

Optimisation par réduction d'incertitudes : application à la recherche d'idéotypes

Victor Picheny¹, D. Da Silva et E. Costes²

Rencontres du réseau Mexico, Toulouse

23 mai 2014

1. INRA MIAT

2. INRA GAP

Plan de l'exposé

- 1 Introduction : recherche d'idéotypes
- 2 Optimisation à l'aide des processus gaussiens
- 3 Optimisation par réduction d'incertitudes
- 4 Application au simulateur MAppleT

Retour sur le simulateur MAppleT

Un problème simplifié :

Traits géométriques :

Distance internoeuds →
Surface feuille →
Diamètre branche →
Angle →

Performance :

Interception
lumineuse



Objectif : recherche d'idéotypes performants

Problème d'optimisation classique

- Objectif : trouver la meilleure combinaison de traits pour l'interception lumineuse
- Traits = variables continues
- Domaine de variation : intervalles réalistes

Quelle pertinence des résultats ?

- Optima dans les "coins" du domaine
- Variétés non atteignables (?) par croisement

Reformulation du problème

Introduction d'un deuxième objectif : "coût de conception"

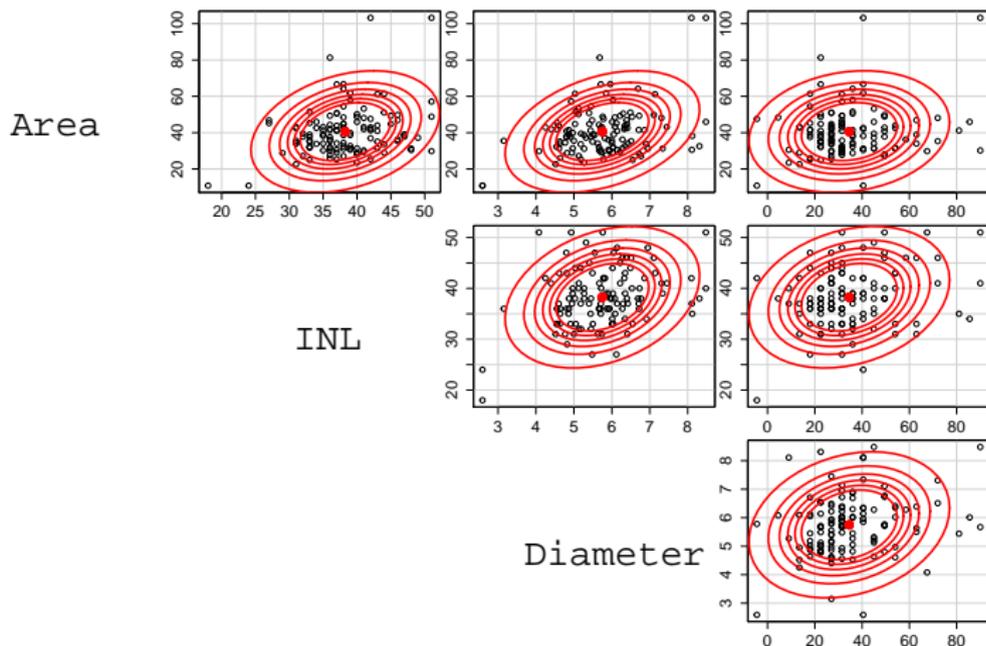
- Coût de conception = distance d'une combinaison de traits à des phénotypes réels
- Antagoniste avec la performance

Quelle fonction de coût ?

- Données disponibles : 123 observations
- Pas de lien explicite au génotype
- Solution raisonnable : distance au nuage de points

Coût de conception

Coût $\approx -\log(d(x))$ densité de probabilité (gaussienne) des 123 observations

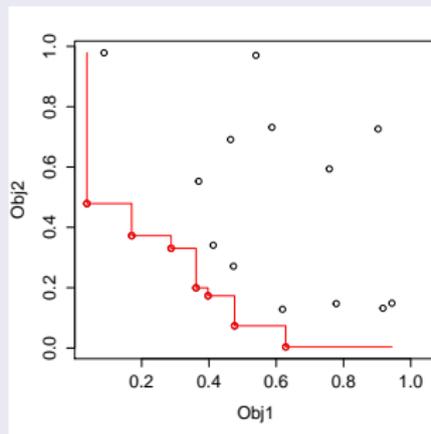


Optimisation multi-critères

Deux objectifs antagonistes

$$\begin{cases} \min & \text{-Performance} \\ \min & \text{Coût} \end{cases}$$

Solution = ensemble de Pareto



Quels défis ?

