

## 1 Résumé

Rio Tinto (RT) est le leader mondial de la production d'aluminium. La division de l'énergie électrique gère la production et la distribution d'énergie. Les six centrales hydroélectriques détenues par RT produisent près de 90% de l'énergie nécessaire à sa production d'aluminium. De par son vaste réseau hydroélectrique, Hydro-Québec (HQ) assure la production de 98% de l'électricité de la province. HQ est la seule entreprise d'électricité en Amérique du Nord à posséder un centre de recherche de l'importance de l'Institut de recherche (IREQ). Ces entreprises font face à de nombreux problèmes d'optimisation, certains ne pouvant être abordés par les algorithmes et méthodologies de recherche opérationnelle existants. **L'objectif principal de ce projet est de développer de nouvelles approches algorithmiques ciblant certaines spécificités identifiées dans les problèmes d'optimisation industriels.**

Ces approches algorithmiques pour l'optimisation sans dérivées seront développées par trois étudiants au troisième cycle, co-encadrés par deux professeurs et un associé de recherche de l'École Polytechnique de Montréal (ÉPM). De par le passé, ces professeurs ont démontré leur capacité à former plusieurs étudiants aux cycles supérieurs, et ont publié de nombreux articles dans les meilleures revues de recherche opérationnelle, ainsi que dans un vaste éventail de revues d'ingénierie.

Les approches développées dans le cadre de ce projet de recherche seront intégrées par l'associé de recherche au logiciel NOMAD, une implémentation de l'algorithme MADS pour l'optimisation de boîtes-noires distribué sous une license libre, et utilisé par de nombreuses entreprises canadiennes. Les nouveaux algorithmes seront testés sur les applications des partenaires industriels en collaboration avec les chercheurs impliqués. Les progrès algorithmiques seront publiés dans des revues scientifiques, et seuls les résultats numériques approuvés par les partenaires industriels RT et HQ seront publiés.

Les étudiants impliqués dans ce projet participeront à toutes les étapes : la définition et l'appropriation de la problématique lors d'échanges avec l'industrie, le développement de nouvelles techniques algorithmiques, l'analyse de convergence de la méthodologie envisagée, la mise en place d'un banc d'essai relié au problème industriel pour les essais numériques, les échanges avec les partenaires industriels pour le transfert de connaissance, et enfin, la rédaction des articles pour diffusion à la communauté scientifique.

## 2 Contexte

Plusieurs problèmes d'optimisation en ingénierie ne possèdent pas la structure nécessaire pour être abordés par les méthodes traditionnelles d'optimisation. En effet, les fonctions objectif et les contraintes définissant le problème sont souvent données sous forme de boîte-noire, habituellement obtenue par le lancement d'un programme informatique qui traite les variables d'entrée et retourne les valeurs de la fonction objectif à optimiser ainsi que les valeurs des fonctions définissant les contraintes. L'utilisation de ces boîtes-noires peut requérir un important temps de calcul, et les valeurs produites peuvent être imprécises. De plus, l'évaluation peut échouer pour des raisons internes à la boîte-noire. Toutes ces raisons font en sorte qu'il est impossible d'utiliser ou même d'estimer les valeurs des dérivées, et motivent donc l'utilisation d'*algorithmes sans dérivées*, communément connus sous le terme de méthodes DFO pour *Derivative-Free Optimization*.

Ce type de problème d'optimisation est fréquemment rencontré par l'industrie. Les chercheurs industriels et universitaires impliqués dans cette demande ont participé par le passé à la résolution de plusieurs problèmes de ce type. HQ et ÉPM ont étudié la question du positionnement optimal de senseurs à neige sur un bassin hydrologique afin de déterminer les endroits qui minimiseraient l'erreur de prédiction. L'évaluation de cette erreur nécessitait une simulation numérique requérant d'importants calculs [5]. Dans un autre projet, ils ont étudié la calibration optimale des paramètres d'un modèle hydrologique via

des simulations climatiques [33]. RT et ÉPM ont abordé la question de planification des arrêts d'entretien des groupes turbo-alternateurs d'un système hydroélectrique [19]. Dans un autre projet, ils étudient l'identification des paramètres décrivant la confection et la gestion d'arbres de scénarios pour la planification à court terme d'un réseau hydroélectrique (projet de doctorat en cours).

Les quatre projets énumérés dans le paragraphe précédant ont eu recours à des techniques d'optimisation de boîtes-noires. L'étude de ces projets a permis le développement de nouvelles fonctionnalités algorithmiques. RT et HQ doivent résoudre plusieurs autres problèmes d'optimisation de type boîte-noire, et les algorithmes existants ne possèdent pas encore les fonctionnalités adéquates pour les résoudre.

### 3 Objectifs

Le présent projet de recherche vise à atteindre les trois objectifs principaux suivants.

