Optimisation sans dérivées avec contraintes pour des fonctions coûteuses

H. Langouët [1], D. Sinoquet [1], E. Thierry [2]

[1] IFP, Rueil-Malmaison
[2] Laboratoire I3S, CNRS/UNSA, Sophia Antipolis

Introduction

- **Contexte :** Simulateurs de plus en plus complexes :
  - coûteux en temps de calcul
  - avec de nombreux paramètres
  - dérivées non disponibles
- **Objectif** $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ — f coûteuse à évaluer et bruitée
  - Nombre de paramètres élevé
  - Optimum global
  - Sous contraintes

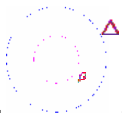
Les dérivées de f ne sont pas disponibles

Algorithme d'optimisation	Approximations des dérivées requises	Contraintes	Coûteux en évaluations de fonctions	Nombre de paramètres	Bruit
Méthodes basées sur les gradients par différences finies	x	Non linéaires	moyen	$\approx 10^4$	pas de bruit
Pattern Search ou Simplexe		bornes	très	$\approx 10^3$	faible
Algorithme génétique		bornes	très	$\approx 10^3$	faible
Krigeage + E.I.		bornes	moyen	$\approx 10^1$	faible
NEWUOA		sans	moyen	$\approx 2 \times 10^2$	?

Algorithme SQA

1 • construction d'un modèle quadratique interpolant la fonction objective en $m = 2n+1$ points dans une région de confiance $\Delta = \rho$ (2n+1) évaluations

2 • Résout le problème pour une itération donnée



2A Tant qu'une progression est obtenue
- $\min Q(x_{opt} + d)$ $\|d\| \leq \Delta$
- Si $\|d\| < \frac{\rho}{2} \longrightarrow$ 2.B
- Utilise la nouvelle évaluation $f(x_{opt} + d)$ pour m.à.j. le modèle Q et le rayon de la région de confiance Δ en fct. de la prédictivité du modèle quadratique $R = \dfrac{f(x_{opt} + d) - f(x_{opt})}{Q(x_{opt} + d) - Q(x_{opt})}$ — 1 évaluation
- si $R > 0.1 \longrightarrow$ 2A

– Vérifie la validité de Q dans la région de confiance

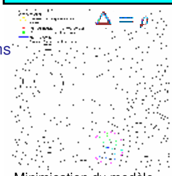
2B
- non valide : $\max |l_t(x_{opt} + d)|$ $\|d\| \leq \bar{\Delta}$ $f(x_{opt} + d)$ — 1 évaluation
- valide : Si $\|d\| > \rho \longrightarrow$ 2.A, sinon 3

3 • Réduction de ρ et $\Delta \longrightarrow$ 2 ou STOP

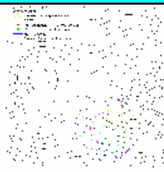
$R \leq 0$ très mauvais	$0 < R \leq 0.1$ mauvais	$0.1 < R \leq 0.7$ moyen-bon	$R > 0.7$ très bon
$x_{k+1} = x_k$	$x_{k+1} = x_k + d$	$x_{k+1} = x_k + d$	$x_{k+1} = x_k + d$
grande réduction de Δ	réduction de Δ	Δ inchangé ou réduit	augmentation de Δ

Test de validité du modèle $\|x_{opt} - x_i\| \leq 2\Delta$ en maintenant $\Delta \geq \rho$

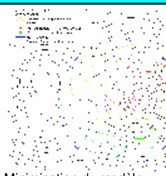
Exemple



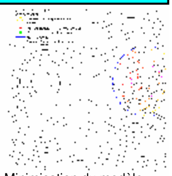
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) < f(x_k)$
Calcul de $R > 0.7$
augmente Δ



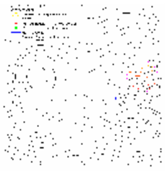
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) < f(x_k)$
Calcul de $R > 0.7$
augmente Δ



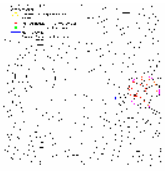
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) < f(x_k)$
Calcul de $0.1 < R \leq 0.7$
diminue Δ



