

Proposition de Sujet de Thèse pour Contrat Doctoral UCA

Adresse e-mail à utiliser pour toute correspondance :

regis.duvigneau@club-internet.fr

Titre de la thèse

Optimisation multi-fidélité par une méthode de Galerkin Discontinue avec raffinement h-/p-

Thesis Title

Multi-fidelity optimization using a Discontinuous Galerkin method with h-/p- refinement

Directeur de Thèse (HDR ou assimilé)

Nom : DUVIGNEAU

Prénom : Régis

Téléphone : 0492387177

Courriel : regis.duvigneau@inria.fr

Laboratoire d'accueil

INRIA-ACUMES

Co-directeur

Nom : Binois

Prénom : Mickaël

HDR : Non

Unité de recherche : INRIA-ACUMES

Téléphone : 0492387625

Courriel : mickael.binois@inria.fr

Domaine Scientifique

DS1 - Mathématiques et leurs Interactions

Description du sujet

L'optimisation de systèmes complexes, reposant sur des simulations numériques, est actuellement en forte croissance dans le domaine industriel, par exemple en aéronautique ou télécommunication. L'approche consiste à mettre en oeuvre un algorithme d'optimisation qui va chercher la valeur optimale d'un ensemble de paramètres x , en pilotant un simulateur estimant la valeur de la fonction coût $f(x)$ pour chaque jeu de paramètres proposé. Une difficulté majeure réside dans le temps de calcul nécessaire à chaque simulation, qui peut s'élever à plusieurs heures lorsque des modèles numériques fins sont utilisés. L'optimisation doit donc tenir compte d'un budget de calcul fortement contraint et, en pratique, limité à quelques dizaines de simulations.

Dans ce contexte difficile, les méthodes d'optimisation Bayésiennes [1] ont récemment démontré leur capacité à fournir des résultats intéressants. L'approche consiste à construire, sur la base de quelques observations de la fonction coût, un modèle statistique de type Processus Gaussien, qui est ensuite enrichi itérativement en déterminant les paramètres maximisant l'amélioration espérée [2] et en simulant les configurations correspondantes. Cette approche s'est révélée très flexible, capable de tenir compte d'incertitudes (observations bruitées), réaliser des simulations en parallèle ou prendre en compte plusieurs fonctions coûts. Cette approche a été utilisée avec succès pour différentes applications au sein de l'équipe Acumes, commune au laboratoire de mathématiques Jean-Alexandre Dieudonné et au centre Inria de l'Université Côte d'Azur.

Dans la perspective de s'appuyer sur des simulations extrêmement coûteuses, on s'intéresse dans cette thèse à étendre cette méthode à l'optimisation multi-fidélité. L'idée est de mixer plusieurs niveaux d'estimation de la fonction coût au cours de l'optimisation, pour progresser plus rapidement. En effet, dans l'hypothèse où on dispose de différentes méthodes d'estimation de la fonction coût, hiérarchisées en terme de précision et coût de calcul, l'algorithme peut certainement s'appuyer parfois sur des estimations moins précises, mais également moins coûteuses, si celles-ci sont suffisamment corrélées aux estimations fines. L'objectif est alors de converger vers l'optimum, pour l'estimation la plus fine, est s'appuyant au maximum sur des estimations plus grossières. Cette approche a été principalement proposée par Le Gratiet [3]. Un point important de l'algorithme est la sélection du (des) niveau(x) de fidélité à utiliser pour chaque nouvelle simulation. Pour cela, on cherche à déterminer quel(s) niveau(x) est (sont) le(s) plus pertinent(s), en terme d'information fournie et de coût de calcul. Un résultat attendu de cette thèse est la comparaison de différentes formulations et la proposition de nouvelles approches pour cette étape clé.

La plupart des applications réalisées et publiées dans la littérature concernent l'utilisation de différents modèles physiques pour représenter les niveaux d'estimation, i.e., différentes équations aux dérivées partielles. Dans cette thèse, on souhaite au contraire explorer l'utilisation des algorithmes multi-fidélités sur la base de différentes approximations numériques de la solution. Ainsi, on considérera un seul modèle physique, par exemple les équations de Navier-Stokes pour l'aérodynamique ou les équations de Maxwell pour l'électromagnétique, associé à différentes discrétisations en espace et temps. Dans cette perspective, on s'appuiera sur une méthode de Galerkin Discontinue pour la résolution des équations aux dérivées partielles [4], utilisée par l'équipe depuis plusieurs années et permettant d'affiner l'approximation arbitrairement, en augmentant le nombre d'éléments

du maillage (type h-) ou le degré des éléments (type p-). Un second résultat attendu est donc un algorithme d'optimisation multi-fidélité sélectionnant automatiquement les niveaux de raffinement h- et p- pertinents pour un problème donné. Les applications visées concernent l'aérodynamique, par exemple l'optimisation de formes de profils d'aile, ou encore l'électromagnétique, par exemple l'optimisation de meta-surfaces optiques. Les contributions méthodologiques de la thèse donneront lieu à la publication d'articles dans des revues internationales.

