

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de substituts pour l'optimisation de boîtes noires

Présentation de mémoire de maîtrise  
Renaud SALTET

Sous la direction de Charles AUDET

Polytechnique Montréal

23 août 2021

# Table des matières

## Contexte

- Optimisation de boîtes noires

- Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

- Ensemble de modèles

- Modèles stochastiques

## Contribution

- Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

- Intégration dans l'algorithme MADS

- Problèmes analytiques

- Problèmes réels

## Conclusion

- Conclusion

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ & \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ & \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

où  $f$  et  $c_j$ ,  $j \in \{1, \dots, m\}$ , ont :

# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

où  $f$  et  $c_j, j \in \{1, \dots, m\}$ , ont :

- ▶ une expression et une structure inconnues

# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ & \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

où  $f$  et  $c_j, j \in \{1, \dots, m\}$ , ont :

- ▶ une expression et une structure inconnues
- ▶ des dérivées non disponibles

# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

où  $f$  et  $c_j, j \in \{1, \dots, m\}$ , ont :

- ▶ une expression et une structure inconnues
- ▶ des dérivées non disponibles
- ▶ des évaluations coûteuses



# Optimisation de boîtes noires

Problème d'optimisation :

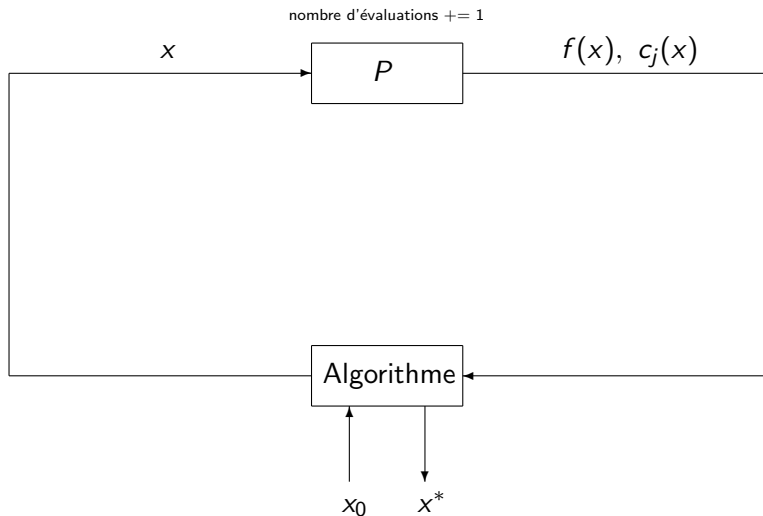
$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{s.c. } c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \quad (P)$$

où  $f$  et  $c_j$ ,  $j \in \{1, \dots, m\}$ , ont :

- ▶ une expression et une structure inconnues
- ▶ des dérivées non disponibles
- ▶ des évaluations coûteuses

On veut trouver la meilleure solution possible avec un budget limité d'évaluations et sans utiliser les dérivées.

# Optimisation de boîtes noires



# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Utilisation de modèles

Qu'est-ce qu'un modèle ?

# Utilisation de modèles

Qu'est-ce qu'un modèle ? Une fonction qui :

- ▶ imite le comportement de l'objectif ou des contraintes

# Utilisation de modèles

Qu'est-ce qu'un modèle ? Une fonction qui :

- ▶ imite le comportement de l'objectif ou des contraintes
- ▶ est peu coûteuse

# Utilisation de modèles

Qu'est-ce qu'un modèle ? Une fonction qui :

- ▶ imite le comportement de l'objectif ou des contraintes
- ▶ est peu coûteuse

Vrai problème :

$$\begin{array}{ll} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) \\ \text{s.c.} & c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{array} \quad (P)$$

# Utilisation de modèles

Qu'est-ce qu'un modèle ? Une fonction qui :

- ▶ imite le comportement de l'objectif ou des contraintes
- ▶ est peu coûteuse

Vrai problème :

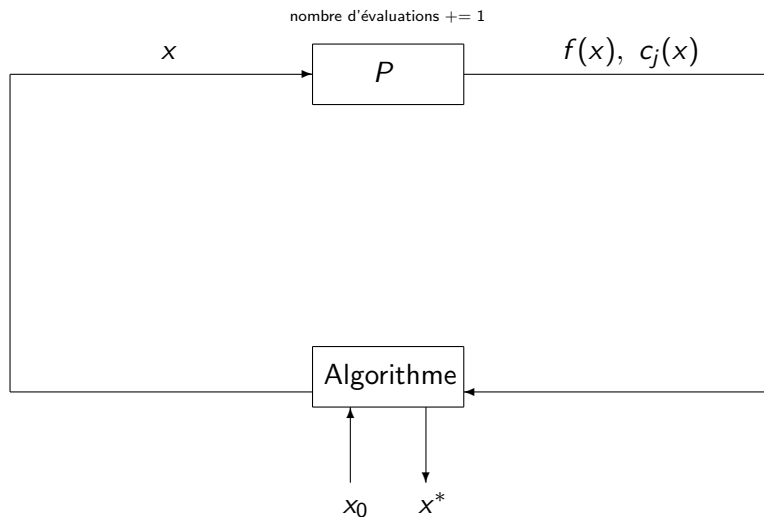
$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ \text{s.c.} \quad & c_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \tag{P}$$

Problème substitut :