Calcul de l'interception lumineuse

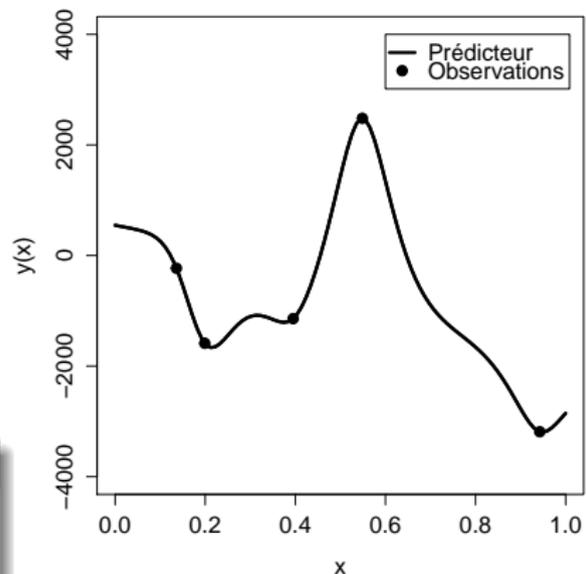
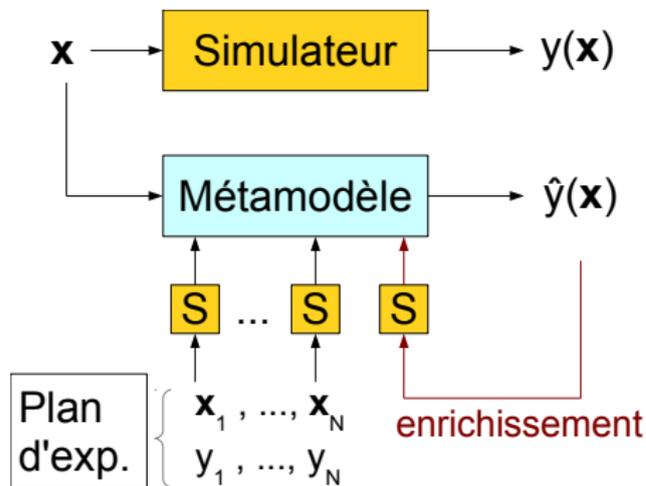
- Modèle coûteux (45min)
- "Boîte-noire" (sans dérivées)
- Fonction non convexe
- (Stochastique !)

⇒ Algorithmes classiques inutilisables

Solution retenue (parcimonieuse !)

- Métamodèle + échantillonnage adaptatif
- Nouvel algorithme adapté au cas multi-objectifs

Une solution classique : métamodélisation



Objectif

Utiliser au mieux le métamodèle pour piloter les nouvelles expériences

Métamodélisation par processus gaussiens

Hypothèse fondamentale

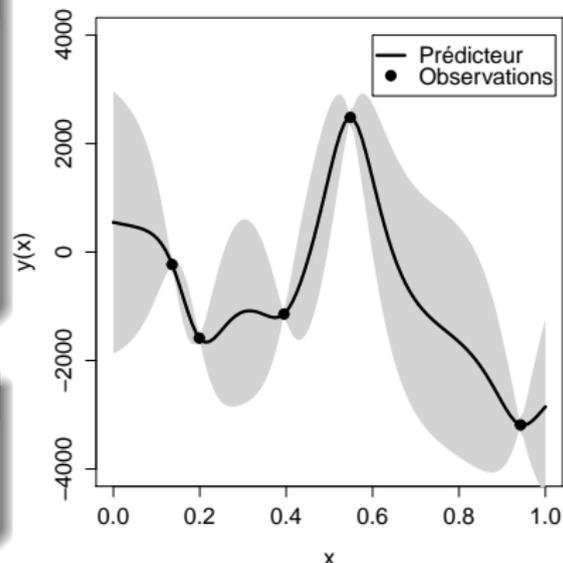
y est une réalisation de

$$Y(\mathbf{x}) \sim \mathcal{PG}(\mu(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$$

Métamodèle = loi conditionnelle aux observations

Métamodèle *probabiliste*

Beaucoup d'information exploitable pour l'optimisation !