Le travail de thèse s'appuiera sur l'environnement logiciel R, pour la partie optimisation Bayésienne, et sur un code de simulation existant basé sur la méthode de Galerkin Discontinue, incluant un raffinement h- et p-. Les contributions logicielles pourront donner lieu à la diffusion de packages R implémentant les algorithmes développés.

Description of the thesis

The optimization of complex systems, based on numerical simulations, is currently growing strongly in industry, for example in aeronautics or telecommunications. The approach consists in implementing an optimization algorithm which will seek for the optimal value of a set of parameters x , by controlling a simulator estimating the value of the cost function $f(x)$ for each set of parameters proposed. A major difficulty lies in the computational time required for each simulation, which can amount to several hours when fine numerical models are used. Optimization must therefore take into account a highly constrained computational budget, which is in practice limited to a few dozen simulations.

In this difficult context, Bayesian optimization methods [1] have recently demonstrated their ability to provide interesting results. The approach consists in building, on the basis of some observations of the cost function, a statistical model of Gaussian Process type, which is then enriched iteratively by determining the parameters maximizing the expected improvement [2] and by simulating the corresponding configurations. This approach has proven to be very flexible, capable of taking into account uncertainties (noisy observations), performing simulations in parallel or taking into account several cost functions. This approach has been successfully applied to various applications within the Acumes team, common to the Jean-Alexandre Dieudonné mathematics lab. and to the Inria Center at Université Côte d'Azur.

In the perspective of relying on extremely expensive simulations, we are interested in this thesis in extending this method to multi-fidelity optimization. The idea is to mix several estimation levels of the cost function during the optimization, to progress more quickly. Indeed, assuming that there are different methods for the estimation of the cost function, hierarchical in terms of accuracy and computational cost, the algorithm can certainly sometimes rely on less accurate, but also less expensive, estimates, if these are sufficiently correlated with the fine estimates. The objective is then to converge towards the optimum, for the finest estimate, by using as much as possible coarser estimates. This approach was mainly proposed by Le Gratiet [3]. An important point of the algorithm is the selection of the level(s) of fidelity to use for each new simulation. For this, we seek to determine which level(s) is (are) the most relevant, in terms of information provided and computational cost. An expected result of this thesis is the comparison of different formulations and the proposal of new approaches for this key step.

Most of the applications achieved and published in the literature concern the use of

different physical models to represent the estimation levels, i.e., different partial differential equations. In this thesis, we want to explore the use of multi-fidelity algorithms on the basis of different numerical approximations of the solution. Thus, we will consider a single physical model, for example the Navier-Stokes equations for aerodynamics or the Maxwell equations for electromagnetics, associated with different discretizations in space and time. In this perspective, we will rely on a Discontinuous Galerkin method for the resolution of partial differential equations [4], used by the team for several years and allowing to refine the approximation arbitrarily, by increasing the number of elements in the mesh (type h-) or the degree of the elements (type p-). A second expected result is therefore a multi-fidelity optimization algorithm automatically selecting the h- and p-refinement levels relevant to a given problem. The applications targeted concern aerodynamics, for example the optimization of the shape of wing profiles, or electromagnetics, for example the optimization of optical meta-surfaces. The methodological contributions of the thesis will lead to the publication of articles in international journals.

The thesis work will be based on the R software environment, for the Bayesian optimization part, and on an existing simulation code based on the Discontinuous Galerkin method, including h- and p- refinements. Software contributions may give rise to the distribution of R packages implementing the algorithms developed.

Informations complémentaires

References:

- [1] D. J. MacKay. Bayesian interpolation. *Neural Computation*, 4(415-447), 1991.
- [2] D. Jones. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, 13(4), 1998
- [3] L. L. Gratiet and J. Garnier. Recursive co-kriging model for design of computer experiments with multiple levels of fidelity. *Int. J. for Uncertainty Quantification*, 4(5):365-386, 2014.
- [4] J. S. Hesthaven and T. Warburton. *Nodal Discontinuous Galerkin Methods*. Springer, 2008.

Profile of the applicant : applied mathematics, scientific computing. Knowledge in optimization and partial differential equations will be a plus.