**Développement d'outils d'optimisation.** Nous ne développons pas des méthodes d'optimisation pour le bon plaisir de les construire. Nous les développons afin de répondre à des besoins rencontrés dans différentes disciplines et diverses industries. Dans le cadre de ce projet, HQ et RT nous ont fait part de certaines spécificités des problèmes d'optimisation qu'ils rencontrent dans leur pratique industrielle sur une base régulière. L'objectif principal de ce projet de recherche est de développer des nouvelles fonctionnalités, méthodologies et outils algorithmiques afin de pouvoir traiter les spécificités rencontrées. L'efficacité de ces nouveaux développements sera mesurée sur les problèmes tests issus, ou inspirés, de ceux rencontrés par nos partenaires industriels.

**Avancement des connaissances sur les algorithmes sans dérivées.** La famille d'algorithmes visée par ce projet regroupe les méthodes d'optimisation de boîtes-noires et d'optimisation sans dérivées. Ce type de méthode intervient lorsque la structure interne des fonctions définissant le problème est inexploitable. Le deuxième objectif de ce projet est d'étendre les capacités de ces méthodes, d'asseoir les nouveaux développements sur de solides fondements mathématiques en utilisant les outils du calcul non-lisse pour analyser la convergence des méthodes. Les avancées seront diffusées dans la littérature de recherche opérationnelle. Les progrès algorithmiques seront intégrés dans notre logiciel NOMAD, librement diffusé sous la license LGPL depuis près de 15 ans.

**Former des étudiants sensibilisés aux problématiques industrielles.** Nous croyons fermement que la meilleure façon de former des étudiants en mathématiques appliquées aux cycles supérieurs est de les exposer aux problèmes réels et de leur permettre dans un cadre universitaire de développer des outils pour aborder ces problèmes. Chacun des trois étudiants au doctorat participant à ce projet sera confronté aux réalités d'une problématique industrielle, et devra développer une méthodologie, analyser ses fondements théoriques et enfin, appliquer ses résultats au problème concret. À la fin de leurs études, ces étudiants seront alors en excellente position pour intégrer le marché du travail.

### 4 Proposition détaillée

Le projet de recherche comprend huit sous-projets visant des améliorations de l'algorithme MADS, et sont détaillées aux sous-sections suivantes. Chacun des sous-projets a été élaboré en collaboration avec les deux industriels, et s'attaque à des problèmes d'optimisation ayant des spécificités propres à l'une ou l'autre des entreprises HQ et RT, et parfois aux deux. Ces sous-projets sont décrits de façon cloisonnée, mais certains liens sont mentionnés pour mettre en évidence la cohésion de la recherche proposée.

Toutes les propositions algorithmiques développées dans le cadre de ce projet seront testées sur des cas tests académiques peu coûteux mais ayant des propriétés similaires à celles de vraies boîtes-noires. Dans certains cas, nous effectuerons des tests sur des problèmes fournis par HQ et RT.

Les développements algorithmiques retenus seront intégrés par Christophe Tribes dans notre logiciel NOMAD et seront rendus disponibles dans les nouvelles versions du logiciel. Quatre nouvelles versions du code seront produites au cours du projet, soit une à la fin de chacune des années du projet.

**FAIT 4.1 Stratégies d’ordonnancement et évaluations opportunistes (Tribes).** Les algorithmes d’optimisation de boîtes-noires que nous développons génèrent des listes de points (dans l’espace des variables) qui sont traités par la simulation numérique. Une stratégie opportuniste consiste à interrompre une série d’évaluations aussitôt qu’une amélioration par rapport à la meilleure solution courante est obtenue et de passer à l’itération suivante. Donc, l’ordre dans lequel les points sont traités affecte grandement l’efficacité de l’algorithme. En traitant d’abord les plus prometteurs on peut bénéficier d’importantes économies en temps de calcul, ce qui est crucial lors d’optimisation de fonctions coûteuses. Pour cette raison, et bien que non spécifique à leurs problèmes d’intérêt, HQ et RT supportent ces développements algorithmiques.

L’ordonnancement des points et la stratégie opportuniste peuvent être implémentés dans les algorithmes qui permettent l’interruption des évaluations tels MADS, GSS dans le logiciel HOPSPACK [38]), PSWARM [43] ainsi que dans des algorithmes génétiques [26].

Nous planifions développer de nouvelles stratégies d’ordonnancement des points d’évaluation applicables dans différents algorithmes de recherche directe. Ces stratégies exploiteront des informations basées sur plusieurs facteurs. En particulier, l’historique des évaluations précédentes, les améliorations anticipées, les modèles d’approximation et les fonctions substitut des objectifs et des contraintes.<sup>1</sup>

Les performances de ces nouvelles stratégies seront testées et comparées aux stratégies existantes. Nous proposons aussi d’étudier l’impact de ces stratégies dans le cas d’évaluations faites en parallèle. On s’intéressera dans ce cas à l’amélioration de performance en terme de temps réel au lieu de simplement considérer le nombre total d’évaluations. En effet, supposons un bloc d’évaluations traités en parallèle. Un arrêt opportuniste ne sera applicable qu’après chaque bloc au lieu de l’être après chaque évaluation dans le cas non parallèle. Le nombre d’évaluations pour converger vers une même solution pourrait être plus grand lorsque les évaluations sont effectuées en parallèle. En connaissant le compromis entre ces deux mesures de performance il sera possible de faire de meilleurs choix sur le nombre de processus d’évaluations en parallèle. Ce sous-projet partage un lien avec celui présenté dans la section 4.5.