Stratégies d'enrichissement adaptatif

Principe : critères d'échantillonnage

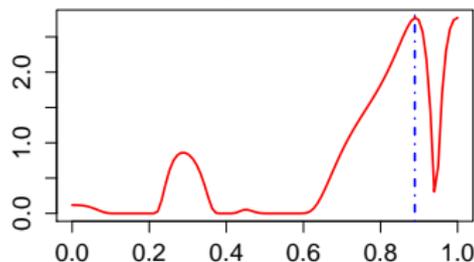
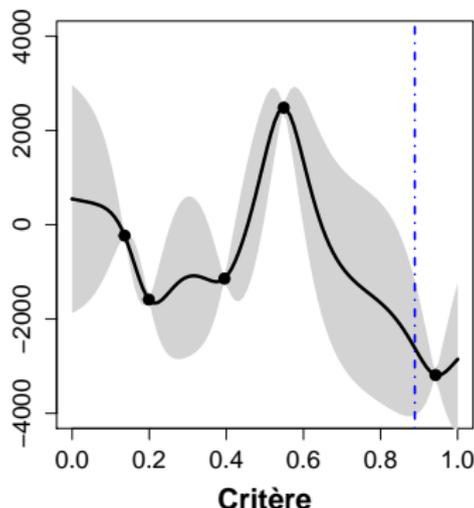
- Mesure de l'intérêt d'une observation potentielle grâce au métamodèle
- Stratégie : on effectue l'observation maximisant le critère

Critères pour l'optimisation

Référence : *Amélioration espérée* = plus grand gain attendu sur l'objectif



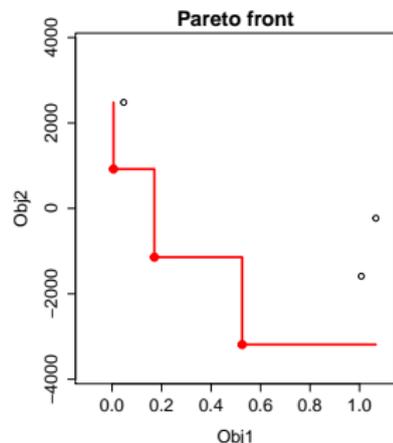
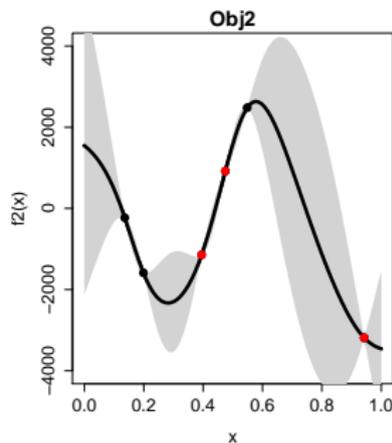
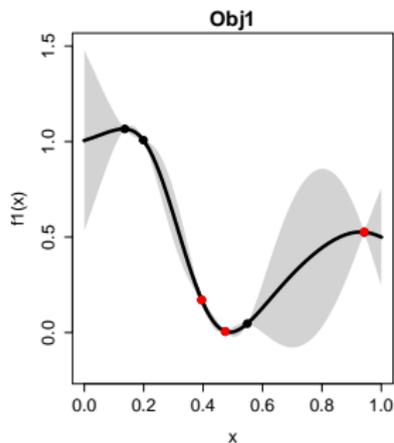
Jones, Schonlau & Welch, Efficient global optimization of expensive black-box functions
Journal of Global optimization 13 (4), 455-492 (1998)



Retour au problème multi-objectifs

Illustration : 2 objectifs, 1 dimension, 6 observations

- Un modèle PG pour chaque objectif
- 3 observations "Pareto-dominantes"



Comment choisir l'observation suivante ?

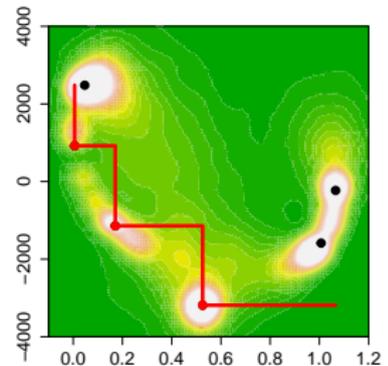
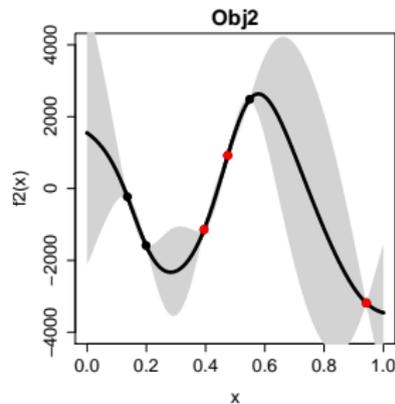
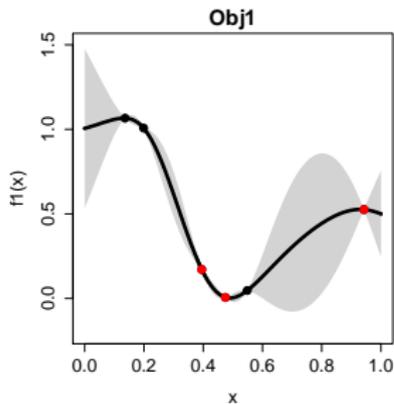
Stepwise uncertainty reduction (SUR)

