

Planification d'expériences pour codes numériques

Sujet de thèse proposé par

Luc Pronzato

CNRS - Laboratoire I3S - Sophia Antipolis

Dans de nombreux domaines l'utilisation de codes numériques supplée aujourd'hui les expérimentations physiques (on parle alors d'expériences simulées). Ces simulations (éléments finis par exemple) sont souvent très gourmandes en temps de calcul, et il est indispensable de disposer de modèles mathématiques simples permettant d'approximer le comportement du code de calcul si l'on veut par exemple optimiser le rendement d'un processus complexe, prédire la probabilité de défaillance d'un système, etc.

La qualité du modèle dépend fortement des expériences réalisées, c'est à dire de la valeur des entrées utilisées pour les simulations. L'utilisation de modèles stochastiques (krigeage par exemple) pour décrire des comportements déterministes mais en partie inconnus avant les simulations est aujourd'hui bien admise. La construction de méthodes permettant d'élaborer des expériences optimales pour la construction de modèles de ce type se heurte cependant à de nombreuses difficultés : prise en compte des paramètres inconnus dans le modèle stochastique, de l'objectif ultime de la modélisation, détection et prise en compte d'éventuelles non-stationnarités dans le modèle, construction séquentielle du plan d'expérience... Tous ces problèmes forment autant de pistes encore à explorer et sont au cœur des domaines étudiés dans le GdR MASCOT-NUM récemment créé (<http://www.gdr-mascotnum.fr/>).

Le sujet de thèse proposé porte sur la prise en compte de la présence de paramètres inconnus dans la matrice de covariance du processus stochastique lors de la construction d'un plan d'expérience. Il s'agira de construire tout d'abord un critère de planification d'expérience approprié, prenant en compte les conséquences d'une incertitude sur les paramètres de la covariance du processus sur l'objectif poursuivi par la modélisation par krigeage. Par exemple, dans le cas le plus simple où il s'agit de construire un modèle assurant une prédiction précise sur le domaine expérimental, il faudra prendre en compte la présence de ces paramètres incertains dans la construction de l'erreur quadratique moyenne de prédiction. Une piste naturelle consiste à utiliser un développement limité et à caractériser la précision sur les paramètres estimés par la matrice d'information de Fisher (avec cependant les difficultés d'usage liées au fait que tous les paramètres ne sont pas estimables dans le modèle : il est souhaitable de ne faire intervenir que les paramètres micro-ergodiques). La problématique est plus ouverte encore si l'objectif de la modélisation diffère d'une simple prédiction (problème d'optimisation par exemple).- Il faudra ensuite proposer des méthodes d'optimisation adaptées à ce critère, avec une attention particulière au cas séquentiel où les points de mesure (ou d'essai en simulation) sont choisis les uns après les autres, en fonction des résultats observés précédemment.

Les méthodes proposées auront pour objectif d'être appliquées sur divers codes de calcul, issus des membres industriels du GdR MASCOT-NUM, afin de valider leurs apports sur des cas pratiques. Il pourra s'agir par exemple de codes simulant des transitoires thermohydrauliques lors des analyses de sûreté des cœurs de réacteurs nucléaires, etc.