

Développement d'outils d'optimisation pour FreeFem++

Sylvain Auliac - Laboratoire Jacques-Louis Lions - UPMC

Résumé

Cette thèse est consacrée au développement d'outils pour FreeFem++ destinés à faciliter la résolution des problèmes d'optimisation. Ce travail se compose de deux parties principales. La première consiste en la programmation, la validation et l'exploitation d'interfaces permettant l'utilisation de routines d'optimisation directement dans le logiciel. La seconde comprend le développement de solutions pour le calcul automatisé des dérivées, toujours au sein de FreeFem++, en exploitant les paradigmes de la différentiation automatique.

FreeFem++ est un environnement de développement intégré dédié à la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles en dimension 2 et 3. Son langage ergonomique permet à l'utilisateur d'exploiter aisément ses nombreux outils de création de maillages, de résolution de systèmes linéaires, ainsi que ses bibliothèques d'éléments finis, *etc...*

Nous introduisons les nouvelles routines d'optimisation désormais accessibles depuis la bibliothèque de modules du logiciel. En particulier, le logiciel libre d'optimisation sous contraintes IPOPT, qui implémente une méthode de points intérieurs très robuste pour l'optimisation en grande dimension. Nous appliquons avec succès ces algorithmes à une série de problèmes concrets parmi lesquels la résolution numérique de problèmes de surfaces minimales, la simulation de condensats de Bose-Einstein, ou encore un problème de positionnement inverse en mécanique des fluides.

Une version prototypique de FreeFem++ contenant les outils de différentiation automatique est présentée, après avoir exposé les principes fondamentaux de cette méthode de calcul de dérivées pour le calcul scientifique.