Optimisation sans dérivées sous contraintes à l'aide de modèle quadratique approché dans une région de confiance

Hoël Langouët, Doctorant à l'IFP.
Courriel : `hoel.langouet@ifp.fr`

L'optimisation intervient dans de nombreuses applications IFP : estimation de paramètres de modèles numériques à partir de données expérimentales (Science de la Terre, combustion dans les moteurs), aide à la conception (réseaux de conduites pétrolières), optimisation de réglages de dispositifs expérimentaux (calibration des moteurs, catalyse).

Ces optimisations consistent à minimiser une fonctionnelle complexe (non linéaire, bruitée), coûteuse à estimer (résolution d'un modèle numérique basé sur des EDP ou EDO, mesures expérimentales), dont les dérivées ne sont généralement pas disponibles. A ces difficultés s'ajoutent la prise en compte de contraintes non linéaires et parfois l'aspect multi-objectif.

Dans un premier temps, nous nous intéressons aux problèmes de minimisation sous contraintes linéaires d'une fontion coûteuse à estimer pour laquelles les dérivées ne sont pas disponibles :

$$\left\{\begin{array}{ll} \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} f(x) & \\ b_l \leqslant x \leqslant b_u, & b_l, b_u \in \mathbb{R}^n \\ Ax \leqslant b, & A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m. \end{array}\right.$$

En pratique, ces problèmes sont souvent résolus par des méthodes d'optimisation non linéaire sous contraintes (de type SQP [10] par exemple) avec des gradients estimés par différences finies. Bien que ces méthodes soient efficaces notamment pour la détermination des contraintes actives, le coût en nombre d'évaluations de la fonction à minimiser est généralement trop élevé pour les problèmes industriels avec simulateurs coûteux. De plus, le choix du pas des différences finies, crucial pour la convergence de ce type de méthode, est généralement délicat puisque très dépendant de la précision du calcul de f, précision difficile à estimer en pratique.

De nombreuses méthodes, dites "directes", permettent d'optimiser une fonction sans nécessiter le calcul des dérivées. Parmi elles, les algorithmes génétiques [2] et les méthodes "Pattern Search" [4] sont peu sensibles aux imprécisions du calcul de f mais sont gourmandes en évaluations. Pour pallier à cet inconvénient, il est désormais classique d'utiliser un modèle de substitution de la fonction objective, peu coûteux à évaluer, qui sera utilisé dans l'optimisation afin de limiter le nombre d'évaluations de la fonction coûteuse. Ces modèles de substitution sont généralement des modèles représentant globalement f sur le domaine considéré construits à partir d'un nombre limité d'évaluations de f choisis suivant certains critères pertinents liés à l'estimation de l'erreur de prédiction de ces modèles et à l'espérance de gain sur la minimisation de la fonction [3, 12]. Ces modèles peuvent être des modèles de krigeage [3, 9, 12], des Radial Basis Functions (RBF), des splines ... Ces méthodes restent limitées à des problèmes de petite taille (10-20 param.)

Une autre classe de méthodes basées sur des modèles de substitution locaux a été proposée par [1, 7, 8, 11] : ces méthodes s'inspirent des méthodes SQP avec région de confiance [1]. Un modèle quadratique est construit à chaque itération dans un voisinage du point courant, la taille de ce voisinage étant mis à jour suivant la comparaison de la réduction prédite par le modèle et la réduction effective calculée en évaluant f. En particulier, Powell [7, 8] a proposé une méthode particulièrement efficace sans contraintes sur des problèmes de taille moyenne (100 param.), basée sur des modèles quadratiques construits à partir d'un nombre limité d'évaluations de f comme points d'interpolation.

Le traitement des contraintes dans ces méthodes reste une difficulté, des méthodes de pénalisation peu efficaces étant souvent utilisées. Dans ce papier, une extension de la méthode de Powell permettant la prise en compte de contraintes linéaires est proposée, celle-ci revient

1. à choisir les points d'interpolation dans le domaine défini par les contraintes,
2. à minimiser le modèle quadratique sous ces contraintes dans la région de confiance.

Des résultats sur des cas tests issus du benchmark CUTEr [5] seront présentés avec une comparaison avec d'autres méthodes d'optimisation sans dérivées ainsi qu'une application de calage de données de production et de données sismiques pour la caractérisation de réservoir pétrolier. Enfin, on discutera des perspectives d'amélioration de ces méthodes : notamment le choix de modèles de substition plus complexes que les modèles quadratiques comme proposé par exemple par [6] ou [13] pour une optimisation plus globale, la prise en compte du bruit sur l'évaluation de la fonction objective, et le traitement des contraintes non linéaires.

Références

[1] CONN A. R., GOULD N. I. M. et TOINT P. L., (2000) *Trust-Region Methods*, MPS-SIAM Series on Optimization.

[2] HANSEN, N. et KERN N., (2004) *Evaluating the CMA Evolution Strategy on Multimodal Test Functions*, In Eighth International Conference on Parallel Problem Solving from Nature PPSN VIII, Proceedings, pp. 282-291, Berlin : Springer.

[3] JONES D., SCHONLAU M. et WELCH W., (1998) *Efficient global optimization of expensive black-box functions.*

[4] KOLDA T. G., LEWIS R ; M. et TORCZON V., (2003) *Optimization by Direct Search : New Perspectives on Some Classical and Modern Methods*, SIAM Review, Vol. 45, No. 3, pp. 385-482.

[5] MORÉ J. J. et WILD S. M., (2007) *Benchmarking Derivative-Free Optimization Algorithms*, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, Preprint ANL/MCS-P1471-1207, http ://www.mcs.anl.gov/ more/dfo/ceperf.pdf.

[6] OEUVRAY R., (2005) *Trust-Region Methods Based on Radial Basis Functions with application to Biomedical Imaging*, Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique de Lausanne.

[7] POWELL M.J.D., (2004) *The NEWUOA software for unconstrained optimization without derivatives.*

[8] POWELL M.J.D., (2007) *Developments of NEWUOA for unconstrained minimization without derivatives.*

[9] SCHONLAU M., (1997) *Computer experiments and global optimization*, Thèse de doctorat, Université de Waterloo.

[10] SINOQUET D. et DELBOS F., (2008) *Adapted nonlinear optimization method for production data and 4D seismic inversion*, 11th ECMOR, Bergen, Norway, 8 - 11 September 2008.

[11] VANDEN BERGHEN F., (2004) *CONDOR : a constrained, non-linear, derivative-free parallel optimizer for continuous, high computing load, noisy objective functions*, Thèse de doctorat, Université de Bruxelles.

[12] VILLEMONTEIX J., (2008) *Optimisation de fonctions coûteuses, Modèles gaussiens pour une utilisation efficace du budget d'évaluations : théorie et pratique industrielle*, Thèse de doctorat, Université Paris-sud XI.

[13] WILD S. M., REGIS R. G. et SHOEMAKER C. A., (2008) *ORBIT : Optimization by Radial Basis Function Interpolation in Trust-Regions*, SIAM J. Scientific Computing, Vol. 30, No. 6, pp. 3197-3219.