Principe

- Mesure d'incertitude par rapport à un objectif
- Observation suivante : réduction optimale de l'incertitude

SUR et optimisation multi-objectifs

Critère d'incertitude = volume de l'ensemble d'excursion "derrière" le front



Calcul du critère d'échantillonnage [CENSURÉ]



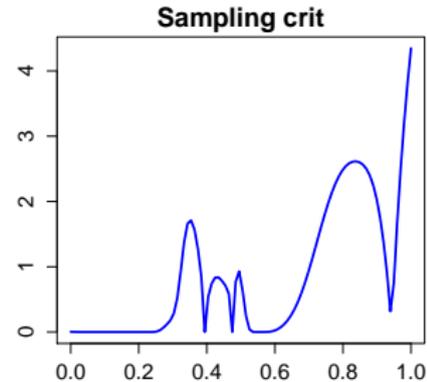
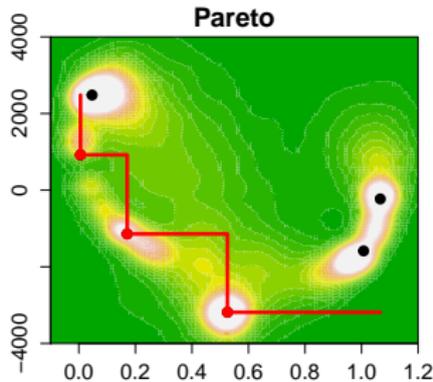
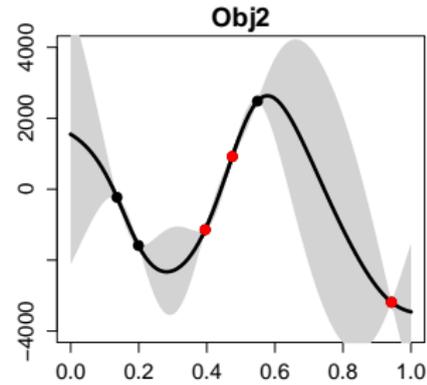
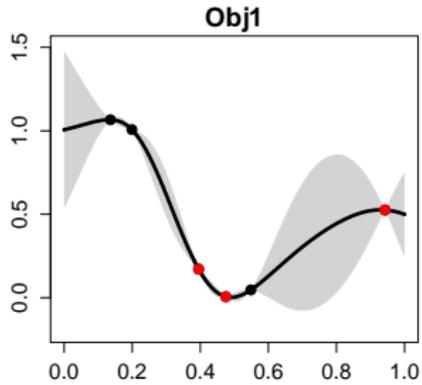
Pour croquer dans cette pomme empoisonnée, lire :



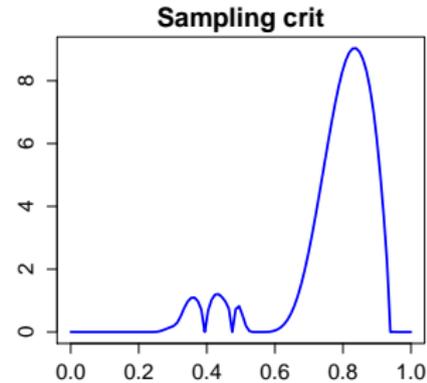
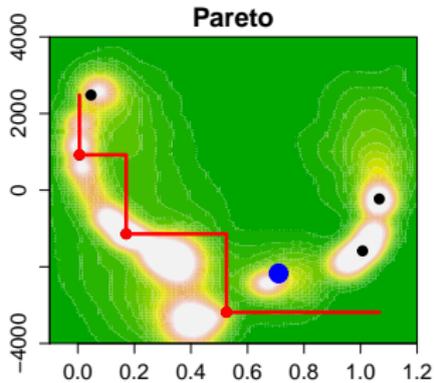
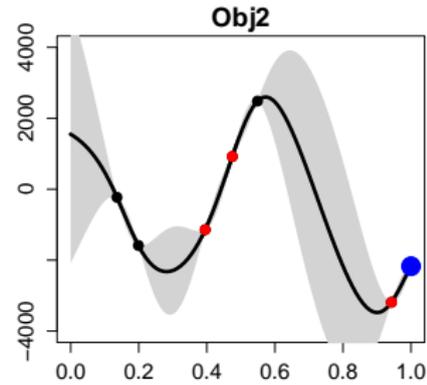
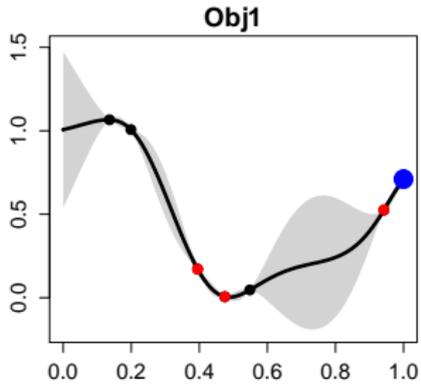
V. Picheny (2014)