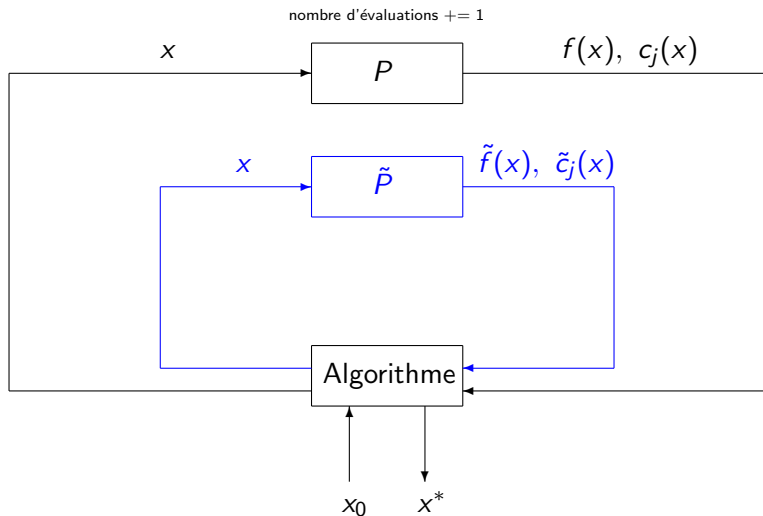
$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \tilde{f}(x) \\ \text{s.c.} \quad & \tilde{c}_j(x) \leq 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, m\} \end{aligned} \tag{\tilde{P}}$$



# Utilisation de modèles



# Utilisation de modèles



# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Ensemble de modèles

# Ensemble de modèles

Plusieurs type de modèles :

- modèles polynomiaux [1, 2]
- fonctions à base radiale [3, 4]
- lissage par noyau [5, 6]
- ...

## Ensemble de modèles

Plusieurs type de modèles :

- modèles polynomiaux [1, 2]
- fonctions à base radiale [3, 4]
- lissage par noyau [5, 6]
- ...

Mais il n'y a pas de modèle *dominant*.

## Ensemble de modèles

Plusieurs type de modèles :

- modèles polynomiaux [1, 2]
- fonctions à base radiale [3, 4]
- lissage par noyau [5, 6]
- ...

Mais il n'y a pas de modèle *dominant*.

Modèle agrégé [5, 7, 8, 9] :

$$\hat{f}(x) = \sum_{k=1}^s w^k \tilde{f}^k(x)$$

- ▶  $\{\tilde{f}^1, \tilde{f}^2, \dots, \tilde{f}^s\}$  est un ensemble de modèles de  $f$
- ▶  $\{w^1, w^2, \dots, w^s\}$  est une collection de poids non négatifs dont la somme vaut 1

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

**Modèles stochastiques**

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion



## Modèles stochastiques

$$x \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \tilde{f}(x)$$

## Modèles stochastiques

$$x \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \tilde{f}(x), \tilde{\sigma}(x)$$

## Modèles stochastiques

$$x \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \tilde{f}(x), \tilde{\sigma}(x) ; \tilde{c}_j(x), \tilde{\sigma}_j(x)$$

# Modèles stochastiques

$$x \in \mathbb{R}^n \longrightarrow \tilde{f}(x), \tilde{\sigma}(x); \tilde{c}_j(x), \tilde{\sigma}_j(x)$$

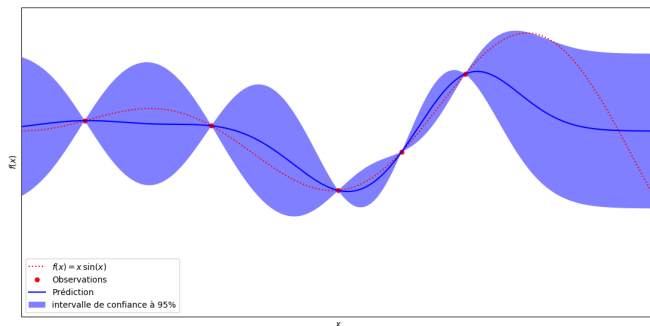


Figure: Processus gaussien sur la fonction  $f : x \mapsto x \sin x$

# Modèles stochastiques

$$\min_{x \in \mathbb{R}} \tilde{f}(x) \quad \longrightarrow \quad \min_{x \in \mathbb{R}} \tilde{f}(x) - \tilde{\sigma}(x)$$

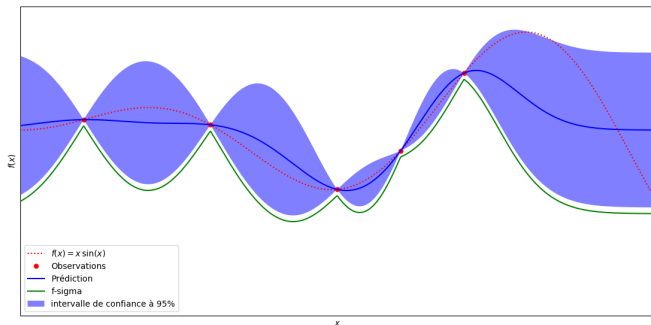


Figure: Processus gaussien sur la fonction  $f : x \mapsto x \sin x$

# Modèles stochastiques

$$\min_{x \in \mathbb{R}} \tilde{f}(x) \quad \longrightarrow \quad \min_{x \in \mathbb{R}} \tilde{f}(x) - \tilde{\sigma}(x)$$

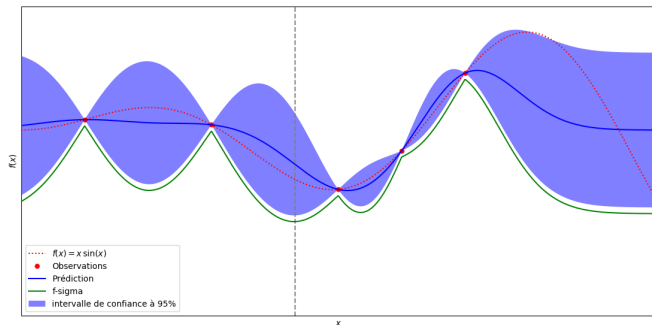


Figure: Processus gaussien sur la fonction  $f : x \mapsto x \sin x$

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Ensemble de modèles :

$$\hat{f}(x) = \sum_{k=1}^s w^k \tilde{f}^k(x)$$

$$\hat{c}_j(x) = \sum_{k=1}^s w_j^k \tilde{c}_j^k(x), \quad j \in \{1, 2, \dots, m\}$$



