



Polytechnique Montréal Gerad

Analyse de sensibilité pour la réduction de dimension en optimisation sans dérivées

Montréal, 16 juillet 2020

Romain Vanden Bulcke

Directeurs: Charles Audet

Sébastien Le Digabel

Superviseur: Miguel Diago Martinez

Jury :

Dominique Orban, président Stéphane Alarie, membre

Contexte du projet

Optimisation sans dérivées et optimisation de boîtes noires en grande dimension



Contexte du projet

Optimisation sans dérivées et optimisation de boîtes noires en grande dimension

Optimisation

▶ Recherche d'extrema d'une fonction



Contexte du projet

Optimisation sans dérivées et optimisation de boîtes noires en grande dimension

Optimisation

Recherche d'extrema d'une fonction

Boîtes noires

Dijet mathématique retournant des valeurs de sortie lorsqu'il reçoit des valeurs en entrée



Contexte du projet

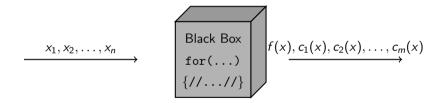
Optimisation sans dérivées et optimisation de boîtes noires en grande dimension

Optimisation

Recherche d'extrema d'une fonction

- Dijet mathématique retournant des valeurs de sortie lorsqu'il reçoit des valeurs en entrée
- ▶ Généralement sous forme d'une simulation informatique





$$\xrightarrow{X_1, X_2, \dots, X_n}$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

Boîtes noires

Dérivées non disponibles



$$X_1, X_2, \ldots, X_n \longrightarrow$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

- Dérivées non disponibles
- Long temps d'exécution

$$X_1, X_2, \ldots, X_n$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses



$$X_1, X_2, \ldots, X_n \longrightarrow$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses
- Parfois bruitées



$$\xrightarrow{x_1, x_2, \dots, x_n}$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses
- Parfois bruitées
- Possibilité d'erreurs



$$X_1, X_2, \ldots, X_n \longrightarrow$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses
- Parfois bruitées
- Possibilité d'erreurs



$$\xrightarrow{X_1, X_2, \dots, X_n}$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

Boîtes noires

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses
- Parfois bruitées
- Possibilité d'erreurs

Contexte du projet

▷ Boîtes noires de grande dimension $(n \ge 100)$



$$X_1, X_2, \dots, X_n \longrightarrow$$



$$f(x), c_1(x), c_2(x), \ldots, c_m(x)$$

Boîtes noires

- Dérivées non disponibles
- ▶ Long temps d'exécution
- Non lisses
- Parfois bruitées
- Possibilité d'erreurs

Contexte du projet

- \triangleright Boîtes noires de grande dimension $(n \ge 100)$
- Séquentiel (pas de parallélisme)



Heuristiques

Méthodes basées sur des modèles

Méthodes de recherche directe

- Heuristiques
 - Algorithme génétique
 - Méthode de Nelder-Mead [6]
 - ...
- Méthodes basées sur des modèles

Méthodes de recherche directe



- Heuristiques
 - Algorithme génétique
 - Méthode de Nelder-Mead [6]
 - ...
- Méthodes basées sur des modèles
 - Descente basée sur des modèles
 - Méthodes de région de confiance [7]
 - Optimisation Bayesienne [8]
- Méthodes de recherche directe



- Heuristiques
 - Algorithme génétique
 - Méthode de Nelder-Mead [6]
 - ...
- Méthodes basées sur des modèles
 - Descente basée sur des modèles
 - Méthodes de région de confiance [7]
 - Optimisation Bayesienne [8]
- Méthodes de recherche directe
 - Recherche par coordonnées [3]
 - Recherche par motif généralisée [9]
 - Recherche directe sur treillis adaptatif (MADS) [1]



- Heuristiques
 - Algorithme génétique
 - Méthode de Nelder-Mead [6]
 - ...
- Méthodes basées sur des modèles
 - Descente basée sur des modèles
 - Méthodes de région de confiance [7]
 - Optimisation Bayesienne [8]
- Méthodes de recherche directe
 - Recherche par coordonnées [3]
 - Recherche par motif généralisée [9]
 - Recherche directe sur treillis adaptatif (Mads) [1]