Multiobjective optimization using Gaussian process emulators via stepwise uncertainty reduction, *Statistics and Computing* (on press)

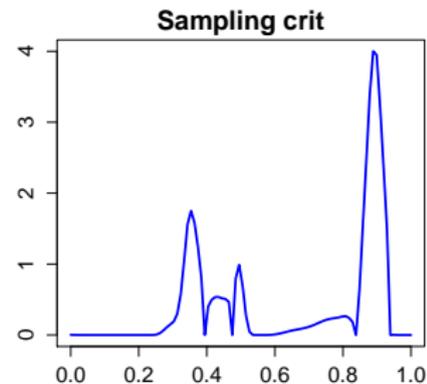
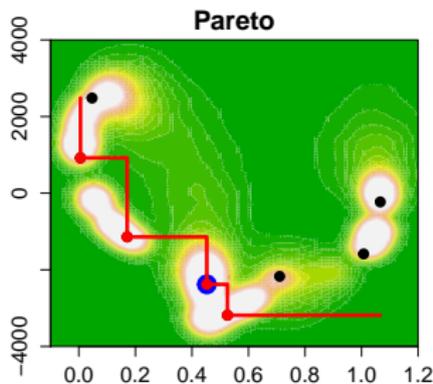
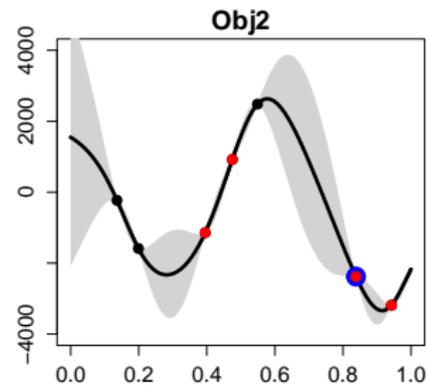
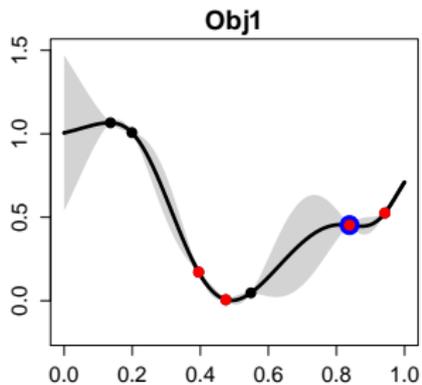
Illustration