**FAIT 4.2 Traitement des variables discrètes et granulaires dans l’algorithme MADS (Tribes).** Ce projet traite des problèmes pour lesquels une granularité minimale est imposée pour une partie ou bien toutes les variables. Les variables entières constituent un cas particulier où la granularité est de un, et les variables devant posséder un nombre fixe de décimales en est un autre. L’impact potentiel est donc très important car, dans l’industrie, de nombreux problèmes sont modélisés avec des variables de nature discrète.

Les principales méthodes d’optimisation de boîtes-noires ont été développées pour gérer les variables continues [9, 42]. Ces méthodes construisent une suite de treillis discrets sur l’espace des variables qui peuvent être raffinés jusqu’à la précision machine pour les variables continues. Dans [3, 8] cette structure discrète est exploitée afin de gérer les variables entières. Cette solution basée sur des arrondis et des treillis de taille minimale unitaire est déjà proposée dans NOMAD et a été adaptée aussi aux variables binaires. Le retour fourni pas nos utilisateurs nous apprend que la fonctionnalité est essentielle et hautement utilisée, mais cependant elle ne permet pas toujours d’obtenir des résultats satisfaisants – il arrive en pratique que le logiciel s’arrête prématurément à des solutions peu intéressantes. Il est donc essentiel de revoir l’algorithme pour les variables discrètes, et c’est ce que va permettre implicitement la gestion des variables granulaires.

---

<sup>1</sup>Une brève introduction aux fonctions substitut et leur utilisation dans un contexte d’optimisation de boîtes-noires est présentée à la section 4.7.

Au lieu de simplement discrétiser les variables, nous prévoyons développer une façon plus efficace de gérer les variables entières ou à granularité prescrite. Nous proposons de concevoir un treillis en fonction de chacune des variables au sein de l'algorithme MADS, ainsi qu'une nouvelle façon de les mettre à jour. Ceci permettra, à une itération donnée, de générer des points du treillis avec un nombre contrôlé de décimales, ce nombre pouvant être zéro pour les variables entières. Ainsi, un arrêt prématuré nous fournira déjà une convergence locale pour un nombre limité de décimales. De plus, pour les variables continues, les itérations produiront des solutions de plus en plus précises, en opposition avec la version courante de MADS qui possiblement, dès les premières itérations, peut toucher à de très petites décimales.

Dans la littérature, ce sujet est très récent et on peut citer les références suivantes comme pertinentes [23, 28, 31, 34, 35, 36, 37, 44]. Au meilleur de nos connaissances, l'algorithme DFL, pour le cas avec contraintes et variables mixtes, est la seule implémentation disponible d'une méthode DFO. On peut le trouver à <http://www.dis.uniroma1.it/%7Elucidi/DFL/> et il servira de base de comparaison pour nos tests numériques. Nous comparerons aussi avec la méthode courante dans NOMAD.

**FAIT 4.3 Optimisation de fonctions hiérarchiques (PhD HQ).** L'optimisation des réglages des stabilisateurs de puissance dans un réseau électrique pour l'obtention d'un amortissement maximal des oscillations de fréquence résultant des perturbations causées par divers phénomènes est un problème rencontré par HQ. La fonction objectif à minimiser est constituée d'une collection de sous-fonctions, chacune d'elle retournant une valeur discrète. Ces sous-fonctions sont ordonnées de façon hiérarchique selon leur priorité. Or, il est fréquent que diverses solutions partagent les mêmes valeurs de certaines des sous-fonctions. La préférence d'une solution envers une autre est alors déterminée en comparant les valeurs des sous-fonctions en suivant l'ordre hiérarchique jusqu'à ce qu'elles diffèrent l'une de l'autre. Cette façon de comparer les objectifs est compatible avec les méthodes d'optimisation de boîtes-noires [30].

Nous proposons de poursuivre la recherche dans cette voie en y intégrant les outils de modèles et substituts à chacune des sous-fonctions, et à tenir compte des contraintes. Nous développerons une prise en compte de sous-fonctions objectif ayant un ordre de priorité qui sont évaluées dans cet ordre par une série de boîtes-noires distinctes. La méthode doit permettre d'identifier si un nouveau point est un échec ou une amélioration comparativement à tous les points déjà évalués sans avoir à évaluer toutes les boîtes-noires.

Le concept de fonctions hiérarchiques peut aussi s'appliquer aux contraintes lorsque des solutions infaisables sont obtenues. Nous étudierons comment définir un degré de non-réalisabilité lorsque les contraintes ont un ordre de priorité. Cette façon de traiter les contraintes se veut complémentaire aux approches de filtre [22] et de barrière progressive [10].

Nous testerons cette méthode sur des cas tests académiques et sur les problèmes réels de HQ visant l'amélioration des performances des contrôleurs dans les réseaux électriques.

