

Simulation & Modélisation

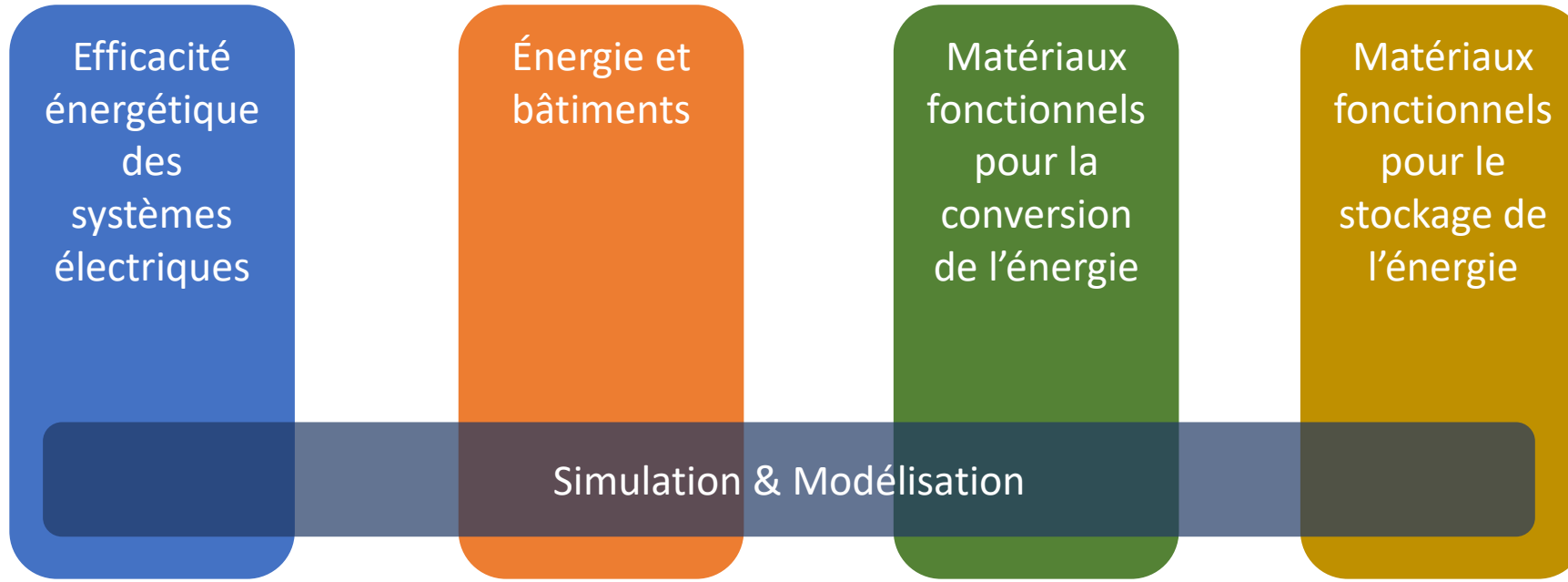
Prof. Adlane SAYEDE
UCCS - UMR CNRS 8181
Université d'Artois



CPER MANIFEST/Groupe A2U Énergie

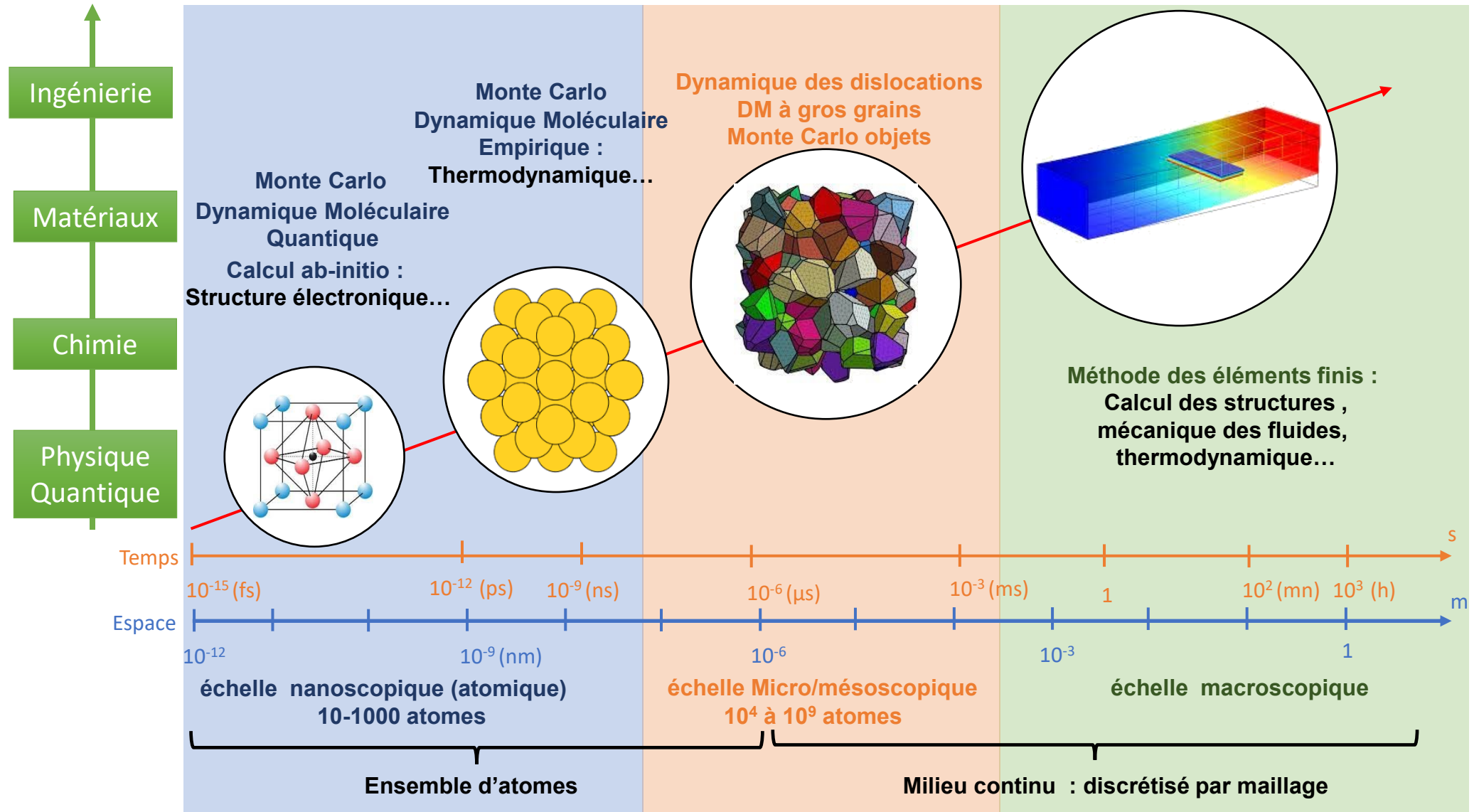


Simulation & Modélisation



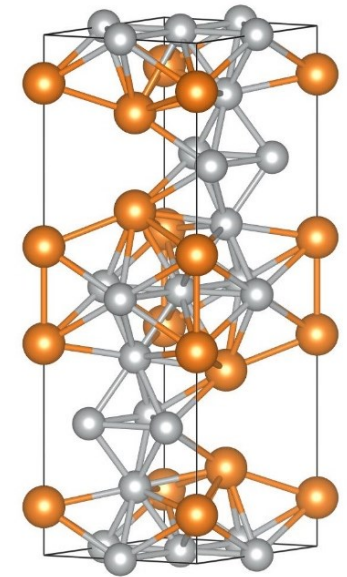
- **La modélisation** consiste à créer une représentation abstraite ou simplifiée d'un système réel à l'aide de modèles mathématiques, graphiques, conceptuels ou informatiques.
- **La simulation** est le processus d'exécution d'un modèle pour observer comment le système réel se comporte en fonction du **modèle**.

