au signal sonore. Il faut donc savoir bien trier ce que l'on entend. L'essentiel est de distinguer le son d'un défaut du simple bruit.

Chaque son a sa texture pour une raison. Lorsqu'une grande énergie se libère brusquement, elle porte des hautes fréquences. Lorsqu'elle se libère lentement, elle porte des basses fréquences. Une fissure s'ouvre en un instant et produit donc un son aigu. La projection de poudre est relativement lente et produit donc un son plus grave. Toutefois, les fréquences effectivement captées varient selon le capteur, le trajet de transmission et la méthode de filtrage. Cet ordre doit donc être compris comme une tendance observée dans certains essais.

L'écoute par le son a un grand atout. La lumière ne voit que la surface, mais le son traverse l'intérieur. Même les fissures situées en profondeur dans une pièce fabriquée peuvent être détectées par le son. Si l'on repère le moment où une fissure apparaît, on peut réagir rapidement. On peut arrêter le procédé sur place, marquer la zone et l'inspecter de nouveau. On peut aussi envisager une réparation consistant à refondre la zone au laser. Mais la refusion ne supprime pas toujours les fissures. Elle peut aussi créer de nouvelles contraintes thermiques et de nouvelles fissures. Un procédé de réparation validé et une simple refusion doivent donc être distingués.

Il existe deux manières d'écouter le son. La première consiste à utiliser un capteur piézoélectrique en contact avec la pièce. Un capteur piézoélectrique est un composant qui produit de l'électricité lorsqu'il reçoit une force. On le fixe à la plaque qui supporte la pièce afin d'écouter les ondes élastiques ayant traversé l'intérieur. La seconde consiste à écouter le son dans l'air avec un microphone. Dans ces deux méthodes, le trajet parcouru par le son et les fréquences captées sont différents.

6.5.2 Transformation en ondelettes temps-fréquence

Il est difficile de juger un signal sonore tel quel. Les seules vibrations dans le temps ne suffisent pas à savoir de quel défaut il s'agit. En effet, des sons de plusieurs hauteurs se superposent au même instant. Il faut voir en même temps quand un son apparaît et à quelle hauteur. C'est ainsi que l'on peut lire l'empreinte d'un défaut.

La transformation en ondelettes (Wavelet Transform) accomplit cette tâche. Cette méthode représente ensemble le temps et la fréquence. Elle transforme le signal sonore en une image dont l'axe horizontal est le temps et l'axe vertical la hauteur du son. Cette image s'appelle un scalogramme (Scalogram). Elle ressemble à une partition qui montre ensemble le temps et la hauteur des notes.

Cette image dessine un motif différent selon le défaut. Le son aigu d'une fissure apparaît comme un point lumineux dans la partie haute. L'oscillation d'un keyhole apparaît comme un motif continu dans la zone médiane. Le bruit s'étale de manière floue dans la partie basse. Lorsque le son devient ainsi une image, il devient plus facile de le comparer à l'œil.

Pour lire les motifs, il faut bien choisir l'ondelette mère. L'ondelette mère est une courte forme d'onde qui sert d'étalon pour comparer le son. Si l'on utilise un étalon qui ressemble à la texture du son, le motif devient plus net. Si l'étalon a une texture différente, le motif devient flou. Choisir le bon étalon fait aussi partie du prétraitement. C'est ce choix qui permet d'obtenir une image aux motifs nets.

L'intelligence artificielle apprend les motifs dans cette image. Un réseau de neurones conçu pour lire des images lit le scalogramme. Il apprend, à partir de nombreux exemples, quel motif correspond à quel défaut. Après l'apprentissage, il examine une nouvelle image et distingue les défauts. En transformant le son en image, on peut emprunter la puissance de l'intelligence artificielle visuelle.

Des recherches récentes ont obtenu de bons résultats avec cette méthode. Une étude a estimé les pores de keyhole uniquement à partir du son dans l'air et de la vitesse du laser. Le son capté par microphone a été transformé en scalogramme pour l'apprentissage. La valeur indiquant la fiabilité du résultat a dépassé 0,8. Cette étude correspond à des résultats publiés dans une revue scientifique. Elle a montré que le son seul peut estimer des défauts internes à l'échelle de la milliseconde.

L'écoute du son a aussi l'avantage d'être peu coûteuse. Les caméras rapides et les appareils de radiographie précis sont chers et difficiles à manier. Les capteurs piézoélectriques sont relativement peu coûteux et faciles à fixer. Si l'on en installe plusieurs, on peut aussi estimer d'où vient le son. C'est pourquoi la surveillance fondée sur le son attire l'attention comme voie pratique sur le terrain.

Le principe de localisation par plusieurs capteurs est simple. Un même son arrive à des instants différents selon les capteurs. Il atteint d'abord le capteur proche, puis plus tard le capteur éloigné. En comparant ces écarts de temps d'arrivée, on estime l'endroit où le son a été produit. C'est comme déterminer une direction à partir de l'écart d'arrivée d'un son sur plusieurs microphones. La position ainsi trouvée indique où se situe le défaut.

6.5.3 Reconnaissance des défauts par l'usage conjoint de la lumière et du son

Multimodal signifie que l'on utilise ensemble plusieurs types de données. C'est comme lorsqu'une personne utilise à la fois ses yeux et ses oreilles. Il y a des choses que l'on manque avec le son seul, et d'autres que l'on manque avec la lumière seule. En combinant les deux, chacun comble les lacunes de l'autre. Cette section traite de la manière de réunir le son et la lumière.

La lumière et le son ne voient pas la même chose. La pyrométrie montre bien la température de surface. L'émission acoustique capte les changements soudains qui se produisent à l'intérieur. Une anomalie de température en surface est d'abord détectée par la caméra. Une fissure interne est d'abord détectée par le son. En combinant les deux signaux, on observe à la fois la surface et l'intérieur.

La méthode de combinaison est la suivante. Le signal sonore est lu par un réseau de neurones dédié au son. L'image lumineuse est lue par un réseau de neurones dédié à l'image. Les caractéristiques extraites par les deux réseaux sont rassemblées pour produire le jugement final. Chacun accomplit ce qu'il sait bien faire, puis les forces se rejoignent dans la conclusion.

Des recherches réelles ont montré la force de cette combinaison. Une étude a recueilli ensemble la pyrométrie et le son. En combinant les deux signaux, elle a mieux détecté les pores de keyhole. Le nombre de pores manqués a diminué par rapport à l'usage d'un seul signal. Détecter aussi les fissures de cette manière reste une tâche à venir.

Lors de cette combinaison, l'alignement temporel est essentiel. Il faut faire correspondre avec précision le moment où le son apparaît et celui où la lumière change. Si le temps est décalé, on peut prendre deux événements différents pour un même événement. Les deux capteurs sont donc synchronisés avec une grande précision. Comme chaque capteur a son propre bruit, un nettoyage préalable est aussi nécessaire.

Il existe plusieurs façons de combiner les deux signaux. On peut mélanger les signaux dès le départ et les faire apprendre ensemble. On peut aussi les faire apprendre séparément et ne les combiner qu'au moment de la conclusion. Les recherches récentes utilisent souvent une méthode qui combine les caractéristiques apprises séparément au moyen d'un classificateur léger. Cette méthode demande peu de calcul et s'adapte bien aux nouveaux défauts. Le meilleur choix dépend de la pièce et de l'équipement.

Le mouvement consistant à combiner plusieurs sens va encore s'élargir. En plus de la lumière et du son, on utilise aussi le signal réfléchi du laser. On collecte aussi les photos des couches fabriquées et les cartes de température. Plusieurs yeux et oreilles examinent une même pièce par couches successives. Plus les sens sont nombreux, moins les défauts échappent à la surveillance. Relier ces nombreux signaux en un seul ensemble est le rôle de l'intelligence artificielle.

Cette méthode a aussi des limites nettes. Il est plus sûr d'utiliser le jugement de l'intelligence artificielle pour les alertes en production et la sélection de zones candidates. La vraie décision d'acceptation doit reposer sur le contrôle non destructif, l'observation de coupes et la tomographie informatisée. Les décalages temporels entre capteurs et le bruit peuvent aussi provoquer des erreurs de jugement. L'intelligence artificielle est un guide qui réduit les zones que l'être humain doit examiner.

Synthèse

Ce chapitre a examiné la technologie qui consiste à fabriquer des pièces de fusée en empilant du métal. Nous avons vu la méthode qui fait fondre et empile de la poudre avec un laser, ainsi que celle qui fait fondre et empile un fil. Nous avons passé en revue les propriétés et les points de vigilance de trois métaux : Inconel 718, GRCop-42 et C-103. Chaque métal a une mission différente, et les problèmes à maîtriser pendant la fabrication sont eux aussi différents.

La fabrication additive offre de la liberté, mais elle apporte aussi un risque de défauts. Les pores de keyhole et le manque de fusion deviennent des points de départ de fissures de fatigue. Les contraintes résiduelles déforment les grandes pièces. L'orientation privilégiée des cristaux déplace la résistance vers une direction. Ces défauts sont directement liés à la sécurité du moteur.

Ces défauts sont liés entre eux. Un seul mauvais réglage laser peut provoquer plusieurs défauts à la fois. En cherchant à éviter le keyhole, on peut provoquer un manque de fusion. En cherchant à réduire les contraintes, on peut dégrader la forme des cristaux. Il ne faut donc pas modifier les conditions en ne regardant qu'un seul défaut. Il faut placer plusieurs défauts sur une même balance et chercher l'équilibre.

L'intelligence artificielle aide ce problème dans trois directions. La première consiste à trouver rapidement les défauts pendant la fabrication. Un modèle intégrant les lois physiques dans les images de pyrométrie distingue les pores. Un modèle qui transforme le son en image puis le lit détecte les fissures internes. En combinant la lumière et le son, on examine à la fois la surface et l'intérieur.

La deuxième direction consiste à prédire rapidement les contraintes thermiques et les déformations à la place de calculs lents. Un modèle de substitution réduit une analyse qui prendrait plusieurs jours à une

durée courte. Cette prédiction rapide permet de filtrer à l'avance un grand nombre de conditions de procédé. Lorsque l'on intègre la physique, la prédiction ne s'écarte pas des lois physiques.

La dernière direction consiste à aider le système à modifier les conditions de procédé au fil de la fabrication. On réduit la déformation en ajustant la trajectoire de balayage et le temps de refroidissement. On maintient une forme cristalline régulière en réglant le laser. Le modèle génératif dessine à l'avance la forme des cristaux à partir des conditions. L'apprentissage par renforcement règle lui-même les conditions pendant la fabrication.

Un point doit être clairement établi. L'intelligence artificielle ne peut pas remplacer tous les contrôles. Les nombreux modèles vus dans ce chapitre sont rapides et intelligents, mais ils ne sont pas parfaits. Beaucoup relèvent encore des premières recherches, et peu sont devenus des normes industrielles établies. Il est plus sûr d'utiliser le jugement de l'intelligence artificielle pour les alertes et la sélection de zones candidates. L'assurance qualité finale repose ensemble sur les éprouvettes, le contrôle non destructif et les essais de combustion.

Un nouveau courant utilise aussi les modèles de langage. Dans la fabrication additive, les articles et les rapports s'accumulent en quantité immense. Un grand modèle de langage (Large Language Model; LLM) lit ces textes et organise les connaissances. On peut lui demander dans quelles conditions quels défauts apparaissent souvent. Une étude de 2025 a tenté de prédire les conditions de défaut au moyen d'un modèle de langage. Ces outils deviennent un pont entre l'expérience humaine et la littérature scientifique.

La vue d'ensemble est la suivante. Les capteurs deviennent les yeux et les oreilles, le modèle de substitution devient la tête, et le contrôleur devient la main. Lorsque ces trois éléments sont reliés, l'usine fabrique des pièces tout en les surveillant elle-même. Le fait que la NASA ait fabriqué une grande tuyère par empilement et l'ait fait résister à de longs essais de combustion en est le point de départ. Le chapitre suivant examine comment finir les pièces ainsi fabriquées et comment estimer si elles résisteront longtemps.

Sources associées

- DebRoy, T., Wei, H. L., Zuback, J. S., Mukherjee, T., Elmer, J. W., Milewski, J. O., Beese, A. M., Wilson-Heid, A., De, A., & Zhang, W. (2018). Additive manufacturing of metallic components: Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 92, 112-224. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.10.001>
- King, W. E., Barth, H. D., Castillo, V. M., Gallegos, G. F., Gibbs, J. W., Hahn, D. E., Kamath, C., & Rubenchik, A. M. (2014). Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 214, 2915-2925. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2014.06.005>
- Rosenthal, D. (1946). The theory of moving sources of heat and its application to metal treatments. *Transactions of the ASME*, 68, 849-866.
- Hunt, J. D. (1984). Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, 65, 75-83. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(84\)90201-5](https://doi.org/10.1016/0025-5416(84)90201-5)
- Mukherjee, T., Manvatkar, V., De, A., & DebRoy, T. (2017). Mitigation of thermal distortion during additive manufacturing. *Scripta Materialia*, 127, 79-83. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.001>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., Evans, L. J., & Garcia, C. (2019). GRCop-42 Development and Hot-fire Testing Using Additive Manufacturing Powder Bed Fusion for Channel-cooled Combustion Chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT). <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>

- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners (Document ID 20230007103). NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NIST. (2024). Additive Manufacturing Benchmark Test Series (AM Bench). National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/ambench>
- NIST. (2022). AM Bench 2022 measurement results data: in-situ thermography and scan strategy laser scans. National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/data-publications/am-bench-2022-measurement-results-data-situ-thermography-and-scan-strategy-laser>
- Levine, L. E., Lane, B. M., Heigel, J. C., et al. (2024). Outcomes and conclusions from the 2022 AM Bench measurements, challenge problems, and conference. Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 13, 154-193. <https://doi.org/10.1007/s40192-024-00372-4>
- Aydogan, B., & Chou, K. (2024). Review of in situ detection and ex situ characterization of porosity in laser powder bed fusion metal additive manufacturing. Metals, 14(6), 669. <https://doi.org/10.3390/met14060669>
- Chen, L., Bi, G., Yao, X., Su, J., Tan, C., Feng, W., Benakis, M., Chew, Y., & Moon, S. K. (2024). In-situ process monitoring and adaptive quality enhancement in laser additive manufacturing: a critical review. arXiv:2404.13673. <https://arxiv.org/abs/2404.13673>
- Emmanuel, I., Yang, Z., Yeung, H., & Zhang, X. (2026). Machine learning modeling for real-time melt pool monitoring in laser powder bed fusion additive manufacturing: a hybrid approach. arXiv:2606.23851. <https://arxiv.org/abs/2606.23851>
- Liu, H., Guirguis, D., Zeng, X., Maurer, L., Rajan, V., Sanaei, N., Yang, C.-T., Beuth, J. L., Rollett, A. D., & Kara, L. B. (2026). Airborne acoustic emission enables sub-scanline keyhole porosity quantification and effective process characterization for metallic laser powder bed fusion. Additive Manufacturing, 116, 105062. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.105062>
- Tian, M., Mu, H., Ding, D., Li, M., Ding, Y., & Zhao, J. (2025). Real-time distortion prediction in metallic additive manufacturing via a physics-informed neural operator approach. arXiv:2511.13178. <https://arxiv.org/abs/2511.13178>
- Zhang, R., Strickland, J., Hou, X., Yang, F., Li, X., de Oliveira, J. A., Li, J., & Zhang, S. (2025). Rapid residual stress simulation and distortion mitigation in laser additive manufacturing through machine learning. Additive Manufacturing, 102, 104721. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104721>
- Bostan, B., Hinnebusch, S., Anderson, D., & To, A. C. (2025). Accurate detection of local porosity in laser powder bed fusion through deep learning of physics-based in-situ infrared camera signatures. Additive Manufacturing, 101, 104701. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104701>
- Giri, S., Liu, S., Gorgannejad, S., Thampy, V., Quan, P., Nicolino, J. W., Strantza, M., Forien, J.-B., Martin, A. A., Calta, N. P., & Tassone, C. J. (2026). In-situ sensor monitoring of multi-class gas porosity formation in laser powder bed fusion using convolutional neural network. Journal of Intelligent Manufacturing. <https://doi.org/10.1007/s10845-026-02861-z>
- Zhang, H., Caputo, A. N., Neu, R. W., Vallabh, C. K. P., To, A. C., Alam, M. J., & Zhao, X. (2026). Process-agnostic multi-metric nondestructive characterization of porosity in additive manufacturing via specialized single-camera two-wavelength pyrometry. Additive Manufacturing, 127, 105282. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2026.105282>
- Tempelman, J. R., Wachtor, A. J., Flynn, E. B., Depond, P. J., Forien, J.-B., Guss, G. M., Calta, N. P., & Matthews, M. J. (2022). Sensor fusion of pyrometry and acoustic measurements for localized keyhole pore identification in laser powder bed fusion. Journal of Materials Processing Technology, 308, 117656. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2022.117656>
- Li, Z., Zheng, H., Zhang, Z., Wang, J., Wen, G., Grasso, M., & Colosimo, B. M. (2026). On the use of acoustic emission methods for in-situ monitoring in metal additive manufacturing: a review study. Additive Manufacturing Frontiers, 5(2), 200347. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200347>
- Brooke, R., Zhang, D., Qiu, D., Gibson, M. A., & Easton, M. (2025). Compositional criteria to predict columnar to equiaxed transitions in metal additive manufacturing. Nature Communications, 16, 5710. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-60162-0>
- Prabhune, B., Panicker, N., Jordan, B., Lim, B., Snyder, K., Delchini, M., See, N. D., Nag, S., Plotnikov, Y., & Lee, Y. (2025). Multi-physics melt pool modeling and process optimization for laser direct energy deposition of Nb-based refractory C103. Journal of Manufacturing Processes, 154, 444-461. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2025.09.082>
- Jeong, W., Cho, S., & Ryu, H. J. (2025). Optimization and characterization of C103 Nb alloy fabricated by laser wire directed energy deposition. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 133, 107318. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2025.107318>

- Xu, Z. Y., Mao, J. Y., Ren, R. X., Wu, Z. Q., Lei, Y. J., Han, L. L., Chen, C., Fan, W., & Wang, Y. (2026). Research progress and challenges of intelligent in situ monitoring for laser additive manufacturing processes based on machine learning. *Advances in Mechanical Engineering*. <https://doi.org/10.1177/16878132261442327>
- Pak, P., & Barati Farimani, A. (2025). AdditiveLLM: Large Language Models Predict Defects in Metals Additive Manufacturing. arXiv:2501.17784. <https://arxiv.org/abs/2501.17784>

Chapitre 7. Post-traitement des alliages aérospatiaux imprimés en 3D et garantie de durée de vie en fatigue à haut nombre de cycles

Introduction

Pensons à une imprimante 3D utilisée à la maison. Elle fait fondre un filament plastique et fabrique un objet couche par couche. Les pièces de moteurs-fusées sont fabriquées d'une manière proche. La différence est que le matériau n'est pas du plastique, mais de la poudre métallique. Un laser fait fondre cette poudre métallique en un instant, puis la solidifie couche par couche. Il devient ainsi possible de produire d'un seul tenant des formes complexes.

Cette méthode a beaucoup changé la fabrication des pièces de fusées. Autrefois, on fabriquait plusieurs morceaux séparément, puis on les assemblait par soudage. Aujourd'hui, même une pièce qui contient des canaux de refroidissement internes peut être fabriquée en une seule fois. Le nombre de pièces diminue et le poids baisse. Comme l'étape d'assemblage de plusieurs morceaux disparaît, le temps de fabrication se raccourcit lui aussi.

Il existe pourtant un problème. Le métal tout juste sorti de l'imprimante ne peut pas être monté tel quel sur une fusée. Sa surface est rugueuse et de petits pores restent à l'intérieur. Des contraintes invisibles à l'œil nu y sont aussi piégées. Si la pièce tourne rapidement dans cet état, elle risque de se rompre.

C'est pourquoi le travail effectué après l'impression est important. On l'appelle post-traitement. On enlève de la matière en surface pour la rendre lisse. On élimine les pores internes par la chaleur et la pression. On rend la microstructure plus homogène par traitement thermique. Ce chapitre présente, dans l'ordre, le processus de post-traitement, du lissage de la surface à l'élimination des défauts internes.

Imaginons une scène dans une cuisine où l'on coupe une viande dure. Un couteau traverse facilement un tofu tendre. Il entre difficilement dans une viande dure. Un superalliage pour fusée ressemble à cette viande dure. Il est très difficile à usiner. Cette propriété difficile à couper s'appelle l'usinabilité difficile.

Il existe une autre grande inquiétude. C'est la fatigue. La fatigue est le phénomène par lequel un matériau se rompt sous l'effet de petites forces répétées de nombreuses fois. Si l'on plie et déplie plusieurs fois un trombone, il finit par casser. Il casse alors même qu'on ne lui a pas appliqué une grande force d'un seul coup. Les aubes tournantes d'une turbopompe de fusée sont exposées à ce risque.

Dans ce chapitre, nous examinons comment l'intelligence artificielle aide dans deux tâches. La première consiste à trouver les conditions permettant de bien usiner un métal difficile à couper. La seconde consiste à savoir à l'avance combien de charges répétées une pièce pourra supporter. Dans les deux cas, s'appuyer seulement sur l'expérience humaine prend beaucoup de temps. L'intelligence artificielle apprend à partir des données et resserre rapidement le champ des réponses.

Cependant, l'intelligence artificielle ne décide pas de tout. Les pièces de fusées engagent des vies humaines et des coûts élevés. Les prévisions de l'intelligence artificielle doivent être vérifiées de nouveau par des essais et des inspections. Ce chapitre explique comment l'intelligence artificielle et l'expérimentation travaillent ensemble en se contrôlant l'une l'autre.

Après avoir lu ce chapitre, deux choses apparaissent clairement. La première est la raison pour laquelle un métal imprimé en 3D a besoin d'être retravaillé. La seconde est la manière dont l'intelligence artificielle aide ce travail et ces contrôles. Nous n'utiliserons pas de formules difficiles. Nous

expliquerons chaque point à partir d'exemples de la vie quotidienne. En suivant pas à pas, il devient facile de saisir l'ensemble du chapitre.

7.1 Les pièces de fusées qui passent à l'impression 3D et les nouveaux défis

Commençons par expliquer ce que cette section traite. Le cœur d'un moteur-fusée est un environnement très sévère. D'un côté circule un carburant cryogénique à moins de -200 degrés. De l'autre passent des gaz brûlants à plusieurs centaines de degrés. La pression est élevée et les vibrations sont fortes. Cette section examine pourquoi les métaux utilisés dans ces conditions sont fabriqués par impression 3D, et quelles faiblesses apparaissent alors.

Les pièces de moteurs-fusées doivent être légères et solides. Si le poids est élevé, la charge utile diminue. Si la résistance est faible, elles ne peuvent pas supporter les hautes pressions. Ces deux exigences se heurtent. En effet, rendre une pièce légère tend à l'affaiblir. La fabrication additive (Additive Manufacturing, AM) a ouvert une voie pour résoudre ce problème.

La chambre de combustion à refroidissement régénératif en est un bon exemple. La paroi de la chambre de combustion est en contact avec une flamme brûlante. Si on la laisse ainsi, la paroi fond. On crée donc de minces canaux de refroidissement à l'intérieur de la paroi. Un carburant froid passe dans ces canaux et refroidit la paroi. Une structure où ces canaux sont cachés dans la paroi est difficile à fabriquer par les méthodes anciennes. La fabrication additive réalise en une seule fois ce type de structure interne complexe.

Une technique représentative de fabrication de pièces est la fusion laser sur lit de poudre (Laser Powder Bed Fusion, LPBF). Un laser passe sur une fine couche de poudre métallique étalée. L'endroit touché par le laser fond instantanément, puis se solidifie rapidement. On étale ensuite une nouvelle couche de poudre au-dessus et on applique de nouveau le laser. En répétant ce processus des milliers de fois, on construit la pièce couche par couche.

Les métaux souvent utilisés dans les pièces de fusées sont les superalliages à base de nickel (superalloy). Un superalliage est un métal spécial qui ne perd pas sa résistance même à haute température. L'Inconel 718 en est un matériau représentatif. On utilise aussi des alliages de la famille Haynes. Ces métaux résistent longtemps même dans des gaz brûlants.

Le problème se trouve dans ce qui se passe à l'intérieur du métal fondu par le laser. La zone traversée par le laser refroidit très vite. Elle refroidit si vite que la température peut baisser de centaines de milliers de degrés par seconde. Lorsque le refroidissement est aussi brutal, la microstructure se solidifie de manière inégale. Les cristaux s'allongent dans la direction de construction. Ces cristaux allongés s'appellent des grains colonnaires (columnar grain).

Un phénomène apparaît aussi dans lequel les propriétés changent selon la direction. On l'appelle anisotropie (anisotropy). Le bois permet de le comprendre facilement. Le bois se fend bien lorsqu'on le sépare dans le sens des fibres. Il faut plus d'effort lorsqu'on coupe à travers les fibres. Dans un métal fabriqué par couches, la résistance varie elle aussi selon la direction. Cette propriété rend la conception et l'usinage des pièces plus difficiles.

Le refroidissement rapide laisse d'autres traces. En hiver, si l'on verse de l'eau chaude dans un verre gelé, il se fissure. C'est parce que l'intérieur et l'extérieur se dilatent à des vitesses différentes. Une chose semblable se produit dans le métal fabriqué par couches. La vitesse de solidification varie selon les zones. Des forces restent donc piégées dans la pièce. Ces forces piégées s'appellent les contraintes résiduelles (residual stress).

À cela s'ajoute une ségrégation des éléments. Quand le métal fondu se solidifie, certains éléments se concentrent d'un côté. Dans l'Inconel 718, l'élément niobium (Nb) se concentre ainsi. Des particules dures apparaissent à cet endroit. On appelle ces particules la phase de Laves (Laves phase). La phase de Laves est beaucoup plus dure que la matrice métallique et se casse facilement.

Ces phénomènes internes créent deux défis. Le premier est la difficulté d'usinage. Les particules dures endommagent les outils de coupe. Le second est que les pores internes deviennent les germes de fissures de fatigue. Dans une pièce qui tourne rapidement, ces germes sont dangereux. Les sections suivantes traitent donc ces deux défis l'un après l'autre.

Il y a une raison pour laquelle la fabrication additive s'est rapidement imposée dans l'industrie des fusées. Elle réduit fortement le temps nécessaire pour produire une pièce. Autrefois, la fabrication du moule de fonderie prenait à elle seule plusieurs mois. La fabrication additive construit directement la pièce sans moule. Si l'on modifie la conception, une nouvelle pièce peut être imprimée le lendemain. Comme la conception et la fabrication peuvent être répétées en cycles courts, le développement s'accélère.

Elle a aussi une grande capacité à réduire le poids. Quand plusieurs morceaux sont réunis en un seul, les joints disparaissent. Les joints ajoutent du poids et deviennent souvent des points faibles. En les supprimant, la pièce devient plus légère et plus solide. C'est pourquoi les entreprises de fusées investissent fortement dans cette technique. L'agence spatiale américaine teste elle aussi depuis longtemps des chambres de combustion fabriquées par couches.

Le post-traitement comprend nécessairement un traitement thermique. Le traitement thermique consiste à chauffer puis refroidir un métal pour modifier sa microstructure. On chauffe d'abord à haute température afin de dissoudre les particules dures dans la matrice. Cette étape s'appelle la mise en solution. Ensuite, on maintient longtemps le métal à une température appropriée pour faire croître de manière homogène les particules de renforcement. Cette étape s'appelle le vieillissement. Ce n'est qu'après ces deux étapes qu'un superalliage donne toute sa résistance.

En résumé, la fabrication additive a apporté de grands avantages et de nouveaux défis. Ses avantages sont les formes complexes et la fabrication rapide. Ses défis sont les surfaces rugueuses et les défauts internes. La clé pour résoudre ces défis est le post-traitement et l'inspection. Et l'intelligence artificielle accompagne l'ensemble de ces processus de post-traitement et d'inspection.

7.2 Pourquoi les superalliage fabriqués par couches sont difficiles à usiner

Commençons par expliquer ce que cette section traite. L'usinabilité difficile désigne la propriété d'un matériau difficile à couper. Les superalliage fabriqués par couches rendent encore plus difficile l'usinage de métaux qui étaient déjà difficiles à couper. Nous examinons pourquoi en distinguant trois raisons. Il s'agit de l'orientation de la microstructure cristalline, des contraintes piégées et de l'écrouissage, puis du processus d'usure de l'outil.

7.2.1 Une microstructure cristalline qui varie selon la direction

Cette sous-section traite de l'effet de l'orientation de la microstructure cristalline sur la coupe. Nous avons vu plus haut que les grains colonnaires s'allongent dans la direction de construction. Nous regardons en détail pourquoi cette microstructure rend l'usinage difficile. Nous examinons aussi le choc que la phase de Laves dure impose à l'outil.

Un métal est formé d'un assemblage de petits cristaux. Dans chaque cristal, les atomes sont disposés selon un ordre régulier. La direction dans laquelle ces cristaux sont orientés détermine les propriétés.

Dans un métal fabriqué par couches, les cristaux sont orientés vers une direction dominante. Comme ils s'allongent dans la direction de construction, les propriétés varient selon les directions.

Quand l'outil de coupe traverse cette microstructure, la résistance change. L'angle entre l'orientation des cristaux et celle de l'arête de coupe varie d'un endroit à l'autre. Certaines zones se coupent doucement. D'autres résistent fortement. La force de coupe monte et descend donc de façon régulière. Comme la force n'est pas uniforme, l'usinage devient instable et la surface devient elle aussi irrégulière.

Ces montées et descentes donnent des chocs répétés à l'outil. Quand les chocs s'accumulent, l'arête se détériore peu à peu. Les vibrations augmentent aussi. Cette vibration s'appelle le broutement (chatter). Quand le broutement est fort, des ondulations restent sur la surface. Dans les pièces de précision, ces marques deviennent un défaut important.

Des particules dures aggravent encore le problème. Lorsque l'Inconel 718 se solidifie, le niobium se concentre aux joints des cristaux. Une phase de Laves en forme de plaques ou de blocs apparaît à cet endroit. Ces particules sont beaucoup plus dures que la matrice métallique, tout en ayant aussi la propriété de se briser facilement.

Que se passe-t-il quand l'outil de coupe heurte ces particules dures ? C'est comme faire passer un couteau sur des cailloux mêlés à une terre tendre. De petites dents se détachent de l'arête. Si ces microdommages continuent de s'accumuler, l'arête de l'outil finit par s'user et s'émousser.

Pour résoudre ce problème, il faut d'abord rendre la microstructure plus homogène. Le traitement thermique présenté plus loin joue ce rôle. Il dissout les particules dures et les fait revenir dans la matrice. Il rend aussi les grains colonnaires allongés un peu plus arrondis. Le degré de variation des propriétés selon la direction diminue alors.

Cette différence de microstructure est directement liée à la performance de la pièce. Si la résistance varie selon la direction, la conception devient difficile. Il faut placer la pièce de manière à éviter la direction la plus faible. Quand la microstructure devient homogène, cette inquiétude diminue. Le post-traitement améliore donc non seulement l'usinage, mais aussi les performances.

L'intelligence artificielle intègre ces informations de microstructure dans ses prévisions. L'orientation des cristaux et la quantité de particules dures deviennent des données d'entrée. Elle apprend comment la résistance à la coupe change selon ces valeurs. Il est difficile pour une personne d'examiner une à une les images de microstructure. L'intelligence artificielle lit rapidement de nombreuses images et y trouve des règles.

L'orientation des cristaux se mesure avec un équipement spécial. Lorsqu'on envoie un faisceau d'électrons sur la surface d'un échantillon, chaque cristal produit un motif différent. Ces motifs permettent de savoir vers quel côté chaque cristal est orienté. Cette information d'orientation devient une bonne donnée d'entrée pour l'intelligence artificielle. Il est difficile pour une personne de compter les orientations à l'œil nu. Une machine lit en une seule fois l'orientation d'innombrables cristaux.

L'angle de construction modifie lui aussi les propriétés. La microstructure change selon que la pièce est construite debout ou couchée. Même avec le même plan, la résistance varie si l'orientation de placement change. C'est pourquoi l'orientation de construction est décidée dès l'étape de conception. Cet angle influence aussi l'usinabilité et la fatigue. L'intelligence artificielle l'intègre comme variable et apprend son effet.

Cependant, la microstructure varie légèrement d'une pièce à l'autre. Même avec les mêmes réglages, il existe des écarts selon les zones. De petites oscillations du laser et des différences de taille des poudres

créent ces écarts. Les prévisions du modèle gardent donc elles aussi une part de fluctuation. La manière de traiter cette fluctuation sera examinée en détail dans une section suivante.

7.2.2 Contraintes piégées et propriété qui rend le métal plus dur à mesure qu'on l'usine

Cette sous-section traite des contraintes piégées et de l'écrouissage. Nous avons vu plus haut que des forces restent piégées dans le métal fabriqué par couches. Nous examinons quels problèmes ces forces piégées provoquent pendant l'usinage. Nous regardons aussi la propriété des superalliages qui deviennent plus durs pendant la coupe.

Revenons d'abord sur les contraintes résiduelles. Plusieurs forces sont piégées dans différentes directions à l'intérieur de la pièce. Cet ensemble de forces est représenté par une boîte mathématique appelée tenseur. On peut considérer un tenseur comme un tableau qui contient ensemble des valeurs selon plusieurs directions. Il est invisible à l'œil nu, mais il pousse et tire à l'intérieur de la pièce.

Ces forces piégées révèlent le problème au moment de l'usinage. Lorsqu'on enlève de la matière en surface, la force présente à cet endroit se libère. La partie restante perd alors son équilibre. Une aube mince ou une pièce en forme d'anneau se déforme. En cherchant à respecter une dimension précise, on finit au contraire par déformer la forme. Il faut donc décider à l'avance jusqu'à l'ordre dans lequel les surfaces seront usinées.

Vient ensuite l'écrouissage (work hardening). L'écrouissage est la propriété par laquelle un métal devient plus dur à mesure qu'il se déforme. Si l'on plie plusieurs fois un fil de fer, l'endroit plié devient raide. Les superalliages présentent fortement cette propriété. La fine couche située devant l'arête de coupe devient plus dure en un instant.

L'outil doit alors couper de nouveau la couche qui vient de durcir. Cela demande plus d'effort. Cela produit aussi plus de chaleur. L'Inconel 718 est un métal qui évacue mal la chaleur. Sa conductivité thermique ne représente qu'environ un tiers de celle d'un acier ordinaire. La chaleur qui ne peut pas s'échapper s'accumule donc entre l'arête de coupe et la pièce, ce qui augmente encore la température.

Les phases de renforcement rendent aussi la tâche difficile à l'outil. Dans l'Inconel 718, de très petites particules de renforcement sont dispersées. La principale particule de renforcement de cet alliage est le gamma double prime contenant du niobium (γ'' , Ni3Nb). Ces particules maintiennent le métal à l'état dur. Même à haute température, elles se dissolvent difficilement. Ainsi, même dans la zone de coupe chaude, le métal ne ramollit pas, et l'outil continue de subir de fortes charges.

Tous ces facteurs se combinent et provoquent des dommages en surface. Une fine couche située sous la surface usinée se transforme. La microstructure se fragmente finement et sa couleur devient blanche. Cette couche s'appelle couche blanche (white layer). Dans la couche blanche, des contraintes résiduelles de traction et des microfissures restent souvent ensemble. Cette couche devient un point de départ des fissures et réduit fortement la durée de vie en fatigue de la pièce.

Pourquoi la couche blanche est-elle dangereuse ? Cette couche contient des contraintes résiduelles de traction invisibles à l'œil nu. La contrainte de traction est une force qui ouvre les fissures. Si des microfissures s'y ajoutent, elles deviennent des germes. Sous des charges répétées, les fissures se développent à partir de ces germes. Il faut donc éviter de laisser une couche blanche lors de la finition finale.

Il existe aussi des moyens de réduire ce problème. Après la coupe, on ajoute un post-traitement qui martèle la surface avec de petites particules. Ce traitement laisse des contraintes de compression en surface. La contrainte de compression est une force qui presse les fissures pour les refermer. Elle agit

dans le sens opposé à la contrainte de traction. En introduisant ainsi des contraintes de compression en surface, on augmente la durée de vie en fatigue de la pièce.

L'intelligence artificielle apprend aussi les effets de ces différents post-traitements. On lui fournit comme entrées les conditions de coupe, le traitement par martelage et le traitement thermique. Elle prédit alors quelle combinaison donnera de bons résultats. Elle réduit fortement les essais que les humains devaient réaliser un par un. Mais la validation finale se fait toujours par des essais réels.

L'intelligence artificielle sert à détecter ce risque à l'avance. Si l'on fournit les conditions de coupe et les valeurs de contraintes résiduelles, elle prédit l'état de surface. Elle apprend dans quelles conditions une couche blanche apparaît. On peut alors éviter les conditions dangereuses. Pour les pièces en titane fabriquées par dépôt de couches, des modèles de deep learning ont été proposés afin de prédire la rugosité de surface et la dureté à partir des conditions de procédé. Ce livre propose d'appliquer la même approche aux surfaces usinées des superalliages.

Cependant, une prédiction n'est fiable que dans le domaine où le modèle a appris. Dans des conditions jamais rencontrées, l'erreur augmente. Les pièces réelles doivent donc toujours être vérifiées par une inspection de surface. La couche blanche est fine et peut facilement échapper à l'œil. L'intelligence artificielle filtre à l'avance les conditions dangereuses et réduit le nombre de candidats.

7.2.3 Les modes d'usure de l'outil et les dommages de surface

Cette sous-section traite des différents modes d'usure de l'outil. L'usure de l'outil (tool wear) est directement liée à la qualité de production. Quand l'outil s'use, la surface devient rugueuse. Une surface rugueuse devient un point de départ des fissures de fatigue. Il est donc important, pour le contrôle de qualité, de savoir à l'avance dans quelle mesure l'outil est usé.

Il existe plusieurs types d'usure de l'outil. Le premier est l'usure en entaille. Une rainure profonde se creuse dans l'outil à la limite de la profondeur de coupe. À cet endroit, l'oxygène de l'air et la couche de métal durcie frottent ensemble. Sous l'effet de ce frottement conjoint de l'oxygène et de la couche métallique dure, la rainure devient peu à peu plus profonde.

Le deuxième est le décollement dû à l'adhésion. Le nickel adhère facilement aux matériaux d'outil. Les copeaux de métal coupé collent à l'arête de coupe. Cet amas s'appelle arête rapportée. Quand cet amas se détache, il arrache aussi le revêtement de la surface de l'outil. À ce moment-là, le revêtement s'arrache, et la surface de l'outil se détériore rapidement.