Bien que le besoin fut identifié en travaillant sur les stabilisateurs de puissance d'HQ, la portée des fonctions hiérarchiques excède le cadre de ce problème particulier. Par exemple, RT utilise NOMAD pour la calibration d'un modèle de simulation de la gestion de ses installations en Colombie-Britannique. La calibration est actuellement réalisée selon différents critères évalués par des sous-fonctions qui sont pondérées à même la fonction objectif [20]. Les objectifs hiérarchiques permettront de s'affranchir de cette pondération de critères et permettront d'intégrer plus facilement les besoins opérationnels de la calibration de ce modèle.

**4.4 Optimisation en présence de variables à effet prépondérant (PhD RT).** Il est possible de mesurer de façon statistique l'impact des variables de décision sur la valeur de la fonction objectif [4]. Ces statistiques permettent d'identifier automatiquement les variables dites *prépondérantes*, et de canaliser

l'effort algorithmique dans le sous-espace engendré par ces variables en fixant les autres.

Nous proposons de poursuivre les travaux dans cette lignée en généralisant ces notions de prépondérance aux fonctions définissant les contraintes. En effet, il est nécessaire dans le cas contraint de tenir compte de l'impact sur la réalisabilité. En particulier, nous nous pencherons sur les situations où la solution initiale ne satisfait pas l'ensemble des contraintes. De plus, nous généraliserons la notion de sensibilité de la fonction à une variable, à la sensibilité à un ensemble de variables. En effet, dans certaines situations, certaines variables sont liées indirectement via les contraintes, et pour en augmenter une il faut par exemple en diminuer une autre. Nous devons alors considérer l'impact de ces liens.

Nous comparerons la performance de l'algorithme MADS avec et sans prise en compte des variables prépondérantes lorsque celles-ci sont fournies par l'utilisateur. Nous intégrerons dans l'algorithme d'optimisation une phase de détection automatique des variables prépondérantes sur la fonction objectif ainsi que sur chacune des contraintes.

Cette méthode sera testée sur des cas tests académiques ainsi que sur des problèmes réels issus de nos deux partenaires industriels. HQ envisage d'appliquer les stratégies pour l'optimisation des variables à effet prépondérant au calage de modèles hydrologiques et à des problèmes d'intégration des énergies renouvelables dans les réseaux autonomes. Dans plusieurs applications de NOMAD chez RT (calibration de modèles hydrologiques et modèles de simulation de la gestion hydroélectrique), une connaissance du fonctionnement de la boîte-noire pourrait être utilisée. Par exemple, certaines de leurs applications utilisent des boîtes-noires avec contraintes et les liens entre les variables et les contraintes sont connus.

**FAIT 4.5 Algorithme parallèle PSD-MADS pour les problèmes de grande taille (PhD HQ).** Les capacités de calcul parallèle ont considérablement augmenté au cours des dernières années. Les deux partenaires industriels HQ et RT possèdent d'importantes grappes qui pourraient être exploitées par les méthodes d'optimisation de boîtes-noires, et en particulier par l'algorithme PSD-MADS [11].

Contrairement à d'autres façons de paralléliser MADS [29], la technique est prioritairement conçue pour traiter les problèmes de grande taille (plus de cinquante variables) en se basant sur une décomposition de type bloc-Jacobi [15]. PSD-MADS assigne des sous-problèmes aux processeurs disponibles pour lesquels seule une partie des variables est libre. Ainsi chaque processeur optimise dans un sous-espace qui lui est propre. Ces sous-espaces sont régulièrement mis à jour, le tout restant asynchrone, c'est-à-dire sans barrière de synchronisation pouvant interrompre le travail d'un des processeurs. L'algorithme peut en fait être vu comme une version sans dérivées et sous contraintes des travaux de Ferris et Mangasarian [21].

En pratique, PSD-MADS s'est révélé très efficace sur des problèmes allant jusqu'à 500 variables, alors même que cette première approche possède quelques faiblesses et ne tient pas compte des développements algorithmiques des dernières années, ni de la nouvelle réalité que les grappes de calculs possèdent désormais énormément plus de processeurs. Nous proposons d'améliorer PSD-MADS en développant des règles performantes de regroupement de variables meilleures que la sélection aléatoire de la version originale. Nous pourrions par exemple utiliser les travaux de [4] qui permettent d'identifier les variables importantes grâce à une analyse de sensibilité des variables. Nous pensons aussi considérer des analyses de sensibilité de combinaisons de variables et revisiter la façon dont les résultats des optimisations dans les sous-espaces sont combinées, en nous basant sur l'étape de synchronisation décrite dans [21] et ignorée dans PSD-MADS, le tout en conservant l'aspect asynchrone de la méthode. Grâce à ces améliorations, nous espérons pouvoir traiter des problèmes comptant de l'ordre de mille variables.

Nous prévoyons faire la conception logicielle pour différentes solutions de parallélisme (MPI, thread computing : traitement multifil du processus, Cloud computing : utilisation de service d'infonuagique de calculs). Nous testerons les méthodes de décomposition spatiale sur des problèmes académiques et sur un

problème d'optimisation industriel d'HQ portant sur le réglage des stabilisateurs de puissance, et utilisant la grappe de calcul haute-performance CASIR à l'IREQ. Cette intégration sera faite avec la participation de Leclaire qui a déjà installé et utilisé la version originale de PSD-MADS sur CASIR.