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Ensemble de modèles :

$$\hat{f}(x) = \sum_{k=1}^s w^k \tilde{f}^k(x)$$

$$\hat{c}_j(x) = \sum_{k=1}^s w_j^k \tilde{c}_j^k(x), \quad j \in \{1, 2, \dots, m\}$$

$$\tilde{\sigma}(x) ? \quad \tilde{\sigma}_j(x) ?$$

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Ensemble de modèles :

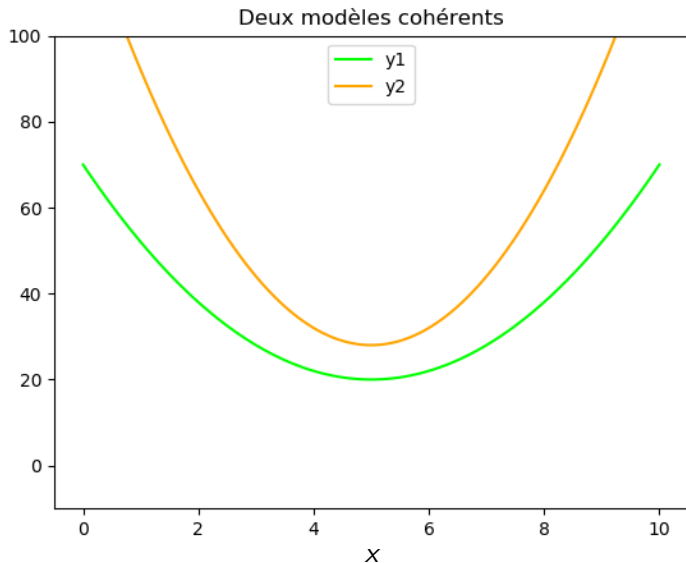
$$\hat{f}(x) = \sum_{k=1}^s w^k \tilde{f}^k(x)$$

$$\hat{c}_j(x) = \sum_{k=1}^s w_j^k \tilde{c}_j^k(x), \quad j \in \{1, 2, \dots, m\}$$

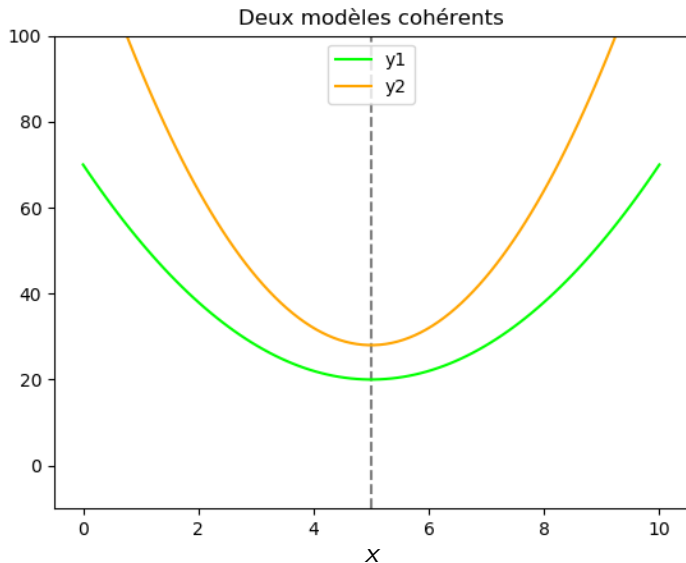
$$\tilde{\sigma}(x) ? \quad \tilde{\sigma}_j(x) ?$$

Comment imiter un modèle *stochastique* avec un ensemble de modèles ?

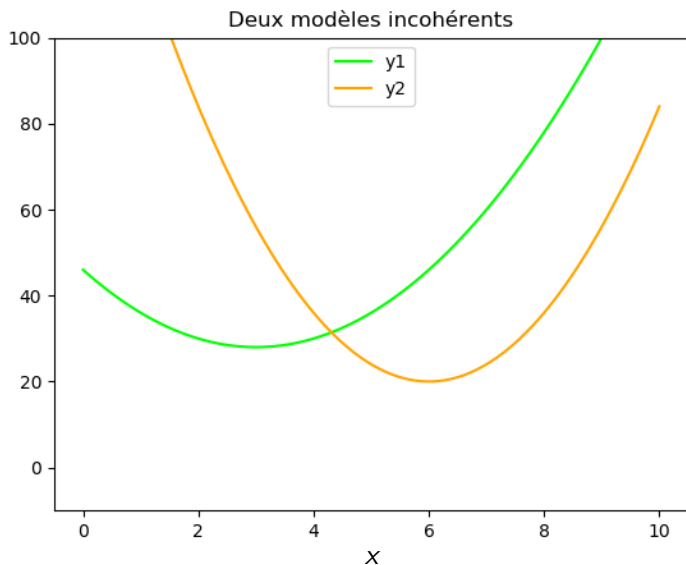
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



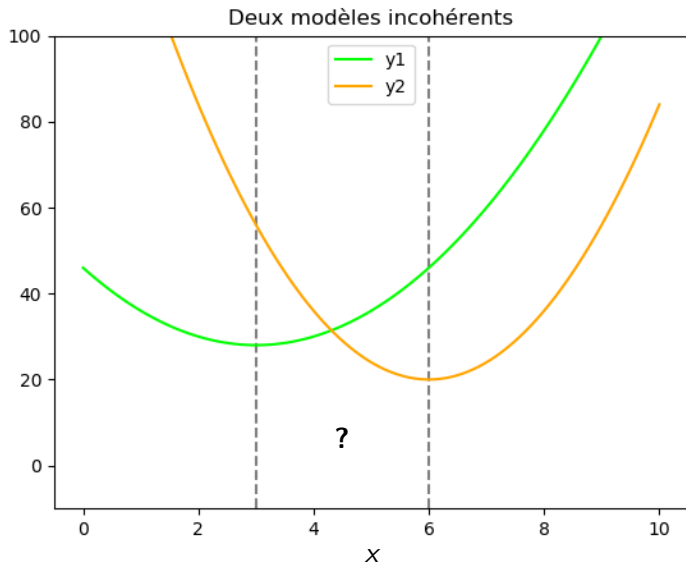
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