Le troisième est l'usure par diffusion. La zone de coupe atteint une température très élevée. À haute température, les atomes diffusent les uns dans les autres. Les atomes de l'outil migrent vers les copeaux métalliques. Il reste alors sur la surface de l'outil une marque creusée, appelée cratère.

Le quatrième concerne la couche blanche de surface et les microfissures. La couche blanche abordée plus haut apparaît aussi ici. Une déformation brutale et un refroidissement rapide se combinent pour former une fine couche blanche. Des fissures peuvent facilement se cacher dans cette couche. Même si l'extérieur semble lisse, des défauts comme des fissures peuvent être cachés à l'intérieur.

Toutes ces usures sont liées entre elles. Quand l'une augmente, les autres augmentent aussi. Il ne faut donc pas chercher une seule cause. Il faut examiner plusieurs signaux ensemble. La force de coupe, les vibrations, le son et la température sont tous des signaux d'usure.

L'intelligence artificielle lit ces signaux ensemble. Des capteurs recueillent les signaux en temps réel pendant la coupe. Le modèle estime, à partir de ces signaux, le degré d'usure actuel de l'outil. Des recherches récentes ont utilisé le deep learning pour lire des photos d'outils usés et prédire directement

le degré d'usure. La machine remplace ainsi le travail où une personne arrêterait l'outil pour l'observer à la loupe.

La même approche fonctionne aussi avec d'autres métaux. Une étude a prédit, à l'aide d'un modèle fondé sur les données, l'usure de l'outil lors de l'usinage d'un alliage de nickel appelé Hastelloy C276. En effet, plusieurs superalliages présentent des modes d'usure semblables. Ces résultats servent aussi de référence pour les superalliages destinés aux fusées.

Prédire l'usure de l'outil rend aussi possible l'usinage sans opérateur. La machine surveille elle-même l'état de l'outil. Si un risque apparaît, elle réduit la vitesse ou remplace l'outil. Une personne n'a pas besoin de surveiller constamment. Dans les usines où des pièces sont usinées toute la nuit sans présence humaine, les modèles prédictifs soutiennent ainsi la sécurité.

Ces quatre formes d'usure dépendent fortement de la température. Plus la zone de coupe est chaude, plus l'usure s'accélère. Le refroidissement est donc important. On pulvérise un fluide de coupe pour évacuer la chaleur. On peut aussi projeter ce fluide à haute pression directement sur l'arête. Ce mode de refroidissement devient lui aussi une variable d'entrée pour l'intelligence artificielle.

En résumé, la prédiction de l'usure de l'outil devient l'œil du contrôle de qualité. On peut remplacer l'outil avant que l'usure ne devienne excessive. On peut corriger les conditions avant que des pièces défectueuses ne soient produites. Cependant, les signaux des capteurs contiennent du bruit. Les vibrations incluent aussi les tremblements propres de la machine. Le modèle doit donc être bien entraîné pour résister au bruit. L'usage combiné de plusieurs capteurs réduit l'effet du bruit.

7.3 Calcul des forces pour bien usiner et optimisation du post-traitement

La section précédente a examiné pourquoi l'usinage est difficile. Cette section montre comment surmonter cette difficulté. Trois points sont traités successivement. On examine d'abord comment calculer les forces qui interviennent dans la coupe. On étudie ensuite comment l'usinabilité varie selon le post-traitement. Enfin, on voit comment l'intelligence artificielle trouve les conditions optimales.

7.3.1 Les forces de coupe et les modèles qui les traitent

Cette sous-section examine les forces de coupe et les modèles qui les traitent. La force de coupe (cutting force) est la force par laquelle l'outil pousse le métal. Si l'on connaît cette force à l'avance, on peut mieux choisir l'outil et les conditions. On examine ensemble l'idée de base du calcul des forces et le problème des vibrations.

La force de coupe n'agit pas dans une seule direction. Il existe en même temps une force qui pousse vers l'avant, une force qui pousse sur le côté et une force qui appuie vers le bas. La force de coupe se représente donc comme un vecteur à trois composantes directionnelles. Un vecteur est une grandeur qui possède à la fois une taille et une direction. En revanche, la contrainte dans le matériau se représente par un tenseur. Un tenseur est une grandeur qui contient ensemble des valeurs dans plusieurs directions. Le vecteur de force de coupe et le tenseur de contrainte sont des grandeurs différentes. La valeur de cette force dépend de l'épaisseur coupée et de la résistance du matériau.

Pendant la coupe, trois phénomènes se produisent en même temps. Le métal se déforme, de la chaleur apparaît et un frottement se crée. Un bon modèle doit traiter ces trois phénomènes ensemble. La résistance du matériau lorsqu'il est comprimé rapidement varie avec la température. Quand il chauffe, le métal ramollit légèrement. Cette relation est introduite dans le modèle sous forme de table, et non sous forme d'équation.

Ce modèle utilise des constantes différentes selon les matériaux. Les constantes sont déterminées par l'expérience. Même pour un même Inconel 718, les constantes diffèrent entre un matériau fabriqué par dépôt de couches et un matériau forgé. C'est parce que la microstructure du matériau fabriqué par dépôt de couches est différente. Des expériences propres à ces matériaux sont donc nécessaires. Le modèle devient précis lorsque suffisamment de données expérimentales propres aux matériaux fabriqués par dépôt de couches sont accumulées.

L'intelligence artificielle aide aussi à déterminer les constantes. Il existe une méthode qui retrouve les constantes à rebours à partir des signaux de coupe. On mesure la force et la température, puis on choisit les constantes qui correspondent à ces valeurs. La machine réalise rapidement ce que l'humain ajustait à la main. On peut alors adapter vite le modèle à un nouveau matériau.

Le problème des vibrations est lui aussi important. Le broutement a été évoqué plus haut. Le broutement est une vibration dans laquelle l'outil et la pièce se font osciller l'un l'autre. Une fois qu'une oscillation apparaît, l'outil recoupe la marque laissée au tour suivant. L'oscillation augmente alors encore. Une petite vibration se développe d'elle-même et finit par gêner l'usinage.

Pour empêcher cette vibration, il faut connaître la profondeur de coupe sûre. Si l'on coupe trop profondément, la vibration augmente. Si l'on coupe moins profondément, elle diminue. La limite varie selon la vitesse de rotation. Le graphique qui trace cette limite s'appelle diagramme de lobes de stabilité. On s'en sert pour choisir des conditions sans vibration.

L'intelligence artificielle aide à accélérer ce calcul. Avec le seul modèle physique, le calcul prend longtemps. À chaque léger changement de condition, il faut tout résoudre depuis le début. L'intelligence artificielle apprend à l'avance les résultats du modèle physique. Ensuite, elle donne immédiatement la réponse pour de nouvelles conditions. Un modèle qui remplace ainsi un calcul lourd s'appelle surrogate. Surrogate signifie substitut. Le calcul exact n'est effectué que quelques fois à l'avance. Le modèle substitut qui a appris ces résultats prend ensuite le relais.

Cette méthode réduit beaucoup le temps sur le terrain. Autrefois, on modifiait les conditions et l'on réalisait plusieurs essais de coupe. Aujourd'hui, le modèle filtre d'abord les conditions dangereuses. Il ne reste alors que quelques cas à tester réellement. Cependant, si le modèle physique est faux, l'intelligence artificielle se trompe aussi. Il est donc plus sûr d'utiliser ensemble la physique et les données.

La méthode qui utilise ensemble la physique et les données s'appelle apprentissage automatique informé par la physique (PIML). Cette méthode intègre les lois physiques dans l'intelligence artificielle. Même lorsque les données sont peu nombreuses, les lois physiques maintiennent la réponse dans un domaine plausible. Elles deviennent un dispositif de sécurité contre les prédictions aberrantes. Cette idée reviendra à plusieurs reprises dans les chapitres suivants de ce livre. Elle est très utile dans les domaines où les données sont rares, comme l'ingénierie des fusées.

7.3.2 Comparaison de l'usinabilité du matériau forgé, de l'état juste après dépôt de couches et du matériau traité par HIP

Cette sous-section compare trois états du métal. Même pour un même Inconel 718, les propriétés varient selon le mode de fabrication et le post-traitement. On examine côte à côte le matériau forgé, l'état juste après dépôt de couches et l'état ayant subi un pressage isostatique à chaud.

Commençons par le matériau forgé (wrought). Un matériau forgé est obtenu en comprimant et en compactant le métal. Son principe est le même que celui du forgeage du fer dans une forge. Sa microstructure est fine et régulière. Les grains sont petits et arrondis. Les variations de force de coupe y sont donc plutôt faibles parmi les trois matériaux. L'usure de l'outil est elle aussi plus faible, ce qui rend la prédiction bien plus facile.

Vient ensuite l'état juste après dépôt de couches. On l'appelle aussi état as-built (as-built). C'est l'état tel qu'il sort de l'imprimante, sans post-traitement. Les contraintes résiduelles sont fortes et la phase Laves dure y est concentrée. Les grains colonnaires sont aussi épais et longs. La résistance à la coupe augmente donc beaucoup par rapport au matériau forgé. Le risque de rupture de l'outil est également parmi les plus élevés des trois matériaux.

Le troisième état est celui qui a subi un pressage isostatique à chaud (Hot Isostatic Pressing, HIP). Le HIP est un post-traitement qui applique en même temps une température élevée et une pression élevée. Il se déroule généralement à une température supérieure à 1000 degrés Celsius. La pression dépasse aussi 100 mégapascals. Dans ces conditions, les pores présents dans le métal sont comprimés et se referment.

Il est facile de penser à une pâte à pain. De petites bulles d'air se trouvent dans la pâte. Si on la presse et la pétrit longtemps, ces bulles s'échappent et la pâte devient dense. Le HIP est semblable. La haute pression écrase les pores dans le métal et les fait se refermer. La haute pression et la chaleur déplacent les atomes, si bien que les parois des pores se rejoignent.

Le HIP modifie aussi la microstructure. Toutefois, l'ampleur de ce changement dépend de la température et du temps de maintien. Si la température est assez élevée, la phase Laves dure se dissout dans la matrice. Si la température est basse ou si le temps est court, une partie de la phase Laves reste. Les longs grains colonnaires peuvent aussi subsister selon les conditions. Lorsque la microstructure devient homogène, les différences selon la direction et les variations de force de coupe diminuent. Le HIP est donc utilisé avec une mise en solution, un vieillissement et un traitement thermique d'homogénéisation, en ajustant leurs conditions.

Le HIP a toutefois ses limites. Il n'élimine pas tous les pores. Les pores reliés à la surface et les pores enfermés à l'intérieur se comportent différemment. Les bulles d'argon piégées pendant le dépôt de couches posent de nouveau problème même si elles sont refermées par HIP. En effet, l'argon est un gaz qui ne se dissout pas dans le métal. Si la pièce reçoit ensuite de nouveau une température élevée, les bulles refermées gonflent et se rouvrent. Ce phénomène s'appelle porosité induite thermiquement. Il est donc important de réduire les bulles de gaz dès le départ.

Un nouveau problème apparaît aussi après le HIP. Quand la microstructure s'adoucit, les copeaux métalliques se fragmentent moins facilement. Les copeaux s'allongent et s'enroulent autour de l'outil. Si cet enroulement devient important, il raye la surface. Il faut donc choisir une géométrie d'outil qui fragmente bien les copeaux.

L'intelligence artificielle organise cette comparaison sous forme de données. Elle rassemble les données d'usinage de chaque état et apprend les différences. Elle juge alors de quel état une nouvelle pièce est la plus proche. Elle propose aussi les post-traitements à appliquer. Des recherches récentes examinent largement les méthodes qui optimisent ensemble le HIP et le traitement thermique.

Le HIP est un post-traitement coûteux et long. Il faut chauffer et presser longtemps la pièce dans un grand équipement. Il est donc difficile de l'appliquer à toutes les pièces. Il faut décider pour quelles pièces le HIP est vraiment nécessaire. L'intelligence artificielle aide aussi cette décision. Elle estime à l'avance l'effet du HIP à partir des informations sur les défauts.

Les recherches publiques servent aussi de bons guides. La NASA a étudié par simulation comment le HIP réduit les défauts de l'Inconel 718 fabriqué par fabrication additive. Une étude a mesuré la résistance à la fatigue après avoir traité par HIP des pièces qui contenaient beaucoup de pores au départ. La plupart des pores se sont refermés, mais des bulles d'argon sont restées. Ces résultats s'accumulent et deviennent la base de la conception du post-traitement.

Il y a une raison de prendre les pièces forgées comme référence. Les pièces forgées sont des matériaux vérifiés depuis longtemps. Leurs propriétés sont bien connues et les données sont nombreuses. L'objectif est de porter les matériaux fabriqués par fabrication additive au niveau des pièces forgées. Le post-traitement est une voie vers cet objectif. L'intelligence artificielle aide à trouver cette voie plus vite.

7.3.3 Trouver de bonnes conditions d'usinage avec peu d'essais

Cette sous-section traite de la méthode permettant de trouver de bonnes conditions avec peu d'essais. Les conditions d'usinage sont nombreuses. La vitesse, l'avance, la profondeur et le mode de refroidissement sont tous des variables. Si l'on combine toutes ces variables, le nombre d'essais explose. On résout ce problème en reliant la méthode des plans d'expériences de Taguchi et les réseaux de neurones artificiels.

La méthode des plans d'expériences de Taguchi (Taguchi method) permet de comparer de nombreuses conditions avec peu d'essais. Elle ne teste pas toutes les combinaisons. Elle choisit seulement des combinaisons représentatives et les expérimente. Quelques combinaisons bien choisies suffisent pour lire la tendance d'ensemble. Comme le nombre d'essais diminue, le temps et le coût diminuent aussi.

Cette méthode réduit fortement le nombre d'essais. Par exemple, plusieurs centaines de combinaisons peuvent être ramenées à dix-huit essais. À chaque essai, on mesure la rugosité de surface et l'usure de l'outil. On mesure aussi l'énergie consommée pour l'usinage. Les valeurs ainsi recueillies dans plusieurs combinaisons deviennent les données d'apprentissage de l'intelligence artificielle.

Un réseau de neurones artificiel (Artificial Neural Network, ANN) apprend les règles à partir de ces données. Un réseau de neurones artificiel est une structure de calcul inspirée des connexions nerveuses du cerveau humain. Les entrées comprennent les conditions d'usinage et l'état du traitement thermique. Les sorties donnent la rugosité de surface et l'usure de l'outil. Le modèle trouve lui-même la relation entre les entrées et les sorties et l'apprend comme une règle.

Une fois l'apprentissage terminé, il prédit aussi les conditions qui n'ont pas été testées. Si l'on saisit une nouvelle vitesse et une nouvelle avance, il indique le résultat à l'avance. On y ajoute ensuite une recherche des conditions optimales. On choisit les conditions qui rendent la surface lisse et réduisent l'usure de l'outil. Quand les deux objectifs se heurtent, on cherche un point d'équilibre.

Les cas réels s'accumulent aussi. Une étude a traité le micro-tournage de l'Inconel 718 fabriqué par fabrication additive. Elle a examiné comment l'usinabilité du matériau change après traitement thermique. Elle a comparé des vitesses de coupe comprises entre 30 mètres et 60 mètres par minute. Ces données s'assemblent et deviennent la matière d'apprentissage du modèle.

Cette combinaison est très utile sur le terrain. On prépare d'abord un petit tableau d'essais. On recueille ensuite des données par capteurs et mesures. Enfin, l'intelligence artificielle apprend la relation entre conditions et qualité. On peut ainsi fixer rapidement les conditions d'une nouvelle pièce.

Quand il y a plusieurs objectifs, il faut trouver un point d'équilibre. On veut une surface lisse, une faible usure de l'outil et un temps court. Ces objectifs se heurtent entre eux. Si l'on usine vite, la surface risque de devenir rugueuse. Ainsi, en cherchant à améliorer un seul objectif, on en détériore souvent un autre.

On utilise alors une méthode qui traite plusieurs objectifs à la fois. On cède un peu sur l'un pour obtenir l'autre. On rassemble les bonnes combinaisons ainsi obtenues. Parmi elles, on choisit celle qui convient à la pièce. L'intelligence artificielle trouve rapidement ces combinaisons.

L'objectif réel est de réduire la rugosité de surface. Les pièces de fusée doivent avoir une surface lisse pour résister à la fatigue. Des conditions d'usinage bien choisies et un bon outil permettent de s'en

rapprocher. Une surface lisse réduit les points de départ des fissures. Le polissage de surface devient donc le premier maillon de la garantie de fatigue.

Les limites sont claires. Un modèle n'est fiable que dans le domaine qu'il a appris. Pour une vitesse ou une avance absente de l'apprentissage, la prédiction devient instable. Si les données sont peu nombreuses, l'erreur augmente. Les pièces importantes doivent donc être confirmées par de vrais essais d'usinage. On vérifie si la prédiction était correcte avec la rugosité de surface et l'usure de l'outil.

Le choix de l'outil est aussi une variable importante. Pour les superalliages, on utilise des outils dotés de revêtements spéciaux. Le revêtement aide à résister à la chaleur et à l'usure. On utilise parfois des outils fabriqués en céramique. L'intelligence artificielle apprend aussi quel outil convient à quelles conditions. On peut alors ajuster ensemble le coût de l'outil et la qualité d'usinage.

La tâche à venir consiste à élargir les données. Si l'on rassemble les données expérimentales de plusieurs organismes, le modèle devient plus robuste. Cependant, les méthodes de mesure varient légèrement d'un organisme à l'autre. Les façons de noter les conditions d'usinage diffèrent aussi. Il faut donc des règles pour harmoniser les données. Lorsque ces normes seront en place, la fiabilité des prédictions augmentera.

7.4 Rupture par fatigue à très grand nombre de cycles des pales de turbopompe

Jusqu'ici, nous avons traité la manière de bien usiner. À partir de cette section, nous traitons la durée pendant laquelle une pièce peut résister. Nous examinons pourquoi les pales rotatives d'une turbopompe de fusée sont particulièrement dangereuses, et quelles traces elles laissent lorsqu'elles se rompent.

7.4.1 Un environnement sévère où le très froid et le très chaud coexistent

Cette sous-section traite de l'environnement sévère dans lequel se trouvent les pales de turbopompe. Une turbopompe (turbopump) est une pompe qui pousse le carburant et l'oxydant à haute pression. Les pales qui tournent rapidement à l'intérieur s'appellent une roue ou impeller (impeller). Nous voyons pourquoi les charges que cette pièce reçoit sont particulières.

L'impeller tourne très vite. Il tourne de 30 000 à 80 000 fois par minute. C'est une vitesse plus de dix fois supérieure à celle d'un moteur automobile. Pendant la rotation, la force centrifuge tire les pales vers l'extérieur. Lorsque la rotation est constante, cette force centrifuge est une charge stationnaire dont l'intensité varie peu.

L'environnement thermique est aussi sévère. L'impeller lui-même est en contact avec le propergol cryogénique. L'hydrogène liquide est plus froid que moins 250 degrés. L'oxygène liquide est aussi proche de moins 180 degrés. Les gaz de fonctionnement chauds ne se trouvent pas du côté de l'impeller, mais du côté de la turbine fixée sur le même arbre. Cette chaleur passe peu à peu vers la pompe par l'arbre, les roulements et les joints. Ainsi, les deux extrémités d'un même arbre font face à la fois à une zone très froide et à une zone chaude.

Un grand écart de température produit contraction et dilatation. Le côté froid se rétracte et le côté chaud s'allonge. Cette différence crée des forces dans la pièce. La force centrifuge stationnaire sert de base. Des charges vibratoires répétées s'y superposent et secouent la pièce.

Les charges répétées viennent de plusieurs endroits. Chaque fois qu'une pale passe près d'une pièce fixe, une force apparaît. Le léger déséquilibre de l'arbre rotatif et les pulsations de pression ajoutent

aussi des forces. Le démarrage et l'arrêt imposent chacun une grande charge. La force de passage des pales se répète des milliers de fois par seconde. Le nombre de cycles s'accumule donc très vite.

La fatigue associée à un nombre aussi élevé de cycles s'appelle fatigue à très grand nombre de cycles (Very High Cycle Fatigue, VHCF). En général, la conception prend dix millions de cycles comme référence. Pour savoir combien de cycles de charge une pièce réelle reçoit, il faut multiplier la fréquence excitatrice par le temps de fonctionnement cumulé. Les études sur éprouvettes vont jusqu'aux domaines de 100 millions et de 1 milliard de cycles. Dans ce domaine, les règles de la fatigue changent, il faut donc l'examiner séparément.

Les essais de fatigue ordinaires couvrent difficilement ce domaine. Si l'on teste 1 milliard de cycles à une vitesse ordinaire, cela prend trop de temps. On utilise donc une machine spéciale d'essai à haute fréquence. Cette machine fait vibrer l'échantillon environ 20 000 fois par seconde. Même avec une vibration aussi rapide, il faut plusieurs jours pour terminer un essai.

Comme les essais prennent longtemps, les données sont précieuses. Si les données sont peu nombreuses, les prédictions deviennent instables. Il faut donc une méthode d'intelligence artificielle qui économise les données. Elle doit produire des prédictions fiables même avec peu de données. Ce problème d'économie des données sera traité de nouveau en détail dans une section ultérieure.

Le choix du matériau est aussi lié à cet environnement. Certains métaux deviennent mous ou se rompent facilement dans des zones très froides. L'Inconel 718 conserve des propriétés relativement stables même à température cryogénique. Il est donc largement utilisé pour les pièces cryogéniques. Les alliages de la famille Haynes donnent de meilleures performances à des températures plus élevées. Il faut choisir le matériau selon l'emplacement de la pièce.

Même dans une même pièce, les conditions varient selon l'endroit. Le pied de pale reçoit beaucoup d'efforts. L'extrémité de pale reçoit beaucoup de vibrations. Il faut donc d'abord trouver les zones faibles qui résistent difficilement aux forces. On appelle ces zones des sections critiques. La garantie de fatigue se fonde sur ces sections critiques.

Trouver les sections critiques exige aussi des calculs. On résout par ordinateur les forces appliquées à la pièce. Ce calcul s'appelle l'analyse par éléments finis. La pièce est divisée en petits éléments, puis les forces sont calculées une par une. Les zones où les forces se concentrent fortement sont les sections critiques. L'intelligence artificielle peut aussi remplacer rapidement ce calcul.

La vibration de l'impeller obéit à des règles particulières. Le nombre de passages des pales près des pièces fixes est déterminé. Ce nombre multiplié par la vitesse de rotation donne la période de vibration. À certaines vitesses de rotation, cette vibration coïncide avec la vibration propre de la pièce. L'amplitude augmente alors fortement. Cette coïncidence s'appelle la résonance. La résonance détériore rapidement la pièce. On conçoit donc la pièce en évitant les vitesses de rotation dangereuses.

La garantie de fatigue de l'impeller est au cœur de la sécurité d'une fusée. Si une seule pale se rompt, toute la pompe se brise. Le moteur s'arrête alors ou explose. Cette pièce est donc soumise à des contrôles plus stricts que toute autre. Il faut gérer à la fois la qualité de surface et les défauts internes.

7.4.2 Rupture qui commence à l'intérieur et motif en œil de poisson

Cette sous-section traite de la manière dont la fatigue à très grand nombre de cycles rompt une pièce. Nous avons dit plus haut que les règles de ce domaine sont différentes. Voyons concrètement en quoi elles diffèrent. Nous examinons aussi le motif particulier qui reste sur la surface rompue.

La fatigue ordinaire commence à la surface. La surface est un endroit où les rayures apparaissent facilement. Sous charge répétée, des traces de glissement se forment à la surface. La fissure commence à partir de ces traces. C'est pourquoi une surface bien polie augmente la durée de vie.

La fatigue à très grand nombre de cycles est différente. La fissure ne commence pas à la surface, mais à l'intérieur. Quand le nombre de cycles devient très élevé, même une faible force peut rendre les défauts internes intolérables. Un petit trou ou une particule dure à l'intérieur devient une graine. Une petite bulle d'argon que le HIP n'a pas pu éliminer en est un exemple dangereux.

Une zone particulière apparaît autour de la graine de fissure. Des centaines de millions de microdéformations s'accumulent autour de cette graine. La fissure commencée à l'intérieur se développe dans une zone où l'air n'entre pas. Les deux faces de la fente étroite se frottent et broient très finement la microstructure. Cette zone finement broyée s'appelle zone granulaire fine (Fine Granular Area, FGA). Au microscope, cette zone apparaît plus sombre que son pourtour. Cette zone sombre se trouve au centre de l'œil de poisson.

La formation de cette zone sombre prend beaucoup de temps. La plus grande partie de la durée de vie en fatigue est consacrée à cette étape. La période avant que la fissure devienne visible est longue. Même si l'extérieur paraît intact, le dommage progresse déjà à l'intérieur.

Ce point a un sens pour fixer le moment des inspections. Les dommages apparaissent tardivement à l'extérieur. Il ne faut donc pas se rassurer en regardant seulement l'extérieur. Il faut examiner l'intérieur à intervalles fixés. Dans les fusées réutilisables, cette gestion des intervalles est encore plus importante. Avant de réutiliser une pièce déjà utilisée, il faut vérifier son intérieur.

Quand la fissure grandit à partir de la graine, un motif circulaire reste. Ce motif ressemble à un œil de poisson. On l'appelle donc œil de poisson (fish-eye). L'œil de poisson prouve que la fissure a commencé à l'intérieur. En observant la surface rompue, on comprend la cause grâce à ce motif.

À la fin, la fissure atteint la surface. À cet instant, la pièce se rompt soudainement. La fissure qui grandissait lentement se propage d'un coup. Cette rupture soudaine, difficile à détecter à l'avance, est la plus dangereuse.

Ce mode de rupture a une grande importance pour l'inspection. Si l'on ne regarde que la surface, on manque le danger. Il faut voir l'intérieur. On utilise donc ensemble la tomodensitométrie à rayons X (X-ray CT) et le contrôle par ultrasons. Ces contrôles observent l'intérieur sans casser la pièce. On les appelle contrôles non destructifs (non-destructive testing).

L'intelligence artificielle s'associe à ces contrôles. Elle prend comme entrées la taille et la position des défauts internes trouvés par CT. Avec ces valeurs, elle prédit la durée de vie en fatigue. Elle classe les défauts selon leur danger. Des recherches récentes ont proposé une méthode pour détecter de façon non destructive les défauts dangereux des pièces fabriquées par fabrication additive. La machine signale d'abord les défauts internes qu'un humain risque de manquer.

Il est difficile d'éliminer complètement les défauts internes. On conçoit donc la pièce pour qu'elle reste sûre même en présence de défauts. Cette idée s'appelle la conception tolérante aux défauts. On fixe à l'avance la taille maximale de défaut que la pièce peut supporter. Les pièces qui contiennent un défaut plus grand sont rejetées. L'intelligence artificielle produit les données qui servent à fixer ce critère.

Cette méthode se rattache aussi aux critères d'inspection. Les équipements d'inspection ne peuvent pas détecter les défauts très petits. Les défauts détectables ont une limite de taille définie. La conception fait en sorte que les défauts dépassant cette limite restent sûrs. Ainsi, les défauts manqués lors de

l'inspection ne sont pas dangereux non plus. De cette manière, l'inspection et la conception combleront chacune les lacunes de l'autre et protégeront la sécurité.

7.5 Garantir la fiabilité en fatigue en prévoyant aussi les variations

La durée de vie en fatigue ne se réduit pas nettement à un seul nombre. Même des pièces placées dans les mêmes conditions ont des durées de vie différentes. La prédiction doit donc inclure l'ampleur de ces variations. Cette section explique l'intelligence artificielle qui traite ces variations. Elle examine comment transformer les défauts en nombres, comment construire un modèle qui inclut les variations, puis comment relier ces résultats aux critères de sécurité.

7.5.1 Transformer l'état du matériau en nombres

Cette sous-section traite des méthodes qui transforment l'état du matériau en nombres. L'intelligence artificielle apprend à partir de nombres. Il faut donc convertir les défauts et les surfaces en nombres. Ces nombres sont appelés des descripteurs (descriptor). Nous examinerons ici, un par un, les nombres importants pour la durée de vie en fatigue.

On commence par décrire la forme des défauts sous forme numérique. Quand on observe l'intérieur d'une pièce par CT, on obtient la forme tridimensionnelle des pores. Cette forme est organisée sous forme de tenseur. Comme indiqué plus haut, un tenseur est une boîte qui contient des valeurs dans plusieurs directions. Il contient l'information sur la direction dans laquelle un pore est allongé et sur son degré d'aplatissement.

La tomographie par rayons X repose sur le même principe que le CT utilisé à l'hôpital. Des rayons X sont envoyés depuis plusieurs directions pour voir l'intérieur. Ces informations sont rassemblées pour créer une image en trois dimensions. On observe les pores internes sans découper la pièce. On mesure un par un la taille et la forme des pores. Les informations ainsi réunies sur la taille et la forme deviennent les données de base de la prédiction en fatigue.

La taille des défauts est elle aussi importante. Une bonne méthode pour mesurer cette taille est la méthode de la racine carrée de l'aire de Murakami (Murakami square root of area). Cette méthode considère le défaut comme une petite fissure. Elle projette le défaut sur un plan perpendiculaire à la direction de la charge et en mesure l'aire. La racine carrée de cette aire est prise comme taille du défaut. C'est parce que cette racine carrée se relie bien à l'intensité de la force qui ouvre la fissure. Ainsi, un pore tridimensionnel complexe est remplacé par une seule valeur et traité de cette manière. Plus cette valeur est grande, plus l'effet sur la fatigue est défavorable.

La position du défaut est examinée en même temps. À taille égale, un défaut proche de la surface est plus dangereux. Un défaut de surface concentre davantage les efforts, car il y a moins de matériau autour pour le retenir. Les effets de l'environnement au contact de l'air font aussi croître la fissure un peu plus vite. Un défaut situé en profondeur est moins dangereux, car il est entouré de matériau de tous côtés. C'est pourquoi on applique des corrections différentes selon la position.

La rugosité de surface est elle aussi transformée en nombre. Une surface usinée comporte de minuscules creux et sommets. Plus les creux sont profonds et aigus, plus les efforts se concentrent. Le degré de cette concentration s'appelle le coefficient de concentration des contraintes (stress concentration factor). C'est comparable au fait qu'une feuille de papier se déchire facilement si on y fait une petite entaille avant de la couper. Une petite entaille rassemble en un point une force qui était répartie et fragilise cet endroit.

Ces nombres, réunis, sont reliés à la durée de vie en fatigue. Il existe un graphique qui représente la relation entre l'intensité de la force et le nombre de cycles. Ce graphique s'appelle une courbe S-N. Les

informations sur les défauts et la rugosité déplacent cette courbe vers le haut ou vers le bas. Si les défauts sont grands et la surface rugueuse, la courbe descend. Quand la courbe descend, cela signifie que la pièce se rompt plus vite sous une même force.

Des recherches récentes ont obtenu de bons résultats en intégrant ces descripteurs dans l'intelligence artificielle. Une étude a prédit la durée de vie en fatigue de métaux fabriqués par fabrication additive à partir d'informations sur les défauts mesurées par CT. Les études qui appliquent la méthode de Murakami à divers cas de fabrication additive se multiplient aussi. Il est confirmé à plusieurs reprises que la taille, la position et la forme des défauts influencent fortement la durée de vie.

La dureté du matériau fait aussi partie des descripteurs. La dureté indique à quel point un matériau est dur. Dans l'équation de Murakami, plus la dureté est élevée, plus elle est prise en compte dans le sens d'une meilleure résistance aux défauts. Cependant, la dureté seule ne permet pas d'expliquer toute la résistance aux défauts. Un matériau très dur peut au contraire devenir plus sensible aux défauts. Il faut donc examiner ensemble la dureté, la taille du défaut, sa position et le rapport de charge.

Les conditions de charge sont aussi introduites sous forme numérique. L'intensité de la force et sa direction sont importantes. Il existe aussi une différence selon que la force vient d'une seule direction ou se combine dans plusieurs directions. La température est intégrée également. C'est parce que les propriétés du matériau diffèrent dans les zones chaudes et froides.

Des recherches récentes ont obtenu de bons résultats avec ce type de descripteurs. Une étude a prédit la durée de vie en fatigue à grand nombre de cycles de l'Inconel 718 fabriqué par fabrication additive. Elle a utilisé comme entrées la taille des défauts et l'intensité de la charge. Le manque de données a été résolu en augmentant les données par intelligence artificielle. Le coefficient de détermination de la prédiction a ainsi atteint 0,975. L'erreur moyenne s'est limitée à 1,13 pour cent. Le coefficient de détermination est une valeur qui montre à quel point la prédiction correspond au réel. Plus cette valeur est proche de 1, plus la prédiction correspond bien au réel. Toutefois, ce chiffre provient de données limitées portant sur un seul matériau. Comme le résultat a été obtenu avec des données augmentées, il est difficile de l'appliquer tel quel à d'autres procédés et matériaux.

Cependant, définir les descripteurs n'est pas simple. Il faut juger quels nombres inclure et quels nombres exclure. Si un nombre important manque, la prédiction se déforme. Si un nombre inutile est ajouté, l'apprentissage devient moins clair. C'est pourquoi des spécialistes du matériau et l'intelligence artificielle doivent les choisir ensemble.

7.5.2 Le réseau de neurones bayésien (BNN), qui produit une plage de réponses

Cette sous-section traite de l'intelligence artificielle qui inclut les variations. Un réseau de neurones ordinaire ne donne généralement qu'une seule réponse. Pour la prédiction en fatigue, cela ne suffit pas. C'est parce que la durée de vie se disperse largement même dans les mêmes conditions. Il faut donc un modèle qui donne aussi une plage de réponses.

Ce type de modèle s'appelle un réseau de neurones bayésien (Bayesian Neural Network, BNN). Dans un réseau de neurones ordinaire, les valeurs internes sont fixées à une valeur unique. Un réseau de neurones bayésien traite les valeurs internes comme des distributions. Il ne possède pas une seule valeur, mais une plage de valeurs. C'est pourquoi la sortie prédite n'est pas unique, mais apparaît sous forme de plage.

Le mot gaussien apparaît souvent ici. Gaussien désigne une distribution en forme de cloche. Elle est élevée au centre et diminue vers les deux côtés. Il est facile de penser à la distribution des notes d'un examen. Il y a beaucoup de personnes près de la moyenne et moins vers les extrémités. Toutefois, la durée de vie en fatigue elle-même n'a souvent pas une forme de cloche. Elle se disperse selon d'autres

formes, appelées log-normale ou Weibull. On applique donc l'hypothèse en forme de cloche à la valeur obtenue en prenant le logarithme de la durée de vie. Cette hypothèse en forme de cloche est aussi une commodité destinée à faciliter le calcul.

Deux valeurs sont importantes dans cette distribution. La première est la moyenne. La moyenne est la valeur représentative. L'autre est l'ampleur de la dispersion. Si cette ampleur est grande, cela signifie que les variations sont fortes. Le réseau de neurones bayésien fournit ces deux valeurs ensemble.

Prenons la météo comme comparaison pour comprendre pourquoi une prédiction possède une plage. Les prévisions annoncent une probabilité de pluie de 70 pour cent pour demain. Elles ne disent pas de façon tranchée que ce sera 100 pour cent. C'est parce que l'avenir comporte des variations. Le réseau de neurones bayésien indique lui aussi une plage de probabilités au lieu d'une seule réponse.

La méthode d'apprentissage de ce modèle est elle aussi particulière. Comme les valeurs internes sont des distributions, le calcul est complexe. Un calcul exact est pratiquement impossible. On utilise donc une méthode qui les remplace par une distribution proche. Le cœur de l'apprentissage consiste à réduire la quantité de calcul en remplaçant ainsi les distributions par des distributions proches.

Une fois l'apprentissage terminé, on tire plusieurs prédictions. Comme les valeurs internes sont des distributions, une réponse légèrement différente apparaît à chaque tirage. On rassemble ces réponses pour calculer la moyenne et la plage. Si les réponses se ressemblent, la plage est étroite. Si les réponses sont dispersées, la plage est large. La taille de cette plage indique dans quelle mesure on peut faire confiance à la prédiction.

Cette méthode ressemble au jugement humain. Un technicien expérimenté distingue lui aussi la certitude de la supposition. Il parle avec assurance d'une pièce qu'il connaît bien. Il parle avec prudence d'une pièce qu'il voit pour la première fois. Le réseau de neurones bayésien communique de la même manière son propre degré de certitude. Il est donc plus facile pour une personne d'examiner ce degré de certitude et d'utiliser le résultat avec confiance.

Cette approche présente un autre avantage. Quand le modèle rencontre des conditions qu'il voit pour la première fois, il produit une plage large. Il envoie lui-même un signal indiquant qu'il ne sait pas bien. La personne voit ce signal et reste prudente. Une prédiction à plage large doit être vérifiée davantage avant d'être utilisée. Le fait qu'un modèle signale ses propres limites aide beaucoup la sécurité.

Cette approche convient bien à la prédiction en fatigue. La fatigue est un phénomène qui comporte de fortes variations. Une plage est plus honnête qu'un seul nombre. Plusieurs études récentes suivent cette direction. Des travaux ont prédit la durée de vie en fatigue de métaux aéronautiques avec leurs variations. D'autres recherches ont augmenté la confiance en intégrant aussi les lois physiques.

Pourquoi est-il utile d'intégrer les lois physiques ? La fatigue possède des théories accumulées depuis longtemps. Ce sont des équations qui décrivent la relation entre la force et la durée de vie. Ces équations sont intégrées à l'intelligence artificielle. Ainsi, même avec peu de données, la réponse ne s'écarte pas fortement. Des recherches traitant en même temps des charges dans plusieurs directions sont aussi apparues. Cette évolution rend plus solide la garantie de durée de vie des pièces de fusée.

Cette méthode a aussi un coût. Comme il faut tirer plusieurs réponses, le calcul augmente. L'apprentissage est aussi plus difficile que pour un réseau de neurones ordinaire. Pourtant, pour des pièces de fusée, ce coût n'est pas regrettable. C'est parce que connaître les variations protège la sécurité. Si un accident survient parce qu'on a fait confiance à un seul nombre, la perte est beaucoup plus grande.

7.5.3 Séparer les variations et les relier aux critères de sécurité

Cette sous-section traite de la manière de séparer les variations. Nous avons dit plus haut qu'une prédiction possédait une plage. Cette plage n'est pas d'une seule nature. Deux types de variations y sont mêlés. Les séparer permet de voir ce qu'il faut faire.