Échelle des espaces et des temps Techniques de simulation

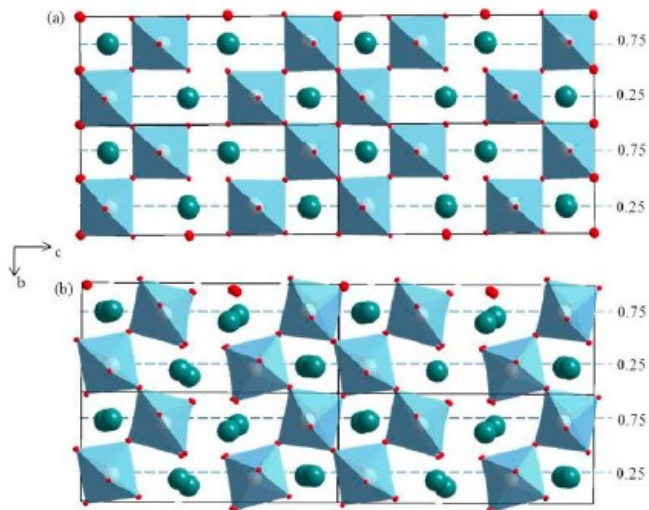


$$H\Psi = \left[-\sum_i^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_I^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I<J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \right] \Psi = E\Psi$$

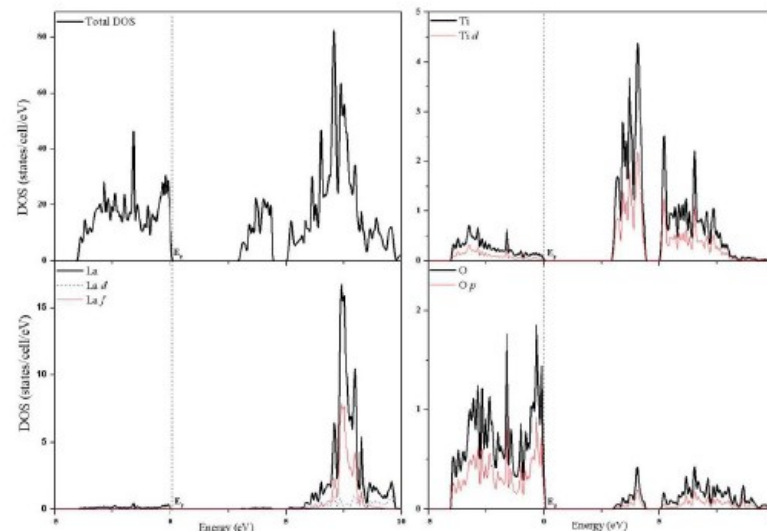
VASP, CRYSTAL, FPLAPW, GAUSSIAN...



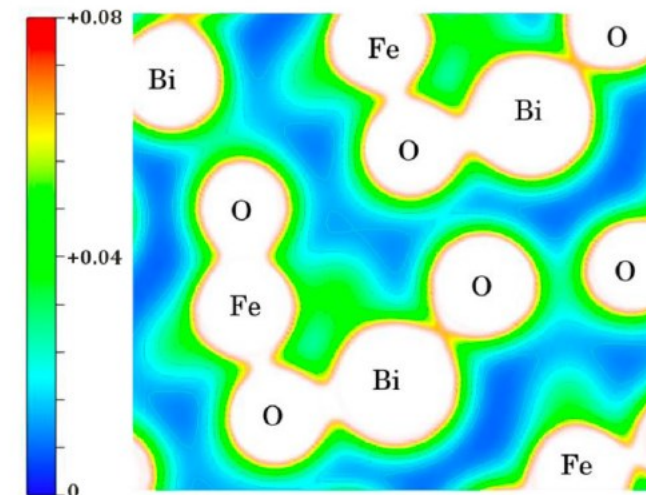
Propriétés ferroélectriques du $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$



Propriétés électroniques du $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$



Propriétés électroniques du BiFeO_3

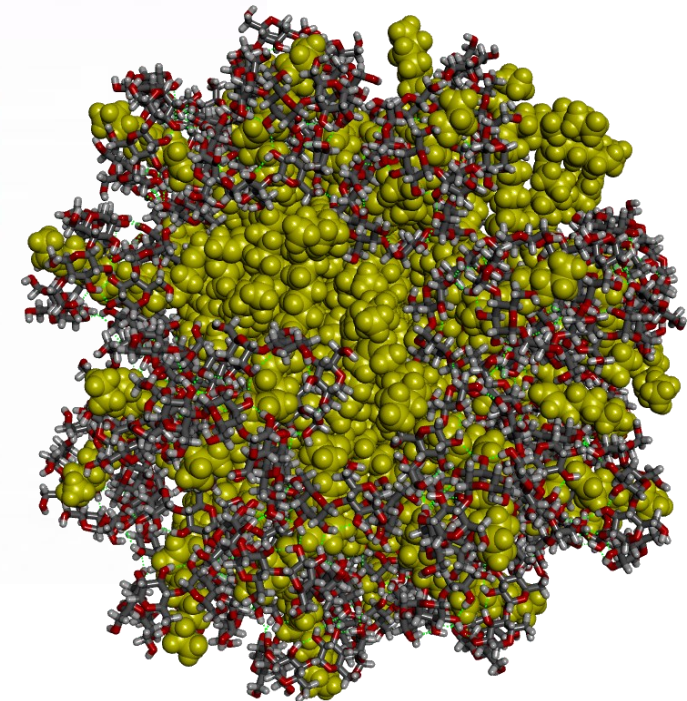
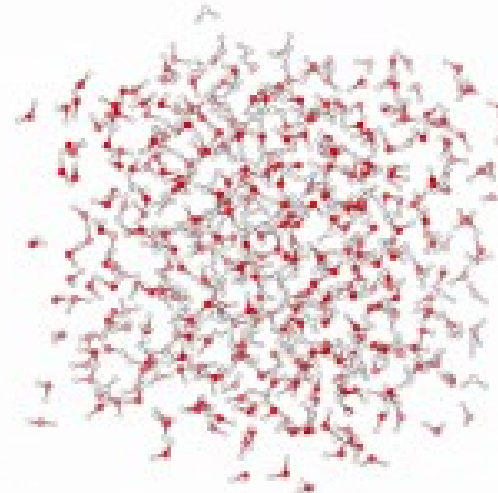


On résout donc simultanément, pour tous les atomes i d'un système, les équations classiques du mouvement.

$$\vec{f} = -\text{grad}(\vec{E}_p) = m_i \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = m_i \ddot{\vec{r}}(t)$$

$$\begin{array}{ccc} \vec{r}(t) & \xrightarrow{\vec{f} = m_i \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = a(t)} & \vec{r}(t + \delta t) \\ \vec{v}(t) & & \vec{v}(t + \delta t) \\ & \ddot{\vec{r}}(t) = a(t) = \frac{d\vec{v}(t)}{dt} = \dot{\vec{v}}(t) & \end{array}$$

Détermination de propriétés thermodynamiques d'un système micellaires.



$$E_{\text{total}} = \sum_{\text{bond}} k_r (r - r_{\text{eq}})^2 + \sum_{\text{angle}} k_\theta (\theta - \theta_{\text{eq}})^2 + \sum_{\text{dihedral}} \frac{v_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)]$$

$$+ \sum_{\text{nb}} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right] + \sum_{\text{nb}} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Dynamique Moléculaire à gros grains.

$$\vec{f} = -\text{grad}(\vec{E}_p) = m_i \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = m \ddot{\vec{r}}(t)$$

$$E_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < r_c$$

Lennard Jones (LJ)

$$F_{GH} = \sqrt{\theta} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \left[(k_n \theta n_{ij} - m_{eff} \gamma_n v_n) - (k_t \Delta s_t - m_{eff} \gamma_t v_t) \right]$$

Granular Hertzian (GH)



Schéma de modélisation basé sur MDGG pour le processus de fabrication d'une cathode d'une batterie solide.

Dynamique Moléculaire à gros grains.

