

cours 'Numerical Optimization': méthodes évolutionnaires et modèles approchés

Laurent Dumas

Laboratoire de Mathématiques de Versailles
Université de Versailles Saint Quentin en Yvelines

Ecole Centrale Paris, 16 mars 2011

1 Approche évolutionnaire

2 Modèles approchés

3 Application en CFD

4 Conclusion

1 Approche évolutionnaire

2 Modèles approchés

3 Application en CFD

4 Conclusion

Algorithmes évolutionnaires : historique

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

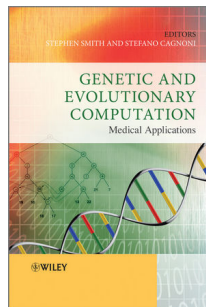
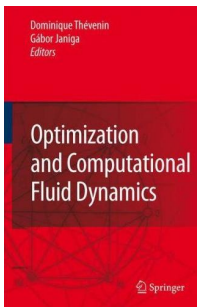
Approche
évolutionnaire

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Les algorithmes évolutionnaires (**algorithmes génétiques, stratégies d'évolution, PSO, etc...**) sont des méthodes stochastiques d'optimisation qui tirent leur nom d'une analogie avec la théorie de l'évolution des espèces de Darwin.
- Références : *Holland* (1976), *Goldberg* (1989), *Cerf* (1994), *Schoenaueur* (1996), *Hansen* (2001), etc...



Principe général d'un algorithme génétique (GA)

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Choix d'une population initiale $P_1 = \{X_i^1 \in \mathcal{O}, 1 \leq i \leq N_p\}$
- for n_g from 1 to N_{gen}
- **Evaluation** de $\{J(X_i^{n_g}), 1 \leq i \leq N_p\}$.
- for k from 1 to $\frac{N_p}{2}$
 - **Selection** de $(X_\alpha^{n_g}, X_\beta^{n_g})$ en fonction de leur facteur de santé.
 - **Croisement** : remplacer $(X_\alpha^{n_g}, X_\beta^{n_g})$ par $(Y_\alpha^{n_g}, Y_\beta^{n_g})$.
 - **Mutation** : remplacer $(Y_\alpha^{n_g}, Y_\beta^{n_g})$ par $(Z_\alpha^{n_g}, Z_\beta^{n_g})$.
- end for
- Generation de la nouvelle population P_{n_g} .
- end for

Principe général d'une stratégie d'évolution (ES)

- Choix d'une population initiale de μ parents :
$$P_1 = \{X_i^1 \in \mathcal{O}, \quad 1 \leq i \leq \mu\}$$
- for n_g from 1 to N_{gen}
- Creation d'une population of $\lambda \geq \mu$ enfants O_{n_g} par :
 - **Croisement** à ω parents $Y_i^{n_g} = \frac{1}{\omega} (\sum_{j=1}^{\omega} X_j^{n_g})$
 - **Mutation** : remplacer $Y_i^{n_g}$ par $Z_i^{n_g}$
 - **Evaluation** de $\{J(Z_i^{n_g}), 1 \leq i \leq \lambda\}$
- **Selection** des meilleurs μ parents dans la population $P_{n_g} \cup O_{n_g}$.
- end for

Principe général d'un essaim de particules (PSO)

- Choix d'une population initiale $P_1 = \{(X_i^1, v_i^1, p_i^1), 1 \leq i \leq N_p\}$ de particules ayant la position actuelle $X_i \in \mathcal{O}$, la vitesse v_i et une meilleure position p_i .
- for n_g from 1 to N_{gen}
- **Evaluation** de $\{J(X_i^{n_g}), 1 \leq i \leq N_p\}$.
- Actualisation de la meilleure position individuelle et globale ($p_g^{n_g}$)

- **Calcul** des nouvelles vitesses de chaque particule :

$$v_i^{n_g+1} = \omega v_i^{n_g} + c_1 \rho_1 (p_i^{n_g} - x_i^{n_g}) + c_2 \rho_2 (p_g^{n_g} - x_i^{n_g})$$

- **Calcul** des nouvelles positions de chaque particule :

$$X_i^{n_g+1} = X_i^{n_g} + v_i^{n_g+1}$$

- end for

1 Approche évolutionnaire

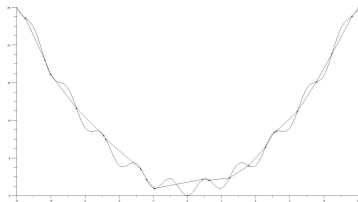
2 Modèles approchés

3 Application en CFD

4 Conclusion

Modèles approchés

- Pour rendre plus performants les algorithmes évolutionnaires, l'incorporation d'un **modèle approché, affiné au cours des itérations**, permet d'améliorer grandement leur efficacité.