Le premier type est l'incertitude épistémique (epistemic uncertainty). C'est une variation qui naît parce que le modèle ne sait pas bien. Elle apparaît fortement dans les conditions où les données manquent. Dans une situation qu'il n'a jamais apprise, le modèle manque d'assurance. Cette variation diminue peu à peu si l'on ajoute les données manquantes.

Le deuxième type est l'incertitude aléatoire (aleatoric uncertainty). Elle naît des variations propres au matériau et à la charge. Même des pièces placées dans les mêmes conditions ont des défauts internes différents. La mesure contient aussi du bruit. Comme cette variation appartient au phénomène lui-même, elle diminue peu même si l'on augmente les données.

Pourquoi est-il important de séparer les deux ? C'est parce que les remèdes sont différents. Si la variation épistémique est grande, il faut faire davantage d'expériences. Si la variation aléatoire est grande, il faut prévoir une marge de sécurité plus importante. Si l'on confond les deux, on risque de choisir le mauvais remède. En séparant les deux variations, on voit clairement ce qu'il faut faire ensuite.

Il faut maintenant relier la prédiction aux critères de sécurité. Les pièces de fusée doivent dépasser des critères de sécurité définis. Ces critères contiennent deux éléments à la fois. Le premier est le pourcentage de pièces qui survivent. Le second est le degré de confiance que l'on peut avoir dans cette valeur. Par exemple, on fixe une borne inférieure selon laquelle 90 pour cent survivent, avec une confiance de 95 pour cent. Une valeur ainsi définie en combinant le taux de survie et le niveau de confiance s'appelle une valeur admissible du matériau. Les valeurs A et B utilisées pour les matériaux aéronautiques en sont des exemples. Il ne suffit pas de soustraire de la moyenne une quantité correspondant aux variations pour garantir cette valeur. Elle se calcule statistiquement en intégrant à la fois le nombre de données d'essai et leur dispersion.

Cette borne inférieure s'appelle la valeur admissible de conception. La pièce doit résister plus longtemps que cette valeur admissible. On y multiplie parfois encore un facteur de sécurité. Le facteur de sécurité est une marge prévue contre les risques imprévus. On empêche les accidents en plaçant ainsi plusieurs couches de marge. Si la marge est excessive, la pièce devient lourde ; il faut donc trouver un équilibre.

Ainsi, le jugement se fait du côté de la sécurité. Dans les conditions où le modèle manque d'assurance, la durée de vie est estimée plus bas. Dans les conditions où il est sûr, on accorde un peu plus de marge. Cette attitude convient aux pièces de fusée. Même avec une estimation légèrement conservatrice, il vaut mieux empêcher un accident.

La certification ne s'achève pas avec l'intelligence artificielle seule. La garantie en fatigue mobilise plusieurs outils ensemble. Il faut à la fois les prédictions de l'intelligence artificielle, les essais de fatigue normalisés, les contrôles non destructifs et les facteurs de sécurité. Les méthodes d'essai normalisées sont elles aussi définies. Il existe des normes internationales pour la manière d'appliquer les forces et pour la manière d'analyser les données.

Le rôle de l'intelligence artificielle est clair. Elle repère rapidement les candidats dangereux. Elle indique où il faut faire davantage d'essais. Elle aide à obtenir beaucoup d'informations avec peu d'expériences. À partir de ces informations, les personnes organisent mieux le plan d'essai et réduisent fortement le temps et les coûts.

Le jugement final revient aux personnes et aux expériences. La prédiction de l'intelligence artificielle est un début, non une fin. Les données d'essai réelles doivent soutenir la prédiction. Les documents qualité doivent enregistrer ce processus. Ce n'est que lorsque tout cela est en place que la pièce peut monter dans une fusée.

Des tâches restent à accomplir. Les données de fatigue sont encore insuffisantes. Les données dans le domaine du très grand nombre de cycles sont encore plus rares. C'est parce que les essais prennent beaucoup de temps. Les méthodes qui apprennent avec peu de données continuent donc d'être étudiées. Il existe aussi des méthodes qui transfèrent les données d'autres matériaux. Si ces méthodes progressent, la prédiction deviendra plus robuste.

La qualité des données est elle aussi importante. La manière de mesurer les défauts varie selon les données. La manière de réaliser les essais varie également. Si les enregistrements sont insuffisants, le modèle apprend mal. Il faut donc une culture qui consigne les données avec soin. Il faut de bonnes données bien enregistrées pour obtenir un bon modèle.

Les normes et la certification doivent elles aussi évoluer. Les règles actuelles de certification ont été établies à partir de matériaux anciens. Les matériaux issus de la fabrication additive ont des propriétés différentes. Il faut donc de nouvelles règles. La manière d'intégrer les prédictions de l'intelligence artificielle dans la certification est aussi en discussion. Lorsque cette discussion sera clarifiée, les pièces fabriquées par fabrication additive seront utilisées plus largement.

Synthèse

Dans ce chapitre, nous avons traité deux grands problèmes. Le premier est de bien usiner des métaux difficiles à couper. Le second est de savoir combien de temps une pièce peut résister. Ces deux problèmes apparaissent dans les pièces de fusée fabriquées par impression 3D. Dans les deux cas, l'intelligence artificielle apporte une aide importante.

Ces deux problèmes sont en réalité liés. Un bon usinage donne une surface lisse. Une surface lisse résiste mieux à la fatigue. Il faut supprimer les pores internes pour réduire les germes de fissures. Au bout du compte, un bon traitement conduit à une longue durée de vie. C'est pourquoi il faut toujours examiner ensemble l'usinage et la fatigue. Ce chapitre a donc placé côte à côte ces deux problèmes, l'usinage et la fatigue, et les a traités ensemble.

Dans la première partie, nous avons vu pourquoi les superalliages fabriqués par fabrication additive sont difficiles à usiner. Une microstructure refroidie rapidement possède des propriétés différentes selon la direction. Des contraintes restent piégées à l'intérieur, et des grains durs s'y concentrent. Ces propriétés usent rapidement les outils et laissent aussi une couche blanche et de fines fissures à la surface.

Nous avons aussi vu comment surmonter ces difficultés. On calcule à l'avance les forces de coupe et les vibrations afin de choisir des conditions sûres. Le pressage isostatique à chaud réduit les pores internes et rend la microstructure plus homogène. La méthode de Taguchi et les réseaux de neurones artificiels permettent de trouver de bonnes conditions avec peu d'expériences. Dans ce processus, l'intelligence artificielle réduit rapidement le nombre de candidats.

Dans la dernière partie, nous avons traité le problème de la fatigue. Les pales de turbopompe d'une fusée sont exposées à la fatigue gigacyclique. Dans ce domaine, les fissures commencent non pas à la surface, mais à l'intérieur. La surface de rupture garde un motif rond appelé aspect en œil de poisson. Il faut donc un contrôle non destructif pour examiner l'intérieur sans casser la pièce.

La prédiction de la fatigue doit intégrer l'incertitude. En effet, même des pièces soumises aux mêmes conditions n'ont pas la même durée de vie. Un réseau de neurones bayésien ne donne pas une seule réponse, mais une plage de réponses. Si l'on divise cette plage en deux types, la prochaine action devient visible. On peut décider s'il faut augmenter les données ou élargir la marge de sécurité.

L'essentiel est la coopération entre l'intelligence artificielle et les humains. L'intelligence artificielle lit rapidement les données et repère les risques. Elle réduit intelligemment le plan d'expériences. Mais la certification finale relève des essais et des contrôles. Les pièces de fusée sont protégées par ces deux forces réunies. Cette coopération entre l'intelligence artificielle et l'expérimentation devient le fondement qui soutient un vol sûr.

Résumons le contenu de ce chapitre en une phrase. Il faut bien usiner, bien finir et bien contrôler. Il faut ensuite prédire les résultats en tenant compte de l'incertitude. L'intelligence artificielle aide rapidement chacune de ces étapes. Les humains s'appuient sur cette aide pour fabriquer des pièces plus sûres. L'avenir des pièces de fusée imprimées en 3D dépend finalement de cette coopération.

Sources associées

- Ojo, O. O., & Taban, E. (2023). Post-processing treatments-microstructure-performance interrelationship of metal additive manufactured aerospace alloys: A review. *Materials Science and Technology*, 39(1), 1-41.
<https://doi.org/10.1080/02670836.2022.2130530>
- Song, Z., Peng, J., Zhu, L., Deng, C., Zhao, Y., Guo, Q., & Zhu, A. (2025). High-Cycle Fatigue Life Prediction of Additive Manufacturing Inconel 718 Alloy via Machine Learning. *Materials*, 18(11), 2604. <https://doi.org/10.3390/ma18112604>
- Yu, C., Huang, Z., Zhang, Z., Shen, J., Wang, J., & Xu, Z. (2021). Influence of post-processing on very high cycle fatigue resistance of Inconel 718 obtained with laser powder bed fusion. *International Journal of Fatigue*, 153, 106510.
<https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2021.106510>
- ASTM International. (2021). ASTM E466-21: Standard Practice for Conducting Force Controlled Constant Amplitude Axial Fatigue Tests of Metallic Materials. ASTM International, West Conshohocken, PA.
<https://www.astm.org/e0466-21.html>
- ASTM International. (2015). ASTM E739-10(2015): Standard Practice for Statistical Analysis of Linear or Linearized Stress-Life and Strain-Life Fatigue Data. ASTM International, West Conshohocken, PA.
<https://www.astm.org/e0739-10r15.html>
- Yi, M., Tang, W., Zhu, Y., Liang, C., Tang, Z., & Yin, Y. (2023). A holistic review on fatigue properties of additively manufactured metals. *arXiv preprint*. (Prépublication non encore évaluée par les pairs)
<https://arxiv.org/abs/2311.07046>
- Altıparmak, S. C., Lombardi, M., Bondioli, F., Fino, P., Biamino, S., & Ugues, D. (2025). Hot isostatic pressing for powder-based additive manufacturing of metals: State-of-the-art review and future perspectives. *Journal of Materials Research and Technology*, 39, 4794-4822. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.10.135>
- Murakami, Y. (2002). *Metal Fatigue: Effects of Small Defects and Nonmetallic Inclusions*. Elsevier Science, Oxford, UK.
- Basquin, O. H. (1910). The exponential law of endurance tests. *Proceedings of the American Society for Testing and Materials*, 10(2), 625-630.
- Coffin, L. F. (1954). A study of the effects of cyclic thermal stresses on a ductile metal. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 76(6), 931-950.
- Manson, S. S. (1953). Behavior of materials under conditions of thermal stress. National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) Technical Note, NACA-TN-2933.
- Arola, D., & Ramulu, M. (1999). An examination of the effects of surface texture on the strength, fatigue life, and stress concentration of machined components. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 121(3), 376-381.
- Blavette, D., Cadel, E., Fraczkiewicz, A., & Menand, A. (1999). Three-dimensional atomic-scale imaging of segregation and precipitation in superalloys. *Science*, 286(5448), 2317-2319. <https://doi.org/10.1126/science.286.5448.2317>
- Wang, Q., Yao, G., & Hou, M. (2026). Fatigue life prediction and uncertainty quantification of aerospace metals: A Bayesian physics-informed neural network model. *Reliability Engineering & System Safety*, 266, 111724.
<https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111724>

- Zhang, D., Dai, W., & Ding, Y. (2025). Bayesian optimization-based physics-informed neural network for adaptive prediction of multiaxial fatigue life in metallic materials. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 49(1), 28-51. <https://doi.org/10.1111/ffe.70101>
- Chang, J., Basvoju, D., Vakanski, A., Charit, I., & Xian, M. (2025). Predictive modeling and uncertainty quantification of fatigue life in metal alloys using machine learning. arXiv preprint. (Prépublication non encore évaluée par les pairs) <https://arxiv.org/abs/2501.15057>
- Li, L., Chang, J., Vakanski, A., Wang, Y., Yao, T., & Xian, M. (2024). Uncertainty quantification in multivariable regression for material property prediction with Bayesian neural networks. *Scientific Reports*, 14, 10543. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-61189-x>
- Vishnu, S., Kuriachen, B., & Mathew, J. (2026). Microturning response of LPBF Inconel 718: Effect of homogenization annealing. *Materials and Manufacturing Processes*, 41(7), 964-973. <https://doi.org/10.1080/10426914.2026.2660062>
- Truong, T. T., Airao, J., Fattahi, S., Azarhoushang, B., Karras, P., & Aghababaei, R. (2025). Image-based machine learning model for tool wear estimation in milling Inconel 718. *Wear*, 571, 205865. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2025.205865>
- Abdullah, M., Rao, A. C. U., Ramachandran, T., Biswal, S., Chaudhary, S. P., Singh, R., Mishra, A., & Mann, V. S. (2026). A data-driven approach for high-accuracy tool wear prediction in machining Hastelloy C276. *Scientific Reports*, 16, 19442. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-50824-4>
- Medibew, T. M., Zieliński, D., Agebo, S. W., & Deja, M. (2025). Recent research progress in the abrasive machining and finishing of additively manufactured metal parts. *Materials*, 18(6), 1249. <https://doi.org/10.3390/ma18061249>
- Liu, Y., Zhao, L., Huang, S., Meng, X., Zhang, Z., Lu, H., Zhou, S., & Dai, G. (2026). Recent progress in surface post-treatment techniques for additive manufactured alloy metal parts: A comprehensive review. *Additive Manufacturing Frontiers*, 200339. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200339>
- Hassan, M., Hussain, M. A., & Jahan, M. P. (2026). Post-processing of additively manufactured metallic parts - A review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. <https://doi.org/10.1007/s00170-026-18615-3>
- Sommer, D., Truetsch, B., Esen, C., & Hellmann, R. (2025). Effect of hot isostatic pressing and sequenced heat treatment on the mechanical properties of hybrid additive manufactured Inconel 718 components. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 9(11), 378. <https://doi.org/10.3390/jmmp9110378>
- Kaletsch, A., Qin, S., Herzog, S., & Broeckmann, C. (2021). Influence of high initial porosity introduced by laser powder bed fusion on the fatigue strength of Inconel 718 after post-processing with hot isostatic pressing. *Additive Manufacturing*, 47, 102331. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.102331>
- Fody, J. M., & Lang, C. G. (2021). Hot isostatic pressing for reduction of defects in additively manufactured Inconel-718: Preliminary simulation approach and results. NASA Technical Reports Server, Document ID 20210015451. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20210015451>
- Baig, S., Jam, A., Beretta, S., Shao, S., & Shamsaei, N. (2025). Non-destructive detection of critical defects in additive manufacturing. *Scientific Reports*, 15, 6740. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-91608-6>
- Novelino, A. L. B., de Oliveira, D., Araújo, J. A., & Ziberov, M. (2026). Defects characterization of wall components fabricated via WAAM and fatigue strength estimation: A theoretical prediction approach based on Murakami's square root of area method. *Progress in Engineering Science*, 3(1), 100238. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100238>
- He, P., Huang, Y., Wang, W., Guo, Y., Yu, Z., Chen, W., Li, B., & Wang, X. (2025). Deep learning driven prediction method for roughness and hardness of laser in-situ forging additive manufacturing Ti-6Al-4V. *Virtual and Physical Prototyping*, 20(1), e2569541. <https://doi.org/10.1080/17452759.2025.2569541>

Chapitre 8. Modélisation des écoulements gazeux réactifs et de la chimie de la combustion par l'apprentissage automatique informé par la physique (PIML/PINNs) et l'apprentissage d'opérateurs (FNO)

Introduction

Quand on allume le gaz d'une cuisinière, une flamme bleue apparaît. Le gaz, qui est le combustible, rencontre l'oxygène de l'air et produit de la chaleur. Ce processus s'appelle la combustion. La combustion est présente partout dans notre vie. Les moteurs de voiture comme les chaudières fonctionnent grâce à la combustion.

Un moteur-fusée produit aussi une force selon le même principe. Mais l'échelle et les conditions sont très différentes. L'intérieur de la chambre de combustion d'une fusée est beaucoup plus chaud et la pression y est élevée. Le combustible et l'oxygène se mélangent et réagissent très vite. À l'intérieur, le gaz s'écoule, tourbillonne et émet du son.

Il est difficile de calculer tout cela en même temps. Les réactions chimiques se produisent en un clin d'œil. En revanche, l'écoulement qui parcourt toute la chambre de combustion est plus lent. Des changements rapides et des changements lents se mêlent dans un même espace. Pour qu'un ordinateur suive les deux à la fois, le volume de calcul augmente fortement.

Jusqu'à présent, on résolvait les équations en les découpant très finement. Cette méthode s'appelle la dynamique des fluides numérique (CFD). Elle est précise, mais coûte cher en calcul. Pour résoudre en détail une grande chambre de combustion de fusée, un superordinateur doit tourner pendant plusieurs jours. Les concepteurs attendent depuis longtemps des outils plus rapides.

L'intelligence artificielle aide à cet endroit précis. Un réseau de neurones bien entraîné réduit rapidement les calculs. Quand les capteurs sont peu nombreux, il peut aussi compléter les informations manquantes. Mais dans un problème de combustion, il est dangereux qu'une intelligence artificielle donne une réponse à sa guise. Dans une fusée, une petite erreur peut entraîner un grand accident.

C'est pourquoi une méthode qui intègre directement les lois physiques dans l'apprentissage est apparue. Cette méthode s'appelle l'apprentissage automatique informé par la physique (PIML). Le réseau de neurones n'imité pas seulement les données. On le construit pour qu'il respecte aussi des lois comme la conservation de la masse ou la conservation de l'énergie. La méthode représentative est le réseau de neurones informé par la physique (PINN).

Ce chapitre traite plusieurs méthodes de cet apprentissage informé par la physique. Nous commençons par expliquer avec des mots les équations qui gouvernent la combustion. Nous examinons ensuite les difficultés de calcul créées par les réactions chimiques rapides. Puis nous regardons une nouvelle structure appelée réseau de Kolmogorov-Arnold (KAN). Nous présentons aussi l'opérateur neuronal de Fourier (FNO), qui transforme une fonction en une autre fonction. Enfin, nous terminons par un cas de reconstruction de l'intérieur d'un moteur à détonation rotative.

Prenons ici une image. Il suffit de penser à deux manières de dessiner une carte. L'une consiste à mesurer tout le terrain pas à pas. Elle est précise, mais prend beaucoup de temps. L'autre consiste à mesurer seulement quelques endroits et à remplir le reste. Elle est rapide, mais si l'on remplit sans règle, on obtient une carte erronée. L'apprentissage informé par la physique consiste à mettre les règles de la nature dans ce remplissage.

Après la lecture de ce chapitre, le tableau d'ensemble devient clair. On voit comment l'intelligence artificielle transforme le calcul de la combustion. On distingue aussi ce qui fonctionne déjà et ce qui reste difficile. Les nouveaux outils sont puissants, mais ils ne font pas tout. Ils ne deviennent fiables que lorsque la physique et la vérification sont présentes ensemble. La recherche de cet équilibre traverse tout ce chapitre.

Ce livre traite avec prudence les noms difficiles et les chiffres. Parmi les recherches récentes, certaines n'ont qu'un nom séduisant. Des chiffres de performance non vérifiés s'y mêlent aussi. Ce chapitre choisit donc seulement des travaux confirmés pour les expliquer. Les chiffres que nous ne pouvons pas vérifier ne sont pas utilisés dans le corps du texte. Les recherches à un stade initial sont clairement indiquées comme telles.

8.1 Changement de paradigme en ingénierie numérique de la combustion et intelligence artificielle

Ce que traite cette section

Cette section commence par examiner pourquoi le calcul de la combustion est difficile. Elle montre la complexité de ce qui se produit dans la chambre de combustion d'une fusée. Elle examine aussi les limites des méthodes de calcul traditionnelles. Puis elle explique pourquoi l'intelligence artificielle est apparue pour dépasser ces limites.

Nous n'utilisons pas ici de formules difficiles. Nous déplaçons plutôt les concepts vers des scènes de la vie courante. Si l'on comprend cette section, toutes les sections suivantes deviennent plus faciles. Car tout ce chapitre présente, au fond, diverses manières de résoudre ce problème.

L'intérieur de la chambre de combustion d'une fusée est un milieu extrême. La température monte jusqu'à plusieurs milliers de degrés. La pression atteint plusieurs centaines de fois la pression atmosphérique. Le combustible et l'oxydant réagissent violemment en peu de temps. Un moteur utilisant du méthane et de l'oxygène liquide en est un exemple représentatif.

Ces réactions sont beaucoup plus complexes qu'elles n'en ont l'air. Le chemin par lequel le méthane rencontre l'oxygène pour devenir de l'eau et du dioxyde de carbone n'est pas unique. Entre les deux, des dizaines de substances intermédiaires apparaissent. Ces substances, appelées radicaux, sont très réactives. Ainsi, des centaines de réactions élémentaires s'entremêlent et avancent en même temps.

Comparons les radicaux à une course de relais. Le témoin passe très vite de main en main. Aucun coureur ne le garde longtemps. Les radicaux apparaissent eux aussi en un instant, puis passent à la substance suivante. Cet échange rapide conduit la combustion. Si l'on manque cette vitesse, on ne peut pas décrire correctement la forme de la flamme.

À cela s'ajoute la turbulence. La turbulence est un écoulement dans lequel le gaz tourbillonne et se mélange de manière désordonnée. Elle ressemble à l'eau d'une rivière qui rencontre un rocher et se brise en écume blanche. Les gaz dans la chambre de combustion d'une fusée se mélangent ainsi. La turbulence fait rencontrer rapidement le combustible et l'oxygène. Mais son mouvement irrégulier rend le calcul plus difficile.

Pour résoudre précisément cette réaction, il faut découper l'espace et le temps très finement. Là où la flamme se dresse en une couche mince, son épaisseur est inférieure à celle d'un cheveu. À l'intérieur, la température et la concentration changent brusquement. Si l'on manque cette couche mince, le calcul se décale. Pour inclure cette couche, il faut donc placer un maillage très serré.

Sentons ce problème multi-échelle à travers des chiffres. La couche mince où se forme la flamme mesure des dizaines de micromètres. En revanche, la longueur totale de la chambre de combustion mesure des dizaines de centimètres. L'écart de taille atteint plusieurs milliers de fois. Le même écart apparaît aussi dans le temps. Pour couvrir toute cette plage à la fois, le nombre de mailles augmente de façon explosive.

Les méthodes de calcul traditionnelles comprennent la simulation numérique directe (DNS) et la simulation des grandes échelles (LES). La simulation numérique directe résout tout, sans omettre même les tourbillons de très petite taille. La simulation des grandes échelles résout seulement les grands tourbillons et approxime les petits. Les deux sont précises, mais demandent beaucoup de calcul. Résoudre en détail une grande chambre de combustion prend beaucoup de temps.

Traduisons l'expression coût de calcul élevé en langage courant. Cela ressemble à la production d'un film en haute définition. Si l'on dessine minutieusement chaque scène, cela prend des mois. Il en va de même pour le calcul de la combustion. Chaque fois que les conditions changent, il faut redessiner depuis le début. Les concepteurs veulent tester des dizaines de conditions. Mais attendre plusieurs jours à chaque changement de condition est difficile dans la réalité.

L'intelligence artificielle ouvre ici une nouvelle voie. Une fois bien entraîné, un réseau de neurones répond vite à des problèmes similaires. Il devient un modèle de substitution léger (surrogate model) qui remplace les calculs lourds. Un modèle de substitution est un modèle d'approximation rapide qui imite le calcul d'origine. Les concepteurs peuvent parcourir plusieurs conditions en peu de temps.

Comparons le modèle de substitution à une application de cartographie. Elle indique le temps de trajet sans que l'on marche réellement sur la route. Elle compare d'innombrables itinéraires en un instant. Le modèle de substitution fonctionne de la même manière. Il estime le résultat sans exécuter tout le calcul réel. Grâce à cela, on peut examiner plusieurs propositions de conception en peu de temps.

Cependant, une application de cartographie se trompe aussi sur les routes inconnues. Un modèle de substitution se décale lui aussi lorsqu'il sort du domaine qu'il a appris. On ne croit donc pas tel quel le résultat estimé. Avant une décision importante, on vérifie de nouveau par un calcul précis. Le modèle de substitution est une boussole qui donne une direction, non un jugement final. Cette attitude traverse tout ce chapitre.

Expliquons un peu plus l'état supercritique. L'eau est un exemple facile à comprendre. D'ordinaire, l'eau bout et se transforme en vapeur. La frontière entre le liquide et le gaz est nette. Mais si l'on élève beaucoup la pression et la température, cette frontière devient floue. Dans la chambre de combustion à haute pression d'une fusée, le combustible se trouve dans cet état. Il est difficile de calculer précisément cette frontière floue entre liquide et gaz.

Des cas réels existent aussi. DeepFlame est un logiciel qui intègre des réseaux de neurones pour calculer rapidement la combustion supercritique. Le terme supercritique désigne un état à haute pression où la frontière entre liquide et gaz devient floue. Les chercheurs ont optimisé ce code et résolu à grande échelle la combustion turbulente du méthane et de l'oxygène. Selon les données publiques, ils ont porté l'échelle de calcul à plusieurs dizaines de milliards de cellules. C'est une plage beaucoup plus vaste qu'auparavant. Ce résultat est une recherche initiale présentée en 2025 lors d'une conférence sur le calcul haute performance.

Dans ce cas, le rôle de l'intelligence artificielle est clair. Le calcul des réactions chimiques est la partie qui prend longtemps. Le réseau de neurones remplace rapidement ce calcul. En même temps, les propriétés du fluide réel sont conservées. C'est une tentative pour obtenir à la fois vitesse et précision. Cette orientation accélère les grands calculs de combustion des fusées.

Voyons pourquoi le calcul à grande échelle est important. Un moteur-fusée réel possède des centaines d'injecteurs. Un injecteur est une pièce qui pulvérise le combustible et l'oxygène pour les mélanger. Les flammes de ces nombreux injecteurs s'influencent mutuellement. Un calcul à petite échelle ne peut pas bien saisir cette interaction. Quand le calcul à grande échelle devient possible, on se rapproche du moteur réel.

L'intelligence artificielle entre dans la combustion de trois grandes manières. La première est le modèle de substitution rapide qui remplace les calculs prenant beaucoup de temps. La deuxième est la reconstruction, qui restaure un champ complet à partir de mesures clairsemées. La dernière consiste à diagnostiquer et contrôler l'état en temps réel. Ce chapitre se concentre sur les deux premières, et le contrôle sera traité dans un chapitre ultérieur.

Prenons un exemple pour voir pourquoi il est dangereux que l'intelligence artificielle viole la physique. Supposons qu'un modèle donne une température inférieure à la température réelle. Le concepteur juge alors que la paroi peut résister. Mais si la température réelle est plus élevée, la paroi fond. Une petite erreur conduit à un grand accident. Dans une fusée, respecter la physique est donc directement lié à la sécurité.

Bien sûr, les limites sont claires. L'intelligence artificielle se trompe souvent hors du domaine qu'elle a appris. Les fusées rencontrent toujours de nouvelles conditions. Si les lois physiques ne sont pas respectées, la prédiction devient dangereuse. C'est pourquoi tout ce chapitre traite des méthodes qui lient physique et apprentissage. En 2026, une revue a aussi synthétisé l'apprentissage informé par la physique pour la propulsion aérospatiale. Ce courant montre que le domaine se développe rapidement.

8.2 Équations gouvernantes des écoulements réactifs compressibles multicomposants et apprentissage informé par la physique

Ce que traite cette section

Cette section explique avec des mots les équations de base qui gouvernent la combustion. Le mot équation peut sembler difficile. Mais l'idée est simple. Rien ne disparaît ni n'apparaît simplement.

Nous verrons ensuite comment mettre cette règle dans un réseau de neurones. Nous examinerons comment un réseau de neurones informé par la physique respecte les lois. Ces deux concepts forment l'ossature de ce chapitre. Toutes les méthodes qui suivent en découlent.

8.2.1 Équations gouvernantes réactives de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes sont des règles qui décrivent le mouvement des fluides. Elles servent à résoudre les phénomènes où l'eau s'écoule et où l'air souffle. Dans la combustion des fusées, on y ajoute les réactions chimiques et la chaleur. Le nombre d'équations à résoudre ensemble augmente donc.

Pour un fluide ordinaire sans réaction, trois équilibres suffisent : la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. Mais pour un fluide réactif comme dans la combustion, la conservation des espèces chimiques s'ajoute. Ces équations contiennent donc quatre lois de conservation. La première est la conservation de la masse. La quantité de gaz qui entre et celle qui sort doivent correspondre. Le gaz ne naît pas et ne disparaît pas spontanément. Cet équilibre de masse est la base de tous les calculs.

Vient ensuite la conservation de la quantité de mouvement. La quantité de mouvement est le produit de la masse par la vitesse. Lorsqu'une force agit, la quantité de mouvement change. Les différences de pression et la viscosité créent cette force. C'est la raison pour laquelle le gaz est poussé rapidement vers l'extérieur dans une fusée.

Pensons à la conservation de la quantité de mouvement avec un vélo. Quand on appuie sur les pédales, le vélo avance. La force exercée produit un changement de vitesse. Dans une fusée, la différence de pression devient cette force. La viscosité est le frottement qui retient l'écoulement et le ralentit. Ces deux forces, la différence de pression et la viscosité, changent la vitesse du gaz.

Il y a aussi la conservation des espèces chimiques. Les espèces chimiques sont les substances qui participent à la réaction, comme l'oxygène, le méthane ou l'eau. Quand une réaction se produit, certaines substances diminuent et d'autres augmentent. La vitesse de réaction détermine ces augmentations et diminutions. Pour un fluide réactif, on établit séparément une équation de conservation pour chaque substance. Des équations s'ajoutent donc en nombre égal à celui des espèces chimiques. La dernière est la conservation de l'énergie. La chaleur issue de la réaction réchauffe le gaz et pousse l'écoulement.

La conservation de l'énergie peut être comparée à une tirelire. Si l'on fait correspondre l'argent déposé et l'argent dépensé, on obtient l'argent restant. Dans la combustion, la réaction chimique ne crée pas une nouvelle énergie. L'énergie chimique enfermée dans le combustible se transforme seulement en chaleur. Cette chaleur réchauffe le gaz et sort en accomplissant un travail. Une partie de la chaleur s'échappe aussi par rayonnement. La conservation de l'énergie est la règle qui équilibre toutes ces entrées et sorties.

Le terme compressible est aussi important. La compressibilité signifie que la densité du gaz change fortement selon la pression. Dans une chambre de combustion de fusée, la pression est élevée et varie beaucoup. On ne peut donc pas fixer la densité. Le fait que la densité change constamment rend le calcul plus difficile.

Voyons pourquoi ces quatre équilibres sont si importants. Un calcul qui rompt l'équilibre devient aussitôt un mensonge. Si la masse augmente d'elle-même, c'est comme si une poussée inexistante apparaissait. Si l'énergie fuit, la prévision de température se déforme. Dans la conception des fusées, une telle erreur mène vite à un accident. C'est pourquoi l'intelligence artificielle doit aussi respecter cet équilibre.

La vitesse de réaction chimique est fixée par la loi d'Arrhenius. La loi d'Arrhenius dit que la réaction s'accélère fortement quand la température augmente. Cela ressemble à une allumette qui, une fois enflammée, propage vite le feu. Cette propriété brusque est à la racine du problème de calcul que nous verrons plus loin. Le concepteur de fusées doit prévoir cette réaction avec précision pour préserver la sécurité.

Il faut aussi résoudre la diffusion et le transfert de chaleur ensemble. La diffusion est le phénomène par lequel une substance se répand d'une zone concentrée vers une zone moins concentrée. C'est comme une odeur qui se répand de la cuisine dans la pièce. Le transfert de chaleur est le phénomène par lequel la chaleur passe d'une zone chaude vers une zone froide. Dans une chambre de combustion, ces deux phénomènes se produisent en même temps que les réactions chimiques. Les équations sont donc liées entre elles et se résolvent comme un seul ensemble.

8.2.2 Fonction de perte composite fondée sur l'information physique

Le cœur d'un réseau de neurones informé par la physique se trouve dans la fonction de perte. La fonction de perte est une mesure de l'erreur du réseau de neurones. Un réseau de neurones ordinaire mesure seulement l'écart avec les données. Le réseau de neurones informé par la physique y ajoute l'erreur physique.

Son fonctionnement est le suivant. Le réseau de neurones reçoit en entrée la position et le temps. Il produit alors la pression, la température, la vitesse et la concentration en ce point. Ces valeurs sont

correctes si elles satisfont les équations de conservation. Si elles ne satisfont pas les équations, elles reçoivent une pénalité correspondante.

Pour mesurer cette erreur physique, il faut dériver. C'est ici qu'intervient la différentiation automatique (automatic differentiation). La différentiation automatique est une technique qui calcule les dérivées en suivant le processus de calcul du réseau de neurones. Elle diffère des différences finies, qui approximent les dérivées à partir des écarts de grille. Elle n'a donc pas l'erreur de troncature qui apparaît dans les différences finies. Cependant, l'erreur d'approximation propre au réseau de neurones et l'erreur liée au choix des points d'échantillonnage demeurent. Ce que la différentiation automatique supprime, c'est l'erreur née de l'approximation des dérivées.

Voyons pourquoi les dérivées sont nécessaires. Les équations de conservation traitent des taux de variation. Elles regardent à quelle vitesse la pression change et comment la vitesse se modifie. Ce taux de variation est précisément une dérivée. On calcule par dérivation la variation des valeurs produites par le réseau de neurones. Puis on vérifie si ce taux de variation satisfait les équations.

Le calcul traditionnel approximait les dérivées sur une grille. Il estimait les variations à partir des écarts entre points de grille voisins. Cette méthode produit de grandes erreurs quand la grille est grossière. La différentiation automatique n'utilise pas cette approximation. Elle dérive directement les formules du réseau de neurones. Il n'est donc pas nécessaire de poser une grille fine uniquement pour dériver. Il faut toutefois choisir les points où mesurer l'erreur physique. Ces points sont appelés points de collocation. Si les points de collocation sont trop espacés, la solution devient instable. Être libre de la grille ne signifie pas être exact n'importe où.

La fonction de perte contient plusieurs termes à la fois. L'écart avec les données est un terme. Les erreurs des équations de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et d'espèces chimiques sont chacune un terme. Les conditions aux limites et l'état initial sont aussi ajoutés comme termes. L'apprentissage réduit ensemble ces différents termes en les pondérant.

Cette approche présente un grand avantage. Même avec peu de données, les lois physiques remplissent les blancs. Au laboratoire, on ne dispose souvent que de capteurs de pression sur la paroi ou de sondes optiques. Ces mesures clairsemées ne suffisent pas à connaître tout l'écoulement. Si l'on impose les lois physiques comme règles, on peut combler les intervalles.

Cette propriété montre toute sa force dans les problèmes inverses. Un calcul ordinaire introduit une cause pour obtenir un résultat. Un problème inverse observe le résultat pour retrouver la cause. En déduire une source de chaleur interne à partir de la seule température de paroi en est un exemple. Le réseau de neurones informé par la physique est efficace pour ce type de problème inverse. C'est parce qu'il traite ensemble les mesures et la physique dans une même fonction de perte.

Dans les essais de fusées, cette capacité a une grande valeur. Il est difficile de placer beaucoup de capteurs dans une chambre de combustion. Elle est chaude et étroite, si bien que les capteurs ne résistent pas. On ne mesure donc que quelques points depuis l'extérieur. Retrouver l'état interne à partir de ces quelques points est une tâche centrale. Le réseau de neurones informé par la physique établit un pont entre les mesures et l'état interne.

Cette fonction de perte cache une difficulté de pondération. Le problème est de décider l'importance de chaque terme. Si l'on donne un poids trop élevé à un terme, les autres sont négligés. Si l'on poursuit seulement l'erreur physique, on perd les données. Si l'on poursuit seulement les données, on viole la physique. Trouver cet équilibre est un grand sujet de recherche.

On peut comparer cette pondération à l'assaisonnement d'un plat. Trop de sel rend le plat salé, trop de sucre le rend sucré. Si un seul élément domine, le goût s'effondre. Il en va de même pour les différents

termes de la fonction de perte. Si un terme devient trop fort, l'apprentissage penche d'un côté. C'est pourquoi on étudie aussi des méthodes qui règlent automatiquement les poids.

L'étude qui a d'abord largement fait connaître ce concept est l'article de Raissi et al. de 2019. Il s'est ensuite largement diffusé dans le domaine de la combustion. En 2025, une revue générale consacrée à l'apprentissage informé par la physique pour la combustion a aussi été publiée. Cette revue classe les sujets en réactions chimiques, écoulements réactifs et autres problèmes de combustion. Elle montre que l'apprentissage informé par la physique est devenu un grand courant.

Il faut aussi regarder honnêtement ses limites. Le réseau de neurones informé par la physique trouve bien une solution adaptée à une condition donnée. Cependant, quand les conditions changent, il faut souvent réentraîner le modèle. Il reste difficile d'englober d'un seul coup un large éventail de conditions. L'apprentissage peut aussi devenir instable près de fortes ondes de choc ou de fronts de flamme abrupts. Les recherches se poursuivent pour combler ces faiblesses.

8.3 Dynamique de réaction raide et apprentissage physique sous contraintes de conservation

8.3.1 Raideur numérique des réactions chimiques et effondrement de l'apprentissage standard

La raideur apparaît quand certaines variations sont très rapides et d'autres lentes. Cette situation est fréquente en chimie de combustion. Des espèces intermédiaires comme les radicaux apparaissent puis disparaissent en un instant. En revanche, la température ou les constituants principaux changent relativement lentement.

Voyons quelle peut être l'ampleur de cet écart de temps. Les réactions rapides se déroulent à l'échelle du milliardième de seconde. Les écoulements lents évoluent à l'échelle du millième de seconde. L'écart entre les deux échelles dépasse un million de fois. Ce grand écart est la racine de la raideur qui perturbe le calcul.

Si l'on résout les variations rapides et lentes avec le même pas de temps, un problème apparaît. Si le pas est adapté aux réactions rapides, le calcul devient interminable. S'il est adapté à l'écoulement lent, les réactions rapides sont manquées et le calcul diverge. L'analyse numérique traditionnelle a longtemps lutté avec ce point. Elle l'a donc traité au moyen de méthodes particulières d'intégration temporelle.

Cet écart de temps ressemble à une prise de vue. Supposons que l'on veuille saisir dans une seule image le battement d'ailes d'un colibri et la marche d'une tortue. Si l'on se règle sur le colibri, il faut déclencher sans cesse. Si l'on se règle sur la tortue, le colibri devient flou. Il est difficile de mettre les deux dans la même image. Il en va de même pour les réactions rapides et les écoulements lents de la combustion.