**FAIT 4.6 Gestion de boîtes-grises (PhD RT).** En optimisation de boîtes-noires, l'information interne à la simulation est ou bien inaccessible ou inexploitable. Certaines situations sont moins extrêmes. Par exemple, le concepteur de la simulation peut posséder une information qualitative de certaines contraintes. RT a abordé un problème où pour réduire la valeur d'une contrainte il faut augmenter telle ou telle variable.

Ce type d'information incomplète reliant les variables aux fonctions définissant le problème a été étudié dans le contexte de recherche par motifs [2] il y a plus de 10 ans. Dans ce travail, l'utilisateur possédait des informations sur le signe de certaines dérivées partielles. Cette information était par la suite utilisée pour guider les recherches dans l'espace des variables. Dans [12] nous proposons une façon de mesurer et de quantifier l'effet de chaque contrainte sur la valeur de la fonction objectif. Nous proposons d'actualiser ces travaux aux méthodes plus récentes tel que MADS, et à les étendre au cas contraint.

De tels problèmes peuvent être décrits comme des problèmes d'optimisation de boîtes-grises. En effet, la boîte n'est pas totalement opaque car on dispose de certaines informations. Il existe d'autres types de boîtes-grises. Par exemple, lorsque la forme de la fonction objectif est partiellement connue. Par exemple,  $f(x) = \sum \phi_i(x)$  où chacune des fonctions  $\phi_i$  est obtenue par une simulation. De façon plus générale  $f(x) = g \circ \phi$  avec  $g$  une fonction analytique explicitement connue et  $\phi$  une boîte-noire. Au lieu de développer une fonction substitut pour  $f$ , il serait certainement plus judicieux de développer des substituts  $m_\phi$  pour  $\phi$  et de les recombinaer avec la fonction analytique  $g \circ m_\phi$ . Nous nous inspirerons des travaux récents de S. Wild de Argonne abordant cette question dans un contexte similaire.

Nous prévoyons tester cette méthode sur des cas tests académiques et des problèmes réels issus du partenaire industriel RT. Nous anticipons qu'une bonne gestion des boîtes-grises permettra d'atteindre de solutions satisfaisantes tout en réduisant le nombre total d'évaluations. En particulier, il y a une application pour RT dans un algorithme d'optimisation stochastique par recherche directe de politique [18]. Cet algorithme nécessite l'optimisation d'un modèle de simulation dont la dérivée de la fonction objectif est le produit de deux fonctions dont une dérivable et possédant une représentation analytique connue. HQ entrevoit des possibilités d'applications pour le calage des modèles énergétiques de bâtiments.

**FAIT 4.7 Fonctions substitut à précision variable (PhD ÉPM).** Les fonctions substitut sont parmi les outils les plus puissants en optimisation de boîtes-noires et sont souvent appliquées avec succès [16, 32]. Leur utilisation est d'ailleurs évoquée dans plusieurs projets de cette proposition de recherche, aux sections 4.1, 4.3, 4.6, et 4.8, tandis que le présent projet propose un développement algorithmique de leur utilisation. Un substitut est une fonction donnant une approximation de l'une des sorties de la boîte-noire et qui sera utilisé comme remplaçant de cette sortie par un algorithme d'optimisation [17, 25, 27, 41]. Il est crucial qu'un substitut prenne moins de temps de calcul que la boîte-noire coûteuse. On distingue deux types de substituts : Les *substituts statiques* correspondent à une simplification du problème original et sont fournis par l'utilisateur, en amont de l'optimisation. Un tel substitut peut être une autre boîte-noire, moins coûteuse. Les *substituts dynamiques* sont des modèles génériques construits lors de l'optimisation et régulièrement mis à jour lorsque de nouvelles évaluations de la boîte-noire deviennent disponibles. Les techniques possibles incluent : modèles polynomiaux, fonctions à base radiale, krigeage et réseaux de neurones.

Nous prévoyons définir un cadre algorithmique utilisant des familles de substituts statiques dont la précision est contrôlable. Ceci suppose donc que de tels substituts sont disponibles et qu'ils possèdent un ou des paramètres de précision. Ces paramètres peuvent correspondre au critère d'arrêt d'une méthode



numérique interne à la boîte-noire. Évidemment, plus la précision exigée est élevée, et plus le temps de calcul est grand. L'algorithme devra utiliser ce levier supplémentaire afin d'accélérer sa recherche. Dans le cadre de MADS, il est clair que la précision doit être reliée à la taille du treillis, qui correspond à la convergence de la méthode. Ainsi, lorsque la taille du treillis sera grande, la précision demandée au substitut devra être grande également, tandis que celle-ci sera diminuée conjointement avec le treillis. C'est du moins l'approche développée dans l'étude de Polak et Wetter [39], avec l'algorithme de recherche par motifs, et pour le cas sans contrainte. Nous nous proposons de généraliser cette approche à MADS avec contraintes, et de développer l'analyse de convergence correspondante.