- De manière générale, l'objectif consiste à construire une fonction approchée \tilde{J} (**surrogate ou metamodèle**) de la fonction exacte J à partir d'un certain nombre de points $(X_i, J(X_i))_{1 \leq i \leq N}$ où la fonction exacte est supposée connue.
- Références : *Giannakoglou (2001), Jin (2005), etc...*

Modèles approchés : méthode de krigage

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- La première méthode présentée ici, appelée méthode de krigage, est une méthode probabiliste basée sur la minimisation de la variance de l'estimation en un point X donné.
- L'approximation de la fonction coût en un point $X \in \mathbb{R}^n$ s'écrit :

$$\hat{j}(X) = \sum_{i=1}^N \omega(X_i) J(X_i)$$

où on suppose que $\hat{j}(X)$ est une réalisation de la variable aléatoire $\hat{J}(X)$.

- Afin de déterminer $\hat{j}(X)$, on suppose que la covariance de \hat{J} est connue :

$$\text{cov}(\hat{J}(X), \hat{J}(Y)) = c(X, Y)$$

Modèles approchés : méthode de krigeage

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- En cherchant à minimiser $var(\hat{J}(X) - J(X))$ tout en imposant $E(\hat{J}(X) - J(X)) = 0$, on aboutit à une relation permettant de déterminer $\hat{j}(X)$:

$$\hat{j}(X) = K^T C^{-1} z$$

où K est le vecteur colonne de terme général $c(X_i, X)$, C est la matrice de terme général $c(X_i, X_j)$, et z le vecteur colonne de terme général $J(X_i)$.

- Une estimation de la variance au point X est également disponible :

$$var(\hat{J}(X) - J(X)) = c(X, X) - K^T C^{-1} K$$

Modèles approchés : méthode de krigeage

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- La fonction de corrélation est en général choisie comme étant de type exponentielle :

$$c(X, Y) = \theta_1 \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - y_i)^2}{r_i^2} \right) + \theta_2$$

- Les paramètres $\Theta = (\theta_1, \theta_2, r_1, \dots, r_n)$ sont alors déterminés par le principe du maximum de vraisemblance, c'est à dire en maximisant la fonction :

$$\mathcal{L}(\Theta) = p(J(X_1), \dots, J(X_N)) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det C}} \exp \left(-\frac{1}{2} z^T C^{-1} z \right)$$

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Une autre méthode possible, appelée méthode RBF, est construite comme une combinaison linéaire de fonctions radiales centrées en chacun des points X_i .
- L'approximation de la fonction coût en un point $X \in \mathbb{R}^n$ s'écrit alors :

$$\tilde{J}(X) = \sum_{i=1}^N w_i h(\|X - X_i\|)$$

où h désigne une fonction $r \mapsto h(r)$ dite fonction de base radiale.

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Les poids $(w_i)_{1 \leq i \leq N}$ sont calculés par résolution de l'équation matricielle $Aw = z$ traduisant l'exactitude du réseau sur les points $(X_i)_{1 \leq i \leq N}$, où la matrice $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ a pour terme général $a_{i,j} = h(\|X_i - X_j\|)$ et le second membre a pour terme général $z_i = J(X_i)$.
- On a donc ici :

$$\tilde{J}(X) = R^T A^{-1} z$$

où R est le vecteur colonne de terme général $h(\|X - X_i\|)$.

- Pour des fonctions h bien choisies, on peut montrer que la matrice A est toujours inversible voire définie positive.

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Une fonction continue f définie sur \mathbb{R}_+^* est dite (définie) positive si pour toute famille de points distincts X_1, \dots, X_N de \mathbb{R}^n , la forme quadratique

$$q(c_1, \dots, c_N) = \sum_{1 \leq i, j \leq N} c_i c_j f(\|X_i - X_j\|)$$

est (définie) positive.

- **Théorème** (Schoenberg) : Une fonction f est totalement monotone sur \mathbb{R}_+^* si et seulement si la fonction $r \rightarrow f(r^2)$ est positive.
- Ainsi, les fonctions $r \mapsto e^{-r^2}$ et $r \mapsto (1 + r^2)^{-\alpha}$ avec $\alpha > 0$ peuvent être utilisées comme fonctions de base dans les réseaux RBF.

