



Universiteit  
Leiden  
The Netherlands

## Optimally weighted ensembles of surrogate models for sequential parameter optimization

Echtenbruck, M.M.

### Citation

Echtenbruck, M. M. (2020, July 2). *Optimally weighted ensembles of surrogate models for sequential parameter optimization*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/123184>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/123184>

**Note:** To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/123184> holds various files of this Leiden University dissertation.

**Author:** Echtenbruck, M.M.

**Title:** Optimally weighted ensembles of surrogate models for sequential parameter optimization

**Issue Date:** 2020-07-02

# Nederlandse Samenvatting

Een gebruikelijke methode om de extrema van een functie te berekenen als dit niet analytisch mogelijk is, is om een search uit te voeren door iteratief en strategisch punten van de functie te kiezen en te evalueren. Echter voor optimalisatie problemen uit de praktijk, is de bestedingsruimte wat betreft het aantal functie evaluaties vaak beperkt gezien de benodigde tijd en de kosten van deze functie evaluaties. Een gebruikelijke techniek, onder deze omstandigheden, is het leren van een surrogaat model, b.v., een regressie model, gebaseerd op de beschikbare evaluaties van de response functie om vervolgens dit model te gebruiken voor het bepalen van de plaats van toekomstige evaluaties. Sequential Parameter Optimization (SPO) is een wel bekende methode voor het oplossen van black-box optimalisatie problemen behept met dure functie evaluaties met gebruikmaking van surrogaat modellen.

Voor zulke optimalisatie processen, kan de keuze van het surrogaat model een significante invloed hebben op de kwaliteit en de prestatie van de optimizer. Om echter relevante beslissingen te maken over welk surrogaat model te kiezen voor een gegeven probleem, is vaak expert kennis van zowel de functie en de eigenschappen van het surrogaat model nodig. In veel voorkomende situaties, echter, is er geen voorkennis van de functie of van alle beschikbare modellen aanwezig. Geautomatiseerde methoden die geheel zelf leren welk type surrogaat model het beste past bij het probleem zouden kunnen helpen bij het overwinnen van deze moeilijkheid.

Deze thesis introduceert nieuwe methoden voor hoe je meerdere heterogene surrogaat modellen voor regressie en optimalisatie van dure black-box optimalisatie problemen beheert. Het overkoepelende doel is het vrijwaren van de gebruiker van de last met betrekking tot het kiezen van het juiste surrogaat model en het creëren van een ensemble genererende strategie dat betrouwbaar en nauwkeurig werkt voor willekeurige criterium functies en modellen. De primaire focus zijn de regressie problemen en optimalisatie processen die slechts een relatief klein aantal

## NEDERLANDSE SAMENVATTING

---

functie evaluaties toelaten daar deze restrictie vaak gepaard gaat met problemen uit de praktijk.

In Hoofdstuk 3 van deze thesis wordt een taxonomie van bekende methoden die dit beogen geïntroduceerd en gespecificeerd. De methoden voor het kiezen van modellen valt uiteen in twee typen.

De 'Single Evaluation Model Selection' methoden gebruiken, in het algemeen, een vooraf gedefiniëerde strategie om het meest geschikte model te kiezen. Deze strategie kan ook gebruik maken van data verkregen uit voorgaande evaluaties. Zulke ad hoc regels laten de regels van spaarzaamheid ('parsimony') buiten beschouwing en steunen niet of nauwelijks op de data bij helpen van het kiezen van het beste model.

Methoden die als 'Multi Evaluation Model Selection' bekend staan, pakken dit probleem aan door het evalueren van alle beschikbare typen surrogaat modellen. Maar in gevallen dat er meer dan één sterk model aanwezig is in de verzameling, kan het gunstig zijn om de inferentie output van verschillende modellen te combineren.

Dat laatste is wat er gedaan wordt in de 'Model Combination' methoden. De tot nu toe bekende strategieën zijn echter, in het algemeen, op de een of andere manier beperkt (b.v., tot homogene modellen of tot bepaalde toepassingen).

In Hoofdstuk 4 worden de inzichten verkregen in Hoofdstuk 3 gebruikt om een nieuwe ensemble methode te ontwikkelen. Deze aanpak wordt op een fundamentele manier bestudeerd door eerst ensembles van twee surrogaat modellen te evalueren. Er wordt aangetoond dat de convexe combinatie van modellen gunstig kan zijn daar de convexe combinatie van voorspellingen van de twee basis modellen zowel positieve als negatieve voorspellingsfouten van de basis modellen middelt. De CCM kan wedijveren met de basis modellen en in sommige gevallen beter presteren dan deze. De inzichten verworven in de studie van convexe combinaties van twee basis modellen leiden er toe dat convexe lineaire combinaties van modellen een ideale keuze is voor het combineren van modellen. De voordelen die in deze studie gevonden zijn zijn:

- Doordat convex lineaire combinatie gebruikt wordt voor het combineren, kan een ensemble niet slechter presteren dan het zwakste basis model.
- Het ensemble kan beter presteren dan de basis modellen wanneer tegengestelde voorspellingsfouten worden gecompenseerd.
- Een CCM verdient de voorkeur boven een basis model alleen als de algehele fit van het ensemble model in feite beter is (in termen van RMSE) dan de algehele fit van elk van de basis modellen.

