

Optimisation d'un simulateur numérique coûteux en présence d'entrées quantitatives et qualitatives

Sujet de la thèse

Les chercheurs du Département Optique et Photonique (DOPT) du CEA-LETI développent des dispositifs photoniques (circuits photoniques intégrés, capteurs, imageurs, etc.). La conception de ces objets de haute technologie fait intervenir de nombreuses variables en termes de propriétés physiques des matériaux et de géométrie. Aussi se tourne-t-on de plus en plus fréquemment vers l'optimisation numérique, qui permet, en principe, d'atteindre plus rapidement les objectifs fixés par le cahier des charges. Cependant, la modélisation de ces micro-composants passe par des simulations numériques coûteuses (méthode des éléments finis ou des différences finies dans le domaine temporel par exemple), qui ne peuvent pas être directement intégrées dans le processus d'optimisation numérique aussitôt que le nombre de paramètres dépasse quelques unités.

Le recours à la métamodélisation [1] permet dans certains cas de pallier cette difficulté : à partir d'un nombre réduit de calculs haute-fidélité, correspondant à un échantillonnage judicieusement choisi de l'espace des paramètres, le métamodèle permet d'évaluer la réponse du système à d'autres jeux de paramètres. Ainsi, après une phase d'apprentissage et de création, le métamodèle, qui est considérablement plus rapide que le modèle initial, tout en conservant une précision suffisante, est utilisable pour l'optimisation.

Les méthodes développées actuellement au laboratoire permettent de déterminer les valeurs optimales de paramètres quantitatifs (largueur d'un guide optique, courant injecté, etc.). Cependant, elles ne sont pas adaptées aux problèmes, pourtant couramment rencontrés dans nos dispositifs, comportant aussi des variables qualitatives (nombre de couches dans un empilement, matériau A ou B dans une région du composant, etc.).

L'objectif de cette thèse est donc de proposer de nouvelles méthodes de métamodélisation [2] et d'optimisation applicables aux problèmes mixtes, i.e. comprenant simultanément des variables qualitatives et quantitatives. La transposition de stratégies adaptatives [3], permettant d'améliorer progressivement le métamodèle lors de la localisation de l'optimum, sera particulièrement étudiée.

De plus, les deux problématiques connexes de la multifidélité et de la calibration, seront aussi abordées :

- l'approche multifidélité est utilisable lorsque le même phénomène physique peut être analysé à l'aide de deux ou plusieurs modèles plus ou moins précis et coûteux. On établit habituellement un métamodèle de la différence entre les réponses des deux simulateurs [4] mais il est plutôt envisagé ici d'assimiler les différents simulateurs aux niveaux d'une variable qualitative.
- lors de la calibration, il s'agit d'identifier les paramètres du simulateur tels que la réponse calculée s'approche au mieux d'expériences réelles en prenant en compte leurs incertitudes. La calibration en présence de variables qualitatives a été très peu étudiée à notre connaissance.

Contexte

Ce sujet s'inscrit dans le cadre de la collaboration entre le CEA-LETI et la Chaire OQUAIDO en mathématiques appliquées.

Le CEA-LETI est l'un des principaux centres de recherche européens en microélectronique. Le DOPT est spécialisé dans la conception, la fabrication et la caractérisation de composants optiques et optoélectroniques. Les chercheurs du DOPT utilisent souvent des simulateurs coûteux en ressources informatiques pour concevoir ces composants. Ils disposent d'une boîte à outil de métamodélisation, développée en interne sous MATLAB, permettant notamment la métamodélisation multi-fidélité et l'optimisation robuste.

La Chaire OQUAIDO réunit, au niveau national, des partenaires académiques et de recherche technologique pour résoudre des problèmes liés à l'exploitation des simulateurs numériques, tels que la quantification d'incertitudes, l'inversion et l'optimisation. L'Ecole des Mines de Saint-Etienne, qui héberge la Chaire, a développé au cours des dix dernières années une recherche du meilleur niveau international dans ces domaines. Les problèmes mixtes figurent parmi les verrous scientifiques identifiés par la Chaire et le travail a commencé sur le sujet [5].

Le CEA-DAM, partenaire de la Chaire, recourt massivement à la simulation numérique. Le laboratoire d'analyse et de quantification des incertitudes a développé une expertise importante en métamodélisation et en calibration de codes coûteux. Le cas test proposé à la Chaire OQUAIDO par le CEA-DAM s'inscrit parfaitement dans la problématique de la thèse et constituera l'un des cas d'application.

Travail demandé

Le travail du doctorant consistera dans un premier temps à décrire l'état de l'art dans le domaine de la métamodélisation et de l'optimisation des problèmes mixtes. Sur cette base, il devra ensuite imaginer et mettre en oeuvre les méthodes les plus efficaces et les mieux adaptées à la conception de nos dispositifs. Les méthodes développées seront successivement testées sur des cas jouet, permettant de les évaluer objectivement, puis sur des problèmes représentatifs des besoins du laboratoire (photonique sur silicium, etc.), ainsi que sur le cas test proposé par le CEA-DAM.

Les développements gagneront à s'appuyer sur les packages R produits par la Chaire OQUAIDO ou sur d'autres logiciels pertinents pour les besoins de la thèse. Ils seront intégrés à la boîte à outil MATLAB de métamodélisation et d'optimisation qui capitalise le savoir-faire du DOPT dans le domaine.

Bibliographie

- [1] A. Forrester, D. A. Sobester, and A. Keane, *Engineering Design via Surrogate Modelling: A Practical Guide*. John Wiley & Sons, 2008.
- [2] Y. Zhang and W. I. Notz, "Computer Experiments with Qualitative and Quantitative Variables: A Review and Reexamination," *Qual. Eng.*, vol. 27, no. 1, pp. 2–13, Jan. 2015.
- [3] D. R. Jones, M. Schonlau, and W. J. Welch, "Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions," *J. Glob. Optim.*, vol. 13, pp. 455–492, Dec. 1998.
- [4] C. Durantin, J. Rouxel, J.-A. Désidéri, and A. Glière, "Multifidelity surrogate modeling based on radial basis functions," *Struct. Multidiscip. Optim.*, vol. 56, no. 5, pp. 1061–1075, Nov. 2017.
- [5] O. Roustant, E. Padonou, Y. Deville, A. Clément, G. Perrin, J. Giorla and H. Wynn, "Group covariance functions for Gaussian process metamodels with categorical inputs," in preparation.

Profil du candidat

Le candidat a suivi une formation approfondie en mathématiques appliquées, notamment optimisation et modélisation probabiliste, et a développé des compétences en génie logiciel. Il est intéressé par la physique et ses applications, notamment pour la recherche technologique. Il maîtrise l'utilisation de logiciels scientifiques tels que R et MATLAB.

Le poste est basé à Grenoble au sein du Laboratoire des Capteurs Optiques. Le doctorant bénéficiera des logiciels et des moyens de calcul disponibles au DOPT (simulateurs, grappe de calcul). Il pourra également effectuer des séjours de recherche à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne.

Mots clé

Apprentissage statistique, Expérimentation numérique, Codes coûteux, Entrées mixtes, Modélisation multi-physiques

Contacts

Olivier Roustant (Prof., HDR) Directeur de thèse Ecole des Mines de Saint-Etienne	Alain Glière (HDR) co-Directeur de thèse, encadrant CEA CEA - LETI DOPT/LCO
+33 (0)4 77 42 66 75 roustant@emse.fr	+33 (0)4 38 78 37 57 alain.gliere@cea.fr