- Algorithme MADS
 - Algorithme STATS-MADS
- 2 Algorithme PCA-MADS
- Tests et résultats
- 4 Conclusion et suite du projet



Plan

- Algorithme MADS
 - Algorithme STATS-MADS
- 2 Algorithme PCA-MADS
- Tests et résultats
- 4 Conclusion et suite du projet

Recherche directe sur treillis adaptatif (MADS)

▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée



- ▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée
- Structure itérative en trois étapes

- ▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée
- Structure itérative en trois étapes
 - ▶ **Etape de recherche :** recherche globale sur le treillis

- ▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée
- Structure itérative en trois étapes
 - ▶ **Etape de recherche :** recherche globale sur le treillis
 - ▶ **Etape de sonde :** recherche autour de la solution courante

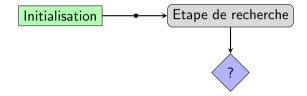
- ▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée
- Structure itérative en trois étapes
 - ▶ **Etape de recherche :** recherche globale sur le treillis
 - ▶ **Etape de sonde :** recherche autour de la solution courante
 - ▶ Etape de mise à jour et vérification d'un critère d'arrêt

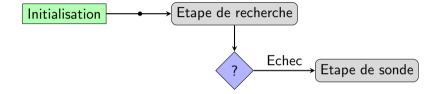


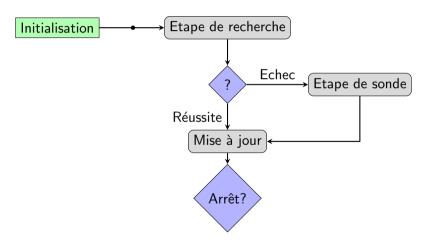
- ▶ Généralisation de la recherche par coordonnées et la recherche par motifs généralisée
- Structure itérative en trois étapes
 - ▶ Etape de recherche : recherche globale sur le treillis
 - ▶ **Etape de sonde :** recherche autour de la solution courante
 - ▶ Etape de mise à jour et vérification d'un critère d'arrêt
- Un treillis conceptuel lie les trois étapes

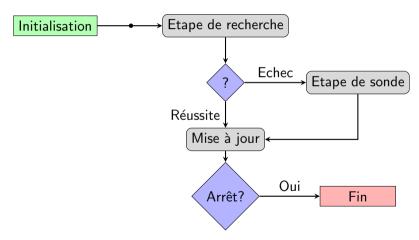


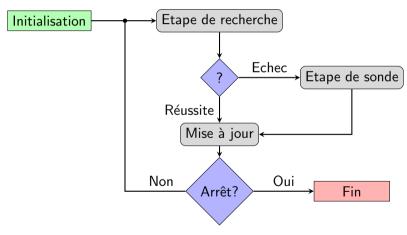
Initialisation











Etape de recherche

Etape de recherche



Etape de recherche

Etape de recherche

- ▷ Evaluation d'un nombre fini de points sur le treillis
- ▶ Pas nécessaire pour la convergence de l'algorithme

MADS: structure III

Etape de sonde

Etape de sonde



Etape de sonde

▶ Evaluation de points autour de la solution courante



Etape de sonde

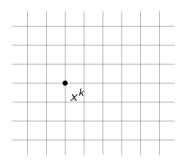
- ▶ Evaluation de points autour de la solution courante
- Directions de sonde forment une base positive

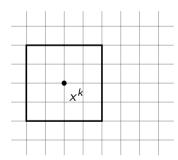
Etape de sonde

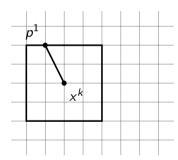
- ▶ Evaluation de points autour de la solution courante
- ▷ Directions de sonde forment une base positive
- Nécessaire pour la convergence de l'algorithme

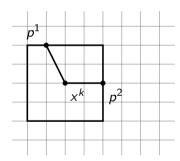
Etape de sonde

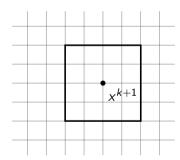
- ▶ Evaluation de points autour de la solution courante
- Directions de sonde forment une base positive
- ▶ Nécessaire pour la convergence de l'algorithme
- Peut être passée si l'étape de recherche est une réussite