Le réseau de neurones informé par la physique standard échoue souvent ici. Ce réseau cherche à réduire toutes les erreurs en même temps. La grande erreur créée par les réactions rapides domine l'apprentissage. L'équilibre des variables lentes n'est alors pas correctement appris. Ce phénomène, où l'apprentissage penche d'un seul côté, est appelé pathologie des gradients.

Représentons cette pathologie par une image. Supposons qu'une voix bruyante accapare toute une réunion. Les propos des personnes plus discrètes sont couverts. La réunion penche alors d'un seul côté. La grande erreur des réactions rapides est cette voix bruyante. L'équilibre des variables lentes passe donc au second plan dans l'apprentissage.

Deux autres causes se cachent ici. La première est la tendance du réseau de neurones à apprendre tardivement les variations abruptes. Le réseau de neurones assimile d'abord les évolutions douces et

repousse les changements nets. Cette propriété est appelée biais spectral. La variation brusque au moment de l'allumage correspond précisément à cette partie nette. La seconde est le problème du respect de la causalité temporelle. Dans la combustion, l'instant précédent est la cause de l'instant suivant. Or l'apprentissage standard cherche à ajuster tous les temps en même temps. L'ordre de la cause et de l'effet se brouille alors. Dans les cas graves, la solution s'affaisse vers un état plat où aucune réaction ne se produit. C'est pourquoi des méthodes ont été proposées pour apprendre le temps par étapes ou pour attribuer des pondérations différentes selon les espèces chimiques.

Un autre problème est l'effondrement des lois de conservation. Quand on pondère plusieurs termes en même temps, l'équilibre peut se rompre. La somme des concentrations des espèces chimiques doit toujours rester constante. Le nombre d'atomes doit aussi être le même avant et après la réaction. Si ces règles sont rompues, des valeurs absurdes, comme des concentrations négatives, apparaissent.

Voyons pourquoi une concentration négative est un grand problème. Dans la réalité, une quantité négative de matière n'existe pas. Il ne peut pas y avoir moins une tasse d'eau. Si le calcul produit une telle valeur, l'étape suivante s'effondre. Le calcul de la vitesse de réaction s'emballe ou s'arrête. Il faut donc absolument empêcher la concentration de devenir négative.

Plusieurs premières études ont traité ce problème. Stiff-PINN de Ji et al., publié en 2021, en est un exemple représentatif. Cette étude a introduit un traitement particulier pour gérer la chimie raide. Des réseaux de neurones informés par la physique multi-échelles sont apparus à une période similaire. Ces travaux ont confirmé à quel point la raideur constitue un grand obstacle pour l'apprentissage.

Il existe une raison pour laquelle cet obstacle devient plus haut dans les fusées. La combustion du méthane et de l'oxygène comporte de nombreux chemins réactionnels. Il faut traiter des dizaines d'espèces. Quand le nombre d'espèces augmente, la raideur augmente aussi. La combustion des fusées se situe donc à l'extrémité difficile du problème de raideur. Il devient d'autant plus nécessaire d'imposer fortement la physique.

8.3.2 Association des contraintes de conservation et de l'intégration temporelle

La clé pour résoudre la raideur consiste à imposer la physique plus solidement. Il existe deux grandes façons de le faire. La première est la contrainte souple, qui pénalise les violations de règles. L'ajout de termes d'erreur physique dans la fonction de perte en fait partie. La seconde est la contrainte dure, qui inscrit la règle dans la structure pour qu'elle ne puisse pas être violée. Plus la raideur est forte, plus on emploie ces deux méthodes ensemble.

Le premier outil consiste à relier un intégrateur temporel éprouvé au réseau de neurones. La méthode de Runge-Kutta est une technique standard qui résout les équations différentielles en découpant le temps en petits intervalles. Il faut toutefois choisir le bon type. Les méthodes explicites, qui projettent directement les valeurs vers l'avant, sont faibles face aux problèmes raides. Pour obtenir une solution stable, il faut diviser le pas de temps de manière excessive. On utilise donc, pour les problèmes raides, des méthodes d'intégration stables de type implicite. On intègre ainsi dans le réseau de neurones une structure d'intégration dont la stabilité est vérifiée. L'apprentissage profond hérite alors de la stabilité accumulée par l'analyse numérique.

Le deuxième outil est la projection qui impose la conservation. On n'utilise pas telles quelles les concentrations produites par le réseau de neurones. On transforme d'abord les valeurs pour qu'elles soient toujours positives. Ensuite, on les réajuste pour que leur somme reste constante. Enfin, on corrige les valeurs afin que le nombre d'atomes soit conservé. Après ce processus, aucune valeur violant la physique ne peut apparaître.

Comparons la projection à un portier. Quelles que soient les valeurs produites par le réseau de neurones, elles sont contrôlées à la porte. Si elles ne respectent pas les règles, elles sont corrigées vers les valeurs correctes les plus proches. Les valeurs négatives sont ramenées à des valeurs positives. Si la somme est incorrecte, elle est réajustée. Ainsi, les valeurs qui sortent respectent toujours les règles.

Cette méthode diffère de l'approche souple. L'approche souple donne seulement une pénalité quand une règle est violée. La pénalité guide l'apprentissage, mais elle n'empêche pas la violation. L'approche dure bloque la violation elle-même par la structure. Même si l'apprentissage est maladroit, la physique est respectée. C'est donc une méthode adaptée aux fusées, où la sécurité prime sur tout.

Un cas réel est CRK-PINN. Cette étude résout les équations de vitesse des réactions de combustion au moyen d'un réseau de neurones informé par la physique. Les auteurs sont Zhang Shihong, Zhang Qi et Wang Bosen. L'article a été publié après évaluation par les pairs dans la revue *Combustion and Flame*. Cette méthode utilise une contrainte souple qui guide la physique par la fonction de perte. Elle intègre dans la perte la loi d'action de masse et la loi d'Arrhenius. La conservation de l'enthalpie, la conservation des éléments et la conservation de la somme des concentrations sont aussi imposées de la même manière. Contrairement à la projection dure décrite plus haut, elle guide la physique par des pénalités.

Les performances sont aussi publiées. Le calcul a été accéléré dans un système de réaction hydrogène-air. Dix espèces et vingt et une réactions ont été traitées. Par rapport au calcul standard, il était environ six à quatorze fois plus rapide. Même lorsqu'il était relié à un calcul réel d'écoulement réactif, il était environ deux à cinq fois plus rapide. C'est un cas où l'on obtient une vitesse de calcul accrue tout en respectant les lois physiques.

Voyons ce que signifie une accélération de plusieurs fois. Le calcul des réactions chimiques représente une grande partie du temps dans l'analyse de la combustion. Une part importante du temps de calcul total y est consacrée. Si cette partie devient dix fois plus rapide, l'ensemble diminue beaucoup. Un calcul qui prenait plusieurs jours peut être ramené à une journée. Le cycle de modification de la conception et de nouvel essai devient d'autant plus rapide.

Précisons ici pour ne pas confondre contrainte souple et contrainte dure. CRK-PINN est une approche souple qui guide la physique par une perte. Elle diffère d'une projection dure qui corrige directement les valeurs. Les deux méthodes peuvent être utilisées ensemble ou séparément. La contrainte souple est flexible, mais elle ne bloque pas entièrement les violations physiques. La contrainte dure bloque les violations, mais rend la structure plus complexe. Décider laquelle utiliser et dans quelle mesure relève du choix de conception.

La leçon de cette méthode est simple et claire. Elle ne jette pas le savoir validé de l'analyse numérique. Des méthodes comme Runge-Kutta ont été perfectionnées pendant des décennies. L'intelligence artificielle gagne en puissance en s'appuyant sur ce savoir. Les connaissances anciennes en physique et le nouvel apprentissage ne s'opposent pas, mais se soutiennent mutuellement.

Cependant, ses limites sont elles aussi claires. Ces méthodes ont été validées dans les systèmes réactionnels qu'elles ont traités. La combustion du méthane et de l'oxygène dans une fusée est plus complexe. Le nombre de substances et de réactions y est bien plus élevé. Pour les transférer à un nouveau système réactionnel, il faut réentraîner le modèle et le valider. Il existe aussi un compromis : plus on impose fortement la physique, plus le calcul devient lourd.

8.4 Modélisation des écoulements réactifs fondée sur les réseaux de Kolmogorov-Arnold

8.4.1 Fondements consistant à placer des fonctions sur les connexions et fonctions d'activation adaptatives

Commençons par rappeler la structure d'un réseau de neurones ordinaire. Un réseau de neurones se compose de nœuds et de connexions qui les relient. Une fonction d'activation fixée est placée dans les nœuds. Sur les connexions, on n'attache que des nombres appelés poids. L'apprentissage consiste à ajuster ces poids.

Expliquons d'abord ce que signifie une fonction d'activation. Un réseau de neurones reçoit une entrée et la fait passer par une certaine courbe avant de produire une sortie. Cette courbe est la fonction d'activation. Dans un réseau de neurones ordinaire, la forme de cette courbe est fixée. On superpose plusieurs courbes prédéfinies pour créer des relations complexes. L'apprentissage garde la forme des courbes inchangée et ne modifie que l'intensité de leur superposition.

Le réseau de Kolmogorov-Arnold inverse cette disposition. Il place des fonctions non pas dans les nœuds, mais sur les connexions. Il modifie ces fonctions elles-mêmes par l'apprentissage. Il ne part pas d'une forme fixée, mais façonne les courbes de façon souple. Cette idée vient d'un théorème mathématique démontré il y a longtemps.

Ce théorème est le théorème de représentation de Kolmogorov-Arnold. Il affirme qu'une fonction complexe peut être exprimée comme la somme de fonctions unidimensionnelles simples. Cette structure représente la fonction de chaque connexion par une courbe souple. Cette courbe peut changer de forme localement. Elle permet donc de raffiner de façon dense seulement les zones où les variations sont rapides, comme dans une flamme.

Transposons ce théorème à un jeu de blocs. Même la forme la plus complexe est une combinaison de quelques blocs de base. On divise une grande structure en petits morceaux, puis on les relie à nouveau. Une fonction complexe peut elle aussi être décomposée en une somme de morceaux unidimensionnels simples. Le réseau de Kolmogorov-Arnold fait de cette décomposition sa structure. Une mathématique ancienne devient ainsi le fondement d'un nouveau réseau de neurones.

Le matériau qui sert à créer ces courbes est la B-spline. Une B-spline est une méthode qui relie en douceur plusieurs morceaux de courbes. Elle appartient à la même famille d'outils que ceux utilisés par les concepteurs automobiles pour tracer des courbes lisses. Chaque morceau n'agit que sur son propre intervalle. Ainsi, modifier un endroit ne fait pas bouger les autres.

Cette localité apporte un avantage à l'apprentissage. On peut diviser finement seulement la zone étroite où la flamme se forme. Les autres zones, plus larges, peuvent rester plus grossières. C'est une manière de concentrer les ressources là où elles sont nécessaires. On appelle cela le raffinement du maillage. On économise ainsi du calcul tout en obtenant la précision nécessaire.

On comprend pourquoi cette propriété est utile. On voit mieux quelle entrée influe sur quelle sortie. On peut représenter avec précision seulement les intervalles nécessaires. Il est aussi plus facile d'examiner visuellement la fonction et de l'analyser. Cette approche convient aux problèmes où les variations locales sont fortes, comme la combustion.

Prenons un exemple de la vie courante pour expliquer la différence entre nœuds et arêtes. Un réseau de neurones ordinaire revient à superposer plusieurs lentilles de forme fixe. La forme des lentilles est fixe, et l'on ne règle que l'intensité de leur superposition. Le réseau de Kolmogorov-Arnold taille la forme

même des lentilles. Il crée ainsi plus librement la réfraction voulue. En contrepartie, tailler les lentilles demande plus de travail.

Bien entendu, cette structure n'est pas universelle. Son apprentissage peut être plus délicat. Plus on divise finement les courbes, plus le nombre de valeurs à régler augmente. Selon le problème, un réseau de neurones ordinaire peut parfois être préférable. Il est juste de voir cette nouvelle structure comme une option parmi d'autres.

8.4.2 Pouvoir de représentation du front de flamme et allègement des paramètres

Le front de flamme est une fine zone où la réaction se concentre. À cet endroit, la température grimpe fortement sur une courte distance. Un gaz à température ambiante peut atteindre en un instant plusieurs milliers de degrés. Les concentrations changent aussi brutalement. Il est difficile de représenter par le calcul ces variations abruptes dans une zone aussi étroite.

Les réseaux de neurones ordinaires sont faibles face à ces variations brusques. Avec des fonctions d'activation fixées, il est difficile de dessiner une couche nette de façon lisse. Si l'on force l'ajustement, des erreurs en forme de petites ondulations apparaissent autour. Ils ont aussi tendance à apprendre tardivement les informations de haute fréquence. À cause de ces propriétés, les résultats du calcul du front de flamme deviennent flous.

Comparons ces ondulations à un dessin de drapeau. Supposons que l'on dessine un mât bien droit uniquement avec un pinceau doux. Des motifs ondulés apparaissent près de l'arête vive du mât. Dans le calcul aussi, de faux motifs apparaissent à côté d'un front de flamme net. Ces motifs n'existent pas dans la réalité. Ils brouillent la prédiction par des signaux inexistantes.

Le réseau de Kolmogorov-Arnold peut montrer sa force sur ce point. Ses courbes souples dessinent mieux les couches abruptes. Il peut diviser finement seulement la zone étroite où la flamme se forme. Il laisse les zones inutiles plus grossières et réduit ainsi le gaspillage. Cette capacité d'adaptation, qui déplace les ressources, convient bien aux calculs de combustion.

Un cas réel est ChemKANs. Les auteurs sont König, Kim et Deng. Cette étude a été publiée en 2025 dans la revue *Physical Chemistry Chemical Physics*. Elle a intégré dans un réseau de Kolmogorov-Arnold les vitesses de réaction et le déroulement des lois thermodynamiques. Son objectif est d'apprendre des modèles de chimie de combustion et d'accélérer le calcul. Toutefois, ce que cette étude a validé n'est pas un front de flamme réparti dans l'espace. Elle a appris un problème de réacteur chimique dans lequel les substances réagissent au cours du temps. La restauration des fronts de flamme spatiaux ou des ondes de choc dans une chambre de combustion de fusée reste une tâche future.

Les résultats publiés sont pratiques. Ce modèle a fonctionné avec un très petit nombre de valeurs réglables. Il a bien appris même avec des données bruitées, sans surapprentissage. Il a résisté à un bruit allant jusqu'à quinze pour cent. Il a aussi montré des résultats environ deux fois plus rapides que le calcul standard. La même équipe a présenté une étude initiale de suivi qui apprend les vitesses de réaction en fonction de la pression.

Expliquons ce que signifie être robuste au bruit. Les mesures réelles contiennent toujours du bruit. C'est parce que les capteurs ne sont pas parfaits. Un modèle fragile face au bruit mémorise même ce bruit. C'est ce qu'on appelle le surapprentissage. Un modèle robuste au bruit apprend seulement les vraies règles.

Comparons le surapprentissage à la préparation d'un examen. Un élève qui mémorise les réponses telles quelles se trompe quand les questions changent. Un élève qui comprend les principes peut résoudre de nouveaux problèmes. Un modèle robuste au bruit ressemble à l'élève qui a appris les principes. Les

données de mesure des fusées contiennent beaucoup de bruit. Cette propriété robuste au bruit a donc une grande valeur pour l'instrumentation des fusées.

Il faut parler des forces de ce modèle dans la limite de ce qui a été confirmé. Trois points ont été confirmés. Il utilise peu de valeurs réglables, il est robuste au bruit, et il est environ deux fois plus rapide que le calcul standard. Les chiffres annonçant des performances supérieures doivent encore être validés. Ce livre ne parle donc que de cette plage confirmée.

Que signifie le réseau de Kolmogorov-Arnold pour les fusées ? Un front de flamme se forme aussi en couche mince dans la chambre de combustion d'une fusée. Il faut bien dessiner cette couche mince pour prédire correctement la chaleur et la pression. Si les paramètres sont peu nombreux, le calcul devient léger. Un modèle léger convient bien au calcul en temps réel. C'est pourquoi cette structure attire l'attention comme candidate pour le diagnostic en temps réel.

Mesurons le poids de l'expression « peu de paramètres ». Les paramètres sont le nombre de valeurs qu'un modèle ajuste. Quand ce nombre est élevé, il faut beaucoup de données pour apprendre. Le calcul est aussi lourd et la mémoire fortement sollicitée. Réaliser la même tâche avec peu de paramètres présente des avantages à plusieurs égards. Le modèle peut fonctionner même sur un petit ordinateur embarqué dans une fusée.

Il faut aussi voir les limites. Ces cas ont été validés sur des systèmes réactionnels relativement simples. Si le nombre d'espèces chimiques atteint plusieurs dizaines, le nombre de connexions explose. La mémoire et le temps d'apprentissage peuvent alors augmenter fortement. C'est pourquoi les recherches se poursuivent pour alléger encore la structure. La combustion turbulente à haute pression d'une fusée est bien plus complexe. Il reste du chemin avant d'utiliser cette structure dans la conception réelle des moteurs. Il faut davantage de code ouvert, d'expériences comparatives et de validations indépendantes. Pour l'instant, il convient de la traiter comme une structure candidate prometteuse.

8.5 L'opérateur neuronal de Fourier qui transforme une fonction en une autre fonction

8.5.1 Principe de l'apprentissage d'opérateurs et indépendance vis-à-vis du maillage

Un opérateur est une règle qui va d'une fonction à une autre fonction. Le terme est difficile, alors prenons un exemple. Supposons que l'on fournisse la distribution du débit à l'entrée de la chambre de combustion. On obtient alors la distribution de la température dans toute la chambre. La règle qui transforme cette image d'entrée en image de température est un opérateur.

Comparons la correspondance entre fonctions à la cuisine. Supposons que l'on fournisse toute une liste d'ingrédients et que l'on obtienne la photo du plat fini. Si l'on modifie légèrement les ingrédients, le plat change aussi. L'apprentissage d'opérateurs apprend cette transformation globale. Il n'apprend pas seulement la valeur de chaque ingrédient, mais la relation d'ensemble. Il fournit donc rapidement une réponse même quand les conditions changent.

Un réseau de neurones ordinaire transforme quelques nombres en quelques nombres. L'apprentissage d'opérateurs transforme une image en une autre image. Il traite ainsi tout le champ d'écoulement en une seule fois. DeepONet fait partie des premières études à avoir élargi cette idée. L'opérateur neuronal de Fourier appartient lui aussi à ces méthodes d'apprentissage d'opérateurs.

Voyons pourquoi cette différence est importante. Refaire le calcul pour chaque condition est lent. Une fois l'opérateur appris, il répond rapidement à de nombreuses conditions. Même si les conditions d'entrée changent, il n'est pas nécessaire de réapprendre. En conception, on modifie les conditions un

nombre incalculable de fois. C'est pourquoi l'apprentissage d'opérateurs attire l'attention comme outil de conception.

Le cœur de l'opérateur neuronal de Fourier réside dans la transformée de Fourier. La transformée de Fourier est une technique qui convertit une forme complexe en somme de plusieurs ondes. Les ondes de basse fréquence portent la grande structure de l'écoulement. Les ondes de haute fréquence portent les détails, comme les petits motifs. Ce réseau de neurones apprend surtout les composantes de basse fréquence pour dessiner rapidement les grands écoulements.

Cette méthode a ses avantages. Le réseau de neurones traite l'écoulement comme une somme d'ondes. Les grands écoulements sont saisis rapidement en les résumant par quelques basses fréquences. Elle est utile pour embrasser d'un seul regard les relations sur un vaste domaine. Toutefois, cette méthode n'est pas une méthode numérique qui résout directement les dérivées des équations. Garder seulement les basses fréquences et couper les hautes fréquences allège le calcul. Mais cette coupure peut au contraire rendre floues les parties nettes, comme les ondes de choc ou les fronts de flamme. Il faut donc être prudent lorsque les détails sont importants.

Comparons ce flou à une photographie. Une photo mal mise au point a des contours flous. Les lignes nettes semblent se diffuser. Plus on coupe les hautes fréquences, plus ce type de diffusion apparaît. La frontière nette de la flamme peut être écrasée. Ces zones exigent donc un traitement séparé qui préserve les hautes fréquences.

La propriété remarquable de cette méthode est son indépendance vis-à-vis du maillage. Ce modèle est défini indépendamment de la finesse du maillage de calcul. Après avoir appris sur des données de basse résolution, il peut être appliqué à un maillage plus fin. On appelle cela la super-résolution zéro coup. Cela ressemble à la restauration d'une photo de basse résolution en haute résolution. Toutefois, il s'agit d'une propriété théorique et d'un résultat observé dans certaines expériences. La précision n'est pas automatiquement garantie à une nouvelle résolution.

Un réseau de neurones ordinaire ne peut pas faire cela. La taille de l'entrée et de la sortie est fixée dès le départ. Si l'on change le maillage, il faut créer un nouveau modèle. L'opérateur neuronal de Fourier est différent. Il traite l'écoulement comme une fonction, et non comme un maillage. Le même modèle peut donc être utilisé même si la résolution change.

Comparons la transformée de Fourier à la radio. La radio reçoit plusieurs émissions en les séparant par fréquence. Les basses et les hautes fréquences portent des informations différentes. L'opérateur neuronal de Fourier divise lui aussi l'écoulement par fréquence. Les grands écoulements sont contenus dans les basses fréquences, et les petits motifs dans les hautes fréquences. Ce réseau de neurones choisit les basses fréquences pour saisir rapidement les grands écoulements.

L'indépendance vis-à-vis du maillage apporte un grand avantage au calcul des fusées. Au début du développement, on examine rapidement plusieurs options avec un maillage grossier. Après avoir choisi une bonne option, on la vérifie précisément avec un maillage fin. À ce moment-là, il n'est pas nécessaire de réapprendre le modèle. Le même modèle s'utilise tel quel aux deux résolutions, ce qui réduit à la fois le temps et le coût.

Cependant, cela ne fonctionne pas automatiquement pour tous les problèmes. Les zones où les valeurs se coupent brusquement, comme les ondes de choc, sont difficiles. Il faut aussi être prudent avec les fronts de flamme minces et la turbulence près des parois. Dans ces zones, les informations de haute fréquence sont importantes. Un traitement séparé et une validation doivent suivre pour que le résultat soit fiable.

8.5.2 Opérateurs neuronaux pour les écoulements de combustion

La combustion est un problème difficile où chaleur, écoulement et chimie sont liés. Les recherches se poursuivent pour adapter les opérateurs neuronaux à ce problème. Plusieurs équipes essaient des méthodes différentes. Ici, nous examinons les exemples récents validés en nous concentrant sur les concepts.

Une voie consiste à apprendre la chimie raide sous forme d'opérateur. L'opérateur neuronal de Fourier étendu (EFNO) en est un exemple. Les auteurs sont Wong, Li, Zhang, Chen et Zhou. Cette étude a cherché à résoudre la chimie raide même dans des conditions non apprises. Elle l'a testée sur l'auto-inflammation de l'hydrogène en dimension zéro et sur une flamme de jet hydrogène-ammoniac en trois dimensions. Elle a montré une bonne capacité de généralisation même dans des états non appris. Cette étude sur l'opérateur étendu a été publiée dans la revue *Combustion and Flame*.

Déplions le terme d'auto-inflammation. Lorsque l'on place du combustible et de l'oxygène à haute température, le feu prend de lui-même. C'est un phénomène où la combustion démarre sans allumette. La chimie de cet instant est très rapide et très raide. L'opérateur d'extension a cherché à apprendre cet instant difficile. C'est un problème souvent utilisé comme banc d'essai pour la chimie raide.

Voyons pourquoi l'opérateur d'extension est important. En général, un réseau de neurones donne de bons résultats seulement dans les conditions qu'il a apprises. Il se trompe dès que la température ou la pression s'en écarte un peu. L'opérateur d'extension a cherché à abaisser ce mur. Dans les essais, il s'est généralisé jusqu'à un certain point à des conditions non vues pendant l'apprentissage. Il a ainsi montré qu'il pouvait encore être utile dans de nouvelles conditions de fusée.

Une autre direction consiste à apprendre d'un seul bloc la turbulence réactive tridimensionnelle. Une étude l'a traitée avec un opérateur neuronal de Fourier auquel s'ajoute une structure U-Net. U-Net est une structure de réseau de neurones qui traite à la fois la vue d'ensemble et les détails. Elle a bien reproduit les caractéristiques fréquentielles de la vitesse, de la température et de la densité dans une turbulence réactive compressible. Elle a prédit l'écoulement beaucoup plus vite que les calculs classiques. Ces résultats montrent le potentiel des modèles de substitution. Beaucoup de travaux de cette famille restent encore à un stade initial, avant l'évaluation par les pairs.

Déplions aussi ce que signifie bien reproduire les caractéristiques fréquentielles. Dans un écoulement, de grands tourbillons et de petits tourbillons se mêlent. Chaque taille de tourbillon contient une certaine énergie. La capacité à représenter correctement cette distribution d'énergie est un critère important. Si le grand écoulement est correct mais que les petits tourbillons sont manqués, le résultat reste incomplet. Un bon opérateur reproduit largement cette distribution des grands et des petits tourbillons.

La troisième direction consiste à traiter le transfert thermique radiatif au moyen d'un opérateur. Une flamme chaude perd aussi de la chaleur sous forme de lumière. C'est ce que l'on appelle le transfert thermique radiatif. Zhao et ses collègues ont proposé un opérateur neuronal qui résout le transfert thermique radiatif dans les incendies. Cette étude initiale porte sur les incendies, non sur les fusées. Elle doit donc être citée comme un cas voisin, sans l'étendre à une démonstration pour les fusées.

On peut sentir le transfert thermique radiatif avec un feu de camp. Quand on se tient devant un feu de camp, le visage devient chaud. Avant même que l'air ne se réchauffe, la lumière transporte déjà la chaleur. Dans la chambre de combustion d'une fusée, la flamme émet aussi de la chaleur sous forme de lumière. Ce rayonnement chauffe les parois et refroidit la flamme. Une prédiction exacte doit donc inclure cette chaleur radiative.

Il est difficile d'inclure le rayonnement dans le calcul. La lumière se propage dans toutes les directions et se mêle. Son intensité diffère selon la direction. Des travaux sur les incendies ont tenté d'apprendre cet

écoulement complexe avec un opérateur. Pour le transférer aux fusées, il faut réadapter les conditions et le valider. Cela reste pourtant un exemple initial significatif, qui montre une direction future.

Ces exemples montrent des avantages communs. Si l'on apprend les résultats de calculs de haute précision, on obtient un modèle de substitution rapide. On peut reconstruire un calcul à basse résolution sous une forme à haute résolution. Dans une situation où les capteurs sont peu nombreux, il devient un outil d'aide pour estimer tout le champ. Il peut servir à parcourir l'espace de conception en peu de temps.

Il existe aussi un point de rencontre entre l'apprentissage d'opérateurs et l'apprentissage informé par la physique. Un opérateur neuronal est rapide, mais il ne respecte pas toujours la physique. On peut y ajouter des contraintes de conservation dans la fonction de perte. C'est une tentative pour obtenir à la fois la vitesse de l'opérateur et la fiabilité de la physique. Cette combinaison réapparaît plus loin dans le cas de la détonation rotative. Ces deux outils ne sont donc pas concurrents ; ils forment une paire.

Précisons ici comment lire ces exemples. Ce livre ne présente pas de tableau comparatif des performances de modèles particuliers. Les chiffres des premières études varient fortement selon les conditions. Il explique plutôt, à partir de cas validés, le rôle que peuvent jouer les opérateurs neuronaux. L'accent porte moins sur les chiffres que sur l'usage de la méthode.

Il existe aussi des exemples de calculs à grande échelle. L'équipe de DeepFlame a intégré des réseaux de neurones pour résoudre la combustion supercritique à grande échelle. Les auteurs sont Guo, Mao, Liu, Tan, Zha et Chen. Selon les données publiques, ils ont calculé la combustion turbulente du méthane et de l'oxygène à l'échelle de dizaines de milliards de cellules. Cela dépasse largement les capacités antérieures. C'est une étude initiale orientée vers la combustion de fusées comportant plus de cent injecteurs.

Pour l'utiliser dans la conception réelle, de nombreux points doivent être vérifiés. Il faut voir si la conservation de la masse et de l'énergie est respectée. Il faut vérifier si la position des ondes de choc est correcte. Il faut examiner si les concentrations des espèces chimiques ne deviennent pas négatives. Ce n'est qu'après avoir passé ces validations que le modèle devient un outil. Un modèle de substitution accompagne le calcul précis ; il ne le remplace pas.

8.6 Reconstruction de l'interface onde de choc-combustion dans un moteur à détonation rotative

8.6.1 Défis d'analyse d'un moteur à détonation rotative

Un moteur à détonation rotative (RDRE) utilise une chambre de combustion en forme d'anneau. À l'intérieur, une onde de détonation tourne très vite en décrivant un cercle. La détonation est une combustion explosive dans laquelle l'onde de choc et la combustion restent attachées et se déplacent ensemble. Cette onde se propage à plusieurs milliers de mètres par seconde, plusieurs fois plus vite que le son.

Cette méthode a l'avantage que la combustion elle-même augmente la pression. Un moteur classique élève d'abord la pression au moyen d'un compresseur ou d'une pompe, puis brûle le mélange. Dans une détonation, l'onde de choc comprime instantanément le gaz et le fait brûler. La pression augmente donc d'elle-même pendant la combustion. On appelle cela la combustion à gain de pression. Toutefois, une pression d'injection reste nécessaire pour introduire le combustible et l'oxygène. Même si la pression augmente dans la chambre de combustion, des pertes surviennent dans l'injection, le mélange et l'échappement. Le gain à l'échelle de tout le moteur dépend donc des conditions. Comme cette méthode

peut accroître le rendement si elle est bien utilisée, de nombreux organismes dans le monde se sont lancés dans son développement.

Voyons la différence entre la détonation et la combustion ordinaire. La combustion ordinaire se propage comme un feu qui avance lentement. La détonation se propage comme une explosion précédée d'une onde de choc. L'onde de choc comprime et chauffe l'air en un instant. Juste derrière elle, le combustible brûle aussitôt. Cette structure où l'onde de choc et la flamme restent attachées crée une forte pression.

Le problème est que l'intérieur est extrêmement complexe. L'onde de choc de tête et la zone de réaction exothermique restent attachées l'une à l'autre. Des ondes de choc obliques, des surfaces de contact et des couches de mélange non brûlé s'entremêlent. Ces structures interagissent à l'échelle du millionième de seconde. C'est pourquoi ce problème compte parmi les plus difficiles en mécanique des fluides.

On peut comparer cette interaction à un accident sur la route. Plusieurs voitures s'emmêlent en même temps dans un carrefour étroit. Un changement en un point se propage instantanément à l'ensemble. Dans une détonation aussi, les ondes de choc et les flammes s'entremêlent ainsi. Une petite oscillation change toute l'onde. Il est donc difficile de prédire et de contrôler l'intérieur de ce moteur.

La mesure est encore plus frustrante. Dans un essai au sol, ce que l'on peut observer est limité. Il ne reste guère que le signal de pression sur la paroi extérieure de la chambre de combustion. On filme parfois aussi la lumière de la flamme avec une caméra ultrarapide. Cette lumière est appelée émission spontanée. C'est la lumière qu'une molécule donnée émet d'elle-même pendant la réaction. Cependant, ces mesures ne permettent pas de connaître directement l'état tridimensionnel interne.

Il faut aussi comprendre pourquoi on développe le moteur à détonation rotative. Un moteur-fusée classique brûle le combustible à pression à peu près constante. La combustion par détonation brûle le mélange en augmentant elle-même la pression. Elle peut produire une plus grande poussée avec le même combustible. Elle peut aussi permettre de rendre le moteur plus court et plus léger. C'est pourquoi cette méthode est considérée comme une candidate pour la propulsion de prochaine génération.

On peut comparer la difficulté de ce moteur à celle d'un appareil photo. Imaginons que l'on photographie une toupie qui tourne vite. Si l'obturateur est lent, la toupie devient une forme floue. L'onde de détonation est bien plus rapide qu'une toupie. Même une caméra très rapide ne saisit que l'apparence extérieure. Pour regarder l'intérieur, il faut combler les zones manquantes par le calcul.

Prenons la vitesse de l'onde de détonation en chiffres. Cette onde se propage à plusieurs milliers de mètres par seconde. Elle est plus rapide qu'une balle. Elle met moins d'une milliseconde à faire le tour d'une chambre de combustion annulaire. En ce temps très court, la pression et la température montent et descendent fortement. Ce changement est si rapide que l'œil humain ne peut absolument pas le suivre.

C'est pourquoi un modèle de reconstruction est indispensable. Il faut un outil capable de reconstituer tout le champ d'écoulement à partir de mesures clairsemées. Il doit estimer rapidement la pression, la température, la vitesse et la distribution des espèces chimiques. C'est là que se rencontrent l'apprentissage informé par la physique et l'apprentissage d'opérateurs. Les méthodes étudiées dans ce chapitre y unissent leurs forces.

8.6.2 Reconstruction et jumeau numérique par fusion des données et de la physique

Le premier outil de reconstruction est la super-résolution. Elle transforme des mesures clairsemées ou grossières en un champ détaillé. L'étude de Yao et Zhang de 2026 l'a tenté au moyen d'un réseau antagoniste cycliquement cohérent. Un réseau antagoniste est une structure où un générateur et un discriminateur apprennent en s'affrontant. Cela ressemble à un faussaire et à un expert qui s'entraînent mutuellement. Cette méthode a été entraînée sur des données de calcul d'un moteur à hydrogène et air. Elle a montré une reconstruction huit fois plus fine d'un champ d'écoulement grossier. Ce résultat provient d'une étude publiée dans une revue scientifique.

Voyons en image pourquoi la super-résolution est nécessaire. Quand on agrandit une vieille photo, elle devient grossière comme un escalier. La technologie de super-résolution restaure cette photo grossière en une image plus lisse. Dans les calculs de combustion aussi, on obtient des résultats sur une grille grossière. Si l'on reconstruit ce champ grossier en un champ détaillé, l'information augmente. C'est une voie pour économiser le coût de calcul avec un calcul grossier tout en retrouvant les détails.

L'outil suivant est la fusion multi-fidélité. Elle relie des calculs bon marché de faible précision et des calculs coûteux de haute précision. L'idée est d'obtenir une estimation exacte même avec peu de données de haute précision. Une étude appelée Cheap2Rich a appliqué cette idée au moteur à détonation rotative. Les auteurs sont Bao, Zayak, Powers, Raman et Kurtz. Cette étude multi-fidélité est encore une recherche initiale avant l'évaluation par les pairs.

On peut comparer l'avantage de la multi-fidélité à la gestion d'un foyer. Si l'on n'utilise que des matériaux coûteux, le budget devient serré. On pose la base avec des matériaux peu chers et l'on utilise les bons matériaux seulement aux endroits essentiels. Le calcul fonctionne de la même manière. Les calculs de faible précision établissent le grand cadre. Seuls les endroits importants sont affinés par des calculs de haute précision. C'est ainsi que l'on approche une grande exactitude avec un coût réduit.

Cette fusion inclut aussi la notion d'assimilation de données. L'assimilation de données est une méthode qui ajuste continuellement le calcul aux mesures réelles. Elle ressemble à la prévision météorologique qui corrige ses prévisions à partir des observations. Dans un moteur à détonation rotative aussi, des signaux de capteurs entrent dans le système. Ces signaux corrigent continuellement le calcul. Les prédictions du modèle se rapprochent alors davantage de l'état réel du moteur.

Un autre outil est le modèle génératif qui tient compte des observations. Un modèle génératif est un réseau de neurones qui produit de lui-même une scène plausible. Si on lui donne des observations clairsemées comme condition, il dessine tout le champ. Il peut encore être utilisable sans réapprentissage lorsque les positions d'observation changent. Wang et ses collègues ont proposé une telle tentative pour la reconstruction d'un combusteur à détonation rotative. Elle est donc utile lorsque les capteurs sont peu nombreux et que les observations manquent.

Le dernier outil est la combinaison d'un opérateur neuronal et d'un réseau neuronal physique. L'opérateur neuronal estime rapidement tout le champ. Le réseau neuronal physique le contraint à respecter les lois de conservation. En combinant les deux méthodes, on obtient un estimateur à la fois rapide et conforme à la physique. Lorsque des signaux de capteurs arrivent, il reconstitue l'intérieur en peu de temps.

Ces résultats de reconstruction mènent au jumeau numérique. Le jumeau numérique est une technologie dans laquelle un modèle informatique suit l'état d'un dispositif réel. À partir du champ d'écoulement reconstruit, on peut calculer la charge thermique sur les parois et le rendement de combustion. On peut détecter à l'avance le risque que les injecteurs soient érodés par la chaleur. Cela peut aussi mener à un contrôle qui maîtrise en peu de temps l'instabilité de combustion.

On peut comparer l'instabilité de combustion à une balançoire. Si l'on pousse la balançoire au bon rythme, elle oscille de plus en plus fort. Dans une chambre de combustion, les oscillations de pression grandissent aussi lorsqu'elles sont en phase avec la flamme. Si ces oscillations deviennent fortes, le moteur peut se briser. Il faut donc les détecter rapidement et casser ce rythme. La reconstruction et le contrôle en temps réel se chargent de détecter et de maîtriser ces oscillations.

Il faut toutefois rester prudent ici aussi. La plupart de ces travaux de reconstruction en sont à un stade initial. Les chiffres qui mettent en avant de grands gains de vitesse ou une haute exactitude dépendent des conditions. Ce livre n'utilise donc pas ces chiffres dans le corps du texte. Cette partie est expliquée seulement au moyen de concepts de conception et de cas validés.

Voyons pourquoi le jumeau numérique est utile. Pendant un essai, on ne peut pas voir directement l'intérieur d'un moteur réel. Le jumeau numérique estime l'état interne à partir des signaux de capteurs. Il détecte les signes de danger plus vite qu'un humain. Il peut envoyer un signal avant que le problème ne grandisse. Dans une fusée réutilisable, cet avertissement précoce a une grande valeur.

L'auto-actualisation comporte aussi des risques cachés. Si un modèle se corrige à partir de ses propres prédictions, les erreurs peuvent s'accumuler. Il peut se pousser lui-même dans une mauvaise direction. Une étude de 2026 a souligné ce problème. Elle a proposé un jumeau numérique auto-actualisé stabilisé par la physique. Cette étude a montré le concept sur un problème thermique général, non sur une fusée. Les règles physiques y tiennent les rênes de l'actualisation.

