

Stage de M2 recherche 2012
Planification d'expériences pour l'approximation fonctionnelle
CEA, DIF, F-91297 Arpajon, France

19 décembre 2011

Contexte scientifique

La modélisation statistique des codes numériques (Computer Experiments) est un domaine en plein essor depuis quelques années chez les industriels et académiques. En effet, les gros codes de calcul sont souvent utilisés pour étudier les systèmes physiques dont les expériences sont coûteuses voire irréalisables. Ces codes étant chers en temps de calcul, une conception basée sur une exploration exhaustive de l'espace des paramètres d'entrée est généralement impossible. Dans ce cas, une approximation mathématique de la sortie du code - également appelée métamodèle - est souvent construite à partir d'un nombre réduit d'appels au code de calcul.

Il existe de nombreuses méthodes de métamodélisation : krigeage, réseaux de neurones, splines, régression linéaire, régression locale... Elles dépendent toutes fortement du choix des points de simulation, *i.e* de la planification des expériences. Le sujet du stage repose sur l'étude des plans d'expériences de type space-filling (plans cherchant à explorer au mieux l'espace des paramètres d'entrée), souvent utilisés dans le cadre de l'approximation fonctionnelle.

Mots clefs : Optimisation, Hypercubes latins, Critères de planification d'expériences, méta modélisation.

Objectifs du stage

Parmi les différentes familles de plans d'expériences, ceux de type hypercube latin sont communément utilisés dans le domaine du Computer Experiments. Ils ont l'avantage de conserver une bonne représentation de l'espace des paramètres d'entrée lorsque l'on projette les points du plan sur une des dimensions.

De plus, pour avoir une idée de la performance de notre plan d'expériences, de nombreux critères ont été mis en place. Ils sont basés soit sur des mesures de distance entre les points du plan - distance minimax ou maximin - soit sur des mesures d'écart à la loi uniforme - Maximum d'entropie, mesure de discrèpanance... Il existe également des critères adaptés à certains types de métamodèle comme le critère IMSE (Integrated Mean Squarred Error) ou MaxMSE

(Maximum Mean Squared Error) pour les modèles de krigeage.

L'objectif de ce stage est de mettre en place une méthode de construction de plans d'expériences de type hypercube latin optimisés selon un ou plusieurs critères via une certaine méthode d'optimisation. L'optimisation d'un hypercube latin s'apparente à un problème d'optimisation combinatoire NP-difficile (il existe $(n!)^{d-1}$ LHS différents de dimension d). Une méthode arborescente ou heuristique sera donc nécessaire pour traiter ce problème. Nous nous concentrerons dans le cadre du stage aux méthodes de types heuristiques et plus particulièrement à la méthode « tabou » qui présente un fort potentiel et qui est très peu utilisée dans le cadre de la planification d'expériences. Nous comparerons cette méthode à d'autres méthodes plus largement utilisées comme celle du recuit-simulé et/ou de l'algorithme génétique.

Les différentes méthodes d'optimisation pourront être comparées en fonction du critère utilisés, de la dimension du problème, du coût de l'optimisation (en termes de temps de calcul), etc. Elles pourront également être comparées en fonction du métamodèle choisi (on prêtera une attention particulière au modèle de krigeage). La planification d'expériences et la méta-modélisation étant un domaine très vaste, le stagiaire pourra, s'il le souhaite, avoir une certaine marge de manoeuvre sur le sujet du stage.

Profil du candidat

Master 2 en mathématiques appliquées ou en troisième année d'école d'ingénieur spécialisation mathématiques appliquées avec de solides bases en probabilités/statistiques et des bases en optimisation.

Logiciels : R ou Matlab.

Références

- [Fang, Li & Sudjianto (2006)] K.T. FANG, R. LI AND A. SUDJIANTO, *Design and Modeling for Computer Experiments*, Computer Science and Data Analysis Series, 2006.
- [Rasmussen & Williams (2006)] C.E. RASMUSSEN AND C.K.I. WILLIAMS, *Gaussian Processes for Machine Learning*, the MIT Press, 2006.
- [Santner, Williams & Notz (2003)] T. J. SANTNER, B. J. WILLIAMS AND W. I. NOTZ, *The Design and Analysis of Computer Experiments*, Springer Series in Statistics, 2003.
- [Lacomme, Prins & Sevaux (2003)] P. LACOMME, C. PRINS AND M. SEVAUX, *Algorithmes de graphes*, Eyrolles, 2^e édition, 2003.

Contact et informations

Loïc Le Gratiet
mail : loic.le-gratiet@cea.fr
tel : 01 69 26 48 73

Le stage est rémunéré 1300€ brut/mois et il débutera en mars-avril prochain pour une durée de 6 mois. Les candidats intéressés devront faire passer un CV détaillé à l'adresse mail mentionnée ci-dessus.