

Stage Master 2 :

Modélisation des systèmes réactionnels oxydatifs : optimisation évolutionnaire multi-objectifs et visualisation de fronts de Pareto.

Contexte

Ce stage se déroulera dans le cadre d'une collaboration entre l'équipe MALICES de l'UMR GMPA de Versailles-Grignon, l'UMR GENIAL d'AgroParisTech de Massy, et l'UR QuaPA de Clermont-Ferrand-Theix. Cette collaboration (AIC EvOxyde) vise à développer des outils algorithmiques d'aide à la modélisation de systèmes réactionnels oxydatifs.

Buts du stage

Sur la base des outils développés au cours de la première année de l'AIC EvOxyde, ainsi que par l'UR QuaPA depuis plusieurs années, le stagiaire aura à programmer un algorithme génétique et une interface de visualisation pour :

- l'apprentissage de paramètres inconnus d'un modèle à partir de jeux de données expérimentales,
- l'exploration interactive du comportement du modèle, afin de permettre des remises en question de différents choix de modélisation (nombre et structure des réactions, forme de la ou des fonctions à optimiser).

Nous exploiterons notamment le simulateur (SIMULOX) développé par l'UR QuaPA sous Matlab : il comprend un programme de résolution des ODEs qui utilise en entrée une base de données de constantes réactionnelles. Dans le cas d'un modèle mathématique tel que SIMULOX, comportant de très nombreux paramètres, l'apprentissage de paramètres sur des données expérimentales ne peut se faire par des méthodes d'apprentissage ou d'optimisation classique, et repose sur l'usage d'heuristiques stochastiques.

Algorithmes évolutionnaires, algorithmes génétiques

Les heuristiques évolutionnaires désignent un ensemble de techniques d'optimisation stochastique fondées sur une transposition informatique des principes d'évolution Darwinienne (<http://evelyne.lutton.free.fr/EvolutionaryAlgorithms.html>). Ces méthodes consistent grossièrement à simuler l'évolution d'une population sous l'action de règles Darwinistes (sélection, mutation, croisement). Des populations de points évoluent dans un espace de recherche sous l'action conjuguée de variations aléatoires (croisement par échange d'informations entre plusieurs points, mutation par perturbation locale sur un point) et d'un processus de sélection (les meilleurs gagnent, au regard d'une fonction définie sur l'espace de recherche considéré, dite fonction d'évaluation ou fitness). La souplesse de ces techniques permet de traiter des problèmes d'optimisation difficiles, inaccessibles aux techniques déterministes, au prix bien-sûr d'un coût algorithmique plus important.

Par ailleurs, la formulation de la résolution d'un problème d'optimisation complexe par le

biais de l'évolution d'une population revient à effectuer un échantillonnage irrégulier de l'espace de recherche : ce mode d'exploration permet de gagner plus d'information sur la forme de l'espace de recherche et la nature du problème d'optimisation que la seule localisation d'un optimum global. L'équipe MALICES du GMPA a pu montrer qu'une analyse fondée sur des visualisations de l'échantillonnage de l'espace effectué par un algorithme évolutionnaire permettait de mettre en évidence la présence de corrélations entre paramètres (Lutton et al, 2013).

Exploration interactive de front de Pareto

Les techniques évolutionnaires peuvent être aussi exploitées pour l'optimisation simultanée de plusieurs objectifs (évolution multi-objectif, Deb 2001), et permettent de produire un échantillonnage du front de Pareto, c'est-à-dire de l'ensemble des compromis « optimaux » entre objectifs (notion de dominance de Pareto). Dans le cadre de la modélisation, cette stratégie ouvre des possibilités très intéressantes pour l'exploration du comportement de modèles, mais cela nécessite le développement d'interfaces conviviales et adaptées (Lotov, 2008).

Prérequis

- Bonnes compétences en programmation (matlab, java), apprentissage, et développement d'interfaces.
- Un intérêt pour la recherche (ce stage pourra éventuellement déboucher sur une thèse).
- Une connaissance des méthodes évolutionnaires et de visualisation sera un plus.
- Il n'est pas nécessaire d'avoir des connaissances en chimie pour aborder ce sujet, mais l'étudiant aura à collaborer avec des chimistes et des biologistes.

Lieu de travail

UMR GMPA, Thiverval-Grignon.

Encadrement

Evelyne Lutton, UMR GMPA (<http://evelyne-lutton.fr>)
Alberto Tonda, UM GMPA

Pour candidater

Envoyez CV et lettre de motivation à Evelyne.Lutton@grignon.inra.fr et Alberto.Tonda@grignon.inra.fr

Quelques références pour commencer

Avila, S.L. (2006), Optimisation multi-objectif et analyse de sensibilité appliquées à la conception de dispositifs. Application : Synthèse d'antennes à réflecteur embarquées dans un satellite, Thèse de L'Ecole Centrale de Lyon, 23 février 2006. (http://tel.archives-ouvertes.fr/docs/00/06/42/99/PDF/These_ECL2006-05_Avila.pdf)

Barichard, V. et Hao, J.K.(2004), Résolution d'un problème d'analyse de sensibilité par un algorithme d'optimisation multiobjectif, 5^{ème} Conférence Francophone de MOdélisation et SIMulation « Modélisation et simulation pour l'analyse et l'optimisation des systèmes industriels et logistiques » MOSIM'04, 1-3 septembre 2004, Nantes, France, (http://www.info.univ-angers.fr/~barichard/page_perso/publications/2004/barichard_hao-MOSIM2004.pdf)

Daudin, J. D., and Broyart, B. (2013) Modélisation de nombreuses réactions interactives dans les aliments : exemples de travaux et identification des verrous, In Séminaire INCOM, INRA-CEPIA, Avril, Paris.