Voyons pourquoi un limiteur est nécessaire. L'intelligence artificielle produit parfois des valeurs absurdes. Si ces valeurs entrent telles quelles dans le contrôle, cela devient dangereux. Le limiteur empêche les valeurs de dépasser la plage sûre. C'est une barrière qui fait respecter les limites physiques définies par l'être humain. Un tel garde-fou est indispensable au contrôle autonome.

Pour l'utiliser dans le contrôle réel d'un moteur, il faut encore beaucoup de préparation. Il faut accumuler assez de données d'essais à grande vitesse. Une validation indépendante doit suivre. Il faut aussi disposer de limiteurs qui protègent la sécurité. Cette évolution montre que la technologie est encore en cours de maturation. Mais la direction est nette. La reconstruction qui utilise ensemble les données et la physique s'installe progressivement.

Synthèse

Ce chapitre a traité de plusieurs voies pour intégrer l'intelligence artificielle dans le calcul de la combustion. Le point de départ était un problème unique. Dans la combustion des fusées, une chimie rapide et des écoulements lents s'entremêlent, ce qui exige beaucoup de calculs. Les méthodes de calcul classiques sont précises, mais lentes. L'intelligence artificielle est rapide, mais elle devient dangereuse si elle viole la physique.

La réponse est l'apprentissage automatique fondé sur l'information physique. Le réseau de neurones ne se contente pas d'imiter les données. Il respecte aussi des lois comme la conservation de la masse et de l'énergie. Le réseau de neurones informé par la physique en est la méthode représentative. Même lorsque les données sont peu nombreuses, la physique comble les vides. Cette force apparaît clairement dans les problèmes inverses.

À ce stade, résumons la relation entre l'intelligence artificielle et la physique. L'intelligence artificielle est forte pour trouver des règles dans les données. La physique contient des lois vérifiées depuis longtemps. L'une seule ne suffit pas. Si l'on n'utilise que les données, on viole la physique. Si l'on n'utilise que la physique, le volume de calcul devient important. C'est pourquoi l'usage conjoint des deux est le cœur de tout ce chapitre.

Dans les problèmes raides, il faut imposer plus fortement la physique. Les seules pénalités sont souvent insuffisantes. On obtient de la stabilité en intégrant un intégrateur temporel dans le réseau de neurones. Une projection qui impose la conservation empêche l'apparition de valeurs absurdes. CRK-PINN est un exemple de contrainte souple qui impose la physique au moyen de la fonction de perte.

Rappelons aussi les équations des écoulements réactifs multicomposants. Les quatre équilibres de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces chimiques et de l'énergie en forment l'ossature. Ces équilibres expriment la règle selon laquelle rien n'apparaît ni ne disparaît sans raison. L'apprentissage informé par la physique inscrit cette règle dans la fonction de perte. La différentiation automatique mesure précisément le résidu des équations. Grâce à cela, il reconstitue l'ensemble même à partir de données clairsemées.

Le réseau de Kolmogorov-Arnold propose une nouvelle architecture. Il place des fonctions flexibles sur les connexions. Il peut mieux représenter les fronts de flamme abrupts. ChemKANs a montré cette possibilité en chimie de la combustion. Même avec peu de valeurs, il a produit des résultats robustes au bruit.

L'opérateur neuronal de Fourier transforme une fonction en une autre fonction. Il peut apprendre à basse résolution et être utilisé à haute résolution. Il devient un modèle de substitution rapide et un outil de reconstruction. Les recherches qui combinent un opérateur d'extension et un U-Net ont donné des résultats dans les écoulements réactifs. Des travaux sur des opérateurs traitant le transfert thermique radiatif sont aussi apparus dans des domaines voisins. Cependant, les ondes de choc et les fronts de flamme minces exigent encore de la prudence.

Le moteur à détonation rotative est le terrain où ces méthodes se rejoignent. L'objectif est de reconstruire l'intérieur à partir de mesures clairsemées. On y utilise la super-résolution, la multifidélité, ainsi que la combinaison d'opérateurs et de réseaux neuronaux physiques. Ces résultats conduisent au jumeau numérique et au contrôle en temps réel. Nous en sommes encore aux débuts, et une validation plus poussée est nécessaire.

Résumons les méthodes de ce chapitre en une phrase. Elles sont toutes des voies qui utilisent ensemble la physique et les données. La physique apporte la confiance, et les données apportent la vitesse. Il est difficile de traiter la combustion des fusées avec un seul de ces deux éléments. La réponse se trouve là où ces deux forces se rencontrent. Ce livre a montré cet emplacement au moyen de cas vérifiés.

Précisons aussi la nature des exemples utilisés dans ce chapitre. Le réseau de neurones informé par la physique de Raissi et l'opérateur neuronal de Fourier de Li sont des travaux fondamentaux largement cités. CRK-PINN et ChemKANs sont des articles publiés dans des revues après évaluation par les pairs. DeepFlame, l'opérateur d'extension et la reconstruction multifidélité relèvent de recherches récentes. Une part importante de ces travaux en est encore au stade initial de la prépublication. Cela signifie que les recherches initiales peuvent encore évoluer.

L'attitude qui traverse ce chapitre mérite aussi d'être rappelée. Ce livre a choisi les exemples en donnant la priorité aux preuves. Les modèles dont seul le nom paraissait convaincant ont été ramenés au rang de concepts. Les chiffres de performance non vérifiés n'ont pas été inclus dans le texte principal. Les recherches initiales ont été clairement présentées comme telles. Le but est d'aider le lecteur à distinguer les faits des attentes.

Les tâches à venir sont aussi claires. Il faut des modèles qui fonctionnent bien d'un seul coup dans un large éventail de conditions. Ils doivent traiter de façon stable les ondes de choc et les fronts de flamme minces. Il faut accumuler davantage de cas validés avec des données de moteurs réels. Les limiteurs qui

protègent la sécurité doivent aussi progresser. À mesure que ces tâches seront résolues, les outils se rapprocheront du terrain.

La leçon de ce chapitre est claire. L'intelligence artificielle change fortement la vitesse du calcul de la combustion. Cependant, elle n'est fiable que lorsqu'elle s'accompagne de physique et de validation. Les preuves vérifiées comptent plus que les noms séduisants des modèles. C'est sur cet équilibre que les technologies de propulsion de prochaine génération avancent pas à pas. Lorsque l'intelligence artificielle et la physique travaillent ensemble, ce pas devient plus solide.

Sources associées

- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3, 422-440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- Li, Z., Kovachki, N., Aizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Aizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2023). Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces With Applications to PDEs. *Journal of Machine Learning Research*, 24, 1-97. <https://www.jmlr.org/papers/v24/21-1524.html>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Meng, X., Mao, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1), 208-228. <https://doi.org/10.1137/19M1274067>
- Liu, Z., Wang, Y., Vaidya, S., Ruehle, F., Halverson, J., Soljagic, M., Hou, T. Y., & Tegmark, M. (2025). KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2404.19756>
- Ji, W., Qiu, W., Shi, Z., Pan, S., & Deng, S. (2021). Stiff-PINN: Physics-Informed Neural Network for Stiff Chemical Kinetics. *The Journal of Physical Chemistry A*, 125(36), 8098-8106. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05102>
- Zhang, S., Zhang, C., & Wang, B. (2024). CRK-PINN: A physics-informed neural network for solving combustion reaction kinetics ordinary differential equations. *Combustion and Flame*, 269, 113647. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113647>
- Koenig, B. C., Kim, S., & Deng, S. (2025). ChemKANs for combustion chemistry modeling and acceleration. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27(33), 17313-17330. <https://doi.org/10.1039/D5CP02009C>
- Koenig, B. C., & Deng, S. (2025). Kolmogorov-Arnold Chemical Reaction Neural Networks for learning pressure-dependent kinetic rate laws. *arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs)*. *arXiv:2511.07686*. <https://arxiv.org/abs/2511.07686>
- Weng, Y., Li, H., Zhang, H., Chen, Z. X., & Zhou, D. (2025). Extended Fourier Neural Operators to learn stiff chemical kinetics under unseen conditions. *Combustion and Flame*, 272, 113847. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113847>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs)*. *arXiv:2509.03347*. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Zhang, Z., Li, Z., Wang, Y., Yang, H., Peng, W., Teng, J., & Wang, J. (2026). Prediction of three-dimensional chemically reacting compressible turbulence based on implicit U-Net enhanced Fourier neural operator. *Acta Mechanica Sinica*, 42(7), 725274. <https://doi.org/10.1007/s10409-025-25274-x>
- Guo, Z., Mao, R., Liu, L., Tan, G., Jia, W., & Chen, Z. X. (2025). Deep Learning-Enabled Supercritical Flame Simulation at Detailed Chemistry and Real-Fluid Accuracy Towards Trillion-Cell Scale. *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC25)*. *arXiv:2508.18969*. <https://doi.org/10.1145/3712285.3759850>
- DeepModeling. (2026). DeepFlame development repository. <https://github.com/deepmodeling/deepflame-dev>

- Jiao, A., Jiang, W., Lu, X., Wang, Y., & Lu, L. (2026). Nested Fourier-enhanced neural operator for efficient modeling of radiation transfer in fires. arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs). arXiv:2604.13919. <https://arxiv.org/abs/2604.13919>
- Bao, Y., Zajac, J., Powers, M., Raman, V., & Kutz, J. N. (2026). Cheap2Rich: A Multi-Fidelity Framework for Data Assimilation and System Identification of Multiscale Physics -- Rotating Detonation Engines. arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs). arXiv:2601.20295. <https://arxiv.org/abs/2601.20295>
- Yao, S., & Zhang, W. (2026). Super-resolution reconstruction of high-fidelity rotating detonation flow fields based on cycle-consistent generative adversarial networks. Physics of Fluids, 38(4), 041704. <https://doi.org/10.1063/5.0333031>
- Wang, X., Li, Z., Zhang, Y., Wen, H., & Wang, B. (2025). Observation-guided generative flow field reconstruction of rotating detonation combustor. Physics of Fluids, 37(11), 116110. <https://doi.org/10.1063/5.0300394>
- Karkadakattil, A. (2026). A Physics-Stabilized Self-Updating Digital Twin Framework Using Physics-Informed Neural Networks for Thermal Field Prediction. Applied Computer Systems, 31(1), 30-40. <https://doi.org/10.2478/acss-2026-0003>
- Shateri, A., Yang, Z., Yan, Y., Paul, M. C., & Xie, J. (2026). AI-Powered Surrogate Modelling for Multiscale Combustion: A Critical Review and Opportunities. arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs). arXiv:2604.25617. <https://arxiv.org/abs/2604.25617>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. arXiv preprint (Prépublication non encore évaluée par les pairs). arXiv:2509.08094. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). Theoretical and Numerical Combustion (3rd ed.). R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA.

Chapitre 9. Optimisation de la rétroconception topologique des canaux de refroidissement régénératif, des trous de refroidissement par film et de l'inducteur

Introduction

En été, si l'on saisit une casserole brûlante à la main, on se brûle. C'est pourquoi les poignées de casserole sont faites en bois ou en plastique. Elles empêchent la chaleur d'atteindre la main. Un moteur de fusée affronte le même problème. À l'intérieur du moteur, la combustion du carburant produit un gaz très chaud. Ce gaz est assez chaud pour faire fondre le métal. Pourtant, la paroi qui contient ce gaz brûlant est en métal. Protéger cette paroi est l'un des grands défis de la conception d'un moteur de fusée.

Les fusées résolvent ce problème avec ingéniosité. Le carburant qui doit entrer dans le moteur n'est pas brûlé tout de suite. On le fait d'abord circuler dans de fins canaux aménagés dans la paroi chaude. En traversant la paroi, le carburant lui retire de la chaleur. La paroi refroidit, et le carburant se réchauffe. Le carburant réchauffé entre ensuite dans la chambre de combustion et brûle. C'est une méthode qui protège la paroi tout en préchauffant le carburant. On l'appelle refroidissement régénératif (regenerative cooling). Le mot régénératif vient du fait que le carburant réchauffé n'est pas rejeté, mais réutilisé.

Le refroidissement régénératif est une méthode ancienne. Il a été utilisé dès les premières fusées. Cependant, il était difficile de concevoir librement les canaux de refroidissement. La fabrication par usinage du métal limitait la forme des canaux. Récemment, deux progrès ont levé cette contrainte. Le premier est l'impression 3D métallique. Le second est l'intelligence artificielle, qui permet de trouver rapidement de bonnes conceptions. Leur rencontre a ouvert une nouvelle étape dans la conception du refroidissement.

Ce chapitre traite des structures de gestion thermique des moteurs de fusée. Il examine les canaux de refroidissement dans la paroi et les trous de refroidissement par film, qui déposent un mince film refroidissant sur la paroi. Il traite aussi de l'inducteur (inducer), l'aube avant de la pompe qui pousse le carburant vers le haut. Ces trois structures posent toutes un problème d'équilibre entre chaleur et écoulement. Si l'on veut refroidir la paroi plus fortement, la résistance qui gêne l'écoulement augmente. Si l'on veut réduire cette résistance, le refroidissement s'affaiblit. Il est difficile de trouver ce point d'équilibre à la seule main de l'homme.

C'est ici que l'intelligence artificielle intervient. L'intelligence artificielle dont il est question dans ce chapitre n'est pas celle qui dessine des images ou écrit des textes. C'est un outil qui trouve rapidement de bonnes réponses dans un espace de conception complexe. Certaines intelligences artificielles remplacent des calculs d'écoulement lents. D'autres choisissent elles-mêmes quelle expérience mener ensuite. D'autres encore réduisent des formes complexes de canaux de refroidissement à de petits ensembles de nombres. Ce chapitre explique ces outils un par un, de manière simple.

Il faut préciser pourquoi le sujet de ce chapitre est important. Dans un moteur de fusée, la gestion thermique et la pompe sont des sources fréquentes de problèmes. Si la paroi fond ou si la pompe vibre, le moteur s'arrête. C'est pourquoi ces parties demandent beaucoup de temps et d'argent lors de la création d'un nouveau moteur. Même un léger gain de vitesse ou de sécurité dans la conception apporte donc une aide considérable. L'intelligence artificielle intervient précisément à cet endroit. Elle parcourt un vaste espace de conception plus vite qu'un humain et sélectionne de bons candidats.

Il faut poser d'emblée un point. La conception du refroidissement des moteurs de fusée est un domaine où les marges de sécurité sont importantes. Si la paroi fond une seule fois, tout le moteur se détruit. On ne prend donc pas telle quelle une réponse proposée par l'intelligence artificielle. L'intelligence artificielle sert à trouver vite de bons candidats. Le jugement final est toujours vérifié par des calculs de haute précision et par de vrais essais de combustion. Les exemples de ce chapitre doivent être lus selon ce principe.

9.1 Comment une fusée protège la paroi brûlante de sa chambre de combustion

Cette section explique comment un moteur de fusée protège une paroi brûlante. Elle examine d'abord pourquoi la chambre de combustion d'une fusée devient si chaude. Elle explique ensuite ce qu'est le refroidissement régénératif et pourquoi il était difficile à fabriquer. Enfin, elle montre comment l'impression 3D métallique transforme cette conception. Cette section sert de base à tout ce qui suit.

Dans la chambre de combustion principale d'un moteur de fusée, le carburant et l'oxygène se rencontrent et brûlent. La température du gaz ainsi produit dépasse largement 3 000 degrés. Le point de fusion de l'acier est d'environ 1 500 degrés. Le gaz de combustion est donc beaucoup plus chaud que le point de fusion de l'acier. De plus, la pression est elle aussi élevée dans la chambre de combustion. Dans un moteur très performant, la pression interne dépasse cent fois la pression atmosphérique. Un gaz brûlant et sous haute pression pousse et chauffe de l'intérieur une mince paroi métallique.

La pression élevée est elle aussi une lourde contrainte. La forte pression dans la chambre de combustion pousse la mince paroi vers l'extérieur. C'est comme lorsqu'on gonfle fortement un ballon et que son enveloppe se tend. À cela s'ajoute une grande différence de température entre l'intérieur chaud et l'extérieur froid. Le côté chaud veut se dilater, tandis que le côté froid tend à rester tel quel. Cette opposition laisse de fortes contraintes dans la paroi. La pression et la chaleur attaquent donc ensemble la paroi. C'est pourquoi celle-ci doit être à la fois mince, bien refroidie et solide.

L'endroit où la chaleur qui se déverse dans la paroi atteint son maximum est le col de la tuyère. La tuyère est une pièce en forme de trompette qui éjecte le gaz vers l'arrière pour produire la poussée. Dans cette trompette, la partie qui se resserre est appelée col de tuyère (throat). À cet endroit, le gaz accélère jusqu'à la vitesse du son. La température du gaz lui-même baisse même légèrement en traversant la tuyère. Pourtant, c'est au col de la tuyère que la chaleur entrant dans la paroi atteint son maximum. Le gaz rapide frotte violemment contre une paroi étroite. La quantité de chaleur entrant dans la paroi par unité de surface s'appelle le flux thermique (heat flux). Le flux thermique au col de la tuyère est très élevé. C'est comme si la chaleur de plusieurs dizaines de grands poêles se concentrait sur une surface étroite de la taille d'une paume.

Essayons d'imaginer l'ampleur de ce flux thermique. La chaleur produite par un brûleur de cuisinière à gaz domestique se répartit sur une surface de la taille d'une paume. Au col de la tuyère, la chaleur de plusieurs dizaines de brûleurs se concentre sur une surface comparable. Cette chaleur se déverse sur une seule mince couche de métal. La différence de température entre la face interne et la face externe de la paroi atteint plusieurs centaines de degrés. Ce grand écart déforme le métal et provoque des fissures. Si la paroi n'est pas refroidie, elle cède en quelques secondes.

Si la paroi reçoit directement cette chaleur, elle fond ou s'affaiblit. On utilise donc le refroidissement régénératif. On aménage plusieurs fins canaux dans la paroi. Le carburant circule d'abord dans ces canaux. En les traversant, il retire de la chaleur à la paroi. La paroi refroidit et le carburant se réchauffe. Le carburant réchauffé entre dans la chambre de combustion et brûle. Comme on protège la paroi tout en préchauffant le carburant, la chaleur n'est pas perdue. On ajoute parfois un refroidissement par film.

Le refroidissement par film consiste à déposer un mince film de fluide refroidissant le long de la paroi. Utilisées ensemble, les deux méthodes protègent la paroi de manière plus sûre.

Le problème est de fabriquer ces canaux de refroidissement. Autrefois, on creusait les canaux en usinant un bloc de métal. Cette méthode obligeait à garder des formes simples. Le plus souvent, on creusait côte à côte des rainures rectangulaires droites. Avec de tels canaux, il est difficile de modifier fortement la largeur ou la direction selon l'emplacement. Il est donc difficile de refroidir plus fortement le seul col de la tuyère, où la chaleur se concentre. Si l'on rétrécit excessivement les canaux, le carburant circule plus difficilement et la perte de pression augmente. Quand la perte de pression est élevée, la pompe qui injecte le carburant doit fournir plus d'effort.

L'impression 3D métallique est en train de lever cette limite. Elle consiste à étaler une fine couche de poudre métallique, puis à la faire fondre au laser pour la souder. La pièce est fabriquée couche par couche. Cette méthode permet de créer des canaux internes complexes qu'on ne peut pas obtenir par usinage. Il devient possible de concevoir des canaux qui se ramifient comme des branches d'arbre, puis se rejoignent. On peut aussi fabriquer des canaux qui suivent la courbure de la paroi. Là où la chaleur se concentre, les canaux peuvent être placés de façon serrée, et ailleurs de façon plus espacée. La liberté de conception s'est donc beaucoup élargie.

Prenons un exemple pour voir à quel point l'impression 3D change les canaux de refroidissement. Avec les anciennes méthodes, on creusait des rainures dans la paroi interne puis on posait un couvercle à l'extérieur pour former les canaux. Il fallait fabriquer plusieurs pièces et les assembler. Quand les joints sont nombreux, ces zones peuvent devenir fragiles. L'impression 3D produit en un seul bloc une paroi dans laquelle les canaux sont déjà inscrits. La diminution des joints rend la paroi plus solide. Les étapes de fabrication diminuent aussi, ce qui économise du temps et de la matière. Il devient donc plus facile de modifier plusieurs fois la conception et de la tester.

Les matériaux destinés aux canaux de refroidissement ont eux aussi progressé. La National Aeronautics and Space Administration (NASA) a développé un alliage de cuivre appelé GRCo-42. Le cuivre est un métal qui transmet bien la chaleur. GRCo-42 est un alliage obtenu en ajoutant un peu de chrome et de niobium au cuivre. Il transmet bien la chaleur tout en résistant aux hautes températures. Avec cet alliage, l'impression 3D permet de produire d'un seul tenant une chambre de combustion dotée de canaux. La National Aeronautics and Space Administration a même réalisé de vrais essais de combustion avec une chambre de combustion fabriquée dans cet alliage. Ces résultats de développement et d'essais ont été rassemblés dans des rapports publics. La National Aeronautics and Space Administration a fait progresser ce matériau et cette technologie de fabrication dans le cadre de son programme de technologies de propulsion de nouvelle génération. C'est un exemple où matériau, fabrication et conception avancent comme un tout.

Le refroidissement par film peut aussi protéger la paroi de manière plus sûre lorsqu'il est utilisé avec l'autre méthode. On perce plusieurs petits trous dans la paroi. Une petite quantité de fluide froid passe par ces trous. Le fluide qui en sort forme un mince film le long de la paroi. Ce film s'interpose entre le gaz brûlant et la paroi. Si le refroidissement régénératif refroidit la paroi depuis l'intérieur, le refroidissement par film recouvre sa surface d'une couche protectrice. Les deux méthodes se complètent. Près du col de la tuyère, où la chaleur se concentre fortement, elles sont parfois superposées.

La forme des canaux de refroidissement influe fortement sur la performance de gestion thermique. Si les canaux sont étroits et serrés, la surface en contact avec la paroi augmente. Plus cette surface de contact est grande, plus la chaleur retirée est importante. Cependant, si les canaux sont trop étroits, le carburant circule difficilement. Il faut alors plus d'effort pour l'injecter. Cette perte d'effort s'appelle la

perte de pression. Quand la perte de pression est élevée, la pompe doit tourner plus fort. Un bon canal de refroidissement refroidit bien la paroi tout en maintenant une faible perte de pression. Ces deux objectifs tirent dans des directions opposées.

Cette nouvelle méthode n'est pas facile pour autant. Une étude publiée en 2025 a analysé un cas de défaillance d'une chambre de combustion en GRCop-42 imprimée en 3D. Lors d'un essai de combustion mené en février 2021, la chambre de combustion s'est rompue au bout de 9 secondes. L'examen des causes a montré que le problème venait d'un endroit où l'impression s'était interrompue une fois pendant la fabrication. À cet endroit, beaucoup plus de pores microscopiques que d'habitude s'étaient formés. Quand les pores sont nombreux, la zone devient fragile. Ce cas montre à quel point les nouvelles méthodes de fabrication sont sensibles au contrôle qualité. En échange d'une conception plus libre, il faut surveiller la fabrication de manière plus rigoureuse.

L'élargissement de la liberté de conception apporte aussi de nouvelles difficultés. Comme la forme des canaux peut désormais être modifiée presque à l'infini, il devient au contraire plus difficile de choisir la bonne forme. La méthode qui consiste à dessiner quelques formes à la main puis à les calculer ne permet pas d'explorer tout cet vaste espace de conception. Même le calcul précis de l'écoulement et de la chaleur dans un seul canal prend beaucoup de temps à l'ordinateur. L'intelligence artificielle intervient pour explorer cet espace large de manière rapide et intelligente. Les sections suivantes examinent ces méthodes une par une.

9.2 Un modèle de substitution pour prévoir les variations brusques du carburant dans les canaux de refroidissement

Cette section explique pourquoi le comportement du carburant dans les canaux de refroidissement est difficile à prévoir. Le méthane ou le kérosène utilisés comme fluide de refroidissement changent fortement de propriétés à haute pression et à haute température. Les analyses précises qui calculent cet écoulement instable sont lentes. On utilise donc un modèle de substitution fondé sur l'intelligence artificielle pour remplacer ces calculs. Nous expliquons ici le principe et les limites de ce modèle de substitution.

Le méthane (methane) ou le RP-1 sont utilisés comme fluides de refroidissement dans les fusées. Le RP-1 est un kérosène raffiné pour les fusées. On peut le voir comme un proche parent du kérosène courant. Ces carburants subissent une pression très élevée dans les canaux de refroidissement. Lorsque la pression dépasse une certaine valeur, la frontière entre liquide et gaz devient floue. Pour prendre l'exemple de l'eau, c'est un état où la distinction disparaît entre l'eau qui bout dans une casserole et les bulles qui se forment. Cet état s'appelle l'état supercritique (supercritical). Un carburant en état supercritique présente des propriétés intermédiaires, ni vraiment liquides ni vraiment gazeuses.

Le mot supercritique peut sembler difficile. Expliquons-le simplement. Quand on fait bouillir de l'eau dans une casserole, l'eau bout en formant des bulles. Le liquide et le gaz se distinguent nettement. Mais si l'on augmente beaucoup la pression, cette ébullition disparaît. Le liquide passe progressivement vers des propriétés proches de celles d'un gaz. La frontière nette où apparaissent les bulles disparaît. Cet état sans frontière claire est l'état supercritique. Dans les canaux de refroidissement, le carburant subit une forte pression et s'écoule donc dans cet état.

Les propriétés de l'état supercritique changent brusquement avec la température. Dans une certaine plage de température, la densité chute fortement. Dans cette même plage, la chaleur spécifique augmente soudainement. La chaleur spécifique est la quantité de chaleur nécessaire pour élever la température de 1 degré. Le point où la densité et la chaleur spécifique oscillent ainsi s'appelle la ligne pseudo-critique (pseudo-critical line). Près de cette zone, les propriétés du carburant changent

rapidement, comme s'il bouillait. Il ne bout pas réellement, mais le phénomène ressemble à l'ébullition, et on l'appelle pseudo-ébullition (pseudo-boiling).

La forte hausse de la chaleur spécifique a aussi un bon côté pour le refroidissement. Quand la chaleur spécifique est grande, le carburant peut contenir beaucoup de chaleur. Une même quantité de carburant emporte davantage de chaleur. Cependant, si la densité chute fortement, le carburant se dilate et accélère. Si cet écoulement accéléré fluctue près de la paroi, la manière dont la chaleur est transportée se désorganise. Un effet favorable et un effet défavorable apparaissent donc au même endroit. C'est pourquoi il est délicat de prévoir le refroidissement dans cette plage.

La pseudo-ébullition pose un problème pour le refroidissement. La paroi refroidit seulement si le carburant lui retire bien la chaleur. Or, près de la ligne pseudo-critique, cette capacité à retirer la chaleur peut parfois chuter brusquement. La couche de carburant réchauffée près de la paroi bloque alors la chaleur comme une fine couverture. Ce phénomène s'appelle la détérioration du transfert de chaleur (heat transfer deterioration). Quand cette détérioration apparaît, la température de la paroi à cet endroit grimpe soudainement. Une étude de 2020 a établi que, lorsque l'on chauffe un carburant de fusée, la pseudo-ébullition et la détérioration du transfert de chaleur apparaissent ensemble. Une étude de 2024 a analysé la cause de cette détérioration au moyen d'un modèle fin d'écoulement à deux états. Cette détérioration du transfert de chaleur est liée au problème de cokéfaction qui sera abordé plus loin. En effet, quand la paroi devient soudainement chaude, le carburant se décompose plus vite à cet endroit.

Il existe une méthode précise pour calculer ce type d'écoulement. C'est la dynamique des fluides numérique (computational fluid dynamics, CFD). Elle divise l'écoulement en petites mailles et résout la vitesse, la pression et la température de chaque cellule selon les lois de la physique. Elle repose sur trois lois de conservation. La première est la conservation de la masse. La quantité de fluide qui entre et celle qui sort doivent correspondre. La deuxième est la conservation de la quantité de mouvement. Les forces qui poussent ou tirent le fluide doivent correspondre aux variations de vitesse. La dernière est la conservation de l'énergie. La chaleur qui entre et celle qui sort doivent correspondre aux variations de température. Résoudre ces trois lois ensemble dans toutes les cellules, c'est la CFD. La CFD est précise, mais lente. Le calcul précis d'un seul tronçon de canal de refroidissement peut prendre près d'une heure à un ordinateur. Dans la conception d'un canal de refroidissement, il faut vérifier des milliers de variantes de forme de canal et de débit. Si chaque calcul prend une heure, la conception n'aboutit pas.

C'est pourquoi on utilise un modèle de substitution (surrogate model). Un modèle de substitution est un modèle d'approximation rapide qui remplace un calcul lent. On commence par calculer à l'avance de nombreux cas avec la CFD afin de rassembler des données. On entraîne ensuite un réseau de neurones artificiels avec ces données. Le réseau de neurones reçoit en entrée la forme du canal, le débit, la pression et la température d'entrée. Il fournit alors directement la température de paroi, le flux thermique et la perte de pression. Des chercheurs du Centre allemand pour l'aéronautique et l'astronautique (DLR) ont créé ce type de modèle de substitution par réseau de neurones. Le modèle qu'ils ont réellement utilisé était un réseau de neurones ordinaire composé de quelques couches cachées. Un calcul qui prenait une heure avec la CFD était terminé par ce modèle en moins d'une seconde. Au début, il ne traitait que des canaux droits, puis il a été étendu aux canaux courbés.

La création d'un modèle de substitution suit les étapes suivantes. On définit d'abord les plages des variables de conception. Il s'agit des plages de largeur du canal, de hauteur du canal, de débit et de température d'entrée. Dans ces plages, on choisit plusieurs cas et on les calcule avec la CFD. Les résultats sont rassemblés sous forme de paires d'entrées et de sorties. Ces paires deviennent le manuel scolaire du réseau de neurones. Le réseau apprend, à partir de ces paires, les règles qui relient les entrées aux

sorties. Une fois l'apprentissage terminé, il répond rapidement même à de nouvelles entrées. Cela ressemble à une personne qui apprend un type de problème en résolvant plusieurs exemples.

Il existe d'autres moyens d'améliorer la précision d'un modèle de substitution. Ces méthodes n'ont pas été utilisées telles quelles dans l'étude du DLR mentionnée plus haut, mais elles sont couramment employées pour rendre les modèles de substitution plus robustes. L'une d'elles consiste à intégrer des connaissances physiques. Si un réseau de neurones apprend seulement à partir des données, il peut produire des réponses qui violent les lois de la physique. On insère donc dans les règles d'apprentissage les lois selon lesquelles la masse, la quantité de mouvement et l'énergie se conservent. Si le réseau de neurones enfreint ces lois, on lui impose une pénalité. Un réseau ainsi construit s'appelle un réseau de neurones informé par la physique (physics-informed neural network, PINN). On peut aussi y ajouter une structure appelée connexion résiduelle (residual connection). Une connexion résiduelle est un passage qui envoie directement l'information d'une couche précédente vers une couche ultérieure. Cette structure aide à entraîner de manière stable les réseaux de neurones profonds. Appliquer ces techniques à un modèle de substitution de canal de refroidissement est l'orientation proposée dans ce livre.

Il faut aussi intégrer avec précision les propriétés des fluides supercritiques. Le National Institute of Standards and Technology (NIST) des États-Unis publie, pour de nombreux fluides, des valeurs telles que la densité et la chaleur spécifique selon la température et la pression. Pour un fluide pur composé d'une seule substance, comme le méthane, on peut relier et utiliser directement ces valeurs de référence. C'est nécessaire pour ne pas manquer les variations brusques près de la ligne pseudo-critique. Mais le cas du RP-1, qui est un kérosène, est différent. Le RP-1 est un mélange de plusieurs hydrocarbures, et sa composition varie légèrement à chaque raffinage. On ne peut donc pas utiliser telle quelle une table de fluide pur. Il faut créer séparément un modèle de mélange de substitution qui reproduit ses propriétés. Si les valeurs de propriétés sont imprécises, le modèle de substitution produira lui aussi une température de paroi erronée. Les propriétés d'un fluide supercritique sont sensibles, et ces données de base sont donc importantes.

Des recherches portent aussi sur le bon choix du réfrigérant lui-même. Une étude de 2026 a conçu un carburant de substitution qui imite le kérosène pour fusées. Elle a recherché, au moyen d'un algorithme génétique, la combinaison qui reproduit bien les propriétés à l'état supercritique. Un algorithme génétique est une méthode qui améliore la réponse en sélectionnant et en croisant de bonnes combinaisons. Plus le modèle de carburant utilisé dans les calculs de refroidissement est précis, plus la prédiction est exacte. L'intelligence artificielle aide aussi à choisir les combinaisons de carburants.

Il faut être prudent lorsque l'on manipule des modèles de substitution. Il ne faut pas s'appuyer sur des noms de modèles utilisés comme des marques, ni sur des chiffres de performance non vérifiés. C'est pourquoi ce livre explique le sujet au moyen du concept général de modèle de substitution CFD, plutôt qu'avec le nom d'un modèle précis. Si le principe est le même, l'enseignement reste le même, quel que soit le nom.

Ce modèle de substitution a aussi été utilisé pour un moteur réel. Le Centre allemand pour l'aéronautique et l'astronautique a étudié par cette méthode les performances des canaux de refroidissement d'un moteur développé en interne. Il a amélioré la prédiction de la température de paroi et l'a intégrée à la conception. Comme le calcul devenait plus rapide, plusieurs conceptions de canaux pouvaient être comparées en peu de temps. La conception a ainsi été explorée largement, sans rester prisonnière de calculs précis mais lents.

Un modèle de substitution a des limites claires. Il n'est fiable que dans la plage qu'il a apprise. Il peut se tromper fortement face à une forme de canal inconnue ou à des conditions de fonctionnement qu'il n'a

pas vues pendant l'apprentissage. Ce risque est encore plus grand avec les fluides supercritiques, car leurs propriétés sont sensibles. Il ne faut donc pas fixer la conception finale avec le seul modèle de substitution. Le modèle de substitution sert à sélectionner rapidement de bons candidats. On choisit ensuite seulement ces candidats et on les vérifie de nouveau avec une CFD précise et des essais réels de combustion. Un modèle de substitution n'est pas un outil qui donne la réponse à la place du concepteur. C'est un outil qui filtre rapidement les candidats.

9.3 L'apprentissage actif pour trouver des trous de refroidissement par film avec peu de calculs

Voyons d'abord pourquoi le refroidissement par film est nécessaire. Le refroidissement régénératif refroidit la paroi par l'intérieur. Cependant, aux endroits où la chaleur se concentre trop, le refroidissement par l'intérieur de la paroi peut ne pas suffire. En effet, la surface même de la paroi touche directement les gaz chauds et se réchauffe. On ajoute donc une fine couche protectrice sur la surface. C'est le refroidissement par film. Le refroidissement régénératif et le refroidissement par film protègent ensemble la paroi, de l'intérieur et de l'extérieur.

Le refroidissement par film (film cooling) est une méthode qui crée un mince film de fluide froid juste devant une paroi chaude. On perce plusieurs petits trous dans la paroi. Par ces trous, on injecte obliquement un fluide froid. Le fluide injecté s'étale finement le long de la paroi et la couvre comme une couverture. Ce film sépare les gaz chauds de la paroi. Comme la paroi ne touche pas directement les gaz chauds, elle se réchauffe moins. Cela ressemble au flux d'air antibuée qui remonte depuis le bas d'un pare-brise de voiture.

Les performances du refroidissement par film dépendent de plusieurs valeurs. L'une d'elles est l'intensité du fluide injecté. On l'appelle le rapport de soufflage (blowing ratio). C'est la valeur obtenue en divisant l'intensité de l'écoulement du fluide froid par celle de l'écoulement des gaz chauds. L'angle d'inclinaison des trous, l'espacement entre les trous et la forme des trous déterminent aussi les performances. Une légère variation de ces valeurs peut modifier fortement les performances du film. Le fait que le film adhère bien à la paroi ou qu'il se soulève et se détache dépend de ces valeurs.

Un rapport de soufflage trop élevé pose aussi problème. Si le fluide est injecté trop fortement, le film se soulève de la paroi. Le jet injecté ne couvre plus la paroi et monte vers le haut. La paroi touche alors de nouveau les gaz chauds. Si le rapport de soufflage est trop faible, le film est mince et disparaît vite. Il existe donc aussi une valeur appropriée pour l'intensité. Il faut ajuster ensemble l'angle, l'espacement et l'intensité pour obtenir un bon film.

L'une des raisons du détachement du film est le tourbillon. Quand le fluide est injecté par un trou, une paire de tourbillons tournant vers la gauche et vers la droite se forme. Ces tourbillons attirent les gaz chauds vers la paroi. Le film de refroidissement créé avec effort se soulève alors et se détache. La paroi est de nouveau exposée aux gaz chauds. Une bonne conception des trous peut affaiblir ces tourbillons. C'est pourquoi on utilise aujourd'hui des trous en éventail, dont l'extrémité s'ouvre comme un éventail. Le fluide injecté s'étale largement sur les côtés et couvre uniformément la paroi.

Les trous en éventail étalent le film de refroidissement plus largement que les trous circulaires. Un trou circulaire injecte le fluide en un seul jet. Ce jet se soulève facilement de la paroi. Un trou en éventail élargit son extrémité sur les côtés et injecte le fluide plus largement. Le fluide ainsi étalé adhère mieux à la paroi. Quand la surface d'adhérence augmente, la paroi est couverte plus uniformément. C'est pourquoi les turbines à gaz et les moteurs aéronautiques utilisent souvent des trous en éventail. Le degré d'ouverture du trou et son angle de perçage déterminent les performances.

Pour trouver une bonne forme de trou, il faut calculer l'écoulement. Pour observer finement les tourbillons, une analyse précise est nécessaire. Cette analyse s'appelle la simulation des grandes structures turbulentes (large eddy simulation, LES). La LES est une méthode qui calcule directement les grands tourbillons dans l'écoulement. Elle est précise, mais très coûteuse en calcul. Résoudre une seule condition prend déjà beaucoup de temps. Il est difficile de calculer des centaines de cas en faisant varier l'angle, l'espacement et l'intensité des trous. Comme le budget de calcul est limité, on ne peut pas calculer n'importe quelle condition au hasard.

C'est ici que le processus gaussien (Gaussian process) aide. Un processus gaussien est une méthode qui prédit avec peu de données. Sa particularité est qu'il ne fournit pas seulement une valeur prédite. Il indique aussi le degré d'incertitude de la prédiction. Là où les données sont nombreuses, il prédit avec confiance. Là où il n'y a pas de données, il signale l'incertitude. C'est comme lorsqu'on dessine une carte : les routes déjà parcourues sont détaillées, tandis que les routes inconnues restent floues. Cette méthode relie les valeurs entre elles au moyen d'une règle de régularité appelée Matérn.