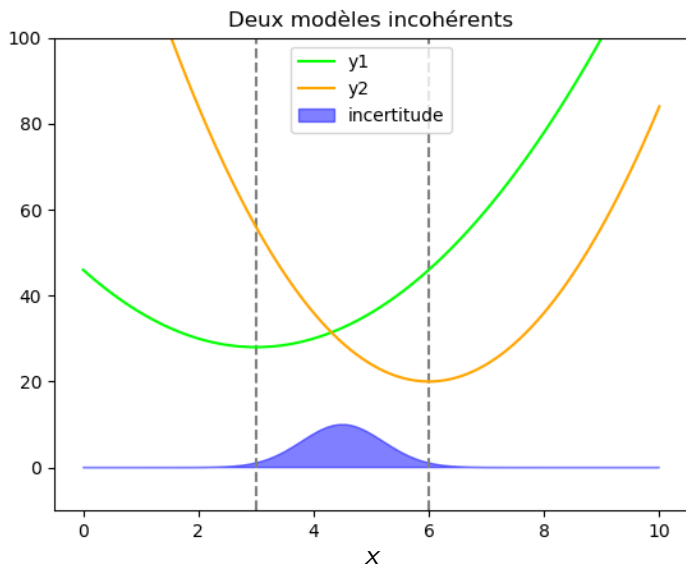
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



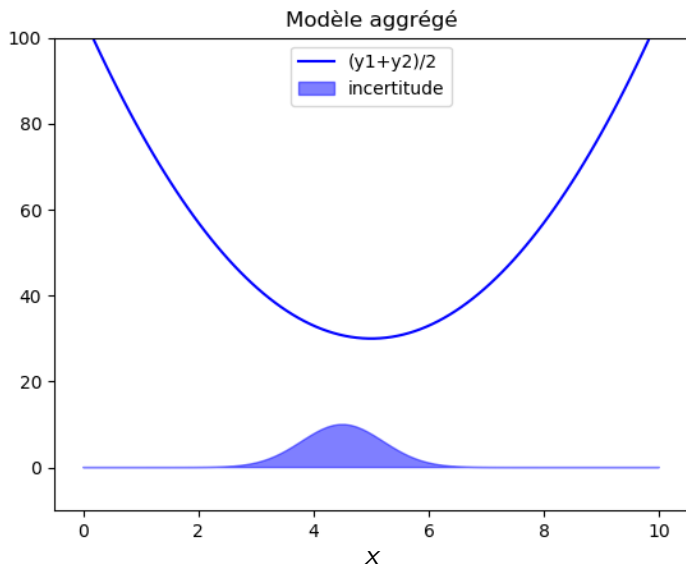
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