Deb, K. (2001). Multi-objective optimization using evolutionary algorithms. Chichester, London: Wiley.

- Deguillaume, L., Leriche, M., & Chaumerliac, N. (2005). Impact of radical versus non-radical pathway in the Fenton chemistry on the iron redox cycle in clouds, *Chemosphere*, 60, 718-724.
- Duestenberg, C. K. & Waite, T. D. (2007). Kinetic modeling of the oxidation of p-hydroxybenzoic acid by Fenton's reagent: Implications of the role of quinones in the redox cycling of iron, *Environmental Science & Technology*, 41, 4103-4110.
- Duestenberg, C. K. & Waite, T. D. (2006). Process Optimization of Fenton Oxidation Using Kinetic Modeling, *Environmental Science & Technology*, 40, 4189-4195.
- Heyd, B., Broyart, B., Maillard, M.-N. (2009). New oils for pan-frying applications. In 7th Euro Fed Lipid Congress – Lipids, fats and oil: from knowledge to application, October 18-21, Graz, Austria.
- Lutton, E., Tonda, A., Gaucel, S., Fouquier, J., Riaublanc, A. and Perrot, N. (2013), Food model exploration through evolutionary optimization coupled with visualization: application to the prediction of a milk gel structure. In *From Model Foods to Food Models*. DREAM Project's International Conference, June 2013.
- [Alexander V. Lotov](#), [Kaisa Miettinen](#), Visualizing the Pareto Frontier. [Multiobjective Optimization](#). [Lecture Notes in Computer Science](#) Volume 5252, 2008, pp 213-243
- Packham, I.S.J., Rafiq, M.Y., Borthwick, M.F. and Denham, S.L. (2005), Interactive visualisation for decision support and evaluation of robustness—in theory and in practice, *Advanced Engineering Informatics*, Volume 19, Issue 4, October 2005, Pages 263-280,
- Promeyrat, A (2013). Analyse et modélisation des mécanismes à l'origine des modifications des protéines lors du chauffage du tissu musculaire. Thèse de doctorat des Universités de Clermont-Ferrand, ED Sciences de la Vie et de la Santé. 397p.
- Promeyrat A., Daudin J-D., Gatellier, P. (2013). Kinetics of protein physicochemical changes induced by heating in meat using mimetic model: (1) effects of heat and oxidants, *Food Chemistry*, 138, 581-589.
- Promeyrat A., Daudin J-D., Astruc T., Danon J., Gatellier P. (2013). Kinetics of protein physicochemical changes induced by heating in meat using mimetic model: (2) effects of fibre type, nature of peroxides, and antioxidants, *Food Chemistry*, 138, 2283-2290.
- Promeyrat, A., Gatellier, P., Broyart, B., Kondjoyan, A., and Daudin, J. D. (2013) Modelling oxidation and denaturation of meat proteins during cooking, In *DREAM International Conference: 'From model foods to food models'*, 24-26 June 2013, Nantes, France.
- Ramirez, J. H., Duarte, F. M., Martins, F. G., Costa, C. A., and Madeira, L. M. (2009). Modelling of the synthetic dye Orange II degradation using Fenton's reagent : From batch to continuous reactor operation, *Chemical Engineering Journal*, 148, 394-404.
- Rivas, F. J., Beltran, F. J., Frades, J., & Buxeda, P. (2001b). Oxidation of p-hydroxybenzoic acid by Fenton's reagent. Protein quality and microbiological changes in aerobically- or vacuum-packaged, irradiated fresh pork loins, *Water Research*, 35, 387-396.
- Rivas, F. J., Beltrín, F. J., Gimeno, O., & Frades, J. (2001a). Treatment of Olive Oil Mill Wastewater by Fenton's Reagent, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 49, 1873-1880.
- Roman, O., Castillo, R., Cuvelier, M. E., Broyart, B., and Maillard, M. N. (2010) The Effect of Temperature and Oxygen Availability on Lipid Oxidation in Sunflower Bulk Oil and Oil-in-Water Emulsion . In *8th Euro Fed Lipid Congress (November 21-24, Munich, Germany)*. Présentation de poster.
- Roman, O. (2012). Mesure et prédiction de la réactivité des lipides au cours du chauffage d'huiles végétales à haute température, Thèse de doctorat : sciences des aliments, AgroParisTech, Massy, 172 p.
- Roman, O., Heyd, B., Broyart, B., Castillo, R., Maillard, M.-N. (2013). Oxydative reactivity of unsaturated fatty acids from sunflower, high oleic sunflower and rapeseed oils subjected to heat treatments, under controlled conditions. *LWT – Food Science and Technology*, vol. 52, p. 49-59.
- Van Boekel, M.A.J.S. (2008). Kinetic Modelling of Reactions in Foods *Food Science and Technology*. (Taylor & Francis, Boca Raton, F.L.).