Examinons aussi la manière dont le processus gaussien relie les valeurs. Des conditions proches devraient donner des performances proches. Si l'on modifie très légèrement l'angle d'un trou, la performance de refroidissement ne change elle aussi que légèrement. Le noyau exprime cette idée sous forme mathématique. Le noyau est une mesure de la proximité entre deux conditions. Si elles sont proches, on considère que les valeurs sont similaires. Si elles sont éloignées, on considère que les valeurs peuvent être différentes. Avec cette mesure, on relie de manière lisse les conditions déjà calculées. On estime aussi les valeurs des conditions qui n'ont pas été calculées.

L'apprentissage actif (active learning) ajoute à cela un choix intelligent. Il choisit lui-même quelle condition calculer ensuite avec la LES. Lors du choix, il observe deux éléments à la fois. Le premier est la zone qui semble offrir de bonnes performances. Le second est la zone incertaine. En explorant une zone qui semble performante, on se rapproche d'une meilleure réponse. En explorant une zone incertaine, on rend plus nette une partie floue de la carte. La règle qui équilibre ces deux objectifs s'appelle une fonction d'acquisition (acquisition function). Une règle souvent utilisée mesure l'amélioration attendue par rapport à la situation actuelle.

L'avantage de cette méthode est qu'elle fixe intelligemment l'ordre des calculs. Elle ne calcule pas n'importe quelles conditions au hasard. Elle choisit d'abord les conditions qui apportent beaucoup à apprendre. Ainsi, même avec peu de calculs LES, on se rapproche d'une bonne forme de trou. On économise des calculs coûteux tout en resserrant rapidement la conception. Cette méthode s'est d'abord imposée dans la conception des trous de refroidissement des aubes de turbines à gaz. Les recherches validées jusqu'à présent portent surtout sur les turbines à gaz. Une optimisation bayésienne à objectifs multiples a amélioré à la fois les performances de refroidissement et l'uniformité. Une étude a indiqué qu'à perte de pression égale, les performances de refroidissement étaient supérieures à celles d'une conception antérieure.

On utilise aussi l'intelligence artificielle pour le calcul de l'écoulement lui-même. Des recherches menées autour de 2024 ont créé des réseaux de neurones capables de prédire l'efficacité du refroidissement par film. Certaines études ont prédit cette efficacité même lorsque la courbure de la paroi et l'angle des trous variaient. Ces modèles de prédiction fournissent des valeurs proches de celles des calculs précis, mais beaucoup plus rapidement. Ils aident à comparer rapidement plusieurs formes de trous au début de la conception. On peut aussi associer les deux méthodes : le processus gaussien choisit le prochain calcul, et le réseau de neurones l'estime rapidement.

Le refroidissement par film des chambres de combustion de fusée emprunte la même méthode. Cependant, les conditions des fusées sont beaucoup plus sévères. Les gaz sont plus chauds et plus

rapides. Il ne faut donc pas transférer tels quels à une fusée les paramètres optimaux de trous obtenus pour un moteur aéronautique. Si la taille des trous, la vitesse du fluide, la courbure de la paroi ou le type de carburant changent, le résultat change. Une bonne méthode de conception peut être transférée, mais les valeurs optimales concrètes doivent être recherchées de nouveau à chaque fois. L'intelligence artificielle est un outil qui accélère cette nouvelle recherche. La forme finale doit être vérifiée de nouveau dans les conditions propres à la fusée.

9.4 Concevoir la forme des canaux de refroidissement avec l'intelligence artificielle

La conception des canaux de refroidissement est un problème où le solide et le fluide sont imbriqués. La chaleur des gaz chauds entre d'abord dans la paroi métallique. Cette chaleur se propage ensuite dans le métal vers le canal de refroidissement. Dans le canal, le carburant en écoulement retire cette chaleur. La conduction thermique dans le métal et la convection par laquelle le fluide emporte la chaleur se rencontrent au même endroit. Le calcul qui résout ces deux phénomènes ensemble s'appelle le transfert thermique conjugué (conjugate heat transfer, CHT). Dans les canaux de refroidissement des fusées, le solide et le fluide sont fortement liés, si bien que ce calcul est important.

On le comprend facilement en pensant à une fenêtre en hiver. L'intérieur de la pièce est chaud et l'extérieur est froid. La température de la face intérieure et celle de la face extérieure de la vitre sont différentes. La chaleur traverse le verre, et l'air froid à l'extérieur de la vitre retire cette chaleur. La conduction thermique dans le verre et la convection de l'air extérieur se rencontrent à la surface de la fenêtre. La paroi d'une fusée fonctionne de la même manière. La chaleur entre du côté des gaz chauds, et le carburant retire la chaleur du côté du canal de refroidissement. Les deux flux se rencontrent dans la paroi et s'équilibrent.

Le point essentiel du transfert thermique conjugué est la condition imposée à la frontière. Pensons à la surface où le métal et le carburant se touchent. La chaleur qui sort du métal vers cette surface doit être égale à la chaleur que le carburant reçoit à cette surface. En effet, la chaleur ne disparaît pas et ne naît pas de rien. Il faut calculer la température de la paroi en respectant cette condition. Ce calcul indique où la température de la paroi atteint son maximum et comment refroidir cet endroit.

Le calcul du transfert thermique conjugué demande beaucoup de calculs. C'est parce qu'il faut résoudre en même temps la conduction thermique dans le solide et la convection dans le fluide. De plus, le fluide est turbulent. La turbulence est un écoulement où se mêlent des tourbillons grands et petits. Plus on résout cet écoulement finement, plus le temps de calcul augmente. Même pour résoudre précisément un seul canal de refroidissement, l'ordinateur met longtemps. S'il existe des milliers de conceptions candidates, il faut répéter ce calcul des milliers de fois. Il faut donc une méthode pour réduire les calculs.

Il faut maintenant concevoir la forme du canal. On utilise ici l'optimisation topologique (topology optimization). L'optimisation topologique est une méthode qui cherche, dans un espace donné, quelles zones remplir de matière et quelles zones laisser vides. Pour un canal de refroidissement, le problème consiste à décider quelles zones garder en métal et quelles zones laisser comme canaux vides où circule le carburant. L'humain ne fixe pas d'avance la forme du canal. Si l'on fixe seulement l'objectif, l'optimisation dessine elle-même la forme du canal. L'objectif est de réduire la température maximale de la paroi. En même temps, il faut éviter que la perte de pression devienne trop grande. Des recherches sur la conception de canaux de refroidissement par optimisation topologique existent déjà. La méthode à base de densité, qui observe ensemble l'écoulement et la chaleur tout en modifiant progressivement la répartition de la matière, en est un exemple représentatif.

Ce problème comporte trop de variables. L'espace est divisé en centaines de milliers de petites cellules. Pour chaque cellule, il faut décider s'il s'agit de métal ou d'un espace vide. Le nombre de possibilités est incalculable. Si l'on fouille directement cet immense espace, il faut un temps sans fin. Il faut donc une méthode pour réduire le problème. C'est là qu'intervient l'autoencodeur convolutionnel (convolutional autoencoder, CAE).

Un autoencodeur est un réseau de neurones qui réduit des données complexes, puis les reconstruit. Sa première partie compresse la forme du canal en un petit groupe de nombres. Ce groupe de nombres s'appelle un vecteur latent (latent vector). Sa seconde partie reconstruit ensuite la forme du canal à partir de ce vecteur latent. S'il est bien entraîné, un petit nombre de valeurs suffit à contenir la forme essentielle du canal. Cela ressemble à la compression d'une photo dans un petit fichier que l'on rouvre ensuite. La convolution est une méthode de calcul qui examine ensemble les parties voisines d'une image. Elle convient bien aux données réparties dans l'espace, comme la forme d'un canal.

Les cas de validation qui appliquent directement aux canaux de refroidissement des fusées cette méthode de réduction de l'espace de conception par autoencodeur sont encore rares. Ce livre propose cette orientation. L'optimisation topologique elle-même est une méthode validée, et l'idée est d'y ajouter un autoencodeur pour accélérer la recherche.

Cette compression rend la conception plus facile. L'optimiseur ne traite pas directement des centaines de milliers de cellules. Il modifie plutôt un petit vecteur latent dans un sens ou dans l'autre. Si l'on modifie légèrement le vecteur latent, la seconde partie produit une forme de canal plausible. On réduit ainsi un vaste espace de conception à un petit espace à explorer. L'optimiseur cherche un bon vecteur latent dans ce petit espace. Le canal produit par ce vecteur devient un bon canal de refroidissement.

L'usage d'un vecteur latent présente un autre avantage. Les formes de canaux générées sont en général plausibles. C'est parce que l'autoencodeur a appris à partir de données de canaux réels. Il crée de nouvelles formes à l'intérieur du cadre des formes apprises pendant l'entraînement. Il produit donc moins de formes étranges qui n'ont pas de sens physique. Cela réduit les efforts inutiles qui apparaissent lorsque l'on fouille au hasard un vaste espace. Comme la recherche se fait seulement dans un espace plus étroit et plus dense, elle est rapide. Toutefois, le seul fait de ressembler aux données d'apprentissage ne garantit pas un bon canal. Il faut vérifier séparément si le canal est bien continu du début à la fin, si la paroi n'est pas trop mince, et si la résistance à l'écoulement et la résistance structurelle sont acceptables. Ces conditions doivent être ajoutées comme règles dans l'optimisation.

Il faut aussi ajouter la condition selon laquelle la forme doit être fabriquable. L'impression 3D fabrique les pièces en les empilant vers le haut. Les parties trop couchées sur le côté, sans support inférieur, s'affaissent pendant la fabrication. On impose donc une contrainte pour que les parois du canal ne soient pas couchées au-delà d'un certain angle. Si cette contrainte est respectée, le canal peut tenir par lui-même sans support. Si l'on ajoute aussi ces conditions dans l'optimisation, la conception obtenue peut être imprimée directement. Cela évite qu'une bonne conception dans le calcul devienne une conception impossible à fabriquer réellement.

Des recherches visent aussi à remplacer le calcul du transfert thermique conjugué par l'intelligence artificielle. Une étude de 2024 a construit un réseau de neurones composé d'encodeurs et de décodeurs empilés en couches. Ce réseau recevait la forme d'un composant en entrée et dessinait directement la distribution de température. Il remplaçait donc le calcul précis du transfert thermique conjugué, qu'il faudrait relancer à chaque fois, par une prédiction rapide. Une autre étude de 2025 a traité séparément le solide et le fluide avec deux réseaux de neurones différents. Elle a entraîné les deux réseaux pour qu'ils ajustent leurs valeurs l'un à l'autre à la frontière. Cela permet de mieux saisir les variations rapides de température à la surface où la paroi et le carburant se touchent. Ces études ont traité des

problèmes généraux de transfert thermique conjugué. Si l'on utilise ce type de modèle prédictif rapide dans l'optimisation topologique des canaux de refroidissement des fusées, la recherche de conception s'accélère. Cette combinaison est une direction à affiner à l'avenir.

Les canaux dessinés par l'optimisation topologique ont des formes difficiles à tracer à la main. Des branches se divisent puis se rejoignent, et les canaux se courbent le long de la surface de la paroi. Des ailettes obliques peuvent aussi s'aligner étroitement, comme des arêtes de poisson. Ces formes répartissent la chaleur de manière plus uniforme et guident l'écoulement en douceur. Même si elles ne paraissent pas bonnes à l'œil humain, elles peuvent être bonnes selon le calcul. L'intelligence artificielle aide à trouver ces formes inattendues.

Il existe un exemple industriel de cette méthode. Une entreprise a appliqué cette technologie d'optimisation topologique aux canaux de refroidissement des fusées. Elle a annoncé avoir ainsi fortement réduit la température maximale de la paroi. Des recherches récentes ont aussi proposé d'utiliser des surfaces régulières dans les canaux de refroidissement. Ces surfaces s'appellent des surfaces minimales triplement périodiques (triply periodic minimal surface, TPMS). Une TPMS est une structure où des surfaces courbes et lisses, semblables à des membranes de bulles de savon, se répètent régulièrement dans l'espace. Cette structure plie une grande surface dans un espace étroit. Plus la surface est grande, plus les échanges de chaleur sont importants. Une étude de 2025 a créé des canaux TPMS qui enveloppent la surface courbe de la paroi. Elle a rapporté une amélioration à la fois des performances de refroidissement et de l'uniformité de la température autour de la paroi. En 2026, une étude a aussi proposé des canaux de refroidissement remplissant l'intérieur d'un réseau pour accroître le transfert de chaleur. Ces canaux à surfaces courbes et ces canaux en réseau ne peuvent être fabriqués qu'avec l'impression 3D. Toutefois, les cas industriels ne suivent pas les mêmes méthodes de validation que les articles scientifiques. Dans ce livre, ils sont seulement traités comme des exemples de référence montrant une tendance industrielle. Les performances finales ne doivent servir de base de conception que lorsqu'il existe des données d'essai indépendantes.

9.5 Optimisation multiobjectif pour réduire le cokage par dépôt de suie

Le RP-1, un carburant de la famille du kérosène, présente une faiblesse lorsqu'il sert de fluide de refroidissement. Lorsqu'il passe près d'une paroi chaude, le carburant se décompose sous l'effet de la chaleur. On appelle cela la pyrolyse. Parmi les fragments produits, le carbone adhère à la paroi et y brûle en dépôt. C'est comme l'huile qui noircit et colle dans une poêle lorsqu'on la laisse trop longtemps. Cette croûte de carbone collée à la paroi s'appelle le cokage (coking). Le cokage s'accumule lentement à l'intérieur des canaux de refroidissement.

La décomposition du carburant par la chaleur s'appelle la pyrolyse. C'est le processus par lequel de grosses molécules reçoivent de la chaleur et se divisent en fragments plus petits. Plus la température est élevée, plus cette division est rapide. Parmi les fragments produits, ceux qui sont riches en carbone s'agglomèrent entre eux. Le carbone aggloméré colle à la paroi et forme une croûte. Ainsi, plus la paroi est chaude, plus le cokage se forme facilement. Le cokage dépend à la fois de la température de la paroi, du type de carburant et du temps de passage.

Le cokage apparaît facilement au col de la tuyère. Le col de la tuyère est l'endroit où le flux thermique est maximal. Comme la paroi y est très chaude, la décomposition du carburant y est active. Le cokage provoque deux problèmes. Le premier est que la croûte de carbone transmet mal la chaleur. La croûte bloque l'espace entre la paroi et le carburant, ce qui rend la paroi plus chaude. Le second est que la croûte rétrécit le canal. Quand le canal devient plus étroit, le passage du carburant devient plus difficile et la perte de pression augmente. Quand ces deux problèmes se combinent, la paroi devient dangereuse.

Dans les moteurs réutilisables, le cokage s'accumule au fil des essais et devient donc un problème plus grave.

Il existe une règle dans la relation entre la température et le cokage. Même une faible hausse de température accélère fortement les réactions chimiques. Quand la température de la paroi augmente, la décomposition du carburant s'accélère nettement. Le cokage s'accumule donc d'autant plus vite. Ainsi, il suffit de réduire un peu la température de la paroi pour réduire fortement le cokage. Un bon refroidissement refroidit la paroi, et une paroi plus froide réduit le cokage. Le refroidissement et la suppression du cokage sont liés de cette manière.

La dégradation du transfert de chaleur décrite dans la section précédente interagit avec ce cokage. Lorsque le carburant supercritique traverse la ligne pseudo-critique, le transfert de chaleur près de la paroi se détériore brusquement. La température de la paroi augmente alors fortement à cet endroit. Quand la paroi devient chaude, le carburant se décompose plus vite et le cokage s'accumule plus rapidement. Le cokage accumulé bloque encore plus la chaleur et rend la paroi encore plus chaude. Si cette rétroaction se poursuit, la paroi peut céder brusquement. La dégradation du transfert de chaleur et le cokage se renforcent donc l'un l'autre.

Pour réduire le cokage, il faut abaisser la température de la paroi. Si la paroi est moins chaude, le carburant se décompose moins. Il faut aussi examiner l'écoulement près de la paroi. Si le carburant rase rapidement la paroi, il y a moins de temps pour que la croûte se fixe. La force avec laquelle le fluide frotte la paroi près de celle-ci s'appelle la contrainte de cisaillement pariétal. Cette force doit être assez élevée pour que la croûte se dépose moins. La conception visant à limiter le cokage est donc un problème où il faut régler ensemble la température de la paroi et le cisaillement pariétal.

Le problème est qu'il existe plusieurs objectifs et qu'ils se heurtent entre eux. Il y a l'objectif de réduire la température de la paroi. Il y a l'objectif de réduire la perte de pression. Il y a l'objectif de limiter le cokage. Ces objectifs ne s'améliorent pas tous ensemble. Si l'on rétrécit le canal pour accélérer l'écoulement, la paroi refroidit, mais la perte de pression augmente. Si l'on élargit le canal pour ralentir l'écoulement, la perte de pression diminue, mais le refroidissement s'affaiblit. Gagner d'un côté signifie perdre de l'autre. Un problème où plusieurs objectifs s'opposent ainsi s'appelle une optimisation multiobjectif.

Ce type de compromis est familier dans la vie quotidienne. Pensons au choix d'un sac. Il est difficile d'obtenir à la fois un sac léger, solide et bon marché. S'il est léger, il est souvent fragile, et s'il est solide, il est lourd ou cher. Nous choisissons donc un point d'équilibre adapté à l'usage. La conception des canaux de refroidissement fonctionne de la même manière. On ne peut pas rendre maximaux à la fois le refroidissement, la réduction de la perte de pression et la limitation du cokage. Lorsque l'on gagne d'un côté, on cède un peu de l'autre.

La réponse d'une optimisation multiobjectif n'est pas unique. Elle donne plutôt un ensemble de bonnes réponses qui se compensent entre elles. Cet ensemble s'appelle le front de Pareto (Pareto front). Les réponses situées sur le front de Pareto ont chacune un point d'équilibre différent. Certaines réponses privilégient le refroidissement, tandis que d'autres privilégient la perte de pression. Le concepteur observe cet ensemble et choisit le point d'équilibre adapté au moteur. Au lieu de fixer d'avance une seule réponse, l'humain étale de bons candidats et choisit parmi eux.

C'est ici qu'intervient l'optimisation bayésienne (Bayesian optimization). C'est une méthode qui étend à plusieurs objectifs le processus gaussien et l'apprentissage actif décrits dans la section précédente. Elle commence par dessiner une carte approximative des objectifs avec peu de calculs. Elle observe cette carte et choisit ensuite quelles conditions calculer. Elle calcule d'abord les conditions qui aident le plus à élargir le front de Pareto. Elle trouve ainsi de bons points d'équilibre tout en réduisant le nombre

d'analyses de combustion coûteuses. Si l'on ajoute le cokage aux objectifs, on obtient une conception qui met en balance la température de la paroi, le cisaillement et la perte de pression. Toutefois, il est encore difficile de trouver des cas validés où le cokage a été utilisé comme objectif d'optimisation dans les canaux de refroidissement des fusées. La physique de la pyrolyse et du dépôt étant bien connue, ce livre propose d'intégrer cette physique aux objectifs de conception.

Le cokage devient un problème plus important dans les moteurs réutilisables. Cela ne signifie pas qu'un moteur utilisé une seule fois puis abandonné échappe au cokage. Même pendant une seule combustion, si le dépôt rétrécit le passage ou dégrade le transfert de chaleur, la paroi peut être endommagée. Que le moteur soit réutilisé ou non, ce qui compte est la vitesse à laquelle le dépôt s'accumule pendant la durée de la mission. Dans un moteur réutilisé plusieurs fois, un problème d'accumulation s'ajoute à cela. À mesure que les essais de combustion se répètent, le dépôt s'accumule peu à peu. Le dépôt accumulé dégrade progressivement le refroidissement. C'est pourquoi un moteur réutilisable doit être conçu dès le départ pour limiter le cokage. L'optimisation par intelligence artificielle aide à concevoir en tenant compte de cette évolution sur une longue durée.

On peut aussi relier cette méthode aux données d'essais de fusées. Le banc d'essai de Lampoldshausen du Centre allemand pour l'aéronautique et l'astronautique est un lieu où l'on fait réellement fonctionner des moteurs-fusées pour obtenir des données. Avec ce type de données d'essai, le modèle de base de l'optimisation devient plus précis. Les données comblent les comportements réels de cokage que le calcul seul peut manquer. C'est une démarche où l'on affine la conception en allant et venant entre l'essai et le calcul.

Des canaux à fort rapport d'aspect sont aussi utilisés pour limiter le cokage. Le rapport d'aspect est la valeur obtenue en divisant la hauteur du canal par sa largeur. Un canal étroit et profond a un rapport d'aspect élevé. Ce type de canal présente une grande surface de contact avec la paroi et évacue bien la chaleur. Comme la paroi se refroidit davantage, la décomposition du carburant diminue. On utilise aussi des canaux qui s'enroulent en spirale. Quand on fait tourbillonner l'écoulement, il frotte plus fortement près de la paroi. Cependant, ces canaux peuvent augmenter les pertes de pression, et il faut donc les évaluer en même temps.

Cette section comporte elle aussi un point de prudence. Les chiffres de réduction du cokage ne sont fiables que lorsqu'ils sont étayés par des essais réels. C'est pourquoi ce livre se concentre sur le principe de la méthode plutôt que sur des valeurs précises. Dans un moteur réel, la composition du carburant, la rugosité de surface, l'action catalytique de la paroi et la durée de fonctionnement influent toutes sur le cokage. Les variables sont nombreuses, ce qui rend la prévision difficile. Les valeurs prévues de cokage qui ne sont pas étayées par des essais doivent être traitées avec prudence. L'intelligence artificielle sert à réduire le nombre de bons candidats, et la décision finale se fait par un essai de combustion réel.

9.6 Apprentissage automatique renforcé par la physique pour concevoir l'inducteur à aubes avant de pompe

Un moteur-fusée doit pousser fortement le carburant et l'oxygène vers la chambre de combustion. C'est le rôle de la turbopompe (turbopump). Une turbopompe est une pompe qui tourne très vite. Mais les aubes principales de la pompe ne fonctionnent pas correctement si la pression d'entrée est basse. On place donc une aube auxiliaire devant les aubes principales. Cette aube auxiliaire est l'inducteur. L'inducteur attire d'abord doucement le liquide et augmente légèrement la pression. Grâce à cela, les aubes principales situées derrière tournent de façon stable. C'est une pièce qui joue le rôle de gardien de la pompe.

Voyons d'abord pourquoi une turbopompe est nécessaire. La pression dans la chambre de combustion est très élevée. Pour y pousser le carburant, il faut une pression encore plus élevée. Un carburant à basse pression ne peut pas entrer dans une chambre de combustion à haute pression. C'est comme l'eau, qui ne s'écoule pas spontanément d'un point bas vers un point haut. On augmente donc fortement la pression du carburant au moyen d'une pompe. La turbopompe d'une fusée accomplit cette tâche grâce à une rotation très rapide. La turbopompe d'un grand moteur tourne des dizaines de milliers de fois par minute.

L'inducteur est plus délicat lorsqu'il traite de l'hydrogène liquide. L'hydrogène liquide (liquid hydrogen) est un liquide très froid, autour de moins 253 degrés. Sa densité est faible et il est léger. Quand l'inducteur tourne vite, des zones où la pression chute brusquement apparaissent à l'avant des aubes. Un liquide bout lorsque la pression devient assez basse. Même sans chaleur, des bulles se forment si la pression seule est basse. C'est le même principe que l'eau qui bout facilement à basse température en montagne. Ce phénomène, où des bulles se forment dans un liquide en écoulement, s'appelle la cavitation (cavitation).

La cavitation met l'inducteur à rude épreuve. Les bulles formées s'écrasent en un instant lorsqu'elles s'écoulent vers une zone où la pression redevient élevée. Quand une bulle s'effondre, une onde de pression très forte apparaît. Cette onde ronge peu à peu la surface des aubes. À la longue, les aubes se creusent. La cavitation réduit aussi les performances de la pompe. Lorsque les bulles deviennent nombreuses, la pression que la pompe élève s'effondre soudainement. Si ce point d'effondrement est dépassé, tout le moteur devient dangereux. L'inducteur doit donc être conçu pour retarder l'apparition de la cavitation.

Une propriété apporte une aide. Dans les liquides cryogéniques, il existe un effet d'inhibition thermodynamique. Pour qu'une bulle se forme, elle doit retirer de la chaleur latente de vaporisation au liquide environnant. La température autour de la bulle baisse alors légèrement. Quand la température baisse, la pression d'ébullition locale baisse elle aussi. La bulle a donc plus de mal à grandir. En quelque sorte, la bulle freine elle-même sa propre croissance. Dans l'hydrogène liquide, cet effet d'inhibition est important, si bien que la cavitation est légèrement retardée. La conception de l'inducteur doit intégrer cet effet dans le calcul. Les règles physiques de l'apprentissage renforcé par la physique doivent aussi l'inclure. Sinon, on juge à tort les performances de cavitation plus mauvaises qu'elles ne le sont réellement.

Concevoir un inducteur consiste à définir la forme des aubes. L'angle des aubes, leur courbure et le degré de balayage vers l'avant déterminent les performances. Les objectifs sont au nombre de trois. Il faut bien augmenter la pression. Il faut obtenir un bon rendement. Il faut retarder la cavitation. Ces objectifs entrent aussi en conflit. Si l'on redresse les aubes pour augmenter fortement la pression, la cavitation apparaît facilement. Si l'on couche les aubes pour éviter la cavitation, la pression augmente moins. C'est le même problème d'équilibre que dans les sections précédentes.

La capacité d'un inducteur à augmenter la pression possède une limite. Supposons que l'on fasse tourner la pompe en abaissant peu à peu la pression d'entrée. Jusqu'à un certain point, la pompe résiste bien. Mais si la pression d'entrée descend sous une certaine valeur, la cavitation devient sévère. À ce moment, la pression élevée par la pompe s'effondre soudainement. Ce point d'effondrement s'appelle le point de coupure de hauteur manométrique. La hauteur manométrique est la mesure de la force par laquelle la pompe pousse le fluide vers le haut. Dans une pompe réelle, on distingue le point où les bulles apparaissent pour la première fois et le point où la hauteur manométrique s'effondre complètement. On prend parfois comme référence le point où la hauteur manométrique baisse de 3 pour cent entre les deux. Cette valeur s'appelle NPSH3. La cavitation initiale, le NPSH3 et l'effondrement

complet de la hauteur manométrique sont des points différents. Un bon inducteur retarde ce point de coupure jusqu'à une pression d'entrée plus basse. Il tourne donc de manière stable même à basse pression. Cette propriété est aussi liée à la masse de la fusée. Si l'inducteur supporte bien une basse pression, on peut maintenir la pression du réservoir de carburant à un niveau plus faible. Quand la pression du réservoir est basse, les parois du réservoir peuvent être plus minces. Si le réservoir s'allège, toute la fusée s'allège. La conception d'une seule petite aube peut ainsi modifier la masse de la fusée.

On utilise ici l'apprentissage automatique renforcé par la physique (physics-enhanced machine learning). Un apprentissage automatique fondé uniquement sur les données peut violer les lois physiques. On intègre donc dans l'apprentissage les lois de conservation des fluides et la physique de la cavitation. Le champ d'écoulement est estimé rapidement par un opérateur neuronal de Fourier (Fourier neural operator, FNO). Cet opérateur est un réseau neuronal qui prédit rapidement l'ensemble de l'écoulement en une seule fois. Si un réseau neuronal ordinaire prédit la valeur en un point, cet opérateur prédit tout le champ d'écoulement d'un bloc. Comme il traite l'écoulement en le divisant en ondes de différentes tailles, il saisit à la fois les grands mouvements et les petites ondulations. Il convient donc bien pour estimer rapidement des valeurs largement réparties dans l'espace, comme un champ d'écoulement. En modifiant la forme des aubes, on peut examiner rapidement l'écoulement et le risque de cavitation. C'est beaucoup plus rapide que de lancer un calcul précis à chaque fois. L'opérateur neuronal de Fourier lui-même est une méthode validée dans plusieurs problèmes d'écoulement. L'utiliser pour la conception inverse d'un inducteur à hydrogène liquide est l'orientation proposée par ce livre.

Dans la conception d'un inducteur, l'intelligence artificielle examine plusieurs types d'informations. Elle observe la répartition de la pression à l'avant des aubes. Elle voit où la pression baisse fortement et dans quelle mesure la cavitation y grandira. Elle observe aussi dans quelle mesure la pression se rétablit derrière les aubes. Elle rassemble ces informations pour trouver une bonne forme d'aube. Une forme d'aube balayée vers l'avant aide à retarder la cavitation. L'intelligence artificielle crée plusieurs formes de ce type et les compare rapidement.

L'intelligence artificielle sert aussi à diagnostiquer la cavitation. Une étude de 2025 a filmé la cavitation d'un inducteur avec une caméra à grande vitesse, puis a analysé ces images au moyen d'un réseau neuronal. Elle a combiné un réseau neuronal qui observe les motifs spatiaux et un réseau neuronal qui observe les changements temporels. Cela permet de détecter le moment où la cavitation devient instable. L'intelligence artificielle saisit les changements rapides difficiles à voir à l'œil nu. Cette étude relève du diagnostic de la cavitation. Son usage est différent de celui d'un modèle de substitution qui remplace le calcul de l'écoulement ou d'une conception inverse qui cherche la forme des aubes. Il faut distinguer ces trois usages sans les confondre.

La conception d'un inducteur ne s'arrête pas au calcul de l'écoulement. Les aubes tournent très vite et subissent donc de grandes forces. Les ondes créées lorsque les bulles de cavitation s'écrasent frappent aussi les aubes. Il faut donc vérifier en même temps si les aubes résistent à ces forces. Si la conception des canaux de refroidissement est un équilibre entre la chaleur et l'écoulement, la conception de l'inducteur est un équilibre entre l'écoulement, les forces et la cavitation. L'intelligence artificielle sert à évaluer ensemble ces nombreux objectifs.

Ici aussi, les limites sont claires. Les essais avec de l'hydrogène cryogénique sont difficiles et coûteux. Les installations d'essai capables de traiter un liquide à moins de 250 degrés sont peu nombreuses. Les données de validation pour la conception des inducteurs ne sont donc pas abondantes. Les chiffres de réduction de la cavitation ne sont fiables que lorsqu'ils sont étayés par des essais réels de pompe. C'est pourquoi ce livre n'utilise pas de chiffres non vérifiés. Il se concentre plutôt sur les informations que le

modèle renforcé par la physique examine pour aider à la conception. Même si l'intelligence artificielle réduit le nombre de bons candidats d'aubes, le jugement final doit se faire au moyen d'un essai réel de pompe.

Synthèse

Ce chapitre a examiné les méthodes permettant de concevoir par intelligence artificielle les structures de gestion thermique des moteurs-fusées. Trois structures ont été traitées. Les canaux de refroidissement dans la paroi, les trous de refroidissement par film qui déposent un film de refroidissement sur la paroi, et l'inducteur à aubes avant de pompe qui pousse le carburant vers le haut. Ces trois structures posent toutes le même type de problème. C'est un problème d'équilibre entre la chaleur et l'écoulement. Si l'on gagne fortement d'un côté, on perd de l'autre. L'intelligence artificielle est entrée en jeu pour trouver rapidement ce point d'équilibre.

Deux grands changements se trouvent à la base de cette évolution. Le premier est l'impression 3D métallique. Elle a permis de créer des canaux internes complexes qu'il était impossible de fabriquer par usinage. La liberté de conception s'est beaucoup élargie. Le second est l'apparition de nouveaux matériaux comme l'alliage de cuivre GRCo-42, qui transfère bien la chaleur. La rencontre d'une conception libre et de bons matériaux a rendu possibles de nouvelles structures de refroidissement. Cependant, cette nouvelle méthode de fabrication est sensible au contrôle qualité, et il faut donc surveiller soigneusement le procédé de fabrication.

L'intelligence artificielle a été utilisée de plusieurs manières. Les modèles de substitution ont remplacé les calculs lents de mécanique des fluides pour estimer rapidement le comportement des carburants supercritiques. L'apprentissage actif par processus gaussien a permis d'économiser des calculs coûteux tout en trouvant de bons trous de refroidissement par film. L'autoencodeur convolutionnel a réduit des formes complexes de canaux à un petit espace numérique, ce qui a facilité la conception topologique. L'optimisation bayésienne multiobjectif a trouvé les points d'équilibre entre des objectifs contradictoires et a limité le cokage. L'apprentissage automatique renforcé par la physique et l'opérateur neuronal de Fourier ont aidé à concevoir des inducteurs capables de maîtriser la cavitation.

Les méthodes de ce chapitre sont liées entre elles. Le modèle de substitution estime rapidement l'écoulement. L'apprentissage actif choisit le calcul suivant à partir de cette estimation. L'autoencodeur réduit l'espace de conception et facilite la recherche. L'optimisation bayésienne trouve le point d'équilibre entre plusieurs objectifs. L'apprentissage renforcé par la physique fait respecter les lois physiques. Il ne s'agit pas d'utiliser un seul outil, mais d'en combiner plusieurs. C'est au concepteur de les choisir et de les assembler selon le problème.

Un principe traverse tout cela. L'intelligence artificielle n'est pas un outil qui décide de la réponse à la place du concepteur. C'est un outil qui réduit rapidement le nombre de bons candidats dans un vaste espace de conception. Un modèle de substitution n'est fiable que dans le domaine qu'il a appris. Les chiffres de performance issus de cas d'entreprise ne sont pas équivalents à une validation scientifique. Les chiffres dont la source n'est pas vérifiée ne sont pas utilisés. Le refroidissement d'un moteur-fusée est un domaine où le moteur se détruit si la paroi fond une seule fois. C'est pourquoi le jugement final repose toujours sur des calculs de haute précision et sur des essais réels de combustion.

Les méthodes de ce chapitre ont un point commun. Elles sont toutes des moyens d'économiser des calculs coûteux. Les calculs précis sont exacts, mais lents. Si l'on lance ce calcul lent à chaque fois, la conception n'aboutit pas. L'intelligence artificielle prend donc en charge une estimation rapide. Le modèle de substitution remplace le calcul, l'apprentissage actif choisit l'ordre des calculs, et

l'autoencodeur réduit le problème. Le temps économisé permet d'examiner davantage de candidats. Plus on en examine, plus la probabilité de s'approcher d'une bonne réponse augmente.

L'orientation à venir repose elle aussi sur ce principe. L'apprentissage automatique qui intègre plus profondément les connaissances physiques progresse. Le lien entre conception et diagnostic s'élargit aussi. L'intelligence artificielle propose des candidats de conception, les essais les vérifient, puis les données de ces essais améliorent à nouveau l'intelligence artificielle. Ce cycle fait avancer peu à peu la conception de la gestion thermique des moteurs-fusées. On peut résumer ce chapitre en une phrase. Il s'agit d'aider l'intelligence artificielle à résoudre rapidement le difficile problème d'équilibre entre chaleur et écoulement, dans un espace de conception devenu plus libre. Et cette réponse est toujours confirmée par l'essai. Les outils sont devenus plus rapides, mais le principe de vérification reste le même. Le chapitre suivant explique comment l'intelligence artificielle diagnostique et commande le moteur ainsi conçu lorsqu'il fonctionne réellement.

Sources associées

- Pizzarelli, M. (2017). Regenerative cooling of liquid rocket engine thrust chambers: Modeling and simulation. *Journal of Propulsion and Power*, 33(4), 802-821. <https://doi.org/10.2514/1.B36261>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2020). Heat transfer prediction for methane in regenerative cooling channels with neural networks. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(2), 347-357. <https://doi.org/10.2514/1.T5865>
- Dresia, K., Waxenegger-Wilfing, G., Riccius, J., Deeken, J., & Oswald, M. (2023). Improved wall temperature prediction for the LUMEN rocket combustion chamber with neural networks. *Aerospace*, 10(5), 450. <https://doi.org/10.3390/aerospace10050450>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2021). Machine learning methods for the design and operation of liquid rocket engines: Research activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., & Evans, L. J. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- NASA NTRS. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. Document ID 20190030433. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20190030433>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT) project. NASA. <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- Demeneghi, G., Williams, B. B., Katsarelis, C., Tilson, W., & Gradl, P. (2025). Additively manufactured GRCop-42 copper-alloy combustion chamber failure analysis: The role of build interruptions. *Engineering Failure Analysis*, 174, 109509. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2025.109509>
- Ferster, K. K., et al. (2025). An open tool for the design of cooling channels within regeneratively cooled liquid rocket engines. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-2127>
- NIST. (2026). Thermophysical properties of fluid systems. NIST Chemistry WebBook. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- Banuti, D. T. (2020). Pseudo-boiling and heat transfer deterioration while heating supercritical liquid rocket engine propellants. *Journal of Supercritical Fluids*, 165, 104895. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104895>
- Zhu, B., Zhang, Q., Ma, L., & Shi, H. (2025). Analysis of heat transfer deterioration mechanism of supercritical fluid based on VOF two-phase method and pseudo-boiling theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 240, 126643. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126643>

- Xiao, R., Zhang, P., Chen, L., & Hou, Y. (2023). Machine learning based prediction of heat transfer deterioration of supercritical fluid in upward vertical tubes. *Applied Thermal Engineering*, 228, 120477. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.120477>
- Gong, K., Zhang, Y., Cao, Y., Feng, Y., & Qin, J. (2024). Deep learning approach for predicting the flow field and heat transfer of supercritical hydrocarbon fuels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 219, 124869. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124869>
- Ko, S., Gil, Y., & Park, S. (2026). Development of RP-3 surrogate fuels via multi-objective genetic algorithm for regenerative cooling CFD with supercritical property fidelity. *Aerospace*, 13(4), 307. <https://doi.org/10.3390/aerospace13040307>
- Zhang, H., Gou, J., Yin, P., Su, X., & Yuan, X. (2023). Film-cooling hole optimization and experimental validation considering the lateral pressure gradient. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 8, 973293. <https://doi.org/10.3389/fmech.2022.973293>
- Wang, Y., Wang, Z., Qian, S., Qiu, X., Shen, W., Zhang, X., Lyu, B., & Cui, J. (2024). Data-driven framework for prediction and optimization of gas turbine blade film cooling. *Physics of Fluids*, 36(3), 035160. <https://doi.org/10.1063/5.0186087>
- Yao, G., Li, D., Zhu, J., Tao, Z., & Qiu, L. (2024). Hybrid AI framework for the predictions of film cooling effectiveness distribution with various surface curvatures and compound angles. *Applied Thermal Engineering*, 257, 124147. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124147>
- Navah, F., Lamarche-Gagnon, M.-E., & Ilinca, F. (2023). Thermofluid topology optimization for cooling channel design. *arXiv:2302.04745*. <https://arxiv.org/abs/2302.04745>
- Gao, C., Xu, W., Zhu, X., Cui, J., Luo, T., Wang, D., Sun, L., Ling, W., Li, X., & Zhou, W. (2025). Enhanced regenerative cooling performance with conformal TPMS channels. *Energy*, 322, 135530. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.135530>
- Fu, R., Miao, X., Gao, L., Duan, L., Xu, Y., Guo, M., Luo, P., & Hu, J. (2026). Numerical study of flow and heat-transfer enhancement in lattice-core regenerative cooling channels for liquid rocket engines. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 175, 111069. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2026.111069>
- Ebbs-Picken, T., Romero, D. A., Da Silva, C. M., & Amon, C. H. (2024). Deep encoder-decoder hierarchical convolutional neural networks for conjugate heat transfer surrogate modeling. *Applied Energy*, 372, 123723. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123723>
- Lee, J., Shin, S., Choi, H., Lee, A., Park, B., & Lee, S. (2025). Extended multiphysics-informed neural network for conjugate heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 246, 127098. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127098>
- Lee, S., Yoon, Y., & Song, S. J. (2025). Deep learning-based identification of turbopump inducer cavitation instability using high-speed camera images. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-0760>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test facilities at Lampoldshausen and rocket propulsion research. DLR. <https://www.dlr.de/en/ra>

Chapitre 10. Diagnostic des défauts en temps réel, jumeau numérique et contrôle adaptatif en temps réel de la propulsion fondé sur l'apprentissage par renforcement pour les moteurs-fusées à ergols liquides (LRE)

Introduction

Quand on conduit longtemps une voiture, on en connaît l'état au bruit. Si un bruit inhabituel vient du moteur, on va au garage. Si un voyant s'allume au tableau de bord, on ralentit. L'être humain juge ainsi en observant plusieurs signaux à la fois. Il en va de même pour un moteur-fusée. Mais un moteur-fusée est beaucoup plus rapide, beaucoup plus chaud et beaucoup plus dangereux qu'une voiture.