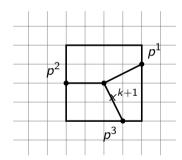


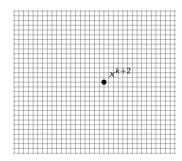




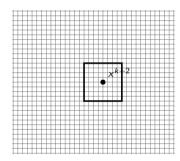




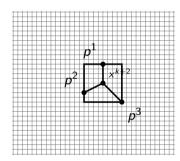




Mads: treillis



Mads: treillis



MADS: convergence

Conditions de convergence

- ▶ Repose sur l'étape de sonde
- > Tous les points évalués doivent appartenir au treillis

MADS: convergence

Conditions de convergence

- ▶ Repose sur l'étape de sonde
- ▶ Tous les points évalués doivent appartenir au treillis

Résultats

- ▶ Pour une fonction localement Lipschitz, MADS converge vers un point stationnaire de Clarke
- \triangleright Pour une fonction dérivable, MADS converge vers un point stationnaire x^* ,

$$\nabla f(x^*) = 0$$



Méthode STATS-MADS

 $\, \triangleright \,$ Adaptation de ${\rm MADS}$ en grande dimension

Méthode Stats-Mads

- ▶ Adaptation de MADS en grande dimension
- Développé par I. Ben Yahia dans son mémoire de maîtrise [2]



Méthode STATS-MADS

- ▶ Adaptation de MADS en grande dimension
- Développé par I. Ben Yahia dans son mémoire de maîtrise [2]

Idée

Réduction de dimension



Méthode STATS-MADS

- ▶ Adaptation de MADS en grande dimension
- Développé par I. Ben Yahia dans son mémoire de maîtrise [2]

Idée

- Réduction de dimension
- ▶ Analyse de sensibilité à l'aide d'une analyse de variance de la cache

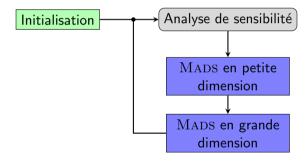
Méthode Stats-Mads

- ▶ Adaptation de MADS en grande dimension
- Développé par I. Ben Yahia dans son mémoire de maîtrise [2]

Idée

- Réduction de dimension
- ▶ Analyse de sensibilité à l'aide d'une analyse de variance de la cache
- ▶ Identifier et fixer les variables les moins influentes





Analyse de sensibilité

Analyse de sensibilité

▶ Lire la cache

Analyse de sensibilité

Analyse de sensibilité

- ▶ Lire la cache
- ▶ Appliquer une analyse de variance et fixer les variables les moins influentes

Analyse de sensibilité

MADS en petite dimension

MADS en grande dimension

Analyse de sensibilité

- ▶ Lire la cache
- ▶ Appliquer une analyse de variance et fixer les variables les moins influentes

Etapes de Mads



Analyse de sensibilité

MADS en petite dimension

MADS en grande dimension

Analyse de sensibilité

- ▶ Lire la cache
- ▶ Appliquer une analyse de variance et fixer les variables les moins influentes

Etapes de Mads

▶ Instances de MADS avec certaines variables fixées

Analyse de sensibilité

MADS en petite dimension

MADS en grande dimension

Analyse de sensibilité

- ▶ Lire la cache
- ▶ Appliquer une analyse de variance et fixer les variables les moins influentes

Etapes de Mads

- ▶ Instances de MADS avec certaines variables fixées
- Utilisation du même treillis

Analyse de sensibilité

MADS en petite dimension

MADS en grande dimension

Analyse de sensibilité

- ▶ Lire la cache
- ▶ Appliquer une analyse de variance et fixer les variables les moins influentes

Etapes de Mads

- ▶ Instances de MADS avec certaines variables fixées
- Utilisation du même treillis
- Budget limité pour chaque instance



Convergence de STATS-MADS

▷ STATS-MADS est une instance de MADS et hérite des mêmes propriétés de convergence

Convergence de STATS-MADS

- ▷ STATS-MADS est une instance de MADS et hérite des mêmes propriétés de convergence
- ▶ Grâce à la sonde en grande dimension

Convergence de STATS-MADS

- ▷ STATS-MADS est une instance de MADS et hérite des mêmes propriétés de convergence
- ▶ Grâce à la sonde en grande dimension

