

# Régression par processus Gaussiens pour des entrées en grande dimension

**Mots-clefs** : machine learning, processus Gaussiens, noyaux entre graphes, noyaux entre noeuds de graphes, grande dimension, simulation numérique

## Introduction

Dans les phases de conception des pièces de nouveaux produits, la simulation numérique est désormais omniprésente pour prédire le comportement et les performances des pièces, permettant ainsi de trouver les bonnes caractéristiques (géométriques, types de matériaux, etc.) pour atteindre les spécifications voulues. Identifier ces caractéristiques passe par la résolution d'un problème d'optimisation, ce qui implique de faire appel au code de simulation numérique de nombreuses fois, de quelques dizaines à plusieurs centaines. Cependant, le temps de retour des codes de calcul peut atteindre plusieurs heures ou quelques jours, ce qui rend l'optimisation trop coûteuse pour les délais accordés en phase de conception. Pour contourner ce problème, l'approche la plus utilisée se base sur la construction de modèles de régression statistique appelés communément méta-modèles ou surfaces de réponse (modèle linéaire, régression par processus Gaussiens, polynômes de chaos, réseaux de neurones, ...). Une fois entraîné, le méta-modèle est utilisé pour prédire les quantités d'intérêt pour de nouvelles combinaisons des entrées non simulées (à but d'optimisation, de propagation d'incertitudes, etc.). En mécanique des solides et des fluides, la dimension des variables d'entrée est très élevée car ces dernières sont souvent issues d'une paramétrisation d'une forme 3D. Une approche pour gérer de telles variables consiste à considérer plutôt directement la forme 3D sous la forme d'un graphe.

## Objectifs

L'enjeu de cette thèse est de contribuer à améliorer la prédictivité des méta-modèles processus Gaussiens sur des espaces de graphes de grandes dimensions. Malgré tous leurs atouts, les processus Gaussiens ont cependant des limitations pratiques liées au fléau de la dimension. La définition de noyaux entre graphes n'est pas nouvelle, et il existe un certain nombre d'articles de revues très complets sur le sujet [1, 2]. Malheureusement, les noyaux de l'état de l'art ont une complexité en fonction du nombre de nœuds extrêmement pénalisante, et s'appliquent principalement à des graphes dont les nœuds sont labellisés. Le premier objectif de la thèse sera donc de proposer de nouvelles approches pour construire des noyaux entre graphes de faible complexité par rapport au nombre de nœuds, et capables de considérer des nœuds associés à des variables continues quelconques. Une autre direction de recherche complémentaire concerne la construction de noyaux entre les nœuds-mêmes d'un graphe. En effet de nombreux cas pratiques de conception impliquent d'identifier la valeur optimale pour des paramètres discrets et non continus, c'est-à-dire des paramètres qui prennent des valeurs dans un ensemble fini non ordonné. On pourra notamment considérer l'approche proposée par [3] qui s'appuie sur la représentation des paramètres discrets sous la forme d'un graphe. On s'intéressera ici aux approches possibles pour augmenter le nombre d'hyperparamètres de ce genre de noyaux. On s'attend à identifier un équilibre en choisissant de manière optimale quels hyper-paramètres introduire, voire même à les sélectionner automatiquement de manière parcimonieuse.

Ces développements pourront être utilisés pour assister la conception de pièces mécaniques telles que des aubes de turbines Safran en dynamique des fluides. A l'aide de processus Gaussiens efficaces en grande dimension, les quantités d'intérêts utiles pour le dimensionnement des aubes pourraient être prédites rapidement et ainsi permettre aux ingénieurs d'explorer l'espace de conception plus facilement.

## Modalités

- Financement : thèse CIFRE Safran.
- Contacts : B. Staber ([brian.staber@safrangroup.com](mailto:brian.staber@safrangroup.com)), J. Garnier ([josselin.garnier@polytechnique.edu](mailto:josselin.garnier@polytechnique.edu)).
- Etablissement d'accueil : La thèse sera réalisée au sein de la plateforme Sciences et Techniques du Numérique (STN) de Safran Tech (78117, Châteaufort), en collaboration avec le Centre de Mathématiques Appliquées (CMAP) de l'Ecole Polytechnique.
- Date de début espérée : septembre/octobre 2022.

## References

- [1] Kriege, N. M., Johansson, F. D., & Morris, C. (2020). A survey on graph kernels. *Applied Network Science*, 5(1), 1-42.
- [2] Ghosh, S., Das, N., Gonçalves, T., Quaresma, P., & Kundu, M. (2018). The journey of graph kernels through two decades. *Computer Science Review*, 27, 88-111.
- [3] Oh, C., Tomczak, J., Gavves, E., & Welling, M. (2019). Combinatorial bayesian optimization using the graph cartesian product. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 32