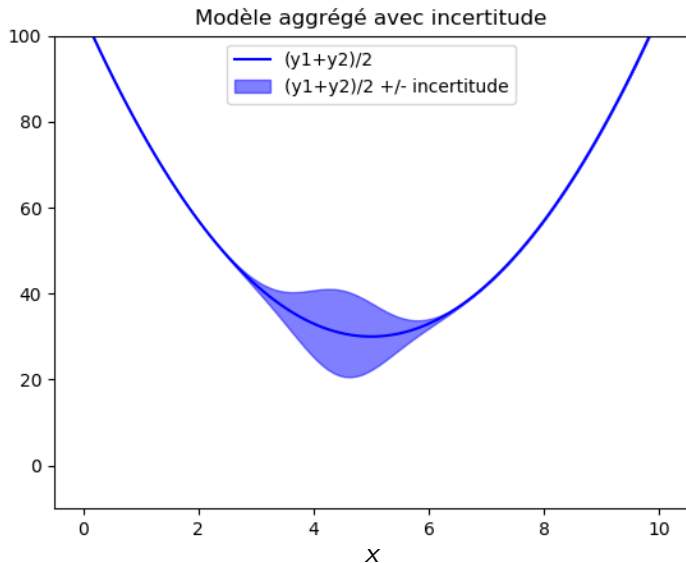


# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

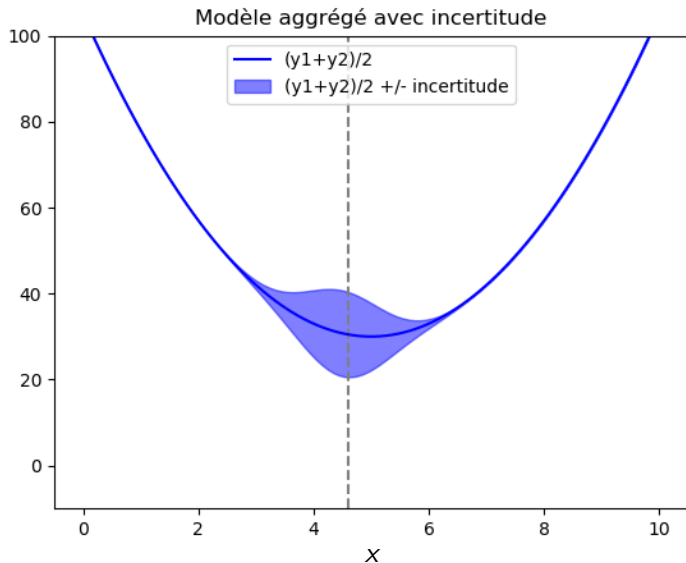




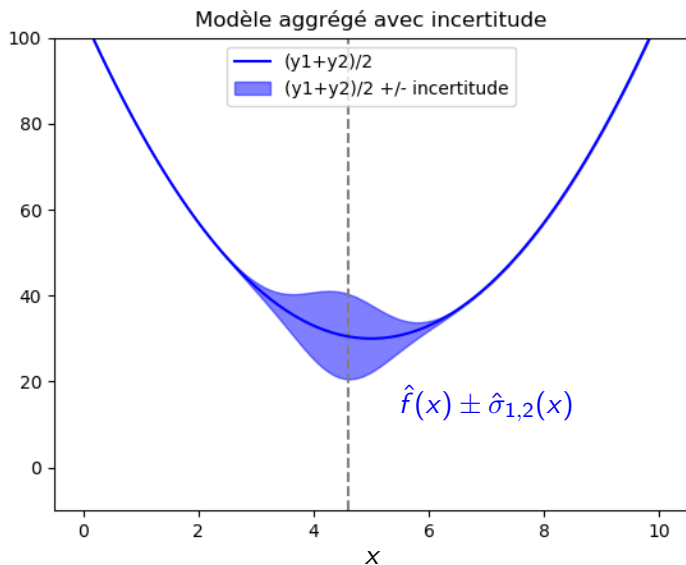
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

1) Quelle expression pour  $\hat{\sigma}_{1,2}(x)$  ?

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

1) Quelle expression pour  $\hat{\sigma}_{1,2}(x)$  ?

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

1) Quelle expression pour  $\hat{\sigma}_{1,2}(x)$  ?

► Alternative *lisse* :

$$\hat{\sigma}_{1,2}(x) = \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \left\langle \nabla_S \tilde{f}^1(x), \nabla_S \tilde{f}^2(x) \right\rangle \right)$$

où  $\nabla_S \tilde{f}$  désigne le gradient simplexe de  $\tilde{f}$

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

1) Quelle expression pour  $\hat{\sigma}_{1,2}(x)$  ?

► Alternative *lisse* :

$$\hat{\sigma}_{1,2}(x) = \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \left\langle \nabla_S \tilde{f}^1(x), \nabla_S \tilde{f}^2(x) \right\rangle \right)$$

où  $\nabla_S \tilde{f}$  désigne le gradient simplexe de  $\tilde{f}$

► Alternative *non lisse* :

$$\hat{\sigma}_{1,2}(x) = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{d \in \mathcal{D}} \text{xor} \left( \tilde{f}^1(x+d) < \tilde{f}^1(x), \tilde{f}^2(x+d) < \tilde{f}^2(x) \right)$$

où  $\mathcal{D}$  est un ensemble générateur positif

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?



## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$

$$= \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$



## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$
$$= \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

- $\Sigma(x) \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[\Sigma(x)]_{k,\ell} = \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)$  si  $k < \ell$  et 0 sinon

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$
$$= \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

- $\Sigma(x) \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[\Sigma(x)]_{k,\ell} = \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)$  si  $k < \ell$  et 0 sinon
- $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[T]_{k\ell} = 1$  si  $k < \ell$  et 0 sinon

## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$
$$= \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

- $\Sigma(x) \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[\Sigma(x)]_{k,\ell} = \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)$  si  $k < \ell$  et 0 sinon
- $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[T]_{k\ell} = 1$  si  $k < \ell$  et 0 sinon
- $w = [w^1, \dots, w^s]^\top$

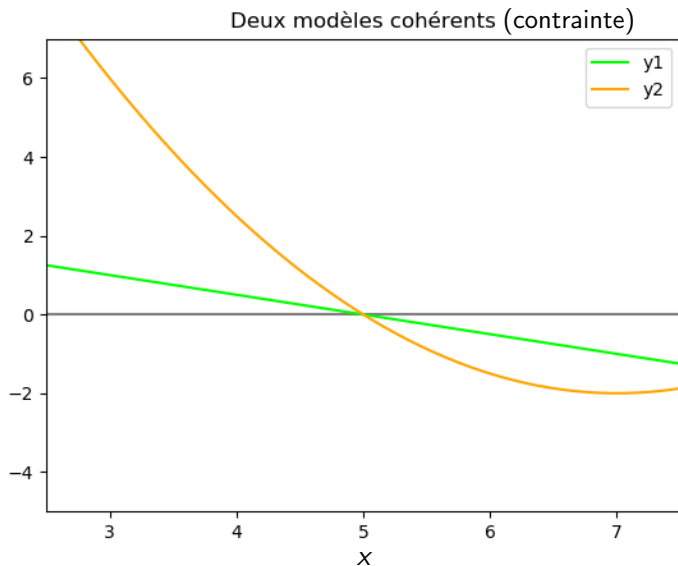
## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

2) Comment généraliser à  $s \geq 2$  modèles ?

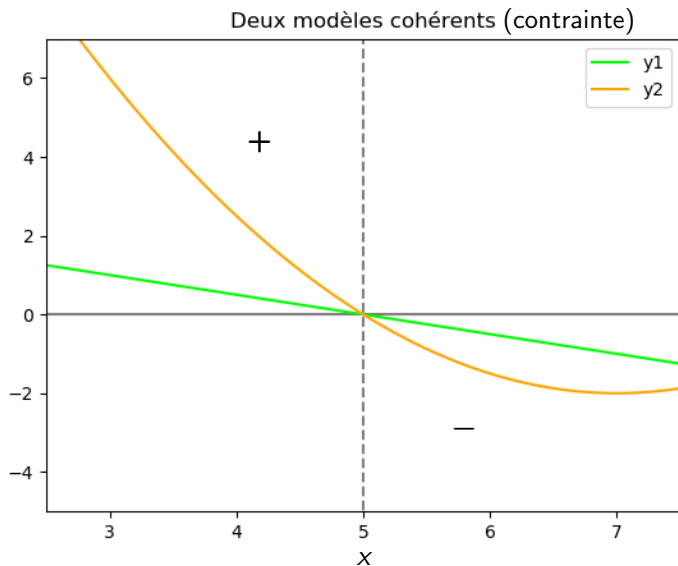
$$\hat{\sigma}(x) = \alpha \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell \times \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)}{\sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\ell=k+1}^s w^k w^\ell}$$
$$= \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