Performances

▶ Bonnes performances sur des problèmes allant jusqu'à 500 variables

Convergence de STATS-MADS

- ▷ STATS-MADS est une instance de MADS et hérite des mêmes propriétés de convergence
- ▶ Grâce à la sonde en grande dimension

Performances

- ▶ Bonnes performances sur des problèmes allant jusqu'à 500 variables
- ightharpoonup Majeure partie de la diminution due à l'instance de MADS en petite dimension

Plan

- 1 Algorithme MADS
 - Algorithme STATS-MADS
- 2 Algorithme PCA-MADS
- Tests et résultats
- 4 Conclusion et suite du projet

Contexte

 \triangleright Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n >= 100)

Contexte

- ightharpoonup Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n>=100)
- ▶ Pas de parallélisme

Contexte

- \triangleright Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n >= 100)
- ▶ Pas de parallélisme

ldée



Contexte

- ho Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n>=100)
- ▶ Pas de parallélisme

ldée

▷ Algorithme basé sur MADS pour hériter de ses propriétés de convergence



Contexte

- ho Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n>=100)
- ▶ Pas de parallélisme

ldée

- ▷ Algorithme basé sur MADS pour hériter de ses propriétés de convergence
- ▶ Concentrer l'optimisation dans les directions les plus influentes

Contexte

- \triangleright Problèmes d'optimisation sans dérivées de grande dimension (n >= 100)
- ▶ Pas de parallélisme

Idée

- ▷ Algorithme basé sur MADS pour hériter de ses propriétés de convergence
- ▷ Concentrer l'optimisation dans les directions les plus influentes
- Réduction de dimension



Caractéristiques de STATS-MADS

▶ Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension

Caractéristiques de STATS-MADS

- ▶ Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension
- Description en grande dimension assez coûteuse mais nécessaire à la convergence

Caractéristiques de STATS-MADS

- ▶ Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension
- Deptimisation en grande dimension assez coûteuse mais nécessaire à la convergence
- ▶ Sous-problème avec un sous-ensemble des variables originales

Caractéristiques de STATS-MADS

- ▶ Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension
- Deptimisation en grande dimension assez coûteuse mais nécessaire à la convergence
- ▶ Sous-problème avec un sous-ensemble des variables originales

Différences entre Stats-Mads et Pca-Mads



Caractéristiques de STATS-MADS

- ▶ Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension
- Deptimisation en grande dimension assez coûteuse mais nécessaire à la convergence
- ▷ Sous-problème avec un sous-ensemble des variables originales

Différences entre STATS-MADS et PCA-MADS

▶ Possibilité de passer l'optimisation en grande dimension (étape la plus coûteuse)



Caractéristiques de STATS-MADS

- Majeure partie de la diminution de l'objectif lors de l'optimisation en petite dimension
- Deptimisation en grande dimension assez coûteuse mais nécessaire à la convergence
- ▷ Sous-problème avec un sous-ensemble des variables originales

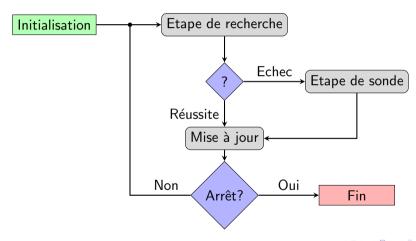
Différences entre STATS-MADS et PCA-MADS

- ▶ Possibilité de passer l'optimisation en grande dimension (étape la plus coûteuse)
- ▶ Faire varier les points selon des combinaisons linéaires des variables originales

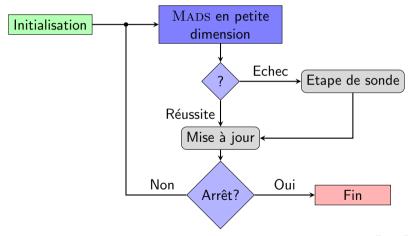


PCA-MADS: structure

PCA-MADS: structure



PCA-MADS: structure



Etape de recherche de Pca-Mads

MADS en petite dimension



Etape de recherche de Pca-Mads

▶ Reprendre un ensemble de points de la cache

MADS en petite dimension



MADS en petite dimension

Etape de recherche de Pca-Mads

- ▶ Reprendre un ensemble de points de la cache
- ▶ Appliquer une analyse en composante principale (PCA) sur ce nuage de points