Exemple de simulations de mélange, de séchage et de calandrage (96 % de NMC - 4 % de CBD, 32,67 % de compression).

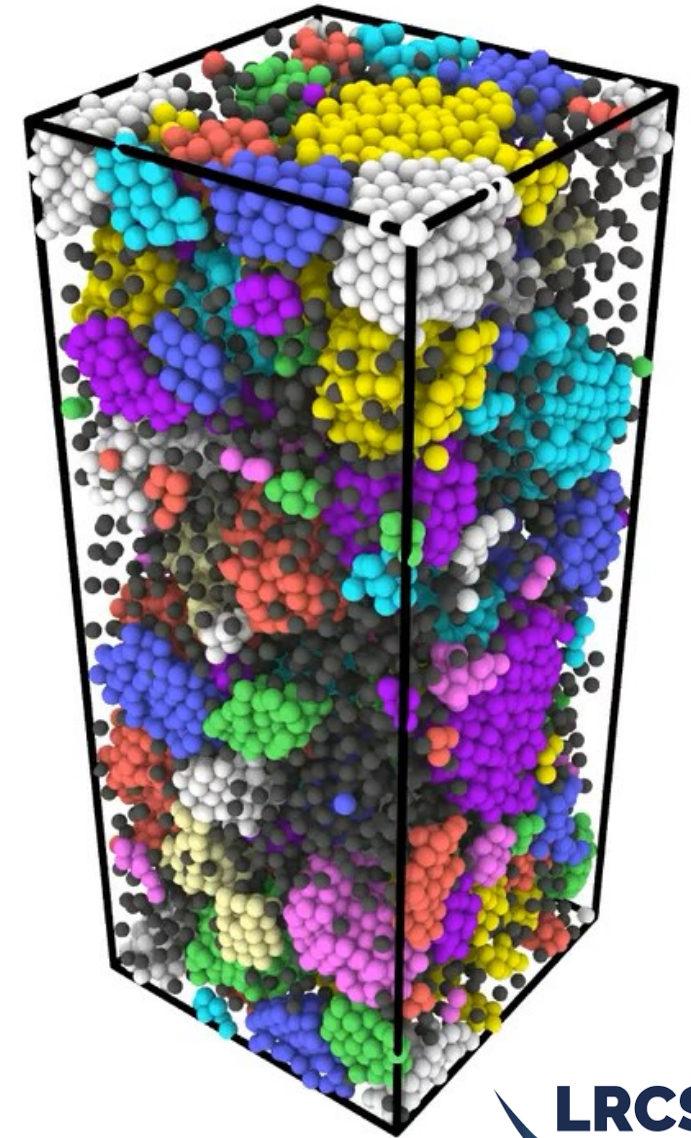
$$\vec{f} = -\text{grad}(\vec{E}_p) = m_i \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = m \ddot{\vec{r}}(t)$$

$$E_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < r_c$$

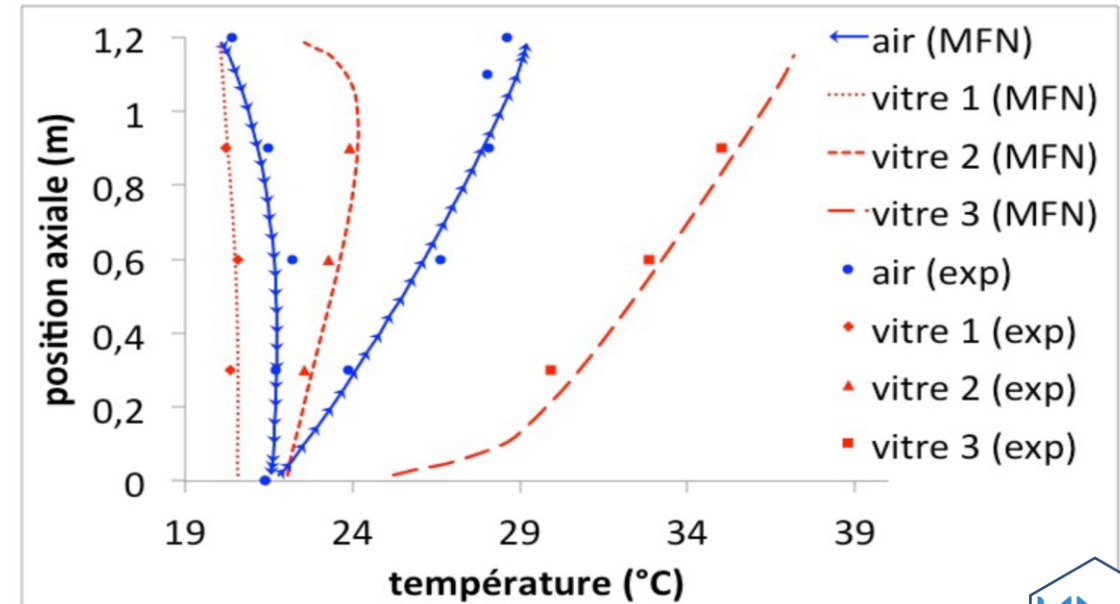
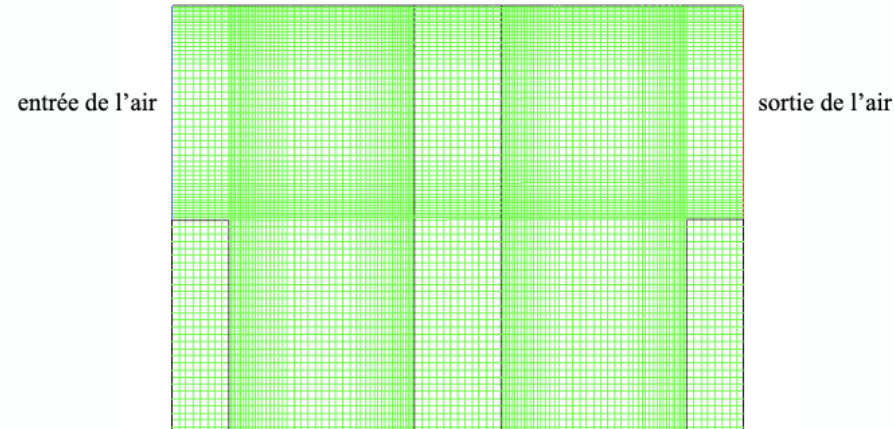
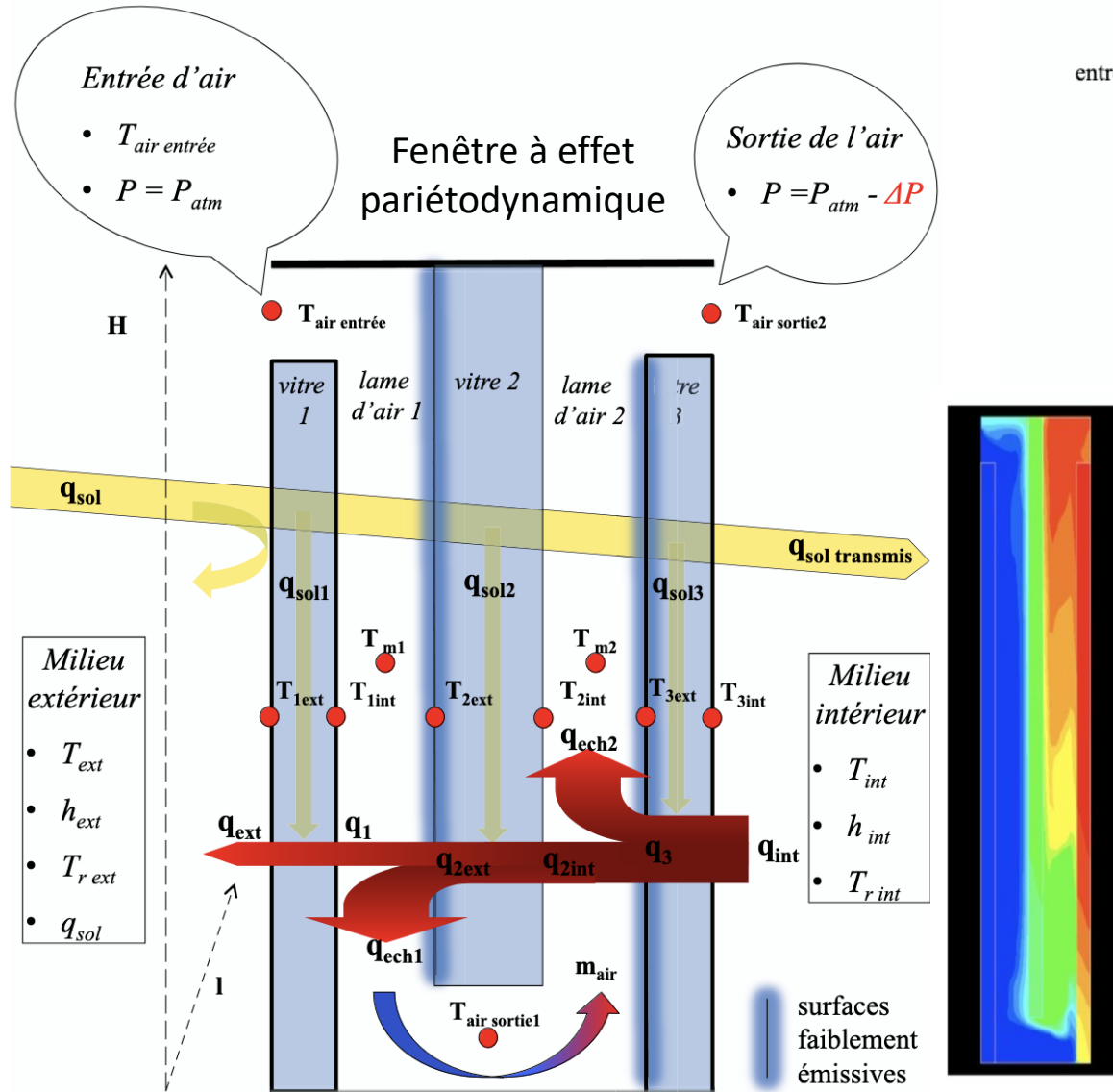
Lennard Jones (LJ)