- $\Sigma(x) \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[\Sigma(x)]_{k,\ell} = \hat{\sigma}_{k,\ell}(x)$  si  $k < \ell$  et 0 sinon
- $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$  est la matrice telle que  $[T]_{k\ell} = 1$  si  $k < \ell$  et 0 sinon
- $w = [w^1, \dots, w^s]^\top$
- $\alpha := \text{Var}(f(\mathbb{X}))$  où  $\mathbb{X}$  est l'ensemble d'échantillonnage

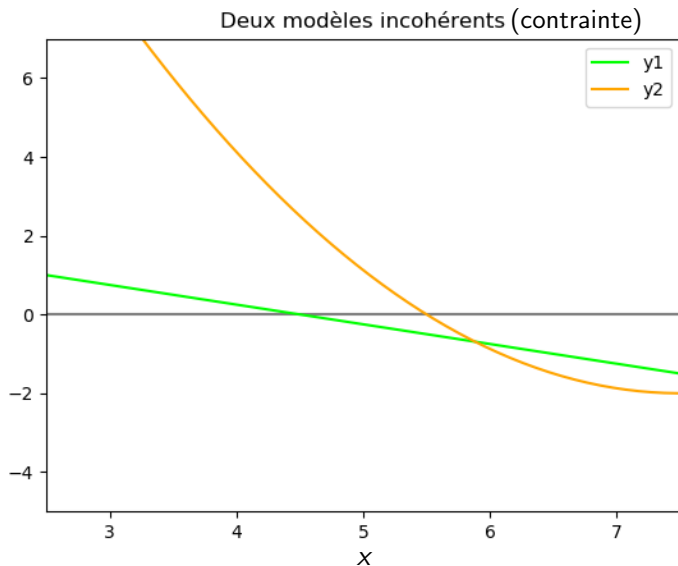
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



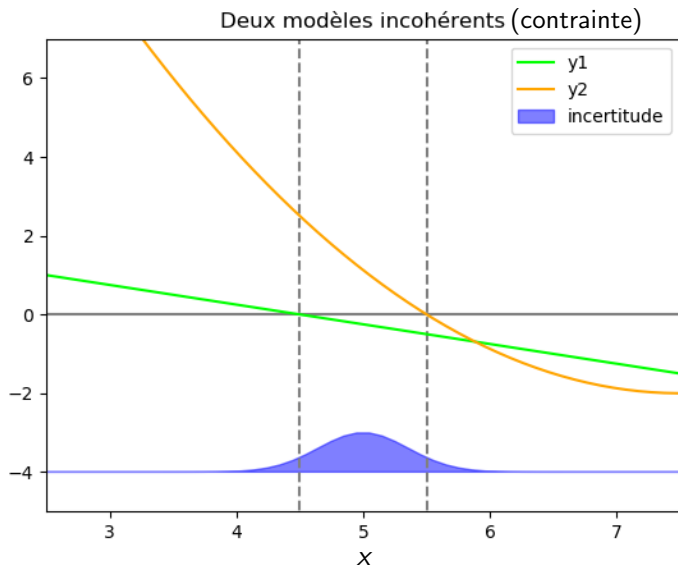
# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles



# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles





## Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Pour la contrainte  $c_j$ ,  $j \in \{1, 2, \dots, m\}$  :

- ▶ Alternative *lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{sigm} \left( -\tilde{c}_j^k(x) \times \tilde{c}_j^\ell(x) \right)$$

où  $\text{sigm}(\cdot)$  est la fonction sigmoïde

- ▶ Alternative *non lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{xor} \left( \tilde{c}_j^k(x) \leq 0, \tilde{c}_j^\ell(x) \leq 0 \right)$$

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Pour la contrainte  $c_j$ ,  $j \in \{1, 2, \dots, m\}$  :

- ▶ Alternative *lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{sigm} \left( -\tilde{c}_j^k(x) \times \tilde{c}_j^\ell(x) \right)$$

où  $\text{sigm}(\cdot)$  est la fonction sigmoïde

- ▶ Alternative *non lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{xor} \left( \tilde{c}_j^k(x) \leq 0, \tilde{c}_j^\ell(x) \leq 0 \right)$$

$$\longrightarrow \quad \hat{\sigma}_j(x) = \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

# Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

Pour la contrainte  $c_j$ ,  $j \in \{1, 2, \dots, m\}$  :

- ▶ Alternative *lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{sigm} \left( -\tilde{c}_j^k(x) \times \tilde{c}_j^\ell(x) \right)$$

où  $\text{sigm}(\cdot)$  est la fonction sigmoïde

- ▶ Alternative *non lisse* :

$$\hat{\sigma}_{k,\ell}(x) = \text{xor} \left( \tilde{c}_j^k(x) \leq 0, \tilde{c}_j^\ell(x) \leq 0 \right)$$

$$\longrightarrow \hat{\sigma}_j(x) = \alpha \frac{w^\top \Sigma(x) w}{w^\top T w}$$

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Intégration dans l'algorithme MADDS

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs**  
(MADS) [10]

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale



# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale
- ▶ la mise à jour des paramètres

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale
- ▶ la mise à jour des paramètres

À l'étape de **recherche globale** :

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale
- ▶ la mise à jour des paramètres

À l'étape de **recherche globale** :

- ▶ les modèles agrégés  $\hat{f}$  et  $\hat{c}_j$ ,  $j \in \{1, \dots, m\}$ , sont construits et intégrés dans un problème substitut  $\tilde{P}$