MADS en petite dimension

Etape de recherche de Pca-Mads

- ▶ Reprendre un ensemble de points de la cache
- ▶ Appliquer une analyse en composante principale (PCA) sur ce nuage de points
- ▶ Identifier les combinaisons de variables qui semblent influencer fortement l'objectif

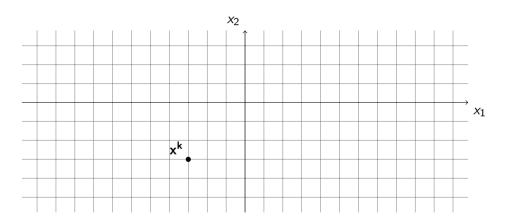
MADS en petite dimension

Etape de recherche de Pca-Mads

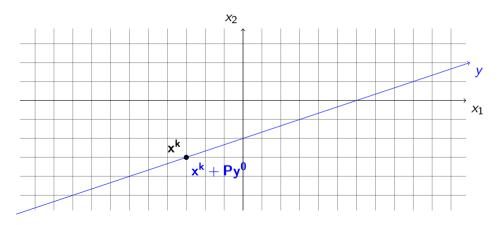
- ▶ Reprendre un ensemble de points de la cache
- ▶ Appliquer une analyse en composante principale (PCA) sur ce nuage de points
- ▶ Identifier les combinaisons de variables qui semblent influencer fortement l'objectif
- ▶ Lancer une instance de MADS sur le sous-problème contenant ces directions



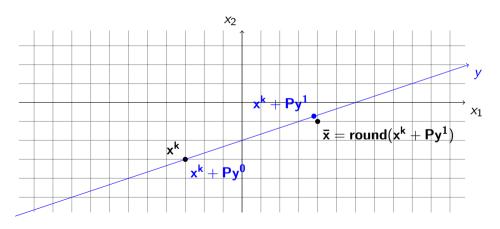
PCA-MADS: construction du sous-problème



PCA-MADS: construction du sous-problème



PCA-MADS: construction du sous-problème



Plan

- Algorithme MADS
 - Algorithme STATS-MADS
- 2 Algorithme PCA-MADS
- Tests et résultats
- 4) Conclusion et suite du projet

Suite de problèmes

Tests exploratoires

- ▶ Comparaison entre une implémentation de MADS classique et PCA-MADS
- ▶ Fonction de Rosenbrock
- ▶ Petites dimensions $(2 \le n \le 20)$
- \triangleright Grandes dimensions ($n = 100, 200, \dots, 500$)

Suite de problèmes

Tests exploratoires

- ▶ Comparaison entre une implémentation de MADS classique et PCA-MADS
- ▶ Fonction de Rosenbrock
- ▶ Petites dimensions $(2 \le n \le 20)$
- \triangleright Grandes dimensions ($n = 100, 200, \dots, 500$)

Comparaison avec d'autres algorithmes

- ▶ Comparaison entre PCA-MADS, STATS-MADS et CMA-ES
- Suite BBOB-largescale de la plateforme COCO
- ▶ 56 problèmes de dimension 80, 160, 320 et 640



Résultats : tests exploratoires

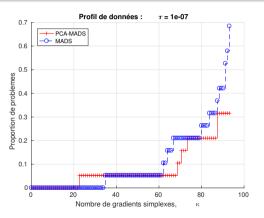


Figure: Ensemble de fonctions de Rosenbrock en petites dimensions, avec un budget de 100n

Résultats : tests exploratoires

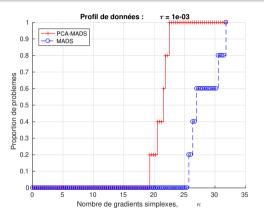


Figure: Profil de données pour l'ensemble de fonctions Rosenbrock en grandes dimensions, avec un budget de 50*n*

