



OFFRE DE STAGE



DESCRIPTIF DU STAGE

Intitulé offre de stage : Modèles de régression par processus gaussiens : application à la formulation de fluides pour la mobilité.

Contexte du stage

TotalEnergies vise la neutralité carbone en 2050. Les lubrifiants, qui sont les fluides qui permettent à tous les systèmes mécaniques de fonctionner en maximisant leur efficacité énergétique, doivent être rapidement repensés pour répondre aux nouveaux besoins (véhicules électriques, éoliennes, etc.) en intégrant les principes d'écoconception (utilisation de matières premières recyclées, biosourcées, etc.)

Pour faire face à ce défi technique, la data et l'intelligence artificielle sont mobilisés pour permettre aux chercheurs de concevoir plus rapidement les lubrifiants de demain.

Plus spécifiquement, la mise en œuvre de modèles mathématiques construits à partir des données de caractérisation produites dans les laboratoires de recherche permet de prédire les propriétés des fluides et de tester virtuellement des milliers de formulations.

Missions confiées

La régression par processus gaussiens est particulièrement adaptée à la construction de ces modèles prédictifs, notamment parce qu'ils ont de bonnes propriétés lorsque la quantité de données est limitée et que le lien entre les entrées et les sorties n'est pas linéaire. Cependant la performance des modèles est pénalisée par deux caractéristiques du problème à résoudre :

1. Les variables cibles du modèle à construire ne constituent qu'un sous-ensemble de l'espace couvert par les données disponibles : il s'agit d'exploiter l'ensemble des données disponibles, mais on ne souhaite disposer d'estimation précises du modèle que dans le sous-espace formé par les variables cibles (les variables associées aux matières premières envisagées dans le contexte d'un projet particulier de formulation) ;
2. Compte tenu du mode de production des données (campagnes d'essais séparées) les données sont structurées en blocs (se recouvrant partiellement).

Les méthodes existantes ne sont pas adaptées au cas des matrices de données sparse par bloc et ne permettent pas d'optimiser la précision pour un sous-ensemble de variables.

Les objectifs du stage sont les suivants :

1. Explorer la structure des données de formulation disponibles (étude des corrélations, étude de la sparsité et identification de sous-ensembles de données cohérents)
2. Construire un modèle de régression par processus gaussien selon une approche classique afin de disposer d'une référence
3. Développer un modèle de régression par processus gaussien optimisé : développement et mise en œuvre de noyaux de covariance spécifiques tenant compte des propriétés des données et du niveau précision attendu différent selon les régions de l'espace

Le stage a pour objectif de préparer un travail de thèse qui visera à développer des méthodes de modélisation mathématique et d'optimisation pour la formulation.

Moyens et outils utilisés :

Le stage aura lieu au centre de recherche de Solaize. Le stagiaire aura accès aux outils informatiques (PC, environnement ML sur le cloud).



OFFRE DE STAGE



PROFIL RECHERCHE

Durée du stage : 6 mois

Date de démarrage souhaitée : T2 2025

Niveau d'études requis : master 2

Compétences techniques exigées : machine learning (modèles de régression, en particulier processus gaussiens), optimisation (sous contrainte, bayésienne, multi-objectif, optimisation combinatoire), python (pandas, scikit-learn).

Bonnes notions en chimie et physique, un fort intérêt pour les nouvelles solutions de mobilités et les nouvelles énergies.

Compétences comportementales : esprit d'analyse, curiosité intellectuelle, esprit de synthèse, rigueur, aisance relationnelle aptitude à travailler dans un contexte pluri-disciplinaire

Bon niveau d'anglais requis : OUI NON

Le stagiaire sera en lien étroit avec les équipes de chercheurs du centre de Recherche de Solaize et des enseignants-chercheurs du laboratoire de mathématiques (ICJ) de Centrale Lyon.

Contacts :

- Laurent Grosset (laurent.grosset@totalenergies.com)
- Christopette Blanchet-Scalliet (Christopette.Blanchet@ec-lyon.fr)
- Céline Helbert (Celine.Helbert@ec-lyon.fr)