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale
- ▶ la mise à jour des paramètres

À l'étape de **recherche globale** :

- ▶ les modèles agrégés  $\hat{f}$  et  $\hat{c}_j$ ,  $j \in \{1, \dots, m\}$ , sont construits et intégrés dans un problème substitut  $\tilde{P}$
- ▶  $\tilde{P}$  est optimisé

# Intégration dans l'algorithme MADS

L'algorithme de **recherche directe par treillis adaptatifs** (MADS) [10] comporte trois étapes :

- ▶ la recherche globale
- ▶ la sonde locale
- ▶ la mise à jour des paramètres

À l'étape de **recherche globale** :

- ▶ les modèles agrégés  $\hat{f}$  et  $\hat{c}_j$ ,  $j \in \{1, \dots, m\}$ , sont construits et intégrés dans un problème substitut  $\tilde{P}$
- ▶  $\tilde{P}$  est optimisé
- ▶ la solution  $x_{\tilde{P}}$  est évaluée par le vrai problème

# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

- ▶ sans recherche globale

# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

- ▶ sans recherche globale
- ▶ avec recherche globale et modèles quadratiques



# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

- ▶ sans recherche globale
- ▶ avec recherche globale et modèles quadratiques
- ▶ avec recherche globale et modèles agrégés munis de l'incertitude lisse

# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

- ▶ sans recherche globale
- ▶ avec recherche globale et modèles quadratiques
- ▶ avec recherche globale et modèles agrégés munis de l'incertitude lisse
- ▶ avec recherche globale et modèles agrégés munis de l'incertitude non lisse

# Intégration dans l'algorithme MADS

Comparaison entre différentes versions de MADS :

- ▶ sans recherche globale
- ▶ avec recherche globale et modèles quadratiques
- ▶ avec recherche globale et modèles agrégés munis de l'incertitude lisse
- ▶ avec recherche globale et modèles agrégés munis de l'incertitude non lisse
- ▶ avec recherche globale et modèles gaussiens (kriging)