- De convex lineaire combinatie van de voorspellingen voor een gegeven verzameling van gewichten is gemakkelijk uit te rekenen.

Als voorbereiding op de implementatie van het algoritme voor een grote verzameling van heterogene modellen, wordt het algoritme op een algemenere manier gespecificeerd door het gebruik van drie basis modellen. Bovendien wordt 'exhaustive search' gebruikt voor het vinden van de optimale combinatie van gewichten in een vast rooster vervangen door een flexibelere (1+1)-ES. Deze aanpassingen zijn vergezeld met experimenten waarmee gegarandeerd wordt dat de veranderingen geen nadelige invloed hebben op de prestatie van de methode.

Voortbouwend op dit fundament, wordt in het vervolg, de verzameling van basis modellen uitgebreid tot de beoogde grootte en worden experimenten uitgevoerd om te garanderen dat de prestatie van de methode onder deze verandering niet zal lijden. De eerste experimenten laten zien dat de (1+1)-ES, zonder verdere aanpassingen, niet overweg kan met de uitgebreide zoekruimte. Daarom worden verschillende aanpakken besproken en geïmplementeerd om deze complicatie te lijf te gaan. Ten slotte, wordt het hoofdstuk afgerond met het vergelijken van de experimenten voor alle aanpakken op een verzameling van test functies welke gebaseerd zijn op fysische modellen. Het blijkt dat in sommige gevallen de aanpakken beter presteren dan de basis modellen. Een ander essentieel inzicht verkregen door het uitvoeren van de experimenten is dat een model soms een gunstige bijdrage tot het ensemble levert terwijl geen enkel 'high-ranked' model dit kan teweegbrengen.

In Hoofdstuk 5 wordt de ontwikkelde ensemble strategie in meer detail geïntroduceerd en aangepast voor toepassing in SPO. Deze aanpassingen zijn nodig, b.v., om de modellen continu af te stemmen ten gevolge van de aanwezigheid van dynamisch veranderende en niet-uniforme data sets. De aanpassingen zijn:

- Periodieke reconstructie van modellen en tijdelijk opschorten van modellen om rekening te houden met dynamische updates.
- Lokaal 'density weighted cross-validation' om om te kunnen gaan met niet-uniforme data distributies.
- Aanpassing van de (1+1)-ES gewichtsoptimalisatie methode om grote ensemble sets te kunnen verwerken.

De dynamisch aanpassend ensemble strategie wordt dan uitgebreid getest met betrekking tot prestatie en rekentijd in sequentiële optimalisatie processen op verscheidene criterium functies. Ten eerste, worden instanties van de methode die gebruik maakt van verschillende settings voor de reconstructie- en opschor-

## NEDERLANDSE SAMENVATTING

---

tingsinterval vergeleken en de invloed van deze settings op de prestatie en rekestijd wordt geanalyseerd. Zowel wat betreft de prestatie als de rekestijd wordt de methode vergeleken met elk basis model en met twee sterke ensemble concurrenten die verschillende kenmerken die deel uitmaken van de kenmerken van de voorgestelde ensemble methode bezitten.

De resultaten laten zien dat de dynamisch aanpasbare ensemble strategie betrouwbaar presteert en wat de nauwkeurigheid betreft kan wedijveren met zowel de basis modellen als de concurrenten. Men kan aantonen dat de voorgestelde ensemble strategie methode een duidelijk voordeel oplevert vergeleken met methoden die zich beperken tot de keuze van een enkele basis model in vaste intervallen. Gegeven dat het beste model op voorhand niet bekend is, is de dynamisch aanpasbare ensemble strategie de beste keuze.

De analyse van de impact (invloed) van het reconstructie interval en het opschortingsinterval op de prestatie van de ensemble strategie laat zien dat een gewone update van de ensemble setup te prefereren is, alhoewel deze update zich moet beperken tot een kleinere deelverzameling van sterkere basis modellen die in een minder frequent interval ge-update mogen worden. Een weloverwogen keuze voor de lengte van deze intervallen heeft ook een duidelijke invloed op de rekestijd van de ensemble strategie.

Samengevat kan men zeggen dat het gelukt is om een strategie te ontwikkelen dat in de eerste plaats zo betrouwbaar en precies mogelijk werkt op willekeurige criterium functies en dat willekeurige typen surrogaat modellen gebruikt als voornaamste doelen is bereikt. Alhoewel het bewust wordt aanvaard dat dit bereikt kan worden ten koste van de ensemble rekestijd, dit nadeel verminderd kan worden door gebruik te maken van weloverwogen settings voor het reconstructie interval en opschortingstijd. Echter, als de nadruk op dure real-world applicaties valt, zullen de benodigde rekestijden verwaarloosbaar zijn.