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutive

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- **Théorème** (Micchelli) : soit h une fonction dérivable sur \mathbb{R}_+ , strictement positive sur \mathbb{R}_+^* . Si la première dérivée de h est totalement monotone et non constante sur \mathbb{R}_+^* , alors pour toute famille de points distincts X_1, \dots, X_N de \mathbb{R}^n :

$$(-1)^{N-1} \det ([h(\|X_i - X_j\|^2)]) > 0$$

- Ainsi, les fonctions $r \rightarrow (c^2 + r^2)^\alpha$ avec $c \in \mathbb{R}$ et $0 < \alpha < 1$ peuvent être utilisées comme fonction de base radiale dans les réseaux RBF.

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutionnaire

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Afin de déterminer les paramètres optimaux des fonctions de base du modèle RBF, une méthode de type 'leave-one out' peut être utilisée.
- Cette méthode consiste à entraîner le réseau sur tous les points sauf un et à tester l'erreur commise sur ce point. En répétant ce procédé sur tous les points, on aboutit à une erreur globale qu'il s'agit de rendre minimale.
- La méthode RBF rejoint alors la méthode de krigeage si une fonction gaussienne est choisie dans les deux cas. Seule la façon de chercher les paramètres optimaux de cette gaussienne diffèrent.

Modèles approchés : méthode RBF

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutionnaire

Modèles
approchés

Application en
CFD

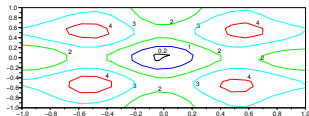
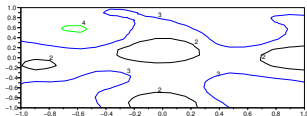
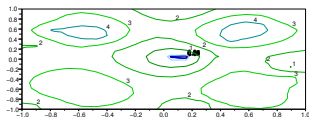
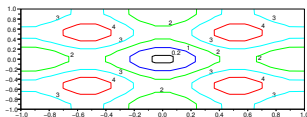
Conclusion

- Dans le cas où le nombre de points N est très grand, la matrice A peut être mal conditionnée. Afin d'éviter ce problème, deux choix sont possibles.
- Soit un procédé de régularisation de Tychonov est ajouté permettant de réduire le conditionnement de A . Dans ce cas, la méthode RBF cesse d'être une méthode d'interpolation.
- Soit le nombre de points N est réduit à m en ne considérant que les plus proches points du point X à calculer. Dans ce cas, le réseau construit devient local.

Modèles approchés : méthode RBF

- Exemple sur la fonction de Rastrigin :

$$Rast(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n (x_i^2 - \cos(2\pi x_i)) + n$$



- La figure ci-dessus compare les contours de la fonction de Rastrigin et trois modèles approchés, construit à partir d'un réseau RBF avec 40 ou 200 points d'exemples.

1 Approche évolutionnaire

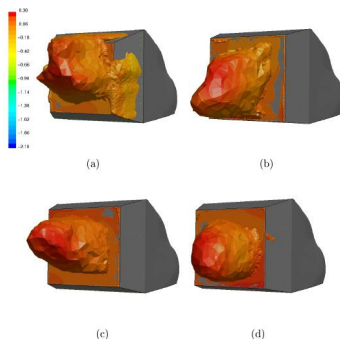
2 Modèles approchés

3 Application en CFD

4 Conclusion

Optimisation de formes de véhicules

- L'objectif était ici de **développer des outils automatiques d'optimisation de formes** de véhicules dans le but crucial de réduire leur consommation (collaboration avec PSA).



- La méthode d'optimisation utilisée a permis de réduire de 50% le C_x d'un véhicule simplifié, conformément aux observations expérimentales.

Conclusions

ECP 2011
Numerical
Optimization

L. Dumas

Approche
évolutionnaire

Modèles
approchés

Application en
CFD

Conclusion

- Les méthodes évolutionnaires d'optimisation permettent d'aborder un grand nombre de problèmes complexes d'optimisation globale en lien avec la CFD.
- Cependant, l'introduction de modèles approchés s'avère en général indispensable pour obtenir un temps de calcul raisonnable.
- Il existe de nombreuses méthodes évolutionnaires (GA, ES, PSO, etc...) et de modèles approchés (RBF, krigeage, etc...). Cependant, aucune approche ne se dégage réellement. De telles méthodes doivent donc être adaptées au problème considéré.