
Approche empirique : apport des bases de données et des modèles statistiques

Damien Perret*¹

¹Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) – CEA Marcoule 30207
Bagnols sur Ceze – Bagnols sur Cèze, France

Résumé

Les premières tentatives de calcul des propriétés des verres à partir de leur composition ont été réalisées par les scientifiques allemands Winckelmann et Schott à la fin du 19^{ème} siècle. Dans des domaines de composition suffisamment restreints, les interactions les plus complexes entre les oxydes peuvent être négligées. Dans ce cas, les propriétés du verre peuvent s'exprimer sous la forme d'un polynôme, où chaque oxyde apporte sa propre contribution dans le calcul de la propriété (principe d'additivité). Le besoin de modéliser et de prédire via une approche statistique et empirique les propriétés des verres nucléaires en fonction de leur composition a débuté dans les années 90. Les études antérieures consistaient en une évaluation paramétrique des propriétés des verres en fonction de la composition, en faisant varier un ou deux composants autour d'une composition de référence. Cette méthode nécessite d'effectuer un grand nombre de formulations et ne permet d'expliquer la variation de propriété qu'autour d'une composition de référence. Le besoin de connaître la variation des propriétés d'intérêt en tout point du domaine de composition s'est avéré rapidement nécessaire et cependant incompatible avec une approche paramétrique simple d'une part, et avec un grand nombre d'éléments chimiques à faire varier en même temps, d'autre part. La complexité de la composition du verre nucléaire rend impossible l'utilisation d'outils théoriques (DFT, dynamique moléculaire, contraintes topologiques,...) et nécessite le développement de modèles statistiques empiriques. Parmi les propriétés d'intérêt à modéliser, on peut citer la durabilité chimique du verre, la température de transition vitreuse, ou encore la viscosité de la fonte verrière. Depuis les années 2000, l'augmentation significative de la puissance des outils informatiques a permis l'utilisation d'algorithmes performants dans les méthodes de data mining. Par exemple, il est aujourd'hui possible de modéliser efficacement la température de transition vitreuse d'un verre de composition complexe à l'aide de réseaux de neurones. La viscosité de la fonte verrière est une propriété plus difficile à modéliser, du fait de sa très grande variabilité sur les échelles de température et de composition. Cette communication vise à présenter une méthode récemment développée, qui associe les techniques de plan d'expériences, de régression multilinéaire et de réseaux de neurones. L'outil développé utilise les données de formulation verrière générées au CEA ces 30 dernières années ainsi qu'un grand nombre de données collectées dans la littérature. Il permet de prédire la température de transition vitreuse ainsi que la viscosité de la fonte verrière à différentes températures.

*Intervenant