Nous testerons les approches sur des cas tests académiques classiques, et sur une famille de problèmes de production énergétique récemment proposés dans le cadre d'une maîtrise [24]. HQ prévoit appliquer les substituts à précision variable pour le calage de modèles énergétiques de bâtiments.

**4.8 Gestion d'évaluations incomplètes (PhD ÉPM).** Le projet décrit ci-dessous possède certains liens avec celui décrit à la section 4.6 portant sur les boîtes-grises et celui portant sur les fonctions hiérarchiques (section 4.3). Certaines fonctions objectif possèdent une structure exploitable. Par exemple, HQ doit résoudre un problème dans lequel cette fonction est obtenue en prenant la somme d'un ensemble de valeurs positives. Chacune de ces valeurs dépend des mêmes variables, mais se calcule via des simulations indépendantes et coûteuses en temps de calcul. Dans un contexte de minimisation de boîtes-noires, il est intéressant d'interrompre prématurément l'évaluation de la boîte-noire dès qu'on détermine que la somme des valeurs positive excèdera la meilleure valeur courante [1, 7]. En effet, ces interruptions permettent de concentrer l'effort algorithmique à de nouvelles évaluations. Cependant, ces interruptions prématurées font en sorte que nous ne disposons pas de la totalité de l'information permettant la construction d'un substitut de l'objectif.

Dans un premier temps, nous proposons d'enrichir les fonctions substitut pour prendre en compte le degré de complétion d'évaluations de fonctions déterminées par accumulation de termes coûteux. Nous aurons donc des substituts sur chacune des composantes de la fonction objectif plutôt qu'un seul substitut de l'objectif. Il faudra alors adapter les phases de recherche globale et d'ordonnancement de l'algorithme MADS pour prendre en compte l'information sur le degré de complétion en plus des valeurs des fonctions. Lors d'une deuxième phase, nous comptons étendre l'étude aux contraintes dont une évaluation partielle permet de déterminer une violation. Si ces contraintes sont de plus *non-relaxables*, c'est-à-dire que leur satisfaction est obligatoire, alors il est clair que l'évaluation de la boîte-noire pourra être interrompue. Là encore il faudra gérer des substituts avec degrés de complétion.

Nous allons développer des cas tests académiques pour lesquels les évaluations de l'objectif correspondent à une somme de termes, et où un degré de complétion est associé à chaque terme ajouté. Nous inclurons ensuite des contraintes du même type. Nous testerons les améliorations algorithmiques sur ces cas tests et sur des problèmes de type moindres-carrés.

L'ajout de cette fonctionnalité à NOMAD sera très utile chez HQ ainsi que chez RT pour accélérer le calage des modèles hydrologiques coûteux en temps de simulation et pour lesquels l'objectif correspond à une somme d'erreurs entre prédictions et observations [33].

## 5 Expertise de l'équipe

L'équipe est formée de trois entités complémentaires. Les expertises spécifiques des 4 chercheurs des deux partenaires industriels sont décrites à la section portant sur les contributions des entreprises. Ces partenaires apportent les problématiques industrielles concrètes, et l'entité de l'École Polytechnique de Montréal (ÉPM) apporte l'expertise méthodologique et algorithmique :

- Charles Audet est professeur titulaire. Il s'intéresse à l'optimisation de boîtes-noires, aux applications aux problèmes d'ingénierie et à leurs fondements théoriques.
- Sébastien Le Digabel est professeur agrégé. Il s'intéresse aux algorithmes d'optimisation de boîtes-noires, leur implémentation et applications aux problèmes d'ingénierie.
- Christophe Tribes est associé de recherche dans ce groupe depuis 2011. Il possède un doctorat en génie mécanique et s'intéresse à la résolution de problèmes réels tels que l'optimisation de turbines hydrauliques et de composantes d'aéronefs. Il est en charge du développement de NOMAD.

Audet et Le Digabel ont démontré leur efficacité à travailler conjointement. Ils ont 18 publications scientifiques communes et ont encadré ensemble (ou encadrent) 5 étudiants aux cycles supérieurs et 2 post-doctorats. Ils ont publié avec Tribes [13, 14] et co-dirigé des étudiants avec lui. Les trois se complètent par leur expertise complémentaire en mathématiques, informatique et ingénierie.

Il est prévu que tout au long de la durée du projet, les quatre chercheurs industriels participeront activement à la recherche et à la supervision des étudiants. Côté de RT collabore avec plusieurs chercheurs universitaires dont C. Audet [40], D. Orban et M. Anjos de l'ÉPM. Il codirige aussi une étudiante au PhD avec Audet. La première collaboration commune d'Alarie de HQ et Audet remonte à 2001 [6]. Il a aussi travaillé avec de nombreux chercheurs universitaires dont Le Digabel [5] et Anjos de l'ÉPM, ainsi que Poulin de l'École de Technologie Supérieure. Leclaire de HQ a quant à lui déjà collaboré avec Audet et Le Digabel [5, 33].