$$F_{GH} = \sqrt{\theta} \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \left[(k_n \theta n_{ij} - m_{eff} \gamma_n v_n) - (k_t \Delta s_t - m_{eff} \gamma_t v_t) \right]$$

Granular Hertzian (GH)



Modèle MFN (Mécanique des Fluides Numériques)



Le but est de caractériser un matériau à changement de phase (MCP) et de simuler son comportement en fonction des sollicitations thermiques imposées afin de quantifier son impact sur l'efficacité énergétique du bâtiment, en termes de stockage et de restitution.

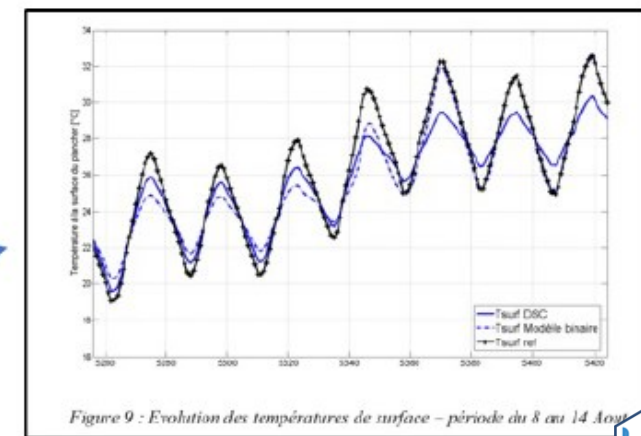
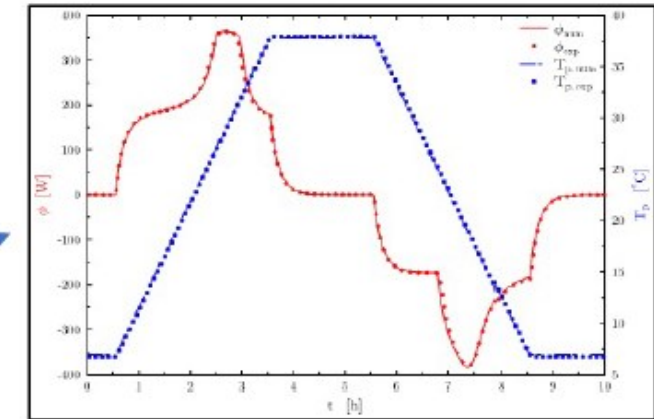
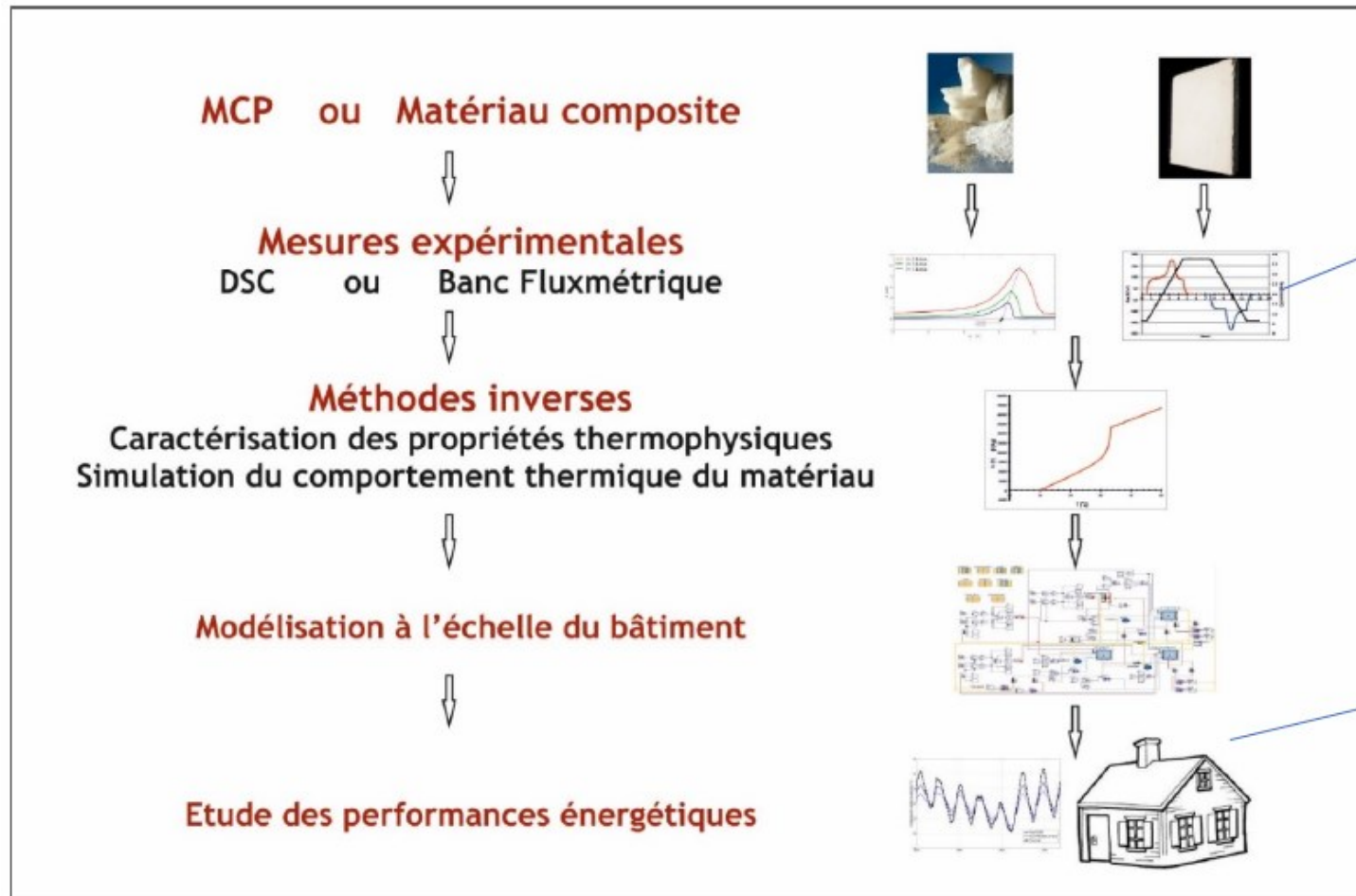
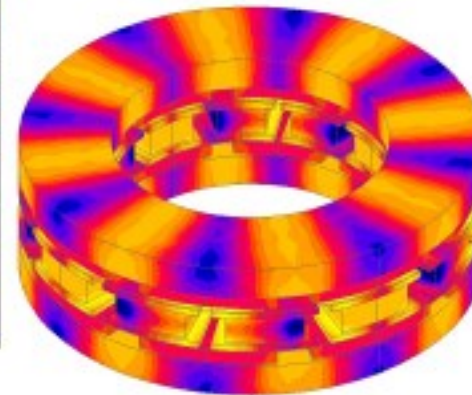
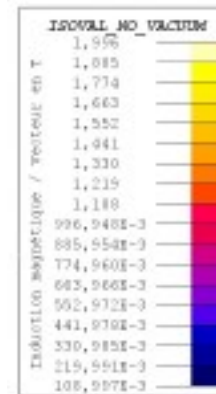
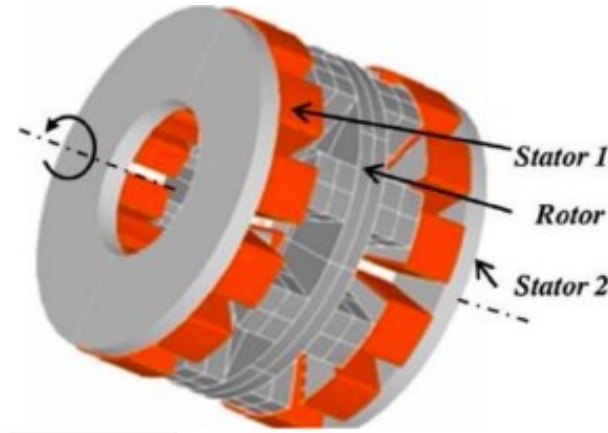
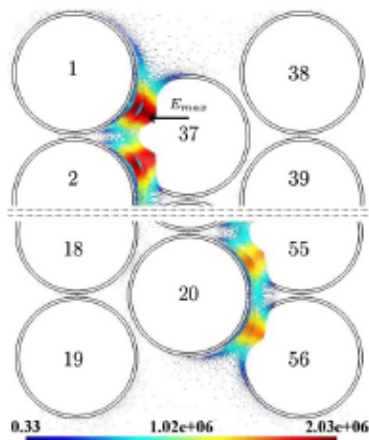


