

Design d'expériences assisté par optimisation bayésienne pour la découverte de nouveaux matériaux

CONTEXTE

La recherche de solutions toujours plus performantes, en phase avec les objectifs de Saint-Gobain d'atteindre la neutralité carbone pour 2050, nécessite une accélération de sa R&D. Les expériences proposées doivent converger plus rapidement vers de nouveaux matériaux essentiels pour l'habitat, la mobilité et les infrastructures. Dans ce contexte, l'utilisation des données R&D par des méthodes d'Intelligence Artificielle (IA) et d'optimisation avancée vont jouer un rôle décisif. Ce stage propose ainsi de contribuer à une approche novatrice, « Materials Informatics », qui combine des outils modélisation mathématique avec les connaissances issues de la science des matériaux. L'objectif de ce stage est d'accélérer la recherche des matériaux par des plans d'expériences itératifs s'appuyant sur des critères d'acquisition connus en optimisation bayésienne.



OBJECTIFS DU STAGE

Ce stage va principalement s'axer sur les développements (théoriques et/ou informatiques selon l'affinité) de solutions d'aide au design d'expériences utilisant de l'optimisation bayésienne. La problématique de création de nouveaux matériaux implique l'intégration de variables entières et de contraintes spécifiques dans le processus d'optimisation bayésienne. Le stage vise donc à :

- faire un état de l'art des différentes librairies de codes existantes pour l'optimisation bayésienne.
- proposer des solutions pour gérer la coexistence de variables entières et continues au sein d'un problème d'optimisation multi-objectifs.
- tester différents modèles et comparer leurs performances (processus Gaussiens, fonctions d'acquisitions, stratégies de design itératifs d'expériences).
- proposer des solutions pour inclure des lois physiques dans les modèles utilisés pour le design d'expériences.
- appliquer les méthodes développées sur des cas concrets de formulations de nouveaux matériaux.

PROFIL RECHERCHE

Etudiant de cycle ingénieur/Master en césure ou stage de fin d'études à l'aise avec l'optimisation, le Machine Learning et la programmation en Python. Des compétences en lien avec la physico-chimie des matériaux seraient un plus.

DUREE

6 mois à partir de Janvier 2024, poursuite en thèse possible.

LIEU

Ce stage aura lieu au sein du DataLab de Saint-Gobain Research Paris (39 Quai Lucien Lefranc, 93300 Aubervilliers) en collaboration avec l'ISAE-SUPAERO/ICA (Toulouse).

CONTACTS

Sébastien Deschamps (ingénieur R&D)
sebastien.deschamps2@saint-gobain.com

Félix Mouhat (ingénieur R&D)
felix.mouhat@saint-gobain.com

A PROPOS DE SAINT-GOBAIN

Leader mondial de la construction durable, Saint-Gobain conçoit, produit et distribue des matériaux et services pour les marchés de l'habitat et de l'industrie. Développées dans une dynamique d'innovation permanente, ses solutions intégrées pour la rénovation des bâtiments publics et privés, la construction légère et la décarbonation du monde de la construction et de l'industrie apportent durabilité et performance. L'engagement du Groupe est guidé par sa raison d'être « MAKING THE WORLD A BETTER HOME ».

51,2 milliards d'euros de chiffre d'affaires en 2022 168 000 collaborateurs dans 75 pays

Engagé à atteindre la Neutralité Carbone à 2050

Pour en savoir plus sur Saint-Gobain, Visitez <http://www.saint-gobain.com> et suivez-nous sur Twitter @saintgobain.

Saint-Gobain Research Paris est l'un des huit grands centres de recherche transversaux qui servent toutes les Activités de Saint-Gobain, <https://www.sgr-paris.saint-gobain.com/>