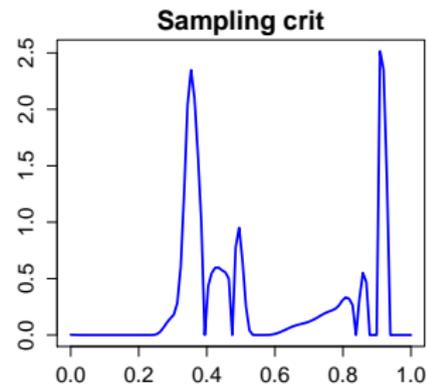
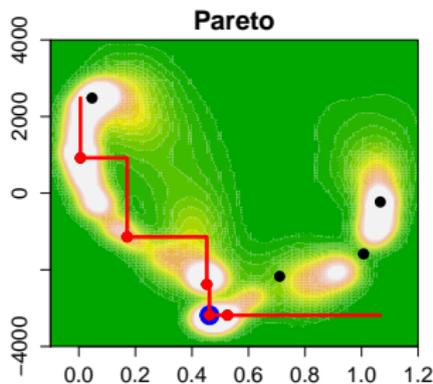
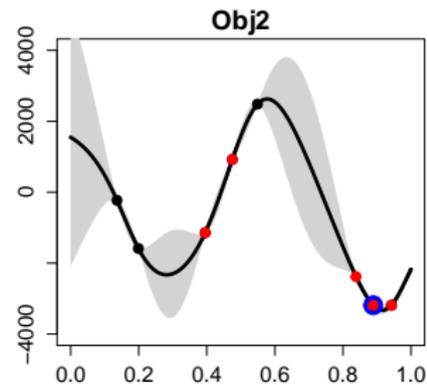
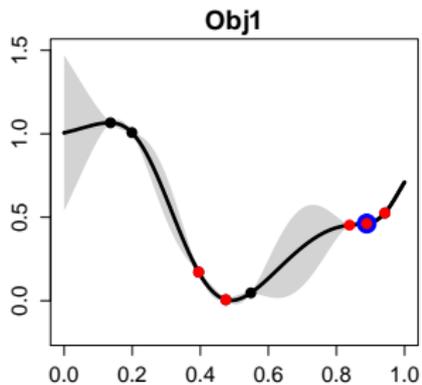
Illustration