Figure 9 : Evolution des températures de surface – période du 8 au 14 Août

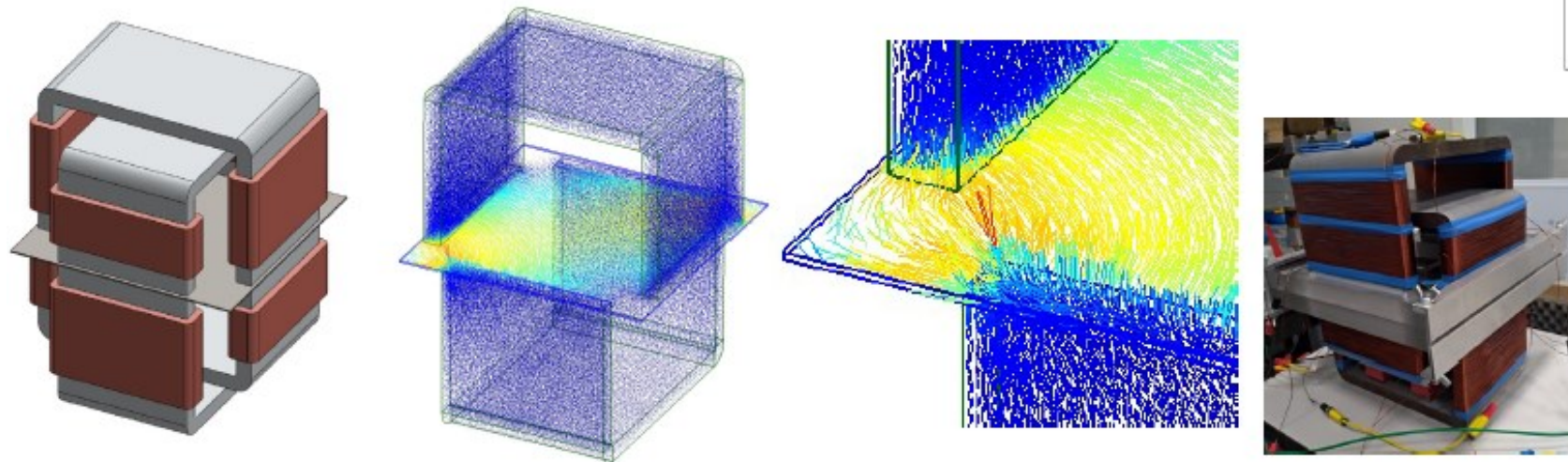
Évaluation des performances des machines tournantes

- Rendement / Efficacité Energétique / Densité de puissance
- Aide au dimensionnement multi-physique machines hautes performances



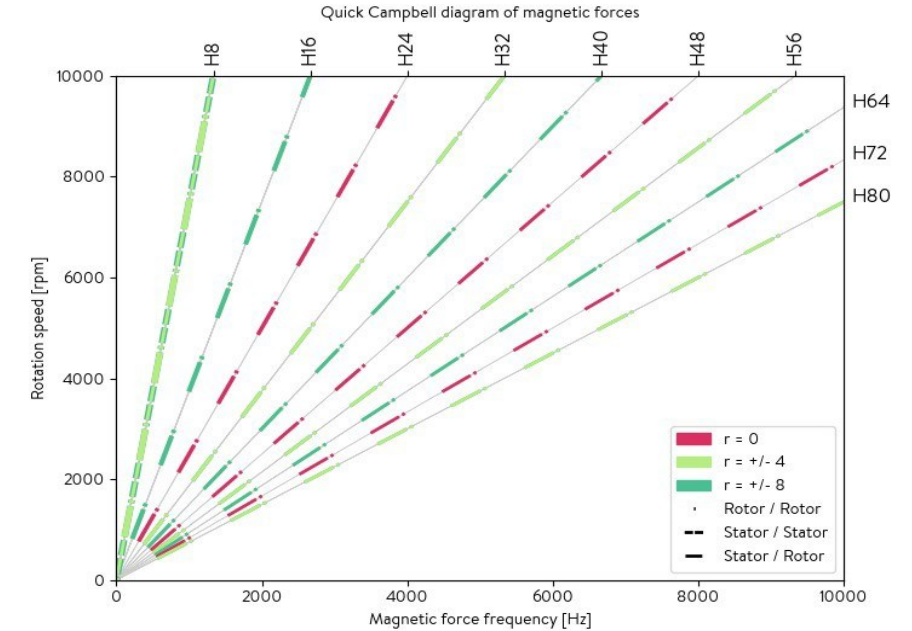
Dimensionnement de maquettes de laboratoire

- Étude de l'homogénéité des champs dans les échantillons sous test
- Choix des meilleurs capteurs pour la maquette réelle