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

**Problèmes analytiques**

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Problèmes analytiques

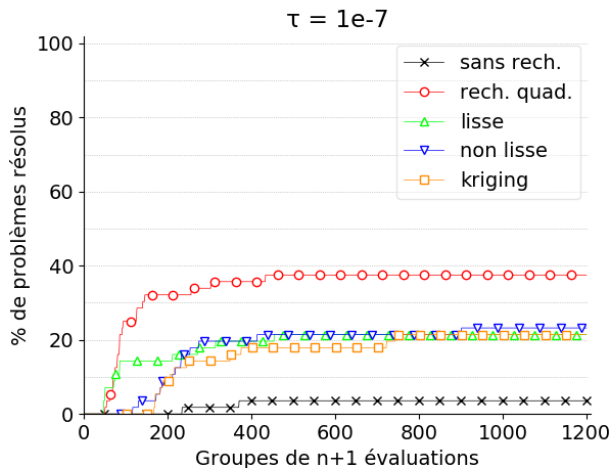


Figure: Profils de données

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

**Problèmes réels**

## Conclusion

Conclusion

# Problèmes réels

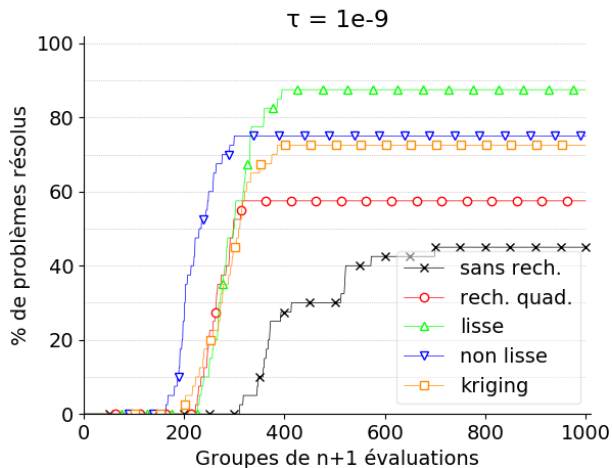


Figure: Profils de données - Problème *Aircraft Range*

# Problèmes réels

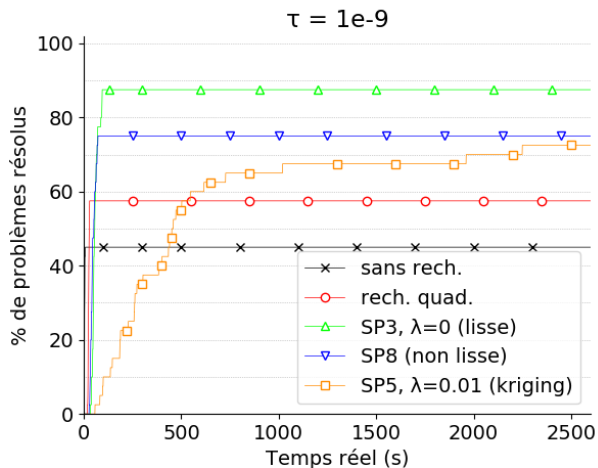


Figure: Profils de données (temps) - Problème *Aircraft Range*



# Problèmes réels

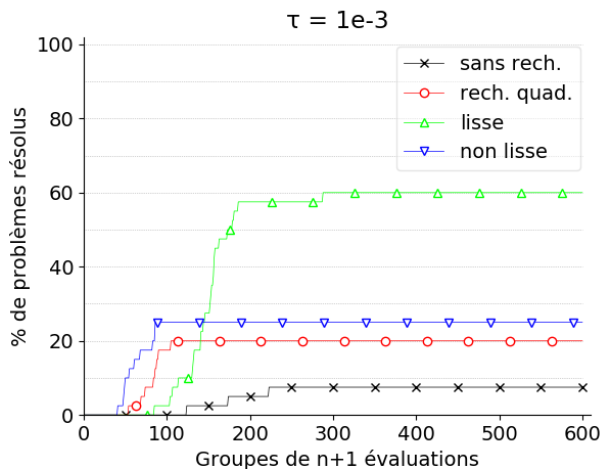


Figure: Profils de données - Problème *Simplified Wing*

# Problèmes réels

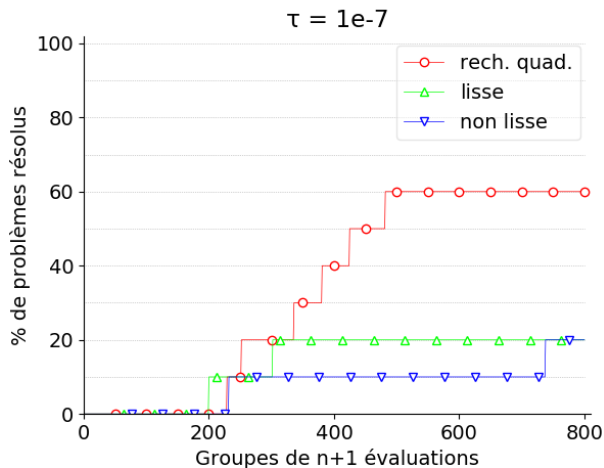


Figure: Profils de données - Problème *Solar 1*

# Problèmes réels

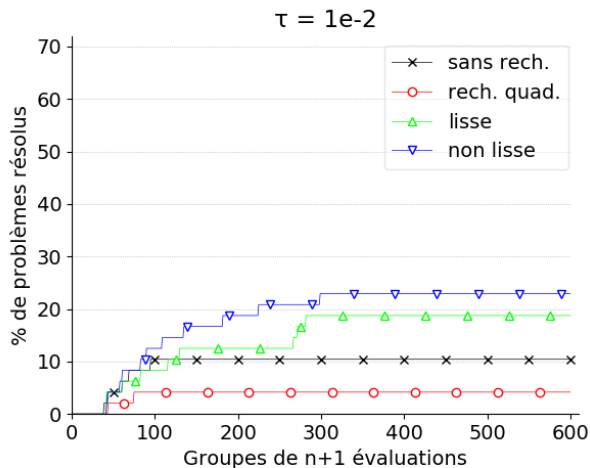


Figure: Profils de données - Problème *Styrene*

# Table des matières

## Contexte

Optimisation de boîtes noires

Utilisation de modèles

## Deux types de modèles

Ensemble de modèles

Modèles stochastiques

## Contribution

Quantification de l'incertitude avec un ensemble de modèles

## Tests numériques

Intégration dans l'algorithme MADS

Problèmes analytiques

Problèmes réels

## Conclusion

Conclusion

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles
- ▶ Faibles performances sur les problèmes analytiques

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles
- ▶ Faibles performances sur les problèmes analytiques
- ▶ Avantage en temps de calcul par rapport aux modèles stochastiques



# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles
- ▶ Faibles performances sur les problèmes analytiques
- ▶ Avantage en temps de calcul par rapport aux modèles stochastiques

## Travaux futurs

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles
- ▶ Faibles performances sur les problèmes analytiques
- ▶ Avantage en temps de calcul par rapport aux modèles stochastiques

## Travaux futurs

- ▶ Étudier plus en détails des différentes formulations du problème substitut  $\tilde{P}$

# Conclusion

- ▶ Création de modèles agrégés se comportant comme des modèles stochastiques
- ▶ Bonnes performances sur les problèmes difficiles
- ▶ Faibles performances sur les problèmes analytiques
- ▶ Avantage en temps de calcul par rapport aux modèles stochastiques

## Travaux futurs

- ▶ Étudier plus en détails des différentes formulations du problème substitut  $\tilde{P}$
- ▶ Étudier les alternatives lisse et non lisse séparément

# References I



A.L. Custódio, H. Rocha, and L.N. Vicente.

Incorporating minimum Frobenius norm models in direct search.  
*Computational Optimization and Applications*, 46(2):265–278, 2010.



A.R. Conn and S. Le Digabel.

Use of quadratic models with mesh-adaptive direct search for constrained black box optimization.  
*Optimization Methods and Software*, 28(1):139–158, 2013.



M.D. Buhmann.

*Radial Basis Functions: Theory and Implementations*.  
Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, 2003.



M.J.D. Powell.

The theory of radial basis function approximation in 1990.  
In W.A. Light, editor, *Advances in Numerical Analysis, Vol. II: Wavelets, Subdivision Algorithms and Radial Basis Functions*, pages 105–210. Oxford University Press, Cambridge, 1992.



E. Acar and M. Rais-Rohani.

Ensemble of metamodels with optimized weight factors.  
*Structural and Multidisciplinary Optimization*, 37(3):279–294, 2009.



T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman.

*The Elements of Statistical Learning*.  
Springer Series in Statistics. Springer New York Inc., New York, NY, USA, 2001.



J. Müller and R. Piché.

Mixture surrogate models based on Dempster-Shafer theory for global optimization problems.  
*Journal of Global Optimization*, 51(1):79–104, 2011.

# References II



P. Ye, G. Pan, and Z. Dong.

Ensemble of surrogate based global optimization methods using hierarchical design space reduction.  
*Structural and Multidisciplinary Optimization*, 58:537–554, 2018.



C. Audet, M. Kokkolaras, S. Le Digabel, and B. Talgorn.

Order-based error for managing ensembles of surrogates in mesh adaptive direct search.  
*Journal of Global Optimization*, 70(3):645–675, 2018.



C. Audet and J.E. Dennis, Jr.

Mesh Adaptive Direct Search Algorithms for Constrained Optimization.  
*SIAM Journal on Optimization*, 17(1):188–217, 2006.