Résultats : comparaison

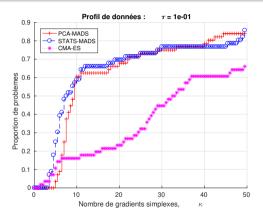


Figure: Comparaison de PCA-MADS, STATS-MADS et CMA-ES

Résultats : comparaison

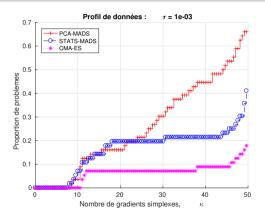


Figure: Comparaison de PCA-MADS, STATS-MADS et CMA-ES

Tests de comparaison entre STATS-MADS et PCA-MADS I

| Problème | Dimension | Pca-Mads | Stats-Mads |
|------------------|-----------|--------------------|--------------------|
| BROWNAL | n = 600 | -216305309.391029 | -216197339.471389 |
| | n = 800 | -512459636.278400 | -512348752.593470 |
| [5, Problème 27] | n = 1000 | -1000756562.998527 | -1000537007.708609 |
| | n = 1500 | -3376668083.684607 | -3376197820.744400 |
| | n = 600 | 0.509424 | 1.896469 |
| | n = 800 | 0.616835 | 2.392375 |
| L1HILB [4] | n = 1000 | 4.490846 | 2.515649 |
| | n = 1500 | 2.433164 | 3.902208 |



Tests de comparaison entre STATS-MADS et PCA-MADS II

| Problème | Dimension | Pca-Mads | Stats-Mads |
|------------------|-----------|---------------------|---------------------|
| PENALTY1 | n = 600 | -383.202462 | -603.041571 |
| | n = 800 | -499.452491 | -805.309644 |
| [5, Problème 23] | n = 1000 | -599.723565 | -1003.565068 |
| | n = 1500 | -891.330350 | -1509.736833 |
| VARDIM | n = 600 | 8932322761.775856 | 11317779579.835079 |
| | n = 800 | 33427194649.599163 | 38882984612.787933 |
| [5, Problème 25] | n = 1000 | 77736754861.641235 | 98219498344.552536 |
| | n = 1500 | 463537077338.545654 | 519702720318.423035 |



Plan

- Algorithme MADS
 - Algorithme STATS-MADS
- 2 Algorithme PCA-MADS
- Tests et résultats
- 4 Conclusion et suite du projet

Conclusion et travaux futurs

Conclusion

- ▶ Pas efficace en petite dimension
- ▶ L'approche de l'algorithme PCA-MADS intéressante en grande dimension
- ▶ Meilleures performances que Stats-Mads



Conclusion et travaux futurs

Conclusion

- ▶ Pas efficace en petite dimension
- $\,\,\vartriangleright\,\, L'approche de l'algorithme <math display="inline">\mathrm{PCA\text{-}MADS}$ intéressante en grande dimension
- ▶ Meilleures performances que STATS-MADS

Suite

- ▶ Comparaison sur d'autres problèmes issus de la littérature ou de l'industrie
- ▶ Comparer avec d'autres algorithmes de DFO en grande dimension
- ▶ Optimiser les paramètres de PCA-MADS
- \triangleright Intégration à Psd-Mads, une version parallèle de Mads



Références I



SIAM Journal on Optimization, 17(1):188-217, 2006.

l. Ben Yahia.

Identification statistique de variables importantes pour l'optimisation de boîtes noires.

Master's thesis, École Polytechnique de Montréal, 2012.

E. Fermi and N. Metropolis.

Numerical solution of a minimum problem.

Los Alamos Unclassified Report LA–1492, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, USA, 1952.



Références II



L. Lukšan and J. Vlcek.

Test problems for nonsmooth unconstrained and linearly constrained optimization. Technical Report 798, Institute of Computer Science, Academy of Sciences of the Czech Republic, 2000.



J.J. Moré, B.S. Garbow, and Kenneth E. Hillstrom.

Testing unconstrained optimization software.

ACM Transactions on Mathematical Software, 7(1):17–41, 1981.



J.A. Nelder and R. Mead.

A simplex method for function minimization.

The Computer Journal, 7(4):308–313, 1965.



Références III



L.M. Rios and N.V. Sahinidis.

Derivative-free optimization: a review of algorithms and comparison of software implementations.

Journal of Global Optimization, 56(3):1247-1293, 2013.



B. Shahriari, K. Swersky, Z. Wang, R.P. Adams, and N. De Freitas. Taking the human out of the loop: A review of Bayesian optimization. *Proceedings of the IEEE*, 104(1):148–175, 2015.



V. Torczon.

On the convergence of pattern search algorithms.

SIAM Journal on Optimization, 7(1):1–25, 1997.