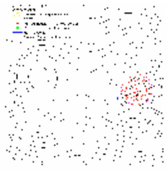
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) > f(x_k)$
Calcul de $R < 0$
Amélioration du modèle: 1 évaluation de f
diminue Δ



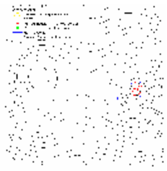
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) < f(x_k)$
Calcul de $0.1 < R < 0.7$
Δ inchangé pour maintenir $\Delta \geq \rho$



Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) < f(x_k)$
Calcul de $R > 0.7$
Δ inchangé

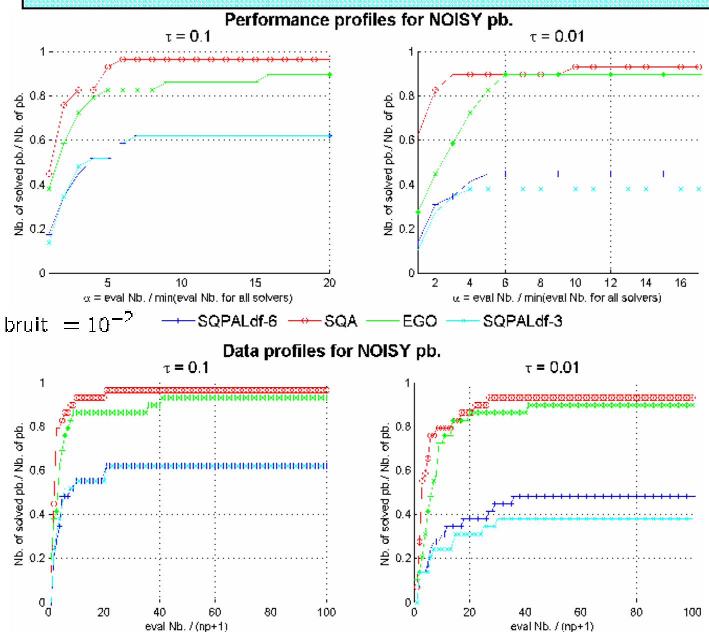


Minimisation du modèle
Minimum de Q trop proche de x_{opt}
$\|d\| < \frac{\rho}{2}$
Pts d'interpolation proches de x_{opt}
$\|x_i - x_{opt}\| \leq 2\Delta$
Pas d'évaluation
ρ et Δ diminuent



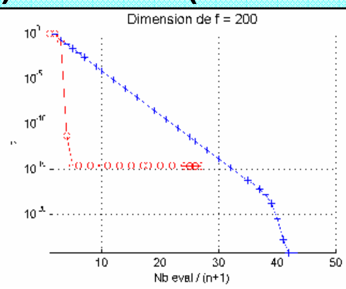
Minimisation du modèle
1 évaluation de f
$f(x_{k+1}) > f(x_k)$
Calcul de $R < 0$
Amélioration du modèle: 1 évaluation de f
diminue Δ

Résultats sur un benchmark de More & Wild (dim. 2 à 7) et un ex. (dim = 200)



La précision est mesurée par

$$\tau = \frac{f(x_{n_{eval}}) - f_L}{f(x_0) - f_L}$$



- **Conclusions** : **SQA**
  - Méthode très performante pour l'optimisation sans dérivées
    - SQA meilleur que EGO et SQPAL (Diff finies) sur cas tests de Moré
    - SQA peut traiter des exemples de plus de 100 paramètres (≠ EGO)
    - extension de SQA aux contraintes linéaires
  - Premiers résultats encourageants sur l'application en caractérisation de réservoir
- Perspectives :
  - adapter SQA afin de prendre en compte des contraintes non linéaires
  - évaluer cette méthode avec un modèle de substitution plus complexe (krigeage, RBF) afin de rendre la méthode plus robuste
  - évaluer SQA sur l'application en caractérisation de réservoir et une application en calibration des moteurs

Bibliographie:
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,
Powell M.J.D., 2004, The NEWUOA software for unconstrained optimization without derivatives.
Powell M.J.D., 2007, Developments of NEWUOA for minimization without derivatives.
Sinoquet D. et Delbos F., 2008, Adapted nonlinear optimization method for production data and 4D seismic inversion, 11th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, Bergen, Norway, September 2008.

Contacts :
Hoël Langouët, IFP, Rueil-Malmaison,
hoel.langouet@ifp.fr