



OPTIMISATION BAYESIENNE POUR LA RECHERCHE SUR LES MATERIAUX

OBJECTIF :

Présenter les fondements et la mise en œuvre pratique de l'optimisation Bayésienne, notamment pour optimiser des compositions, des paramètres de synthèse, des procédés expérimentaux ou des conditions de simulation lorsque chaque nouvelle expérience ou chaque nouveau calcul représente un coût important.

Exploiter conjointement les données déjà disponibles, les prédictions d'un modèle et leurs incertitudes afin de sélectionner, de manière séquentielle, les expériences ou calculs les plus informatifs.

À l'issue de la formation, les participants devront être capables de :

- Formuler un problème de recherche sur les matériaux sous la forme d'un problème d'optimisation séquentielle
- Comprendre le rôle du modèle probabiliste, de l'incertitude et des fonctions d'acquisition
- Mettre en place une première boucle d'optimisation Bayésienne à partir de données expérimentales ou numériques
- Traiter des variables de composition, de procédé ou de structure, ainsi que des contraintes expérimentales
- Interpréter les recommandations de l'algorithme et d'évaluer la progression de l'optimisation
- Identifier les principales limites et erreurs méthodologiques, notamment en présence de peu de données, de bruit expérimental ou de variables fortement corrélées

PUBLIC :

Cette formation est ouverte à tous, issus des secteurs public et privé :

-  Doctorants ou post-doctorants
-  Enseignants-chercheurs
-  Chercheurs / ingénieurs de recherche

PRÉREQUIS :

- Niveau d'anglais B2 (**la formation se déroule en anglais**)
- Ordinateur portable personnel nécessaire
- Des connaissances en Python sont un plus, mais ne sont pas indispensables.

PROGRAMME :

Lundi 23/11 après-midi :

Visite du GPM : Groupe de Physique des Matériaux

Introduction à l'apprentissage actif et à l'optimisation bayésienne

- Pourquoi utiliser l'apprentissage actif et l'optimisation bayésienne en recherche sur les matériaux
- Formulation d'un problème d'optimisation séquentielle
- Données, modèles prédictifs et estimation de l'incertitude
- Introduction aux modèles probabilistes et aux processus gaussiens
- Premiers exemples appliqués aux matériaux

PROGRAMME (suite) :

Mardi 24/11 matin : De la prédiction à la décision expérimentale

- Compromis exploration/exploitation
- Fonctions d'acquisition : Expected Improvement, Probability of Improvement, Upper Confidence Bound
- Construction d'une boucle complète d'optimisation bayésienne
- Variables continues, discrètes et catégorielles
- Bruit expérimental, contraintes et expériences impossibles
- Exercices et premiers travaux pratiques

Mardi 24/11 après-midi : Optimisation de problèmes réels en science des matériaux

- Active learning et optimisation bayésienne appliqués aux compositions, procédés et paramètres expérimentaux
- Optimisation sous contraintes
- Introduction à l'optimisation multiobjectif et aux fronts de Pareto
- Sélection de plusieurs expériences en parallèle
- Travaux pratiques sur des cas représentatifs de recherche sur les matériaux
- Analyse et interprétation des recommandations proposées par les algorithmes

Jeudi 25/11 matin : Mise en œuvre complète et bonnes pratiques

- Construction d'une campagne d'optimisation de bout en bout
- Évolution du modèle et de son incertitude au cours des cycles expérimentaux
- Critères d'arrêt et évaluation de la progression
- Reproductibilité et principales erreurs méthodologiques
- Discussion à partir des problématiques des participants
- Synthèse et perspectives

FORMATEUR :



Guillaume LAMBARD :

Senior Researcher au NIMS (Japon), au sein du Data-driven Materials Design Group.

Professeur associé à l'Université de Kyushu. Spécialiste de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique appliqués aux matériaux.

SESSION :

GPM : 23-24-25 novembre 2026
(Saint Etienne du Rouvray – 76)

DURÉE :

2 jours (14h)

MODALITÉ :

Présentiel

REPAS (pris en charge) :

Dîner d'accueil le 23/11 au soir (optionnel)
Plateau-repas du 24/11 midi

Renseignements et inscription :

Attention places limitées (10 max)



Elodie ISTE :
05 87 50 23 32
[diadem-formationcontinue-
contact@unilim.fr](mailto:diadem-formationcontinue-contact@unilim.fr)