Les expertises de l'équipe sont complémentaires, et couvrent tous les aspects nécessaires au bon déroulement du projet. L'équipe a démontré par le passé être en mesure de mener à bien de nombreux projets de recherche, à former des étudiants aux cycles supérieurs, ainsi qu'à publier dans les meilleures revues scientifiques de mathématiques appliquées et d'ingénierie.

## 6 Gestion de la recherche

À titre de chercheur principal, Audet sera en charge de la coordination des efforts de l'équipe. De par le passé, Audet a su démontrer ses capacités à gérer des projets de cette envergure. En effet, de 2001 à 2015 il a géré des projets de recherche de taille comparable à celle de la présente demande, qui ont permis la formation de dizaines d'étudiants aux cycles supérieurs, à des dizaines de publications scientifiques, et à la création du logiciel NOMAD. Audet participera activement à ce projet en co-encadrant des étudiants de troisième cycle impliqués dans ce projet, et les intégrera à ses activités de recherche tel que décrit à la section suivante. Il s'assurera que l'échéancier sera suivi, et animera des réunions mensuelles.

Ce projet s'insère naturellement au cœur des activités de recherche de Audet et Le Digabel. Les étudiants soutenus par ce projet seront intégrés à ceux qu'ils dirigent actuellement, au GERAD. Audet, Le Digabel, Tribes et les étudiants se rencontrent sur une base hebdomadaire afin de veiller à l'avancement efficace des travaux.

Un des aspects les plus importants lors de collaborations impliquant universitaires et industriels est la communication. D'expérience, nous savons qu'il est impératif de maintenir des contacts réguliers entre les deux partis. Un suivi des projets avec RT et HQ se fera tous les quinze jours et les visites chez les industriels seront régulières. Celles chez HQ seront courtes et fréquentes étant donnée la proximité entre HQ et le GERAD qui est situé à Montréal. Les visites chez RT seront plus longues et moins fréquentes en raison de l'éloignement du Saguenay.

Au début du projet, les deux étudiants associés à un partenaire industriel, et possiblement le troisième étudiant aussi, vont devoir passer une semaine chez le partenaire afin de s'approprier les problématiques. Ceci permettra, au cours de toute la recherche subséquente, de toujours contextualiser les différents développements. Les étudiants retourneront sur place, encore une semaine, lorsque les méthodes algo-



rithmiques seront prêtes à être validées et testées sur les applications industrielles qui ont motivé les développements.

## 7 Formation de personnel hautement qualifié

La formation de PHQ est au cœur du programme de recherche proposé. Au cours de la prochaine période de quatre ans, il est prévu que les fonds de la recherche proposée permettront de rémunérer trois étudiants au doctorat. Chaque étudiant poursuivra un parcours universitaire similaire avant de se concentrer sur leur projet individuel. Chaque étudiant :

- suivra cinq cours d'études supérieures en recherche sur les opérations telles que la programmation mathématique, théorie des graphes, programmation en nombres entiers ;
- aura un bureau au centre de recherche GERAD où ils échangeront facilement avec environ 150 étudiants des cycles supérieurs, 50 professeurs de diverses universités, et plusieurs visiteurs de renom, et assisteront à des séminaires hebdomadaires en recherche opérationnelle ;
- recevra l'assistance technique de Tribes sur l'environnement Unix, sur l'utilisation et l'architecture du logiciel de NOMAD et sur l'utilisation d'un réseau important d'ordinateurs ;
- participera aux conférences annuelles internationales des Journées de l'Optimisation à Montréal. Ces réunions attirent de nombreux chercheurs et permettent aux étudiants d'améliorer leur réseau de contacts ;
- visitera nos partenaires RT et HQ et échangera avec eux pour discuter de la progression de leur recherche et de l'intégration de leurs résultats en milieu industriel ;
- suivra une série d'ateliers (sur la rédaction technique, gestion de projet, développement de carrière, etc.) à l'ÉPM afin d'enrichir leurs habiletés techniques et leurs compétences ;
- sera invité à faire une présentation orale en anglais de leur recherche à notre groupe afin d'améliorer leurs compétences en communication et de les préparer aux conférences internationales ;
- présentera ses travaux à une conférence internationale à l'extérieur de la province de Québec afin de se faire connaître dans la communauté d'optimisation et de promouvoir leurs travaux ;
- soumettra ses travaux de recherche à des revues scientifiques arbitrées par les pairs.