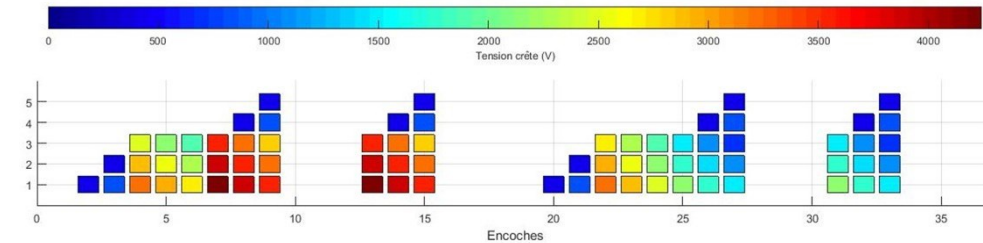
Méthodes analytiques

- Prédiction et réduction du bruit d'origine magnétique des machines

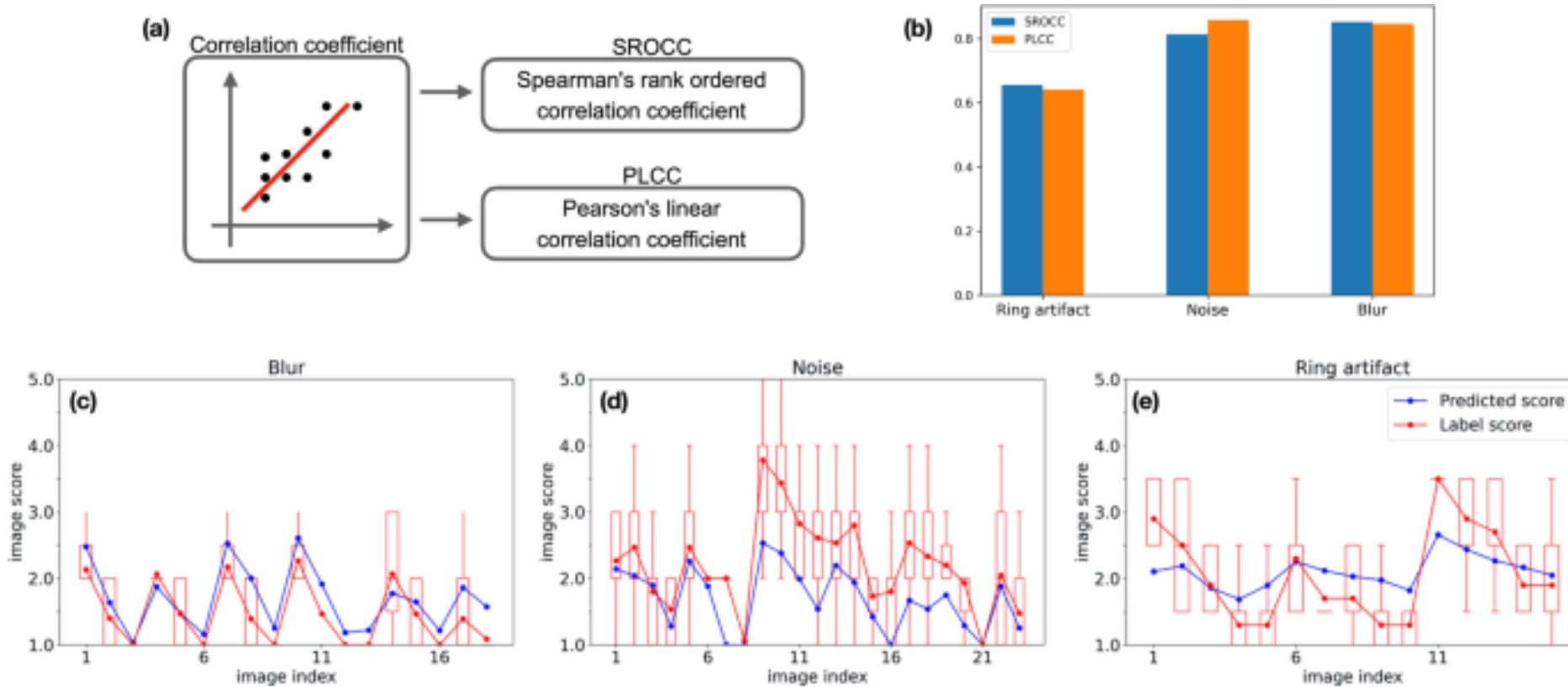


Méthodes Stochastiques

- Prédiction des seuils d'apparition des phénomènes de dégradation des diélectriques
- Modèles de vieillissement des machines

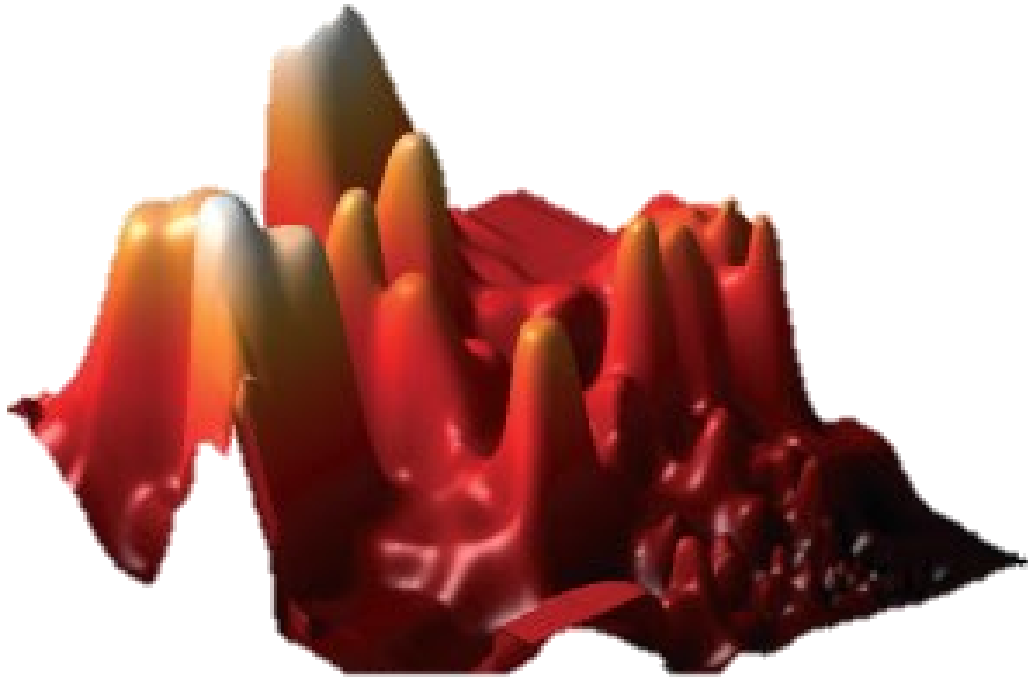


Utilisation de réseaux de neurones convolutionnels (CNN) pour évaluer la qualité des images tomographiques de rayons X.

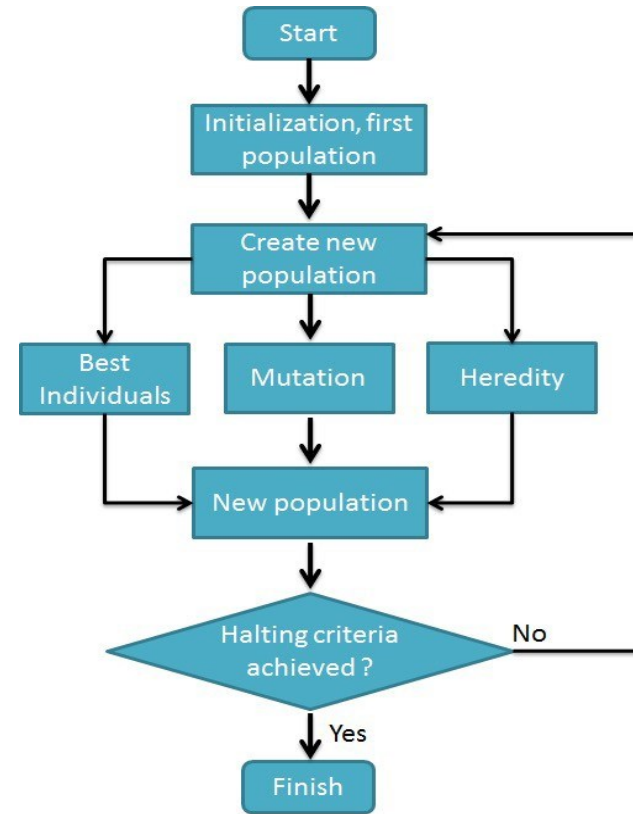


Algorithme évolutionnaire

Espace conformationnel (paysage énergétique)
d'une structure cristalline.