Un moteur-fusée à ergols liquides produit une grande force en brûlant un carburant liquide et un oxydant liquide. Ce moteur traite une chaleur et une pression immenses en très peu de temps. Si une seule pièce se dérègle légèrement, l'ensemble peut s'effondrer. Il est donc important d'observer sans cesse son état pendant que le moteur fonctionne. Observer ainsi l'état du moteur pendant toute sa marche s'appelle la surveillance d'état en temps réel.

Ce chapitre traite de la manière dont l'intelligence artificielle observe et règle un moteur-fusée. En anglais, l'intelligence artificielle se dit Artificial Intelligence, abrégé en AI. Nous aborderons quatre grands sujets. Le premier est le diagnostic, qui consiste à trouver rapidement les anomalies dans les signaux des capteurs. Le deuxième est le jumeau numérique (Digital Twin), qui permet de représenter par ordinateur l'intérieur invisible du moteur. Le troisième est une méthode pour mesurer l'incertitude, même lorsque le moteur vieillit ou présente des écarts de fabrication. Le dernier est un contrôle intelligent qui règle plusieurs vannes ensemble.

Quand ces technologies sont réunies, le moteur prend soin lui-même de sa santé. Cette évolution est nécessaire à l'époque des fusées réutilisables. Lorsqu'un même moteur est utilisé plusieurs fois, son état change un peu à chaque usage. Il est difficile pour une personne de l'ajuster à la main à chaque fois. L'intelligence artificielle est un outil qui lit rapidement ces changements et y répond. Nous allons maintenant expliquer, un par un, les principes de fonctionnement de ces technologies.

Avant de lire ce chapitre, il faut garder une idée en tête. L'intelligence artificielle n'est pas de la magie. C'est un outil qui observe des données et y cherche des règles. Si les données sont mauvaises, la réponse l'est aussi. Ce chapitre présente donc l'utilité de chaque technologie, mais aussi ses limites. Il n'utilise pas de chiffres de performance non vérifiés. Il s'attache plutôt à expliquer simplement les principes. L'objectif est que le lecteur comprenne l'ossature de ces technologies.

10.1 Les défis de la surveillance d'état en temps réel des LRE

Ce que traite cette section

Cette section explique pourquoi il est si difficile de surveiller un moteur-fusée en temps réel. Elle décrit d'abord à quel point l'environnement d'un moteur-fusée à ergols liquides est rude. Elle examine ensuite les limites des méthodes de surveillance utilisées jusqu'à présent. Enfin, elle explique pourquoi la surveillance par intelligence artificielle est nécessaire.

Commençons par préciser un terme. Dans ce chapitre, LRE revient souvent. C'est l'abréviation de moteur-fusée à ergols liquides (Liquid Rocket Engine). Nous emploierons désormais moteur-fusée à ergols liquides ou moteur. Ce moteur est largement utilisé pour envoyer des objets lourds dans l'espace.

Un moteur-fusée à ergols liquides est une machine complexe où de nombreuses pièces fonctionnent ensemble. La chambre de combustion est la salle où l'on brûle le carburant et l'oxydant. L'injecteur est la pièce qui pulvérise finement le carburant et l'oxydant pour les mélanger. La turbopompe est une pompe qui pousse les ergols à haute pression. Les vannes ouvrent et ferment l'écoulement des ergols. Les canaux de refroidissement extraient la chaleur pour empêcher la paroi de fondre. Toutes ces pièces doivent fonctionner comme un seul corps pour que le moteur marche correctement.

Le problème est que cet environnement est très rude. La pression dans la chambre de combustion atteint plusieurs dizaines d'atmosphères. La température de la flamme dépasse 3 000 degrés. La turbopompe tourne des dizaines de milliers de fois par minute. Ces valeurs n'ont rien à voir avec une cocotte-minute de cuisine ou un moteur de voiture. Une petite vibration peut se propager sous forme de grande force. Le moteur fonctionne donc toujours avec un risque de rupture.

Cet environnement rude est aussi sévère pour les capteurs. Les capteurs sont les yeux qui lisent l'état du moteur. Mais si un capteur est proche d'une zone chaude, il se détériore lui-même. Si les vibrations sont fortes, les câbles peuvent aussi se rompre. C'est comme devoir observer le moteur avec une vue brouillée. Il est donc difficile de se fier à une seule valeur de capteur. Il faut observer plusieurs capteurs ensemble et filtrer les signaux. Même si un capteur est anormal, on vérifie avec d'autres capteurs.

La quantité de signaux est elle aussi considérable. Un seul capteur à lecture dense produit des dizaines de milliers de valeurs par seconde. Un moteur possède des dizaines à des centaines de capteurs de ce type. Il en résulte des millions de valeurs par seconde. Une personne ne peut pas observer visuellement autant de valeurs. En outre, le jugement doit être terminé en quelques millisecondes. Une milliseconde est un millième de seconde. Pendant le temps d'un clignement d'œil, il faut juger des centaines de fois. Cette vitesse et ce volume ne peuvent pas être traités sans l'aide d'une machine.

Prenons un exemple pour voir à quelle vitesse une anomalie de moteur peut devenir un accident. Dans la chambre de combustion, la pression commence à osciller fortement et régulièrement. Cette oscillation peut être multipliée en quelques millisecondes. L'oscillation amplifiée frappe l'injecteur et la paroi. Si ces chocs se répètent, le métal se fissure. Des gaz chauds s'échappent par les fissures. Tout cela se produit en un clin d'œil. Il faut donc saisir les premiers signes d'anomalie le plus tôt possible.

La différence entre les essais au sol et le vol ajoute une difficulté. Lors d'un essai au sol, le moteur est solidement fixé. On peut installer beaucoup de capteurs. Si un problème survient, on peut l'arrêter immédiatement. En vol, la situation est différente. À cause du poids, on ne peut pas installer beaucoup de capteurs. Aucune personne ne peut l'observer de près. Le moteur en vol doit donc juger par lui-même avec peu de capteurs, et l'intelligence artificielle aide ce jugement.

Le diagnostic des moteurs-fusées a le même objectif que celui des autres machines. Mais les conditions sont beaucoup plus sévères. Le temps est court, les données sont rares et le risque est élevé. Il est donc difficile de transférer telles quelles les méthodes d'autres domaines. Il faut les adapter aux fusées. Les technologies présentées dans ce chapitre sont toutes le résultat de ce travail d'adaptation, qui se poursuit encore aujourd'hui.

Les essais au sol sont eux aussi dangereux. Un essai qui consiste à fixer le moteur au sol et à l'allumer s'appelle un essai hot-fire. Dans cet essai, le moteur produit une force identique à celle des conditions réelles. Dans l'espace, la situation est plus délicate. Pour qu'une fusée atterrisse de nouveau, il faut arrêter puis rallumer le moteur en vol. À ce moment, les ergols ballottent dans le réservoir. Ce

ballotement s'appelle le sloshing. Le moment d'ouverture des vannes se décale aussi légèrement. Ces secousses brusques apparaissent et disparaissent en un instant, ce qui les rend faciles à manquer.

On comprend mieux en imaginant une fusée qui revient se poser. Au lancement, le moteur produit sa force maximale. À l'atterrissage, il doit réduire fortement sa poussée pour descendre doucement. Pendant ce processus, la poussée du moteur monte et descend sur une large plage. Le liquide dans les réservoirs d'ergols ballote aussi. Les vannes s'ouvrent et se ferment rapidement. La température et la pression changent brusquement. Des anomalies peuvent facilement apparaître pendant ce court moment difficile. Il faut donc l'observer sans le manquer.

Le réallumage du moteur en vol est aussi délicat. Même en orbite, la gravité terrestre reste importante. Mais comme la fusée et les ergols tombent ensemble en chute libre, le poids est presque imperceptible. Cet état s'appelle la microgravité. En microgravité, le liquide ne reste pas à sa place dans le réservoir. Il faut donc rassembler les ergols d'un côté par une petite accélération ou par la tension superficielle. Si l'on allume le moteur sans ce processus, l'écoulement n'est pas régulier. La pression et le débit bondissent momentanément. Dans cet état transitoire, le diagnostic peut facilement vaciller. Il peut voir une anomalie alors que l'état est normal. Le diagnostic doit donc apprendre à supporter cet état transitoire.

Jusqu'à présent, la surveillance des moteurs a souvent reposé sur des valeurs limites. Lorsqu'une valeur dépasse une ligne fixée à l'avance, le moteur est immédiatement arrêté. Cette ligne s'appelle une ligne rouge (redline). Par exemple, si la pression dépasse la valeur fixée, le moteur s'arrête. Cette méthode est facile à comprendre et rapide. Elle est donc utilisée depuis longtemps comme une méthode fiable.

La méthode de la ligne rouge ressemble au disjoncteur d'une maison. Si l'on consomme trop d'électricité, le disjoncteur saute. Quand la limite est dépassée, le courant est coupé sans condition. Cette méthode est utile pour empêcher les grands accidents. Le jugement est simple, donc rapide et sûr. Les moteurs-fusées ont eux aussi ce type de coupure de sécurité comme base. Si une valeur dépasse la ligne de danger, le moteur est immédiatement arrêté.

Mais la méthode de la ligne rouge manque facilement les signaux faibles d'anomalie. Les signaux des capteurs contiennent toujours du bruit. Si le bruit est fort, une alarme peut sonner alors que tout va bien. C'est ce qu'on appelle une fausse alarme. Si les fausses alarmes sont fréquentes, les personnes ne font plus confiance aux alarmes. À l'inverse, une légère oscillation de l'injecteur ou une petite usure d'un joint reste cachée à l'intérieur des valeurs limites. Ces signaux faibles sont peu visibles tant qu'ils ne grandissent pas, et une fois qu'ils ont grandi, il est déjà trop tard pour agir.

Le diagnostic par intelligence artificielle cherche à combler cette lacune. Une personne ne peut observer qu'un ou deux instruments à la fois. L'intelligence artificielle observe simultanément des centaines de signaux de capteurs. Elle examine à la fois la forme des différents signaux et leurs relations. Elle peut donc lire les signes d'anomalie avant que les valeurs ne dépassent la limite. Un article de synthèse publié en 2026 dans une revue d'aéronautique et d'astronautique résume cette évolution. Cet article explique que les méthodes fondées sur les données se sont beaucoup développées dans le diagnostic des moteurs-fusées à ergols liquides. Il souligne en même temps la difficulté liée au faible nombre de données de panne réelles.

En résumé, la surveillance des moteurs-fusées se heurte à trois murs. Les signaux sont rapides et bruyants. Les anomalies faibles apparaissent tard. Il faut aussi trouver l'équilibre entre fausses alarmes et anomalies manquées. L'intelligence artificielle est une tentative pour franchir ces trois murs à la fois. À partir de la section suivante, nous examinerons concrètement ces méthodes une par une.

La surveillance par intelligence artificielle ne supprime pas la méthode de la ligne rouge. Les deux méthodes sont utilisées ensemble. La ligne rouge est la dernière défense qui empêche les grands accidents. L'intelligence artificielle lit à l'avance les signes faibles qui apparaissent avant cette limite. C'est une sorte de filet de sécurité en plusieurs couches. Le filet intérieur attrape ce que le filet extérieur a laissé passer. La sécurité des fusées se protège ainsi en superposant plusieurs méthodes, sans dépendre d'une seule.

10.2 Détecter tôt les anomalies en observant plusieurs capteurs ensemble

Ce que traite cette section

Cette section traite des architectures d'intelligence artificielle qui détectent rapidement les anomalies dans les signaux des capteurs du moteur. Elle explique d'abord le terme télémétrie et les signaux à très haute fréquence. Elle présente ensuite un réseau de neurones qui observe à la fois le déroulement temporel et les relations entre les canaux. Ce type de réseau s'appelle un réseau d'attention à convolution temporelle (TCAN). Cette architecture n'est pas un modèle validé spécialement pour les fusées, mais une méthode utilisée dans plusieurs domaines. Enfin, la section examine aussi les limites que ce type de diagnostic n'a pas encore dépassées.

Commençons par les termes. La télémétrie (telemetry) consiste à envoyer et recevoir sous forme de signaux l'état d'un dispositif situé à distance. Un moteur possède des capteurs qui mesurent la pression, les vibrations, la température et le débit. Les valeurs de ces capteurs entrent en temps réel dans un ordinateur. Très haute fréquence signifie que ces signaux sont lus à des intervalles très serrés. Certains capteurs lisent des dizaines de milliers à des centaines de milliers de fois par seconde. Une lecture aussi dense est nécessaire pour saisir les oscillations rapides.

Les capteurs de pression utilisent des éléments piézoélectriques. Un élément piézoélectrique est un matériau qui produit une petite quantité d'électricité quand il est comprimé. Lorsque la pression change rapidement, le signal électrique change rapidement lui aussi. Ce capteur saisit donc bien les oscillations rapides de pression. L'accéléromètre mesure l'intensité des vibrations d'une pièce. En utilisant ces deux capteurs ensemble, on observe à la fois la pression et les vibrations. C'est une manière de lire l'état du moteur sous plusieurs angles.

Une surveillance à lecture lente manque les anomalies rapides. Imaginons que l'on photographie les battements d'ailes d'un colibri avec un vieil appareil photo. Si l'obturateur est lent, les ailes deviennent floues. Seul un obturateur rapide saisit l'instant des ailes. Il en va de même pour les capteurs. Si l'intervalle de lecture est trop large, les oscillations rapides disparaissent. Pour voir les oscillations à haute fréquence dangereuses, il faut donc lire les signaux de manière dense.

Voyons pourquoi une surveillance aussi rapide est nécessaire. Les anomalies d'un moteur-fusée grandissent en un clin d'œil. Il existe un phénomène dans lequel la pression oscille régulièrement près de l'injecteur. On l'appelle chugging. C'est un phénomène où le moteur oscille à basse fréquence. S'il est sévère, les vannes et les conduites vibrent et se détériorent. Ces oscillations croissent en un instant. Elles sont trop rapides pour qu'une personne les voie et réagisse. La machine doit donc juger à sa place, à l'échelle de la milliseconde.

L'anomalie d'une pièce peut aussi apparaître d'abord dans le signal d'une autre pièce. Par exemple, l'arbre de la turbopompe commence à vibrer. Cette vibration entraîne peu après un changement de pression dans la chambre de combustion. Il est difficile pour une personne de voir d'un seul coup d'œil ce retard temporel et ce lien. Un réseau de neurones observe plusieurs capteurs ensemble. Il peut donc apprendre ces retards temporels et les relations entre canaux.

L'architecture présentée ici combine deux méthodes. La première est la convolution temporelle. La convolution temporelle est une méthode qui extrait des formes dans le déroulement temporel d'un signal. Elle observe les évolutions longues en élargissant progressivement la fenêtre, de la courte à la longue. La seconde est l'attention (attention). L'attention est une méthode qui détermine sur quels signaux il faut se concentrer davantage. Elle accorde plus de poids au canal important à un instant donné. En combinant ces deux méthodes, on examine à la fois les courtes oscillations et les relations entre canaux. Cette architecture combinée s'appelle un réseau d'attention à convolution temporelle (TCAN).

Examinons un peu plus en détail comment la convolution temporelle observe les longs flux. La convolution est une méthode qui parcourt un signal avec une petite fenêtre. Si la fenêtre est étroite, elle ne voit qu'un bref instant. Les anomalies d'une fusée peuvent aussi apparaître sur une longue durée. Il faut donc regarder sur un temps plus large. La méthode utilisée consiste alors à élargir l'intervalle de la fenêtre. On appelle cela une convolution dilatée. Elle parcourt un temps plus large en regardant une valeur sur deux. C'est le même principe que monter un escalier deux marches à la fois pour aller plus haut avec le même nombre de pas. Ainsi, on observe un long flux avec peu de calculs.

Prenons aussi l'exemple de la manière dont l'attention répartit la concentration. Imaginons une salle de classe bruyante où l'on distingue la voix d'un ami. L'oreille se concentre sur le son important parmi plusieurs sons. L'attention fait la même chose. Elle donne du poids au canal qui révèle le plus clairement l'anomalie du moment. Quand la situation change, le poids change aussi. Elle choisit donc, parmi plusieurs capteurs, le signal important à chaque instant. La convolution temporelle observe le déroulement dans le temps, et l'attention choisit le canal.

Cette méthode combinée est largement utilisée dans les recherches récentes. Une étude de 2025 propose un réseau neuronal à convolution temporelle auquel on ajoute l'attention. Cette étude explique qu'il saisit à la fois les dépendances courtes et les dépendances longues. Une autre étude de la même année associe la convolution temporelle et l'attention de graphe. Elle considère plusieurs capteurs comme un graphe et apprend aussi leurs relations. Ces études ne portent pas spécialement sur les fusées. Cependant, elles conviennent bien au problème qui consiste à détecter ensemble les anomalies de plusieurs capteurs. Le diagnostic d'un moteur de fusée relève du même type de problème, car il doit lui aussi détecter ensemble les anomalies de plusieurs capteurs. Ce qui est vérifié, c'est que cette structure a bien détecté des anomalies dans des données générales de séries temporelles. Il n'existe pas encore de démonstration empirique montrant qu'elle s'applique telle quelle aux capteurs de fusée et aux types de pannes. Ce livre propose cette structure comme une voie à explorer pour le diagnostic des fusées.

D'autres recherches dans le domaine des fusées montrent une orientation semblable. Les diagnostics par apprentissage profond qui lisent ensemble plusieurs signaux de capteurs se multiplient. Une étude de 2022 utilise un réseau à mémoire longue et courte interprétable. Ce réseau neuronal classe les anomalies du moteur à partir de données de plusieurs capteurs. Une étude de 2024 traite de la détection de défauts fondée sur l'apprentissage des propriétés. Toutes ces approches cherchent à regrouper plusieurs signaux pour détecter rapidement les anomalies.

L'endroit où ce diagnostic est calculé compte aussi. Si l'on envoie le signal vers un ordinateur éloigné pour prendre une décision, cela prend du temps. Pour obtenir une réponse en quelques millisecondes, il faut calculer près du moteur. Cette manière de calculer directement près du dispositif s'appelle l'informatique en périphérie. On place le réseau neuronal sur une petite puce dédiée et on l'y fait fonctionner. Dès que le signal arrive, la décision est prise sur place. C'est ainsi que le danger peut être repéré en quelques millisecondes. Le réseau neuronal de diagnostic doit donc être petit et rapide. Même précis, un grand réseau neuronal perd de son utilité s'il est lent.

Un modèle de diagnostic passe en général par trois étapes. Il commence par lisser les signaux des capteurs de manière uniforme. C'est ce qu'on appelle la normalisation. La raison est que chaque capteur a une échelle et une unité différentes. Ensuite, on découpe une courte fenêtre temporelle et on l'entre dans le modèle. Enfin, on classe l'état en plusieurs types. On distingue l'état normal, une anomalie de capteur, une anomalie de pompe ou une oscillation de combustion. Le modèle de diagnostic répète sans arrêt ces trois étapes à très grande vitesse.

Il existe plusieurs types d'anomalies que ce diagnostic cherche à saisir. Il y a le chugging, une oscillation lente et saccadée près de l'injecteur. Il y a aussi les oscillations à haute fréquence, qui vibrent plus rapidement. Il existe des problèmes de fuite dus à l'usure des joints de la turbopompe. Il existe aussi des problèmes d'usure des roulements, qui augmentent les vibrations. Chaque anomalie laisse une forme de signal différente. Le modèle de diagnostic apprend ces différences de forme. Il observe quelle forme apparaît et distingue le type d'anomalie.

Il faut ici rester prudent. Certains textes sur cette structure avancent des chiffres comme la précision ou la latence. Cependant, ces chiffres ne sont pas confirmés par des articles publiés. Présenter des chiffres non vérifiés comme des faits induit le lecteur en erreur. Ce livre n'emploie donc pas ces chiffres. Il explique plutôt cette structure seulement comme un principe de diagnostic précoce des défauts. L'essentiel est d'observer plusieurs capteurs ensemble pour repérer tôt les anomalies.

Dans un moteur réel, on classe le niveau de risque d'une panne lorsqu'on traite le résultat du diagnostic. Un signal critique, comme une pression qui dépasse largement la limite de danger, suffit à lui seul pour couper immédiatement le moteur. Si l'on impose une confirmation multiple à ce type de signal, l'arrêt est retardé et l'accident peut s'aggraver. À l'inverse, lorsqu'il s'agit d'un signe faible, on agit quand plusieurs signaux indiquent la même anomalie. Le but est d'éviter qu'un mauvais jugement d'un seul modèle ne compromette un essai pourtant normal. La sortie du diagnostic est donc utilisée avec une logique de sécurité. Il faut aussi une supervision humaine et des dispositifs de sécurité fondés sur des règles.

Pour faire confiance à un modèle de diagnostic, il faut savoir pourquoi il a pris cette décision. Un réseau neuronal ressemble à une boîte dont l'intérieur est difficile à examiner. Il donne une réponse, mais n'en explique pas la raison. Dans un domaine dangereux comme les fusées, la raison compte. Les recherches qui montrent quel capteur a conduit la décision se multiplient donc. On appelle cela un diagnostic interprétable. L'être humain examine cette raison et décide s'il peut faire confiance au diagnostic. Il faut pouvoir connaître la raison pour utiliser l'intelligence artificielle dans une décision de sécurité.

Une autre difficulté vient du manque de données. Les vraies données de panne d'un moteur de fusée sont très rares. C'est parce qu'une panne signifie aussitôt un accident coûteux. Les données normales sont donc nombreuses, tandis que les données de panne sont presque inexistantes. L'intelligence artificielle apprend difficilement quand les données sont rares. Pour résoudre ce problème, les chercheurs utilisent plusieurs méthodes. L'une consiste à créer de fausses données qui imitent des situations de panne à l'aide d'un modèle physique. Une autre consiste à introduire volontairement des pannes prédéfinies dans une maquette d'essai. Cette procédure consistant à introduire volontairement une panne s'appelle l'injection de défauts. La création de fausses données et l'injection de défauts n'ont pas le même sens. Le manque de données demeure un grand défi dans ce domaine.

Il existe aussi une méthode qui consiste à transférer à un autre moteur ce que l'on a appris sur un moteur. On appelle cela l'apprentissage par transfert. C'est comparable au fait qu'une personne qui sait faire du vélo apprend plus vite à conduire une moto. Elle transfère des connaissances déjà acquises à une nouvelle situation. Ainsi, même si les données du nouveau moteur sont rares, l'apprentissage est plus rapide. Un article de synthèse publié en 2026 dans une revue d'aérospatiale souligne aussi cette

difficulté. Les vraies données de panne sont rares et les types de pannes sont nombreux. Cet article organise les recherches sur le diagnostic autour de ces trois problèmes pratiques.

Le diagnostic ne sert pas seulement à prévenir les accidents. Il sert aussi à effectuer la maintenance au bon moment. S'il n'y a pas d'anomalie, il n'est pas nécessaire de remplacer une pièce. Si des signes d'anomalie apparaissent, on intervient à l'avance. Cette méthode qui consiste à entretenir en fonction de l'état s'appelle la maintenance fondée sur l'état. Les moteurs réutilisables réduisent leurs coûts grâce à cette méthode. Le diagnostic est un outil qui protège à la fois la sécurité et les coûts.

10.3 Le jumeau numérique qui dessine l'intérieur invisible de la chambre de combustion

Cette section traite des oscillations dangereuses dans la chambre de combustion. On appelle ces oscillations l'instabilité de combustion. Nous expliquons d'abord comment le son et la flamme renforcent mutuellement leur énergie. Nous voyons ensuite comment reconstruire par ordinateur l'écoulement invisible de la pression. Cette méthode utilise un réseau neuronal qui respecte les équations physiques. Enfin, nous examinons l'utilité et les limites de cette méthode.

Commençons par les termes. L'instabilité de combustion est un phénomène dans lequel la pression oscille fortement dans la chambre de combustion. Lorsque la flamme et le son se synchronisent, cette oscillation augmente. Une petite oscillation de pression perturbe le dégagement de chaleur de la flamme. La flamme perturbée amplifie à son tour l'oscillation de pression. Si cette rétroaction se répète, l'oscillation grossit comme une boule de neige. Dans les cas graves, la paroi de la chambre de combustion et l'injecteur se brisent. Dans l'histoire des fusées, ce phénomène est un vieux problème difficile.

Cette oscillation est un grand problème depuis les débuts du développement des fusées. Même les grands moteurs qui ont envoyé des êtres humains sur la Lune ont souffert de ce problème. Dans la chambre de combustion, la pression résonnait fortement et détruisait le moteur. Les chercheurs l'ont maîtrisée en modifiant plusieurs fois la forme de l'injecteur. Cela montre à quel point l'oscillation de combustion est difficile à traiter. Aujourd'hui encore, ce problème est vérifié à chaque fois qu'un nouveau moteur est conçu.

Les oscillations prennent plusieurs formes. Imaginons que la chambre de combustion soit un cylindre. Le son peut résonner dans le sens de la longueur du cylindre. Il peut aussi tourner et résonner le long de la circonférence. Il peut encore résonner en traversant le diamètre. Chaque forme a une fréquence différente. Si l'on sait quelle forme se développe, il devient plus facile de réagir. Il est donc important de connaître la forme et l'intensité de l'oscillation.

Il existe un principe ancien qui explique cette rétroaction. Si davantage de chaleur est libérée au moment où la pression augmente, l'oscillation s'amplifie. Ce principe s'appelle le critère de Rayleigh. Il est facile à comprendre en imaginant une balançoire. Si l'on pousse la balançoire au moment où elle avance, elle monte de plus en plus haut. Si l'on pousse au moment opposé, la balançoire s'arrête. La flamme et le son se renforcent ou se calment selon le même principe. Le moment où ils échangent leur énergie distingue la stabilité de l'instabilité.

Cette rétroaction ressemble aussi à la relation entre un diapason et un microphone. Dans une salle de spectacle, si l'on approche un microphone d'un haut-parleur, un son aigu apparaît. C'est parce que le son du haut-parleur entre dans le microphone et est amplifié à nouveau. Cette rétroaction fait grossir le son comme une boule de neige. Dans une chambre de combustion, la flamme joue en quelque sorte le rôle du haut-parleur et le son celui du microphone. Si leurs phases coïncident, le son augmente de manière incontrôlable. Il faut donc une conception qui coupe cette rétroaction.

Le problème est qu'il est difficile de voir directement l'intérieur de la chambre de combustion. L'intérieur est trop chaud et la pression y est élevée. On ne peut pas placer des capteurs n'importe où. On peut seulement fixer quelques capteurs de pression à certains endroits de la paroi. Or les oscillations dangereuses se produisent dans toute la chambre de combustion. Il est difficile de connaître l'ensemble de la situation avec seulement quelques points sur la paroi. Il faut donc une méthode capable de dessiner l'ensemble à partir de peu d'observations.

C'est ici qu'apparaît le jumeau numérique. Un jumeau numérique est un modèle informatique qui suit fidèlement un dispositif réel. Pendant que le moteur réel fonctionne, le modèle fonctionne lui aussi. Il reçoit les valeurs des capteurs et ajuste continuellement le modèle à la réalité. Cela permet d'estimer l'état d'emplacements sans capteurs. Son nom vient du fait que ce modèle fonctionne à côté du réel, comme un jumeau.

Le jumeau numérique ressemble par certains aspects à un système de navigation automobile. La navigation reçoit l'état réel de la circulation et redessine l'itinéraire. Le jumeau numérique reçoit lui aussi les signaux du moteur réel et redessine son état. La différence tient à la vitesse et à la précision. Le jumeau d'une fusée doit ajuster l'état à chaque milliseconde. C'est nécessaire pour suivre les oscillations rapides. Pour atteindre cette vitesse, le modèle doit être léger.

Déduire l'intérieur avec quelques capteurs sur la paroi est un problème à résoudre à l'envers. D'ordinaire, on connaît la cause et l'on cherche le résultat. Ici, on ne connaît que la pression sur la paroi, qui est le résultat. À partir de ce résultat, on remonte au champ de pression interne, qui est la cause. Un problème qui cherche la cause à partir du résultat s'appelle un problème inverse. Le problème inverse est difficile, car plusieurs réponses peuvent exister. Les équations physiques ne laissent subsister, parmi ces réponses, que celles qui respectent la physique.

La méthode qui remplit l'intérieur de ce jumeau numérique est le réseau neuronal fondé sur la physique. Ce réseau neuronal s'appelle réseau de neurones informé par la physique (Physics-Informed Neural Network, PINN). Nous l'appellerons désormais réseau neuronal physique. Un réseau neuronal ordinaire apprend seulement à partir des données. Un réseau neuronal physique apprend à respecter aussi les équations physiques en plus des données. Pendant l'apprentissage, il reçoit une pénalité lorsqu'il enfreint une équation. Ainsi, même avec peu de données, il produit une réponse conforme à la physique.

Regardons un peu plus comment apprend le réseau neuronal physique. Un réseau neuronal ordinaire réduit seulement l'écart avec la bonne réponse. Le réseau neuronal physique réduit deux choses à la fois. La première est l'écart avec les valeurs des capteurs. La seconde est le degré de violation des équations physiques. Il apprend à réduire ces deux pénalités ensemble. Alors, même aux endroits sans capteur, la réponse respecte la physique. Les règles physiques combleront en quelque sorte les vides des données. C'est comparable aux lignes d'un dessin à colorier qui guident la couleur.

Cette méthode peut devenir un outil de surveillance peu coûteux. Pour calculer précisément l'intérieur de la chambre de combustion, un gros ordinateur doit fonctionner longtemps. Pendant un essai, on n'a pas ce temps. Une fois entraîné, le réseau neuronal physique donne rapidement une réponse. Il peut donc dessiner l'état interne même pendant l'essai. Cette image rapide permet d'observer les signes d'oscillations dangereuses. C'est comme regarder à l'intérieur sans arrêter l'essai.

L'équation qui décrit les formes sonores de la chambre de combustion est l'équation de Helmholtz. Cette équation indique sous quelle forme le son résonne dans un espace fermé. Elle ressemble au principe selon lequel certaines notes résonnent bien dans un instrument à vent. Le réseau neuronal physique apprend en respectant cette équation et les conditions aux limites. Il reçoit en entrée les valeurs de

quelques capteurs placés sur la paroi. Il reconstruit alors l'écoulement de pression dans toute la chambre de combustion. Il montre comme une image l'endroit où l'oscillation devient forte.

Le son dans la chambre de combustion varie selon la manière dont il réagit aux limites. La face de l'injecteur et le col de la tuyère réfléchissent une partie du son et en absorbent une autre. Le degré de cette réflexion et de cette absorption s'appelle les conditions aux limites acoustiques. Le réseau neuronal physique apprend en respectant aussi ces conditions aux limites. C'est nécessaire pour dessiner non pas le son d'une pièce vide, mais celui d'une vraie chambre de combustion. Le critère de Rayleigh vu plus haut et ces conditions aux limites déterminent l'instabilité de combustion d'une fusée.

Cette orientation est active dans les recherches récentes. Les réseaux de neurones physiques ont un point fort pour reconstruire le champ de pression sonore à partir de peu d'observations. C'est parce que la pression n'est mesurée qu'en quelques points et que la vitesse ne l'est presque pas. Une étude de 2024 apprend, au moyen d'un réseau de neurones physique, l'interaction thermoacoustique dans une chambre de combustion. La thermoacoustique désigne le phénomène où la chaleur et le son s'entremêlent. Cette étude trouve dans les données des valeurs comme l'amortissement de la pression et le couplage du dégagement de chaleur. Une étude de 2026 estime les propriétés d'absorption acoustique de la paroi de la chambre de combustion au moyen d'un réseau de neurones physique qui résout le problème en divisant le domaine. Ces études traitent de l'apprentissage thermoacoustique des chambres de combustion générales et de l'estimation des propriétés aux limites. Il n'existe pas encore de démonstration qui reconstruise en temps réel tout le champ de pression avec peu de capteurs dans une véritable chambre de combustion de moteur-fusée à ergols liquides. Ce livre propose cette reconstruction en temps réel comme une direction à suivre.

Les réseaux de neurones physiques sont aussi utilisés dans la recherche sur la combustion propre pour la propulsion aérospatiale. Un article de 2026 considère ce courant comme une voie vers une propulsion durable. Il relie les équations physiques aux données pour décrire plus précisément la combustion. Ces recherches s'étendent non seulement aux fusées, mais aussi aux moteurs aéronautiques. L'idée de réseaux de neurones qui respectent la physique se diffuse dans plusieurs domaines.

Le jumeau numérique est déjà utilisé dans la maintenance des moteurs aéronautiques. Un grand moteur aéronautique aurait détecté à l'avance plusieurs anomalies grâce à un jumeau numérique. On sait qu'il a prédit l'usure des aubes de turbine et des problèmes de combustion. Ce cas montre qu'un modèle de surveillance peut être réellement utile. Les moteurs de fusée travaillent dans des conditions plus sévères que les moteurs aéronautiques et disposent de moins de données. Il faut donc davantage de vérifications pour transférer cette orientation aux fusées.

Les réseaux de neurones physiques ont aussi des faiblesses. Lorsque l'on introduit des équations dans l'apprentissage, l'entraînement devient délicat. Il faut bien équilibrer le poids de la pénalité physique et celui de la pénalité liée aux données. Si cet équilibre est mauvais, la réponse penche d'un seul côté. Plus la combustion traitée est complexe, plus cet ajustement devient difficile. Les réseaux de neurones physiques ne sont donc pas une solution universelle. Il faut choisir les équations et la structure adaptées au problème. Pour ce choix, les connaissances humaines restent nécessaires.

Dans une perspective plus large, l'apprentissage automatique fondé sur la physique se développe rapidement dans l'ensemble de la recherche sur la combustion. Un article de synthèse paru en 2025 présente ce courant. Il l'explique en le divisant en chimie de la combustion, écoulements réactifs et plusieurs autres problèmes. Il considère que l'introduction des connaissances physiques dans l'apprentissage permet d'obtenir des réponses conformes à la physique même avec peu de données. Un autre article de synthèse de 2026 se concentre sur la combustion turbulente dans la propulsion aérospatiale. Il explique qu'il relie la rigueur de la physique à la force des données.

L'avantage de cette méthode tient au fait qu'elle utilise ensemble les données et la physique. Quand les capteurs sont peu nombreux, il est difficile de combler les zones vides avec les seules données. Les équations physiques réduisent ces zones vides. On peut donc représenter l'état global même avec quelques capteurs bon marché. Le fait qu'elle puisse fonctionner rapidement pour la surveillance est aussi très utile.

Ses limites sont aussi claires. Les réactions de flamme et la turbulence sont très complexes. L'équation de Helmholtz est un modèle réduit qui traite le son de manière simplifiée. Elle ne contient pas tous les détails de la combustion réelle. Ce jumeau numérique sert donc à une surveillance rapide. Les jugements précis doivent être complétés par des analyses à haute fidélité et par des essais réels. Les valeurs détaillées, comme certaines fréquences ou amplitudes de pression, ne sont pas confirmées par les articles publiés. C'est pourquoi ce livre n'utilise pas ces chiffres. Il explique plutôt seulement le principe de fonctionnement de cette méthode et les usages auxquels elle peut servir.

Pour qu'un jumeau numérique fonctionne bien, il doit rester continuellement aligné sur la réalité. Si le modèle s'écarte peu à peu du réel, la représentation se déforme. On corrige donc sans cesse le modèle avec les valeurs des capteurs. Si cette correction tarde, le jumeau perd le contact avec le réel. Si elle est trop fréquente, il suit même le bruit et devient instable. Trouver l'équilibre entre les deux est le point clé de la technologie. Un bon jumeau ne perd pas le réel de vue, tout en ne se laissant pas entraîner par le bruit.

La surveillance n'est pas le seul moyen de maîtriser les oscillations de combustion. On insère aussi parfois dans la paroi une structure qui absorbe le son. Cette structure s'appelle un dispositif d'absorption acoustique. On modifie aussi la disposition des injecteurs pour couper la rétroaction. La surveillance par intelligence artificielle est un outil qui aide cette conception. Elle indique à l'avance dans quelles conditions les oscillations grandissent. La conception et la surveillance doivent aller ensemble pour maîtriser les oscillations.

10.4 Comment mesurer le vieillissement du moteur et les différences entre exemplaires

Cette section traite des problèmes liés au vieillissement des moteurs et aux différences d'un exemplaire à l'autre. Elle explique d'abord pourquoi un moteur réutilisable change peu à peu. Elle examine ensuite une méthode pour mesurer l'incertitude de ce changement. Cette méthode est un réseau de neurones qui produit à la fois une réponse et une plage de réponse. Enfin, elle montre pourquoi cette incertitude est importante pour la sécurité. Un point doit être précisé d'emblée. Les études citées ici portent sur la prédiction de la durée de vie de machines générales. Elles n'ont pas été vérifiées avec des données de moteurs de fusée, et leur application aux fusées relève d'une possibilité future.

