



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Stochastic and deterministic algorithms for continuous black-box optimization

Wang, H.

Citation

Wang, H. (2018, November 1). *Stochastic and deterministic algorithms for continuous black-box optimization*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/66671>

Version: Not Applicable (or Unknown)

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

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/66671>

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

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/66671> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Wang, H.

Title: Stochastic and deterministic algorithms for continuous black-box optimization

Issue Date: 2018-11-01

Samenvatting

Het black-box-optimalisatieprobleem komt in veel toepassingen voor. Bijvoorbeeld, de afstemmingstaak van een machine-learning algoritme voor het leren van een curve op experimentele gegevens.

In het PROMIMOOC-project (**PRO**cess **MI**ning voor **Multi-Objective Online Control** met industriële partners Tata Steel en BMW groep), is het optimalisatieprobleem waarmee we geconfronteerd worden, het zoeken naar de juiste controleparameters van productieprocessen (voor beide partners), zodanig, dat het aantal defecten tijdens deze productie processen grotendeels gereduceerd word. Een dergelijk probleem wordt meestal een “black-box” genoemd, omdat we niet direct het fysieke mechanisme achter het productieproces modelleren en omdat er geen aanvullende informatie over de wiskundige kenmerken (bijvoorbeeld convexiteit en continuïteit) bekend zijn die zouden helpen bij de optimalisatie. Daarom wordt het Black-Box-probleem ook als zeer uitdagend beschouwd. Een andere moeilijkheid doet zich voor bij de extreem hoge kosten van het uitvoeren van proeven op de productielijn: veronderstel dat een kandidaat-instelling van controleparameters (of kandidaat-oplossing) wordt voorgesteld door een optimalisatie-algoritme. De kwaliteit van deze instelling kan alleen worden beoordeeld door deze toe te passen op de daadwerkelijke productielijn en vervolgens de defectfrequentie in de uitvoer te meten. Dit is vaak erg duur en riskant: wanneer de kandidaat-instelling niet goed presteert, zullen veel defecten worden gegenereerd en dit resulteert in extra productiekosten voor de industriële partners. Om dit probleem efficiënt en zorgvuldig op te lossen, moeten verschillende fundamentele optimalisatietechnieken op een redelijke manier worden gecombineerd.

Allereerst, omdat er niet veel wiskundige veronderstellingen over het probleem zijn, moeten we onze toevlucht nemen tot het zogenaamde *stochastische optimalisatie-algoritme*, in plaats van de traditionele optimalisatietechnieken uit de wiskunde en

operationeel onderzoek te gebruiken. Het stochastische optimalisatie-algoritme is een klasse van methoden die de doelfunctie direct optimaliseert door uitsluitend de beoordeling (evaluatie) van de kandidaat-oplossing te gebruiken. Stochastische optimalisatie-algoritmen worden onderbouwd door de zogenaamde *Stochastische variatie*, die (lokale) willekeurige verstoringen genereert om het huidige zoekpunt te wijzigen. In evolutionaire methoden wordt dit meestal de mutatie-operator genoemd. Intuïtief beïnvloedt de efficiëntie van een stochastische variatiemethode de prestaties van het bijbehorende optimalisatie-algoritme enorm. Dit is de reden waarom we de efficiëntie van dergelijke methoden grondig onderzoeken (Hoofdstuk 2). Als resultaat van het onderzoek stellen we een nieuwe stochastische variatiemethode voor, genaamd *mirrored orthogonal sampling*, die gericht is op het gelijkmatig genereren van willekeurige verstoringen die de zoekruimte (deelverzameling van $\mathbb{R}^d$) dekken. Zowel theoretische analyse als empirisch onderzoek zijn uitgevoerd op de voorgestelde methode.

Ten tweede, omdat het erg duur is om kandidaat-oplossingen te beoordelen, is het gebruikelijk om een dure beoordeling in de praktijk te vervangen door een machine learning model, dat is getraind met behulp van de historische beoordelingen. Dan kan een optimalisatie-algoritme de kwaliteit van een kandidaat-oplossing bepalen aan de hand van het model, in plaats van het echte productieproces met deze oplossing uit te voeren. Z'ou techniek heet *Surrogaatmodellering*. Een grote uitdaging bij surrogaatmodellering is het geven van een betrouwbare kwantificering over de onzekerheid van de voorspelling van een model, omdat data-gestuurde modellen meestal significante voorspellingsfouten opleveren. In hoofdstuk 3 bestuderen we het bekende *Kriging/Gaussian Process Regression* (GPR) model, dat in staat is om de onzekerheid te kwantificeren. De kwantificeringsbenadering in Kriging/GPR wordt in detail besproken. Bij de toepassing van de Kriging/GPR-methode op reële gegevens, worden we geconfronteerd met het volgende obstakel: de Kriging/GPR-methode heeft een kubieke tijd complexiteit, waardoor de toepasbaarheid van de methode bij grote datasets wordt beperkt. In dit hoofdstuk wordt een nieuw algoritmisch raamwerk, genaamd *Cluster Kriging*, voorgesteld om dit probleem aan te pakken. Cluster Kriging wordt getest op een aantal geselecteerde functies en datasets, met een versnelling van de model leersnelheid en een verbeterde model precisie.

Vanzelfsprekend is, wanneer eenmaal een goed surrogaatmodel is verkregen, de vraag hoe een dergelijk model op een redelijke manier moet worden gebruikt, zodat

de kwantificering van de onzekerheid in aanmerking wordt genomen. Het is mogelijk om de meest betrouwbare oplossing te bepalen op basis van het surrogaatmodel, of als alternatief, welk punt het grootste potentieel heeft om de optimalisatieprocedure te helpen als de feitelijke beoordeling daarop is uitgevoerd. Dergelijke beslissingen worden meestal bepaald door een nutsfunctie op het surrogaatmodel, genaamd *invulcriterium*. Dit is het onderwerp van hoofdstuk 4. De moeilijkheid bij het ontwerpen van het invulcriterium is het in balans brengen van de afweging tussen de modelvoorspelling (exploitatie) en de modelonzekerheid (verkenning). In dit hoofdstuk vatten we het bestaande invulcriterium samen en stellen we een nieuw invulcriterium voor, genaamd *Moment-Generating Function of Improvement* dat het mogelijk maakt om deze afweging expliciet en soepel te regelen. Bovendien wordt de parallelisatie mogelijkheden van invulcriteriums ook grondig overwogen en worden verschillende nieuwe parallelisatie methoden voorgesteld en getest.

Ten slotte, bespreken we het zogenaamde optimaliseringsprobleem met meerdere doelstellingen: stel dat we het aantal defecten in de productie willen minimaliseren en het hele proces tegelijkertijd willen maximaliseren. In dit geval is het typisch niet mogelijk om een instelling van parameters te vinden die beide doelen op hetzelfde moment behaalt, daarom moeten we speciale algoritmen voor de optimalisatie van meerdere doeleinden gebruiken. In hoofdstuk 5 willen we een optimaliseringsalgoritme met meerdere doeleinden ontwerpen dat de gradiënt of de Hessiaanse matrix van de doelfunctie kan gebruiken. Om dit doel te bereiken, worden het gradiëntveld en de Hessiaanse matrix van de zogenaamde hypervolume-indicator afgeleid en grondig bestudeerd. Dientengevolge worden twee nieuwe algoritmen, namelijk de hypervolume-gebaseerde eerste- (gradiënt) en tweede-orde (Hessiaan) methoden voorgesteld en getest.