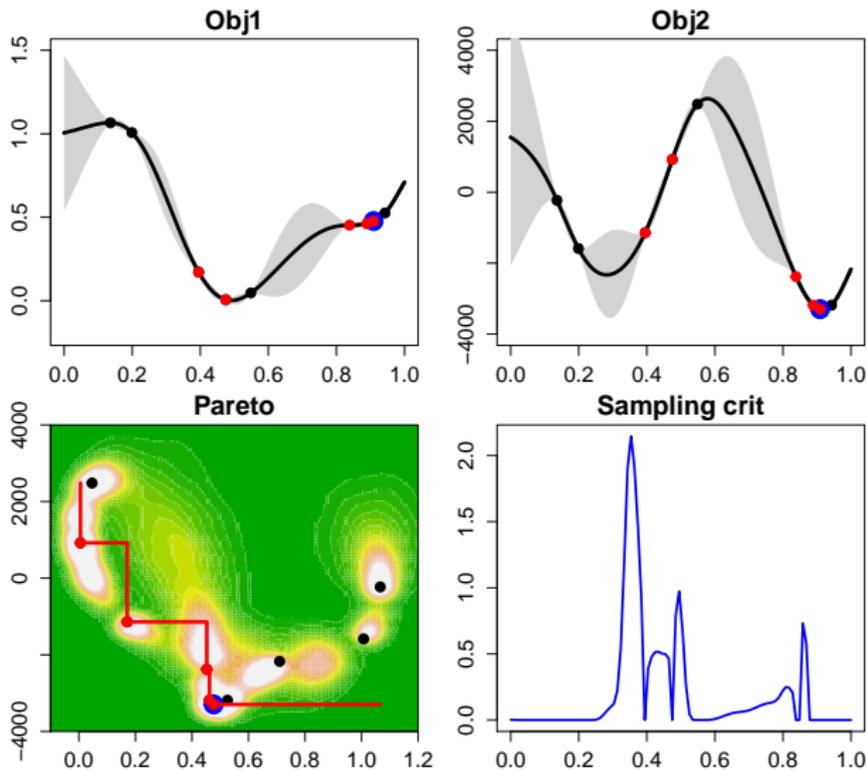
Illustration



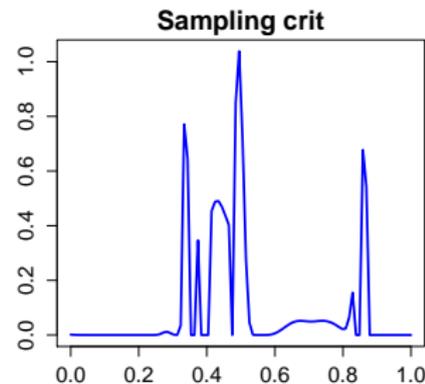
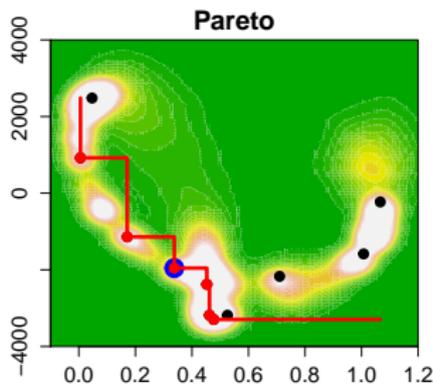
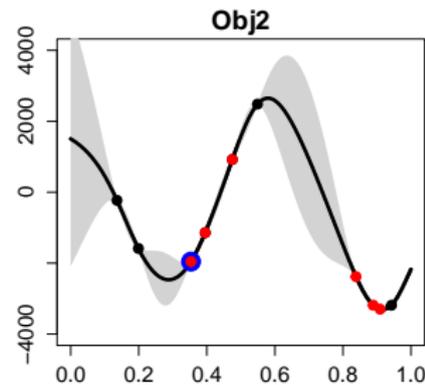
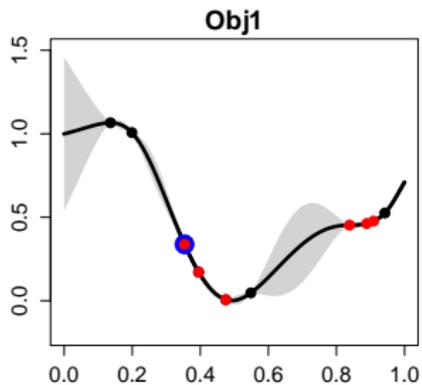
Illustration



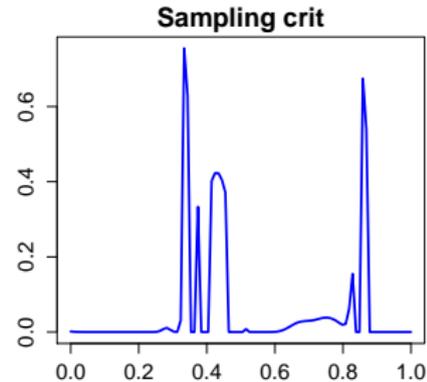
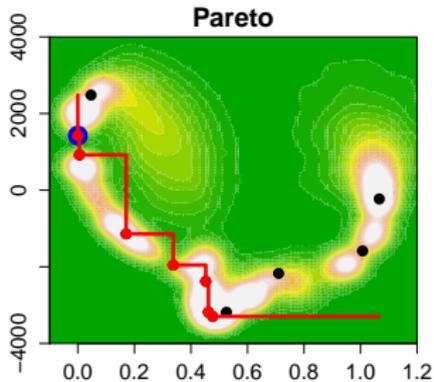
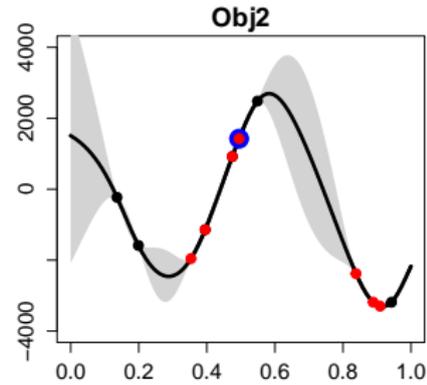
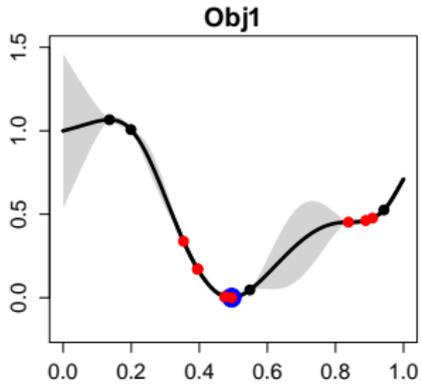
Illustration



