

OPTIFOR® : OUTIL NEURONAL POUR L'OPTIMISATION DE LA FORMULATION

Objectifs

- Analyse graphique de données abondantes
- Prédiction des propriétés d'un mélange à partir de sa composition
- Prédiction des compositions des mélanges permettant d'obtenir des propriétés pré-déterminées.

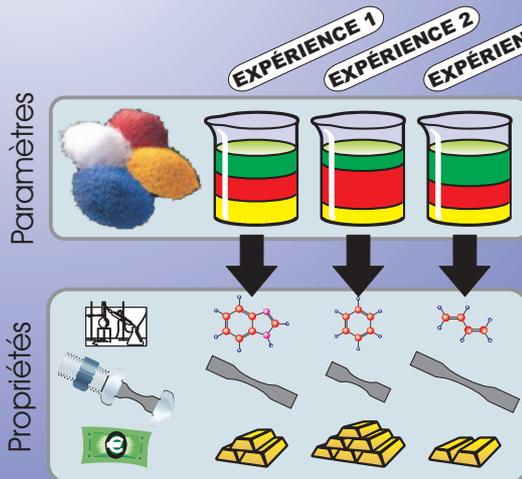
Contexte

- Absence d'outil performant d'aide à la formulation chimique
- Cahier des charges délivré par le CDR HUTCHINSON (M. Georget - Service Matériaux Rhéologie) à partir de plans d'expériences précis et exhaustifs

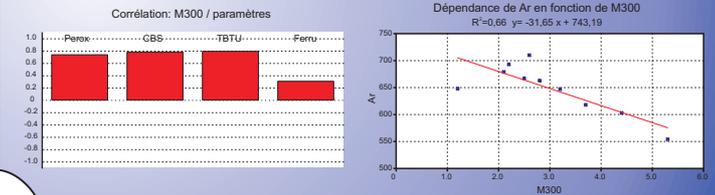
I - Construction évoluée de la base de données

Les données relatives à chaque mélange sont classées selon 2 catégories:

- les paramètres (composants du mélanges),
- les propriétés (critères d'appréciation du mélange).



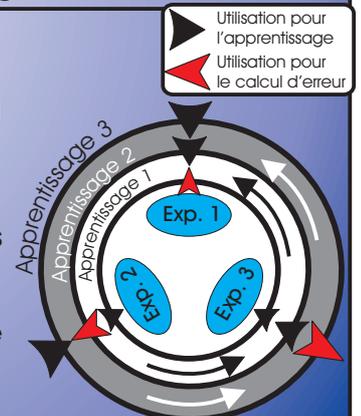
II - Analyse primaire de dépendances et de corrélations multiparamétriques



L'analyse des dépendances et des corrélations (paramètres et propriétés) donne une indication de la qualité de la base de données.

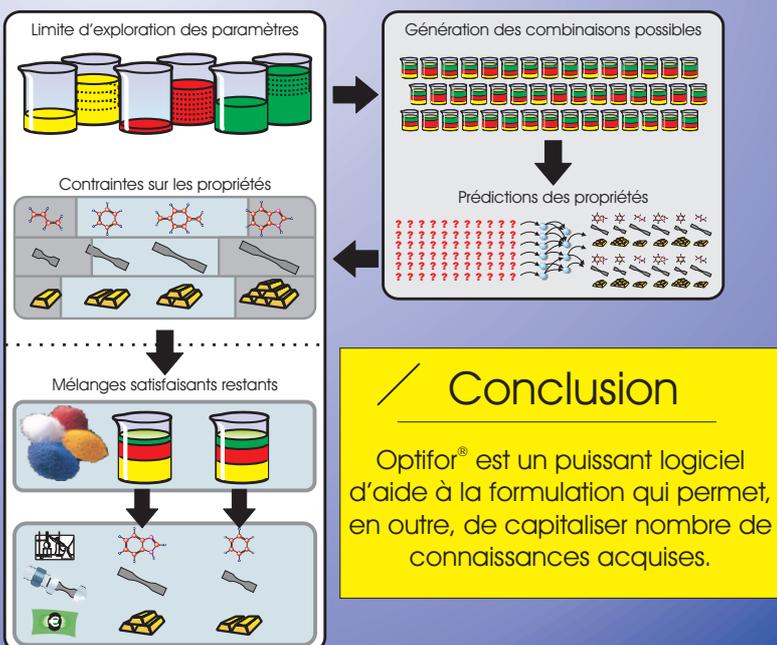
III - Calibration par erreurs tournantes et apprentissage neuronal

Parmi les expériences représentatives, une partie est utilisée pour l'entraînement du modèle neuronal, la partie restante servant à valider le modèle proposé. De nombreuses combinaisons de ces sous-ensembles sont testées, seule l'architecture neuronale la plus performante est retenue.



V - Optimisation de formules : contraintes multiparamétriques

Le modèle neuronal permet de recenser l'ensemble des mélanges répondant à des exigences définies par l'utilisateur concernant les paramètres (limites d'exploration) et les propriétés (contraintes).



IV - Prédiction de nouvelles formules

Le modèle neuronal permet de prédire les propriétés d'un mélange dont les paramètres sont définis par l'utilisateur. De plus, le réseau de neurones précise la sensibilité de chaque propriété à chacun des paramètres du mélange.