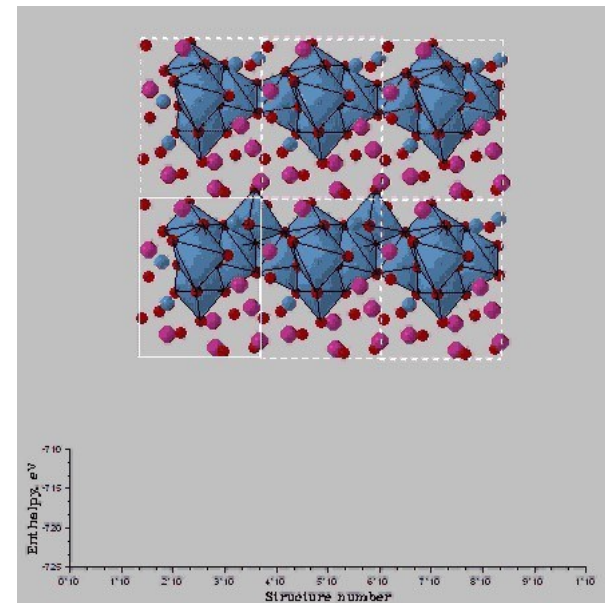


Un nombre de configurations très important !

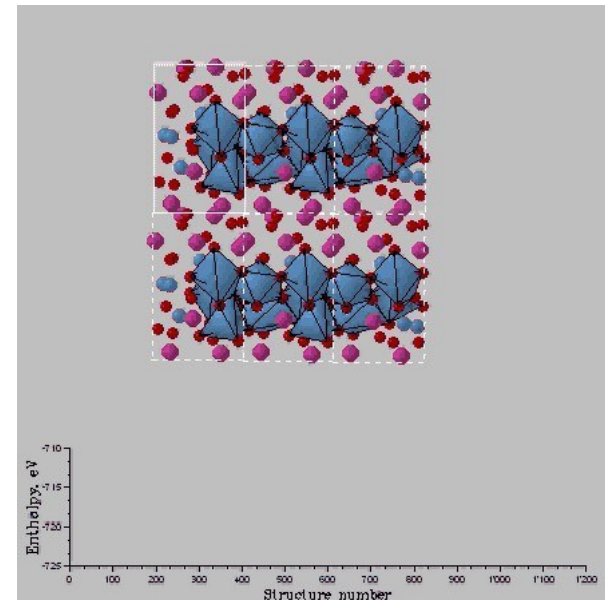


Algorithme évolutionnaire

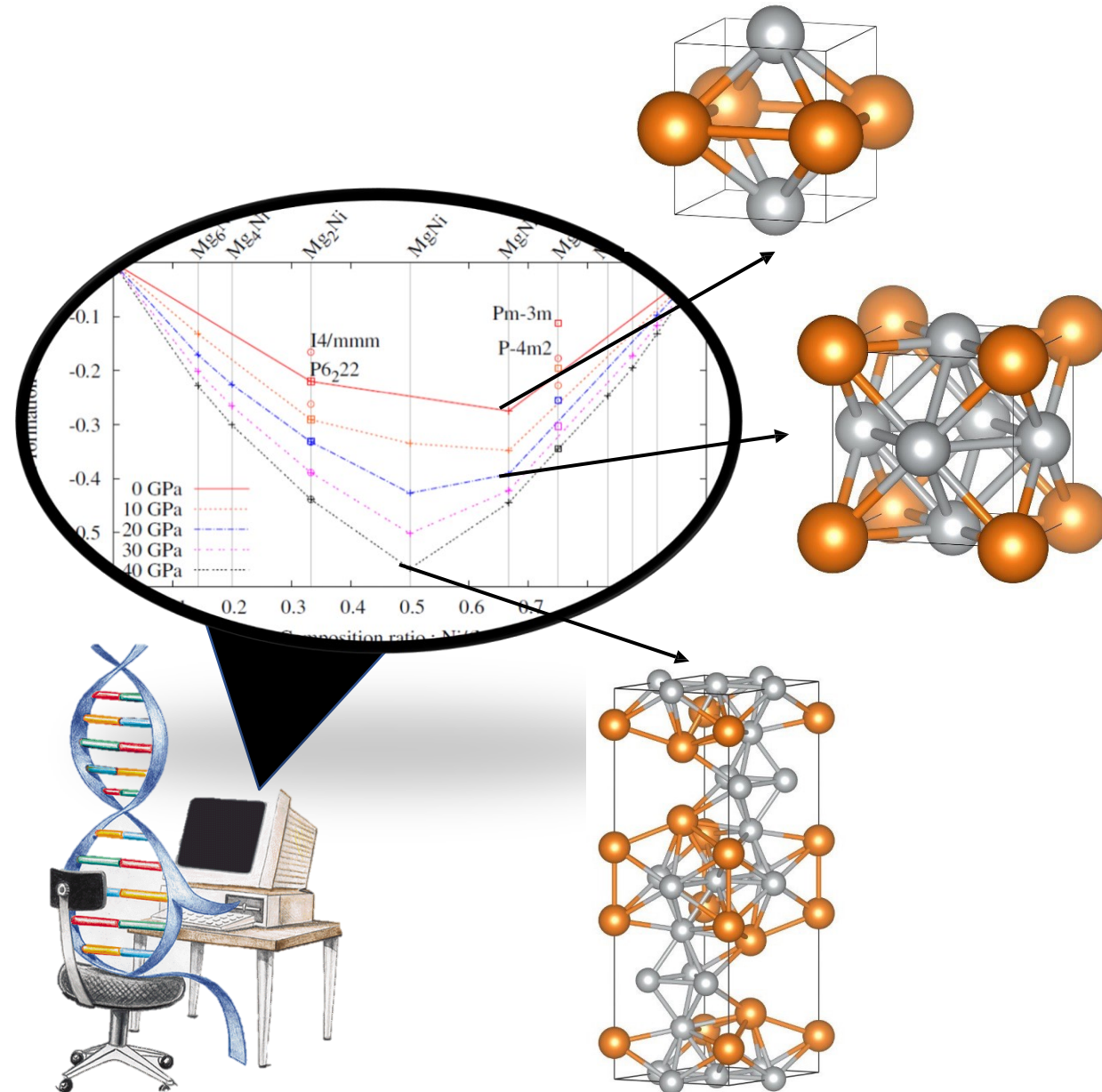
Classical sampling



Evolutionary sampling

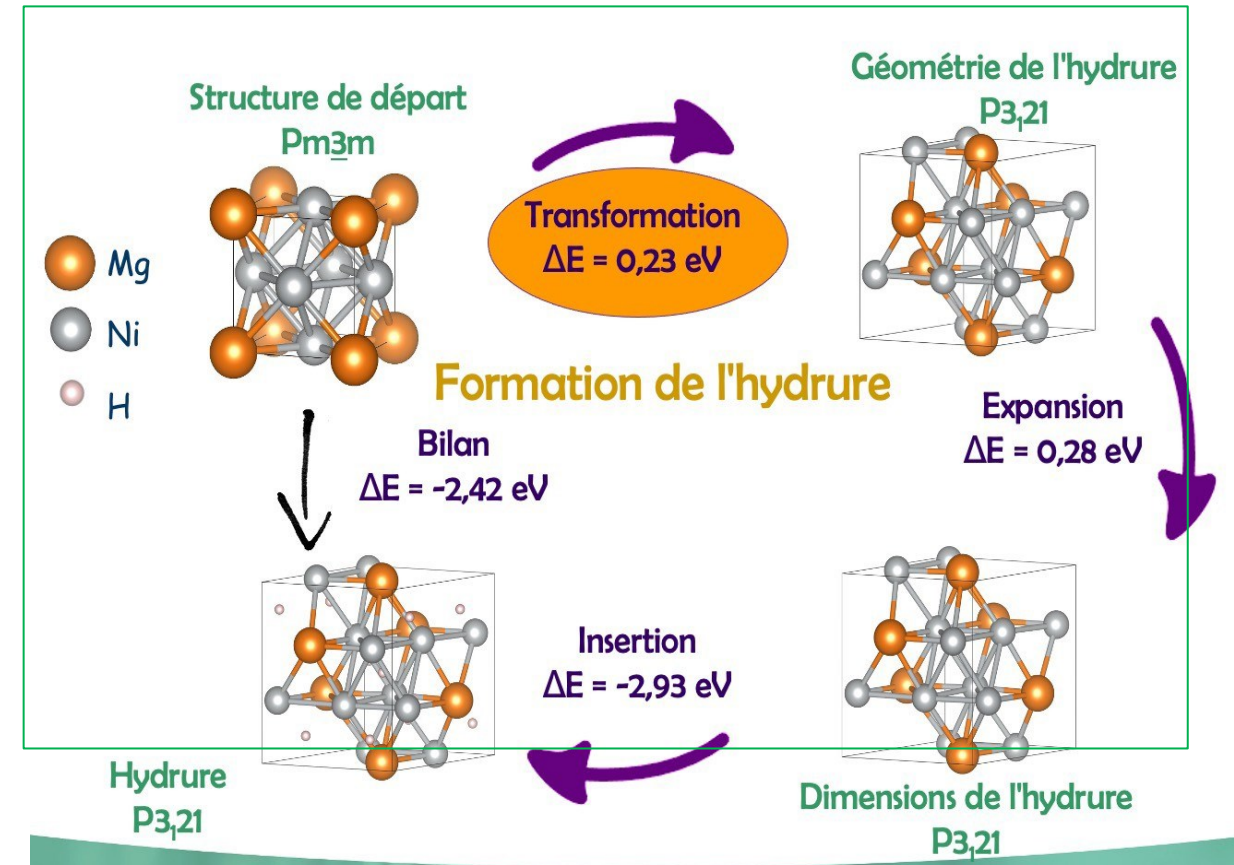


Algorithme évolutionnaire

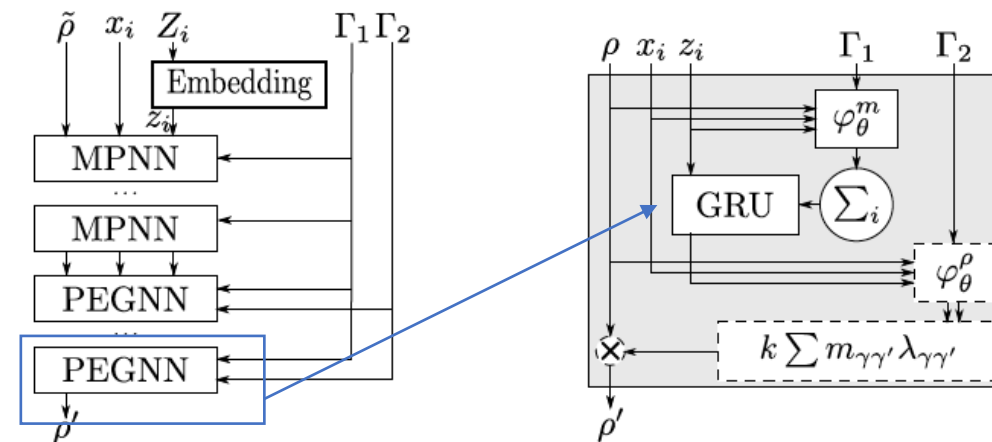
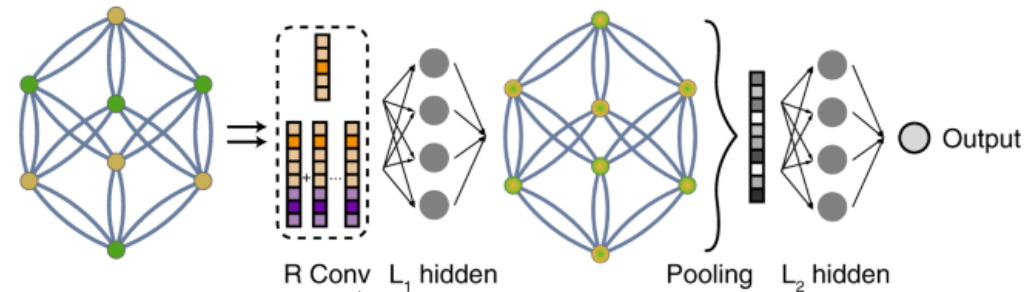
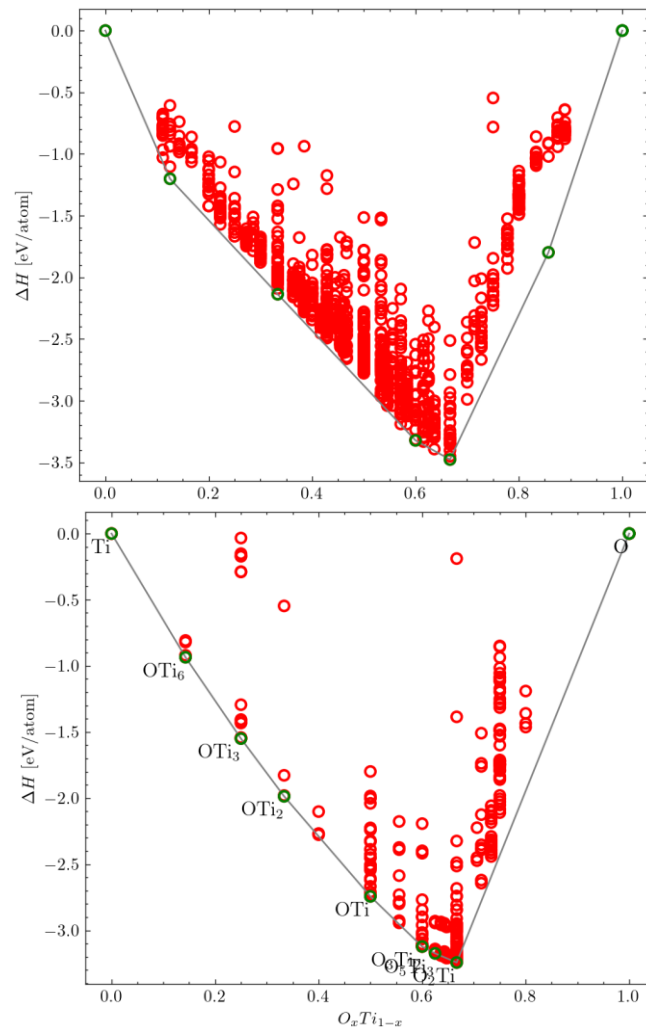


Hydrogénation de MgNi₃

Algorithme évolutionnaire couplé à des calculs DFT (Théorie de la Fonctionnelle)



Apprentissage Automatique (ML)



(a) Overview of our model

(b) EMPNN layer

Astrid Klipfel, Olivier Peltre, Najwa Harrati, Yael Fregier, Adlane Sayede, Zied Bouraoui, **Equivariant Message Passing Neural Network for Crystal Material Discovery** in *The 37th AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2023.

Chaire de Professeur Junior (CPI) IA – Chimie :

- Contrat de 3 ans avant titularisation dans le corps des professeurs des Universités.
- Financement ANR de 200K euros : financement de doctorant, post doc, contractuel IT....
- Rentrée 2024
- Contact : adlane.sayede@univ-artois.fr



UCCS - UMR CNRS 8181
Faculté des Science de Lens
Université d'Artois