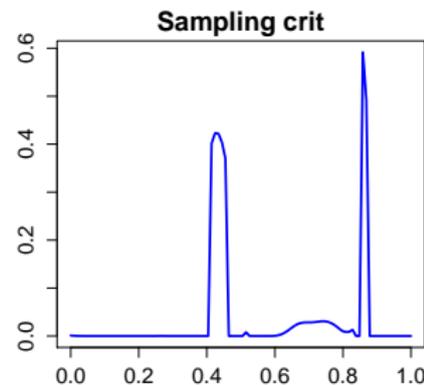
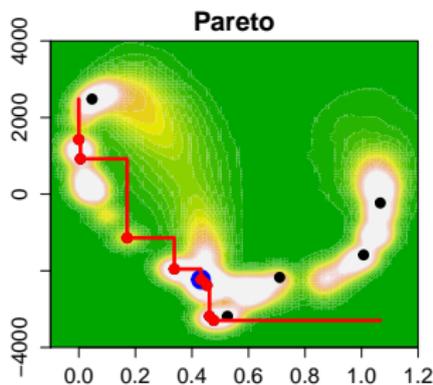
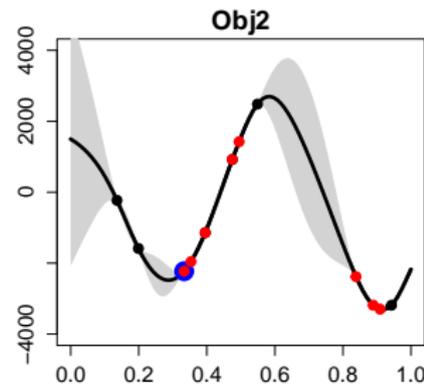
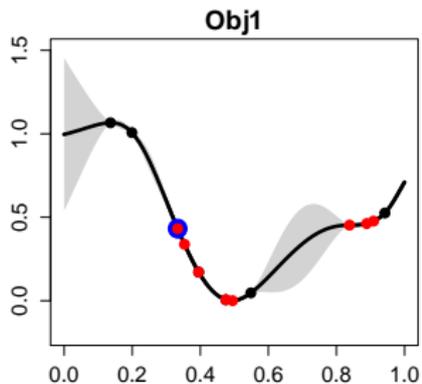
Illustration



Illustration



Illustration



Application au simulateur MAppleT

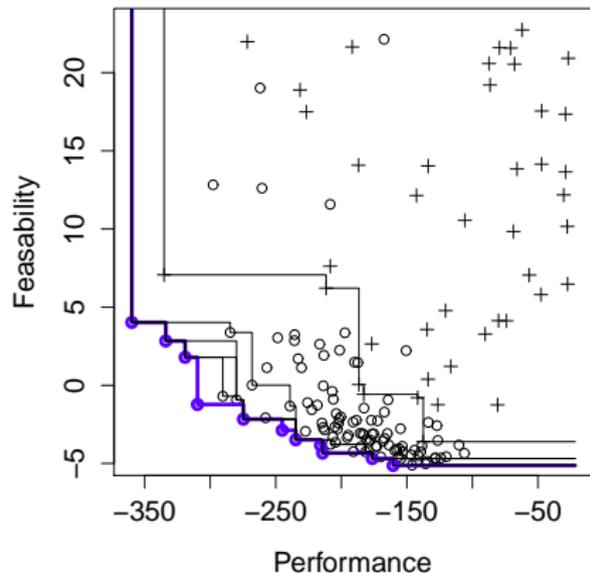
Configuration

- Initialisation : 50 observations
- 110 itérations de l'algorithme
- ≈ 1 min pour trouver la nouvelle observation (45min par simulation)

Résultats

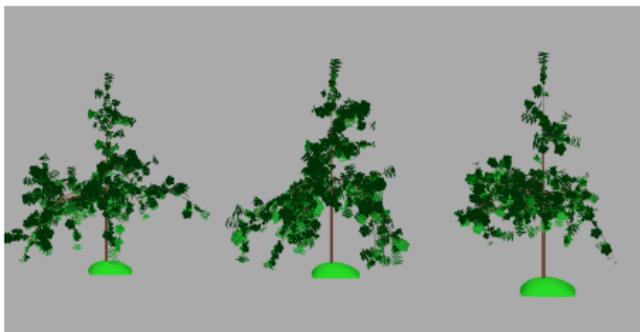
- Front étendu malgré le faible nombre de simulations
- Ensemble de variétés potentielles

- Croix : observations initiales
- Cercles : nouvelles observations



3 arbres Pareto-optimaux

Paramètre	LB	UB	x_1^*	x_2^*	x_3^*
Branching Angle	20	120	79	77	79
Internode Length (m)	0.008	0.051	0.050	0.048	0.044
Top Shoot Diameter (m)	0.001	0.0085	0.0069	0.0074	0.0066
Leaf Area (m^2)	0.0003	0.011	0.0089	0.0065	0.0046
PLA	-	-	360	310	214
Feas.	-	-	4	-1.2	-4.3



Quelques perspectives

Application

- Résultats sous une forme plus facilement exploitables (chemins ?)
- Approfondissement de la notion de faisabilité
- Traitement des aspects stochastiques
- Transposition à d'autres modèles (SUNFLO)

Algorithme

- Gestion des corrélations entre objectifs
- Parallélisation, données bruitées
- Paquet R en préparation...

~ The End ~



Ensemble des simulations MAppleT