Un moteur réutilisable emploie plusieurs fois le même moteur. C'est comme passer d'un gobelet en papier que l'on jette après une utilisation à une tasse en porcelaine que l'on utilise plusieurs fois. Cette méthode réduit fortement le coût du transport spatial. Cependant, les pièces s'usent un peu à chaque usage. La surface des injecteurs s'use. Les aubes de turbine s'érodent. Les canaux de refroidissement changent sous l'effet de la fatigue thermique. Ce phénomène où les performances changent avec le temps s'appelle le vieillissement au fil des années.

Une autre variable est l'écart de fabrication. Même avec le même plan, les dimensions réelles diffèrent légèrement. Chaque pièce comporte de petites erreurs. À cause de ces erreurs, la réponse varie d'un moteur à l'autre. Quand le vieillissement et les écarts de fabrication se superposent, chaque moteur acquiert sa propre individualité. Même avec la même commande de vanne, les résultats diffèrent un peu selon le moteur, et le contrôleur doit donc connaître cette différence.

Ce changement influence directement les performances du moteur. L'usure et l'érosion diminuent peu à peu la poussée. Quand la poussée diminue, la trajectoire de la fusée change. Le degré d'efficacité de la combustion change aussi. Une valeur qui exprime cette efficacité est la vitesse caractéristique d'éjection. Si cette valeur baisse, le même ergol produit moins de force. Il est donc important de mesurer à l'avance le vieillissement et les écarts.

Il faut expliquer un peu l'expression vitesse caractéristique d'éjection. Cette valeur est un indicateur du degré d'efficacité de la combustion dans la chambre de combustion. Elle est déterminée par la pression de la chambre de combustion, la surface du col de la tuyère et le débit d'ergol. Elle diffère de la vitesse réelle des gaz expulsés par la tuyère ou du rendement de la tuyère. C'est une mesure qui évalue seulement la qualité de la combustion. Si cette valeur est élevée, la combustion est efficace. Si elle est basse, l'ergol brûle moins efficacement. Quand l'injecteur s'use, le mélange se dégrade et cette valeur baisse. On peut donc estimer l'état de santé du moteur à partir de l'évolution de cette valeur.

Ce changement peut être comparé à des chaussures de sport portées longtemps. Des chaussures neuves ont une semelle solide. Si on les porte longtemps, la semelle s'use et glisse. Même en courant avec la même force, on avance moins. Le moteur aussi voit ses performances baisser peu à peu à mesure qu'il est utilisé. Le problème est que cette baisse diffère selon les moteurs. Certains moteurs s'usent vite, d'autres lentement. Il faut donc examiner séparément l'état de chaque moteur.

Connaître le vieillissement est la clé d'une réutilisation sûre. Si l'on ne connaît pas l'état, on commet deux erreurs. On peut jeter trop tôt un moteur encore utilisable. C'est du gaspillage. À l'inverse, on peut utiliser de force un moteur déjà fatigué. Cela peut conduire à un accident. Si l'on connaît précisément l'état, on utilise le moteur autant qu'il peut l'être sans dépasser la ligne de danger, et l'on évite ainsi les deux erreurs à la fois.

C'est ici qu'intervient le réseau de neurones bayésien variationnel. En anglais, on dit Variational Bayesian Neural Network. Nous l'appellerons désormais réseau de neurones bayésien. Un réseau de neurones ordinaire ne produit qu'une seule réponse. Par exemple, il répond uniquement que la baisse de poussée est de 3 pour cent. Un réseau de neurones bayésien produit aussi la plage de la réponse. Il indique à la fois la réponse et le degré de confiance, par exemple en disant qu'il est très probable que la baisse de poussée se situe entre 2 et 4 pour cent.

On peut représenter simplement la manière dont un réseau de neurones bayésien produit une plage. Supposons que l'on interroge plusieurs personnes au lieu d'une seule. Si les réponses sont semblables, la confiance est élevée. Si les réponses divergent, la confiance est faible. Un réseau de neurones bayésien contient ce type d'opinions multiples dans un seul modèle. Il produit donc à la fois la valeur centrale de la réponse et l'ampleur de sa dispersion. Une plage étroite signifie que le modèle est sûr de lui, et une plage large signifie qu'il ne sait pas encore bien.

Il existe deux types d'incertitude. L'un vient des fluctuations propres aux données. Ce sont des fluctuations que l'on ne peut pas éliminer, comme le bruit des capteurs. L'autre vient du fait que le modèle a moins appris. Elle augmente dans des situations qu'il n'a pas rencontrées. Quand il rencontre pour la première fois un nouveau type de vieillissement, cette incertitude augmente. Distinguer les deux types facilite la réponse. On peut décider s'il faut recueillir davantage de données ou mener davantage d'essais.

Un réseau de neurones bayésien est plus difficile à entraîner qu'un réseau de neurones ordinaire. C'est parce qu'il doit apprendre non pas une seule réponse, mais une distribution de réponses. Calculer précisément cette distribution demande beaucoup de calculs. Les chercheurs utilisent donc des méthodes d'approximation. Ils apprennent en remplaçant la distribution par une forme plus facile à traiter. Cette méthode s'appelle l'inférence variationnelle. Le mot variationnel vient de cette

approximation. Comme on utilise une approximation, il faut absolument vérifier les résultats avec des données réelles.

La prédiction du vieillissement n'est pas un problème propre aux fusées. Les moteurs d'avion, les éoliennes et les machines d'usine se posent le même problème. C'est parce que ce sont toutes des machines utilisées longtemps. Les recherches dans ce domaine circulent donc d'un secteur à l'autre. On transfère aux fusées des méthodes qui ont bien fonctionné sur d'autres machines. Les conditions difficiles des fusées peuvent aussi faire naître de nouvelles méthodes. Quand les domaines échangent ainsi leurs méthodes, la technologie progresse plus vite.

Ce degré de confiance s'appelle l'incertitude. Connaître l'incertitude est important pour la sécurité. Il faut traiter différemment les moments où le modèle répond avec assurance et ceux où il ne sait pas bien. Quand le modèle dit qu'il ne sait pas, les humains deviennent plus prudents. Ils augmentent les marges de sécurité. Ils vérifient par des essais supplémentaires. C'est le même principe que lorsqu'une prévision météorologique indique la probabilité de pluie. Si la probabilité est d'une chance sur deux, on prend un parapluie et l'on observe la situation.

Cette orientation se développe rapidement dans plusieurs domaines. Les recherches qui prédisent la durée de vie restante des pièces en sont un exemple représentatif. Cette durée est appelée durée de vie utile restante. Une étude de 2024 prédit cette durée au moyen d'un réseau de neurones bayésien. Elle produit non pas une seule réponse, mais une distribution de probabilité. Une étude de 2025 traite plusieurs incertitudes ensemble au moyen d'un réseau de neurones récurrent bayésien. Ces études ne sont pas propres aux fusées. Cependant, le problème traité est le même : connaître l'état de machines qui vieillissent. La même idée peut aussi être utilisée pour prédire le vieillissement des moteurs de fusée.

Les données de moteurs aéronautiques constituent un domaine où cette méthode a été largement testée. Les chercheurs comparent leurs méthodes avec des données publiques de vieillissement de moteurs. Ils comparent les prédictions de plusieurs méthodes à partir des mêmes données. Cela permet de déterminer quelle méthode est meilleure. Les données de fusées sont rares, mais ces données publiques permettent de consolider l'ossature de la méthode. La méthode ainsi consolidée est ensuite transférée aux données de fusées pour être vérifiée.

Le contrôleur reçoit ces informations d'incertitude et prend ses décisions. Si l'incertitude est grande, il fonctionne de manière conservatrice. Il fixe une poussée un peu plus basse ou garde davantage de marge. Si l'incertitude est faible, il tire davantage de performance du moteur. Cela permet d'exploiter le moteur selon son état. C'est plus sûr qu'une méthode qui traite tous les moteurs avec une seule règle fixe.

Les informations d'incertitude servent aussi aux décisions de maintenance. Si le modèle prédit le vieillissement avec assurance, il est plus facile d'établir un plan. Si le modèle dit qu'il ne sait pas bien, on ouvre la pièce et on l'inspecte directement. Cela réduit la maintenance à l'aveugle. Comme on entretient en connaissant l'état, on économise les pièces. En même temps, on ne manque pas les pièces dangereuses. Connaître l'incertitude protège à la fois l'économie et la sécurité.

Il existe aussi des limites. Le fait qu'une intelligence artificielle produise une probabilité ne signifie pas que cette probabilité soit automatiquement correcte. Si le modèle apprend mal, il donne une confiance erronée. Il faut donc le corriger et le vérifier avec des données d'essais réels. Il s'agit de vérifier si l'incertitude produite par le modèle correspond à l'erreur réelle. Une probabilité qui n'a pas passé cette vérification est difficile à croire. Dans un domaine dangereux comme les fusées, cette vérification doit être plus stricte. Les valeurs comme les intervalles de confiance détaillés ne sont pas confirmées par les

articles publiés. C'est pourquoi ce livre n'utilise pas ces chiffres. Il explique plutôt seulement l'ossature de l'idée qui consiste à mesurer l'incertitude.

10.5 Commande par apprentissage par renforcement qui règle plusieurs vannes ensemble (LUMEN, DLR P8.3)

Cette section traite de la commande intelligente qui règle ensemble plusieurs vannes du moteur. Elle explique d'abord ce qu'est l'apprentissage par renforcement. Elle examine ensuite pourquoi la commande d'un moteur de fusée est difficile. Elle présente ensuite un cas d'expérience réelle menée en Allemagne. Enfin, elle indique les tâches qui restent avant d'utiliser cette technologie en vol.

L'apprentissage par renforcement est une méthode qui apprend par essais et erreurs. Cela ressemble à la façon dont un bébé apprend à marcher. On peut imaginer qu'il reçoit une pénalité lorsqu'il tombe et une récompense lorsqu'il marche bien. On donne une récompense aux bons comportements et une pénalité aux mauvais comportements. En essayant plusieurs fois, on cherche la méthode qui reçoit beaucoup de récompenses. La méthode qui ajoute un réseau de neurones à cela s'appelle apprentissage profond par renforcement (Deep Reinforcement Learning, DRL). Nous l'appellerons désormais apprentissage profond par renforcement.

Dans l'apprentissage par renforcement, deux tendances s'opposent. L'une pousse à utiliser une bonne méthode déjà connue. L'autre pousse à essayer une nouvelle méthode. Si l'on utilise toujours ce que l'on connaît, on ne trouve pas de meilleure voie. Si l'on ne fait que du nouveau, on prend des risques et l'on s'égaré. Il faut donc un équilibre entre les deux. On peut voir cet équilibre comme un tir à la corde entre la volonté de chercher du nouveau et celle d'utiliser ce que l'on sait. Au début de l'apprentissage, on essaie beaucoup. Puis, avec le temps, on utilise davantage ce que l'on connaît.

Dans une fusée, on ne peut pas faire ces essais et erreurs sur un vrai moteur. On ne peut pas apprendre en détruisant le moteur. On apprend donc d'abord avec un modèle informatique. Ce modèle s'appelle un simulateur. Dans un simulateur, on peut tomber des milliers de fois sans danger. On essaie librement et l'on cherche une bonne commande. C'est comme apprendre les astuces en jouant plusieurs parties d'un jeu.

Voyons pourquoi la commande d'un moteur-fusée est difficile. Les valeurs à l'intérieur du moteur sont liées entre elles. Si l'on ouvre la vanne de l'oxydant, la pression monte. Si la pression monte, la rotation de la turbopompe change. Le rapport entre le carburant et l'oxydant varie aussi. Ce rapport s'appelle le rapport de mélange. Quand on touche à une valeur, d'autres valeurs suivent en chaîne. On ne peut donc pas régler une seule vanne séparément. Il faut une commande capable de traiter plusieurs valeurs à la fois.

Dans une fusée qui atterrit, cette commande devient plus délicate. Pour redescendre, la fusée doit fortement réduire sa poussée. Elle peut descendre sous le tiers de la poussée maximale. Le fait de régler la poussée sur une large plage s'appelle le deep throttling. Cela signifie réduire fortement l'ouverture. Même alors, il faut maintenir un rapport de mélange adapté. Si le rapport de mélange se dérègle, la combustion se dégrade et les pièces s'abîment. Il faut donc ajuster plusieurs valeurs à la fois, vite et sans danger.

Le Centre allemand pour l'aéronautique et l'astronautique étudie ce problème avec un vrai moteur. On abrège ce centre en DLR. Le DLR a construit un moteur expérimental appelé LUMEN. LUMEN est un moteur à pompe qui utilise de l'oxygène liquide et du méthane. Sa poussée est de l'ordre de 25 kilonewtons. Cela correspond à la taille d'un petit moteur-fusée. Ce moteur a été mis en marche pour la première fois en mars 2024 sur le banc d'essai P8.3. P8.3 est une installation d'essai située au DLR de

Lampoldshausen. LUMEN est un terrain d'essai pour les technologies de moteurs réutilisables. On y étudie à la fois la surveillance de l'état et la commande intelligente.

LUMEN utilise un cycle particulier. Ce cycle s'appelle *expand bleed*. Il consiste à faire tourner la turbine avec une partie du carburant chauffé dans les canaux de refroidissement. Cette méthode a une structure relativement simple et sûre. Elle convient donc bien à l'essai de diverses technologies. LUMEN est un banc d'essai ouvert, utilisé par l'industrie et les instituts de recherche. Il permet de tester de nouvelles méthodes de commande sur un vrai moteur.

Le banc d'essai P8.3 est entré en service en 2021. Il a été construit en agrandissant une installation existante. Auparavant, on ne pouvait tester que la chambre de combustion. P8.3 permet de tester tout le moteur, y compris la turbopompe. Il permet donc de vérifier les méthodes de commande dans des conditions réelles. LUMEN et P8.3 forment la base des recherches sur la commande par intelligence artificielle.

Le DLR ajoute une commande par intelligence artificielle à ce moteur. Les documents officiels du DLR expliquent que le transfert de chaleur dans les canaux de refroidissement est modélisé par un réseau de neurones. Ils indiquent aussi que la commande par intelligence artificielle sert à régler la poussée et à surveiller les instabilités de combustion. La thèse de doctorat de Kai Dresia, publiée en 2025, traite cette recherche en détail. Cette thèse commande un moteur-fusée par apprentissage profond par renforcement. Elle compare ensuite les résultats avec ceux d'une commande prédictive fondée sur un modèle. Elle rapporte une erreur moyenne d'environ 1,3 pour cent dans la commande simultanée de plusieurs valeurs. Cette valeur est le résultat présenté dans la thèse de Dresia. Elle provient de simulations et de travaux sur banc d'essai. Ce n'est pas une valeur démontrée en vol sur toute la plage de fonctionnement d'un moteur complet.

Dans des recherches antérieures, le DLR a appliqué une commande par réseau de neurones à de vrais essais. En 2023, il a vérifié cette commande lors d'un essai de turbopompe de LUMEN. Il a aussi mené des recherches sur la modélisation du transfert de chaleur dans les canaux de refroidissement par réseau de neurones. En 2024, il a présenté les résultats des essais de composants de LUMEN et l'état d'avancement du projet. Ces recherches accumulées conduisent à la commande d'un vrai moteur. Il ne s'agit pas d'une réussite isolée, mais d'une accumulation sur plusieurs années.

Examinons un peu plus le cadre dans lequel le contrôleur traite les états et les actions. À chaque instant, le contrôleur lit l'état et produit une action. Cette action crée l'état suivant. Dans cet état suivant, il produit à nouveau une action. Ce processus se poursuit sans arrêt. Un problème où les états et les actions s'enchaînent ainsi s'appelle un problème de décision séquentielle. L'apprentissage par renforcement convient bien à ce type de décision séquentielle. Il n'apprend pas un jugement isolé, mais un flux de jugements successifs.

Voyons le principe selon lequel un contrôleur par apprentissage par renforcement prend ses décisions. Le contrôleur lit d'abord l'état du moteur. Il s'agit de valeurs comme la pression de la chambre de combustion, la position des vannes, la rotation des pompes et la température. Ces valeurs s'appellent l'état. Le contrôleur observe l'état et décide de combien déplacer les vannes. Ce mouvement s'appelle une action. Si le résultat de l'action est bon, il reçoit une récompense. S'il est mauvais, il reçoit une pénalité. S'il se rapproche de la poussée visée, on lui donne une récompense. Si le rapport de mélange se dérègle ou si les vibrations augmentent, on lui donne une pénalité. La règle qui contient ces récompenses et pénalités s'appelle la fonction de récompense. Le contrôleur affine la commande des vannes dans le sens qui lui apporte le plus de récompenses.

La bonne conception de la fonction de récompense décide du succès ou de l'échec de la commande. Les règles de récompense et de pénalité doivent contenir l'objectif lui-même. Si l'on récompense seulement

la poussée, le contrôleur peut ignorer les vibrations. Il faut donc inclure ensemble la poussée, le rapport de mélange et les vibrations dans les récompenses et pénalités. On pénalise aussi les mouvements trop brusques des vannes. Les commandes brusques imposent une contrainte aux pièces. Il faut bien régler le poids des différents objectifs. Ce réglage des poids est le travail central de la conception de la commande.

Dans l'industrie aussi, le fonctionnement automatique des moteurs réutilisables est un sujet majeur. Le moteur récent d'une entreprise américaine vise la réutilisation répétée. On sait qu'il a été modifié pour réduire le nombre de pièces et faciliter la fabrication. Il aurait aussi supprimé le bouclier thermique afin de réduire le poids et la complexité. Ces changements s'inscrivent dans une tendance qui vise à utiliser souvent les moteurs et à les entretenir rapidement. Toutefois, il s'agit d'un cas de développement d'entreprise. Ce ne sont pas des performances vérifiées sur le plan scientifique. Ce livre ne cite ce cas qu'à titre d'exemple de tendance.

La force de cette méthode est de traiter le problème lié comme un tout. Il est difficile pour une personne d'écrire à la main des règles pour chaque vanne. Comme les valeurs sont liées entre elles, les règles deviennent complexes. L'apprentissage par renforcement apprend par lui-même ces relations liées à partir des données. Il observe plusieurs valeurs ensemble et cherche un point d'équilibre. Toutefois, un contrôleur déjà appris ne s'adapte pas automatiquement à un vieillissement qu'il n'a jamais rencontré. Il existe plusieurs façons de répondre aux changements du moteur. On peut d'abord lire l'état et l'intégrer à la commande. Il existe aussi une commande robuste, conçue pour rester stable malgré les changements. On peut encore faire réapprendre le contrôleur avec de nouvelles données. L'adaptation en ligne pendant le fonctionnement crée un nouveau risque, celui d'un changement de commande non vérifié. Le choix de la méthode dépend donc de l'évaluation de la sécurité.

La commande par apprentissage par renforcement peut être comparée aux méthodes existantes. Parmi les méthodes utilisées depuis longtemps figure la commande prédictive fondée sur un modèle. Cette méthode prévoit l'avenir avec un modèle mathématique du moteur et choisit la commande des vannes. Elle fonctionne bien si le modèle est exact. Mais si le moteur vieillit ou si le modèle devient inexact, ses performances baissent. L'apprentissage par renforcement apprend directement à partir des données et se montre donc flexible face à ces changements. Les deux méthodes ont chacune leurs avantages et leurs limites. Les chercheurs les comparent donc et les combinent.

Voyons pourquoi il est important de maintenir un rapport de mélange adapté. Le rapport entre le carburant et l'oxydant est le rapport de mélange. La température de la flamme atteint en général son maximum près du rapport où le carburant et l'oxydant correspondent exactement. Si l'on s'écarte de ce rapport, la température baisse, qu'il reste du carburant ou de l'oxydant. Les fusées fonctionnent souvent avec un peu plus de carburant que nécessaire. Cela sert à protéger la paroi en abaissant la température de la flamme qui la touche. Mais si l'on ajoute trop de carburant, la force diminue. Avec les carburants de type kérosène, de la suie se forme alors. Les moteurs à hydrogène produisent très peu de suie. Ainsi, le bon rapport de mélange varie selon le couple de propergols. Il faut donc maintenir ce rapport même pendant les changements de poussée. C'est pourquoi une commande capable d'ajuster plusieurs valeurs à la fois est nécessaire.

Ici, il faut traiter les chiffres avec prudence. Les valeurs détaillées de performance, comme le temps de deep throttling rapide, la plage d'erreur du rapport de mélange ou le taux de réduction des vibrations, ne sont pas confirmées par des articles publiés. Utiliser des valeurs non confirmées reviendrait à exagérer les faits. Ce livre n'emploie donc pas ces chiffres. La valeur confirmée est l'erreur moyenne d'environ 1,3 pour cent dans la commande de plusieurs variables. C'est la seule valeur prise comme base.

Précisons ce que signifie cette erreur moyenne de 1,3 pour cent. Cette valeur est le résultat d'un réglage simultané de plusieurs variables. Autrement dit, plusieurs objectifs ont été maintenus ensemble, et non un seul. Il est difficile d'obtenir cet équilibre avec des règles écrites à la main. L'intelligence artificielle a appris les relations liées et trouvé un équilibre. Toutefois, cette valeur provient des conditions limitées d'une recherche particulière. Elle ne peut pas être transférée telle quelle à tous les moteurs. Si les conditions changent, il faut la vérifier à nouveau.

Il reste du chemin avant d'utiliser directement cette technologie dans un moteur de vol. Un contrôleur par apprentissage par renforcement apprend d'abord en simulation. Dans l'ordinateur, les erreurs ne sont pas dangereuses. Ensuite, on le teste avec du matériel connecté. Cet essai s'appelle un essai hardware-in-the-loop. On fait fonctionner ensemble des pièces réelles et le réseau de neurones. Puis on vérifie la sécurité par des essais de combustion au sol. Il faut franchir toutes ces étapes avant de parler de vol. La certification des fusées est très stricte.

Une grande difficulté vient ici de la différence entre le simulateur et la réalité. Un modèle informatique n'est pas identique à un vrai moteur. Une commande bien apprise dans le modèle peut se dérégler dans la réalité. Cette différence s'appelle l'écart entre le simulateur et le réel. Pour réduire cet écart, il faut rendre le modèle plus exact. Il faut aussi le corriger en continu avec des données d'essais réels. Des bancs d'essai comme LUMEN servent à ces corrections. Il faut des données réelles pour faire confiance à l'intelligence artificielle.

Un autre principe consiste à superposer les dispositifs de sécurité. Un contrôleur par apprentissage par renforcement peut émettre une commande anormale. Pour ce cas, on ajoute un dispositif de sécurité fondé sur des règles. Si la commande du contrôleur dépasse une limite dangereuse, ce dispositif la bloque. L'intelligence artificielle améliore les performances, et les règles protègent le minimum de sécurité. Ces deux couches sont nécessaires pour appliquer l'intelligence artificielle à un vrai moteur.

Les vannes ont aussi des limites physiques. Une vanne ne peut pas s'ouvrir ni se fermer plus vite qu'une vitesse donnée. Cette vitesse maximale s'appelle la limite de vitesse d'actionnement de la vanne. Si l'intelligence artificielle donne une commande brusque qui dépasse cette limite, les conduites subissent un choc. Le coup de bélier, où le liquide s'arrête soudainement et frappe la conduite, en est un exemple. Les commandes du contrôleur sont donc limitées à une vitesse que la vanne peut réellement produire. On prévoit aussi un dispositif de basculement sûr qui passe immédiatement à un contrôleur classique si l'intelligence artificielle devient instable. Le contrôleur classique protège le moteur avec des règles validées depuis longtemps.

La valeur de la commande par apprentissage par renforcement apparaît clairement dans la réutilisation. Quand un même moteur est utilisé plusieurs fois, son état change à chaque fois. Des règles de commande fixes ne peuvent pas suivre ces changements. Le contrôleur par apprentissage par renforcement lit l'état et règle les vannes en conséquence. Il traite un moteur vieilli comme un moteur vieilli, et un moteur neuf comme un moteur neuf. Cette flexibilité réduit le coût des fusées réutilisables. C'est pourquoi de nombreuses institutions dans le monde consacrent des efforts à cette recherche.

Toutefois, la commande par intelligence artificielle en est encore au stade des essais au sol. Elle n'est pas encore largement utilisée dans les moteurs de vol réels. La certification de vol exige de longs essais et de nombreux enregistrements. Il faut prouver que la nouvelle commande est sûre dans toutes les situations. Cette preuve demande beaucoup de données et de temps. Pour l'instant, la commande par intelligence artificielle grandit donc dans les laboratoires et sur les bancs d'essai. Quand les résultats s'accumuleront, ils mèneront un jour au vol.

10.6 Conclusion et perspectives

Cette section examine comment les quatre technologies précédentes se relient en un ensemble. Elle résume ensuite pourquoi cet ensemble est nécessaire à l'ère des fusées réutilisables. Enfin, elle précise les principes de sécurité nécessaires à la gestion des moteurs par intelligence artificielle.

Le fonctionnement intelligent d'un moteur-fusée à ergols liquides relie quatre technologies. Le diagnostic par capteurs observe plusieurs signaux ensemble et lit tôt les faibles signes afin de détecter les anomalies précoces. Le jumeau numérique reconstruit les flux de pression internes invisibles avec un réseau de neurones qui respecte les équations physiques. Le modèle bayésien mesure l'incertitude du vieillissement et des écarts, et donne la réponse avec sa marge. Le contrôleur par apprentissage par renforcement règle plusieurs vannes ensemble et cherche le point d'équilibre des valeurs liées.

Ces quatre technologies échangent des données entre elles. Quand le diagnostic trouve une anomalie, le contrôleur réagit. Quand le jumeau numérique indique l'état interne, le diagnostic devient plus exact. Quand le modèle bayésien indique l'incertitude, le contrôleur devient plus prudent. Ainsi, les quatre technologies fonctionnent en boucle. C'est une structure où le moteur surveille lui-même son état et se règle lui-même. Cette structure s'appelle la gestion autonome de la santé.

Ces quatre technologies compensent leurs faiblesses respectives. Le diagnostic seul ne permet pas de connaître avec précision la cause d'une anomalie. Si le jumeau numérique montre l'intérieur, la cause devient plus nette. Le contrôleur seul ne connaît pas le vieillissement du moteur. Si le modèle bayésien indique l'incertitude, le contrôle devient plus sûr. La faille d'une technologie est comblée par une autre. C'est pourquoi on ne les traite pas séparément, mais comme un ensemble. Ce n'est qu'une fois réunies que la gestion autonome devient complète.

Ce courant n'est pas encore un produit achevé. Il en est surtout au stade de la recherche et des essais. Plusieurs résultats sont aussi des travaux initiaux qui n'ont pas été évalués par les pairs. Il est donc trop tôt pour affirmer les résultats de façon définitive. Ce livre le précise clairement. Pour l'instant, il s'agit de comprendre l'ossature et la direction de la technologie. Il faudra encore du temps avant qu'elle soit largement utilisée dans des moteurs de vol réels.

Ce courant est indispensable à l'ère des fusées réutilisables. Lorsqu'un même moteur est utilisé plusieurs fois, son état change à chaque fois. Des règles fixes ne suffisent pas à traiter toutes ces variations. Les valeurs sont trop rapides et trop liées entre elles pour qu'une personne les ajuste manuellement à chaque fois. L'intelligence artificielle est un outil qui lit vite ces changements et y répond. Pour réduire le coût du transport spatial, cette gestion autonome est nécessaire.

Cependant, le contrôle par intelligence artificielle doit impérativement comporter des dispositifs de limitation. Le premier est l'explicabilité. Une personne doit pouvoir savoir pourquoi le modèle a pris cette décision. Le deuxième est la vérification indépendante. Il faut confirmer la décision du modèle par une autre méthode. Le dernier est le passage à un état sûr en cas de défaillance. Même si le modèle devient instable, le moteur doit pouvoir s'arrêter en sécurité. Sans ces trois dispositifs, il est difficile de confier un moteur à l'intelligence artificielle.

L'intelligence artificielle n'est pas un outil auquel on confie aveuglément le moteur. C'est un outil qui permet de l'observer plus en détail. L'humain emprunte les yeux de l'intelligence artificielle pour comprendre le moteur plus en profondeur. La décision finale et la responsabilité restent humaines. Sur ce principe, l'intelligence artificielle rend les fusées plus sûres et moins coûteuses.

Synthèse

Revenons sur l'essentiel de ce chapitre. Un moteur-fusée à ergols liquides est une machine extrêmement rapide, chaude et dangereuse. Pour utiliser ce moteur en sécurité, il faut une surveillance et un contrôle en temps réel. La méthode classique par valeurs limites risque de manquer les anomalies faibles.

L'intelligence artificielle comble cette faille en observant plusieurs capteurs ensemble. Elle cherche à lire les signes faibles avant que les valeurs ne franchissent la ligne de danger.

Le diagnostic précoce observe à la fois l'évolution dans le temps et les relations entre canaux. Une structure combinant convolution temporelle et attention en est un exemple représentatif. Cette structure détecte tôt les anomalies dans plusieurs capteurs. La décision doit être achevée en quelques millisecondes sur une petite puce placée près du moteur. Toutefois, les chiffres de performance propres aux fusées restent difficiles à confirmer. Ce livre les présente donc seulement sous l'angle du principe. Le diagnostic s'emploie avec la supervision humaine et des dispositifs de sécurité fondés sur des règles.

Le jumeau numérique dessine l'intérieur invisible de la chambre de combustion. Il utilise un réseau de neurones physique qui respecte les équations de la physique. Avec quelques capteurs placés sur la paroi, il reconstitue l'ensemble de l'écoulement de pression. Il est très utile pour surveiller l'instabilité de combustion. Toutefois, il ne peut pas contenir toute la complexité de la flamme. On l'utilise pour une surveillance rapide, puis on le complète par une analyse précise. Le jumeau numérique ne remplit son rôle que s'il est corrigé en permanence par des signaux réels.

Le réseau de neurones bayésien mesure l'incertitude liée au vieillissement et aux écarts. Il donne une réponse, mais aussi l'ampleur de cette réponse. Si cette ampleur est faible, cela signifie qu'il est confiant. Si elle est large, cela signifie qu'il sait mal. Cette information sert au contrôleur à décider s'il doit agir avec prudence. Elle sert aussi à déterminer le moment de la maintenance. Toutefois, les probabilités du modèle doivent être vérifiées avec des données réelles.

Le contrôleur par apprentissage par renforcement règle plusieurs vannes ensemble. Le DLR allemand étudie cette approche avec le moteur LUMEN et le banc d'essai P8.3. Les données publiques font état d'une erreur moyenne d'environ 1,3 pour cent dans le contrôle de plusieurs variables. Certains chiffres détaillés de performance ne sont pas utilisés ici, faute de confirmation suffisante. Pour employer cette technologie en vol, plusieurs étapes de vérification restent nécessaires.

Revenons à un principe qui traverse tout ce chapitre. L'intelligence artificielle est un outil qui améliore les performances. Mais la sécurité est protégée par les règles et par les humains. Ces deux couches doivent exister ensemble pour installer l'intelligence artificielle dans un moteur réel. On ne fait pas confiance aux chiffres non vérifiés. Il faut distinguer les recherches initiales des résultats validés. Cette attitude est la bonne manière de traiter une technologie aussi dangereuse que les fusées.

Lorsque ces quatre technologies sont réunies, le moteur veille lui-même à sa santé. Elles échangent des données et tournent comme une seule boucle. Cette gestion autonome est une base de l'ère des fusées réutilisables. C'est parce qu'un même moteur change d'état à chaque nouvelle utilisation. Toutefois, pour la sécurité, l'explicabilité, la vérification indépendante et le dispositif de passage à un état sûr doivent être présents ensemble.

Les technologies examinées dans ce chapitre répondent à des questions différentes. Le diagnostic demande ce qui ne va pas maintenant. Le jumeau numérique demande quel est l'état de l'intérieur invisible. Le modèle bayésien demande dans quelle mesure il faut croire ce jugement. Le contrôleur demande donc ce qu'il faut faire. Lorsque ces quatre questions se rejoignent, l'état du moteur et la réponse à apporter forment un tout. Une bonne gestion d'un moteur par intelligence artificielle traite ces quatre questions ensemble.

Pour finir, précisons l'attitude à adopter face aux sources de ce chapitre. Une grande partie des recherches récentes citées ici en est à un stade initial. Plusieurs articles sont des travaux préliminaires qui n'ont pas été évalués par les pairs. Les exemples de moteurs d'entreprise montrent seulement une tendance industrielle. Leur poids n'est pas le même que celui de résultats validés sur le plan scientifique. C'est pourquoi ce chapitre accorde du poids aux valeurs confirmées et aux principes. Les chiffres qui n'ont pas pu être vérifiés ont été écartés. J'espère que le lecteur comprendra correctement la direction de cette technologie. L'intelligence artificielle est un outil dans le long chemin qui rendra les fusées plus sûres et moins coûteuses.

Sources associées

- Yang, S., Wu, J., Xie, C., Zhong, Z., Cheng, Y., Wang, B., Liu, Y., & Lu, J. (2026). Data-Driven Intelligent Fault Diagnosis: A Review from the Perspectives of Three Practical Issues in Liquid Rocket Engines. *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 27(4), 3438-3463. <https://doi.org/10.1007/s42405-026-01131-9>
- Wang, T., Ding, L., & Yu, H. (2022). Research and Development of Fault Diagnosis Methods for Liquid Rocket Engines. *Aerospace*, 9(9), 481. <https://doi.org/10.3390/aerospace9090481>
- Deng, L., Cheng, Y., & Shi, Y. (2022). Fault Detection and Diagnosis for Liquid Rocket Engines Based on Long Short-Term Memory and Generative Adversarial Networks. *Aerospace*, 9(8), 399. <https://doi.org/10.3390/aerospace9080399>
- Urgolo, A., Pill, I., Waxenegger-Wilfing, G., & Freiburger, M. (2024). Property Learning-Based Fault Detection for Liquid Propellant Rocket Engine Control Systems. *OASICS*, 125, 15:1-15:20. <https://doi.org/10.4230/OASICS.DX.2024.15>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2021). Machine Learning Methods for the Design and Operation of Liquid Rocket Engines: Research Activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- NASA. (2009). Distributed Health Monitoring System for Reusable Liquid Rocket Engines. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20090040299/downloads/20090040299.pdf>
- Wang, C., Liu, Q., Qu, L., Chang, W., Wang, T., Duan, P., & Cao, Y. (2025). Self-attention-enhanced Temporal Convolutional Networks for Anomaly Detection in Time Series. *Proceedings of the 2025 4th International Conference on Cryptography, Network Security and Communication Technology*. <https://doi.org/10.1145/3723890.3723911>
- Wang, D., Zhang, H., & Yu, Z. (2026). MST-MFGAT: An adaptive temporal convolution with feature graph attention network for time series anomaly detection. *Neurocomputing*, 664, 132134. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2025.132134>
- Harrje, D. T., & Reardon, F. H. (1972). Liquid Propellant Rocket Combustion Instability. NASA SP-194. <https://ntrs.nasa.gov/citations/19720026079>
- Culick, F. E. C. (2006). Unsteady Combustion in Liquid Rocket Engines: Dynamics, Instabilities, and Control. NATO RTO-EN-AVT-143.
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Mariappan, S., Nath, K., & Karniadakis, G. E. (2024). Learning thermoacoustic interactions in combustors using a physics-informed neural network. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 138, 109388. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2024.109388>
- Li, A., Du, J., & Liu, Y. (2026). Domain-decomposition physics-informed neural network approach for the acoustic boundary impedance estimation of a combustion chamber model. *Journal of Vibration and Control*. <https://doi.org/10.1177/10775463261433496>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. *arXiv:2509.08094*. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Selvam D., C., Devarajan, Y., Raja, T., Tiwari, A., Sunil Kumar, M., Sharma, K., Agrawal, A. P., Khandual, A., & Mehar, K. (2026). Physics-Informed machine learning for turbulent combustion in aerospace propulsion: bridging physical rigour and data intelligence. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 20, 2678066. <https://doi.org/10.1080/19942060.2026.2678066>

- Ochella, S., Dinmohammadi, F., & Shafiee, M. (2024). Bayesian neural networks for uncertainty quantification in remaining useful life prediction of systems with sensor monitoring. *Journal of Mechanical Engineering Science*. <https://doi.org/10.1177/16878132241239802>
- Chen, C., Wang, C., Guo, J., Cui, P., Zheng, J., & Liu, Z. (2025). Remaining useful life prediction considering multiple uncertainty information via Bayesian BiGRU-based method. *Reliability Engineering & System Safety*, 264, 111431. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111431>
- Dresia, K. (2025). Rocket Engine Control with Deep Reinforcement Learning. DLR-Forschungsbericht DLR-FB-2025-16. <https://doi.org/10.57676/bwbm-p528>
- Dresia, K., Adler, A., Saraf, A., Hahn, R., Kurudzija, E., Traudt, T., Deeken, J., & Waxenegger-Wilfing, G. (2023). Rocket Engine Control with Neural Networks: Experimental Results of the LUMEN Turbopump Test Campaign. AIAA SciTech 2023 Forum, AIAA 2023-0137. <https://doi.org/10.2514/6.2023-0137>
- Börner, M., Traudt, T., Dresia, K., Armbruster, W., Suslov, D., Groll, C., Hahn, R. D., Saraf, A. M., Deeken, J., Hardi, J., Oswald, M., & Schlechtriem, S. (2024). Component Test Results and Project Progress of the DLR Liquid Upper Stage Demonstrator Engine (LUMEN). AIAA SciTech 2024 Forum, AIAA 2024-1398. <https://doi.org/10.2514/6.2024-1398>
- DLR. (2026). LUMEN: AI-assisted reusable rocket engines. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/featured-topics/reusable-space-transportation/lumen>
- DLR. (2026). LUMEN, Liquid Upper Stage Demonstrator Engine. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/research-infrastructure/large-scale-research-facilities/lumen-en>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test cell P8.3. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/ra/research-transfer/research-and-test-infrastructure/test-benches-for-space-propulsion/research-and-technology-test-bench-p8-1/test-cell-p8.3>

Soutenir ce livre de la Bibliothèque IA

Si ce livre vous a été utile, vous pouvez soutenir les prochaines traductions, les éditions publiques et les projets ouverts de connaissance sur l'intelligence artificielle via PayPal.

PayPal

<https://paypal.me/kimkjkj>



Scannez le code QR ou ouvrez le lien ci-dessus.

Kim Kyung-jin, avocat