Nous planifions suivre le calendrier suivant :

	Année 1		Année 2		Année 3		Année 4	
Tribes		4.1.c NOMAD	4.2.c NOMAD	4.3.c NOMAD	4.4.e NOMAD	4.6.d NOMAD		
	4.1 Ordonnancement		4.2 Variables discrètes		4.7.c NOMAD	4.5.d NOMAD	4.8.d NOMAD	
PhD HQ	cours		4.3 Fonctions hiérarchiques			4.5 PSD-MADS		
PhD RT	cours		4.4 Variables prépondérantes			4.6 Boîtes-grises		
PhD ÉPM	cours		4.7 Substituts			4.8 Évaluations incomplètes		

## 8 Valeur des résultats et pertinence industrielle

La famille d'algorithmes au cœur de ce projet regroupe les méthodes d'optimisation de boîtes-noires et d'optimisation sans dérivées. Les problèmes pour lesquels ces méthodes fonctionnent bien se retrouvent fréquemment dans l'industrie car les outils d'analyse sont complexes et rarement l'information de la sensibilité des fonctions aux variables est disponible. Dans sa version courante, le logiciel NOMAD qui est conçu pour résoudre ce type de problèmes est utilisé sur une base régulière par HQ et RT. Aux sections 2 et 4 nous avons mentionné des problèmes de

- positionnement optimal de senseurs à neige sur un bassin hydrologique,
- amélioration des performances des contrôleurs dans les réseaux électriques,

- calage de modèles énergétiques de bâtiments, et de modèles hydrologiques,
- intégration des énergies renouvelables dans les réseaux autonomes,
- optimisation des réglages des stabilisateurs de puissance,
- optimisation stochastique par recherche directe de politique.

Par ailleurs, quelque soit le domaine d'application, le nombre de cas qui se prêtent à l'utilisation d'un logiciel d'optimisation en association avec une analyse de type boîte-noire ne cesse d'augmenter. Cette croissance s'explique par la disponibilité des ressources de calcul à un coût de plus en plus bas et par l'énorme intérêt pour les ingénieurs de disposer de grandeurs automatiquement optimisées pour une tâche ou une situation donnée. Une façon d'accroître encore la pertinence d'appliquer ces méthodes à plus de situations consiste à améliorer les performances générales des algorithmes afin d'obtenir de meilleures solutions en un temps réduit. C'est un des résultats attendu de ce travail.

Cependant, pour certains problèmes particuliers, les méthodes d'optimisation actuelles s'avèrent inefficaces du fait de certaines de leurs spécificités. C'est le cas des problèmes énoncés par RT et HQ dans la section 4. Pour ces problèmes, les approches d'optimisation courantes ne donnent pas toujours des résultats entièrement satisfaisants aux ingénieurs, soit parce que le problème ne peut pas être formulé exactement ou que la solution n'est pas obtenue assez rapidement ou qu'elle n'est pas assez bonne. Ceux-ci sont alors amenés à résoudre ces problèmes en faisant appel à plus d'interventions manuelles et fastidieuses. Ce projet vise à offrir des alternatives algorithmiques efficaces et adaptées à ces problèmes particuliers qui pourront alors être résolus plus rapidement par les ingénieurs. Ceci représente un autre résultat escompté important de ce travail.

## 9 Avantages pour le Canada

Les trois objectifs principaux de ce projet sont l'avancement des connaissances sur l'optimisation sans dérivées, le développement et la diffusion d'outils d'optimisation pour des problématiques industrielles et la formation d'étudiants sensibilisés à ces problématiques et possédant des compétences recherchées au Canada à la fois dans l'industrie et le domaine universitaire. La réalisation de ces trois objectifs contribuera à maintenir l'ÉPM comme un pôle d'excellence international en mathématiques appliquées et plus spécialement en optimisation sans dérivées.

En travaillant étroitement avec HQ et RT pour le développement d'outils efficaces et automatiques pour résoudre des problèmes industriels concrets, la diffusion de ces nouveaux outils auprès des ingénieurs sera facilitée et ils seront mieux formés à l'utilisation des méthodes d'optimisation sans dérivées.

Par ailleurs, quoique initiée par des problèmes industriels en énergie, la présente recherche conduite sur les algorithmes pour l'optimisation de boîtes-noires est nécessairement générique. Plusieurs applications novatrices sont donc attendues car de nombreux problèmes d'optimisation possèdent des structures similaires à ceux énoncés dans ce document. En particulier, on peut penser au domaine de l'aéronautique avec l'optimisation des composantes d'aéronefs et au domaine de l'efficacité énergétique des bâtiments dans lesquelles le Canada est un leader mondial.

Les méthodes et algorithmes développés durant ce travail seront publiés dans des journaux scientifiques et rendus disponibles à toute la communauté via le logiciel libre **NOMAD** (licence LGPL) qui est déjà utilisé par de nombreuses universités et industries dans le monde, dont HQ et RT, nos partenaires pour la présente demande, mais aussi Bombardier, Boeing, Airbus, General Motors, Exxon, Intel, Siemens, etc. Depuis 2008, plus de 6000 utilisateurs ont téléchargé **NOMAD**, qui est donc une vitrine extrêmement visible de nos travaux. Cette plateforme constitue un extraordinaire vecteur de rayonnement pour notre recherche et l'ÉPM, ainsi que tous nos partenaires dont les noms sont affichés à chaque exécution de **NOMAD**.

## Références

- [1] M.A. Abramson, T.J. Asaki, J.E. Dennis, Jr., R. Magallanez, Jr., and M.J. Sottile. An Efficient Class of Direct Search Surrogate Methods for Solving Expensive Optimization Problems with CPU-time-related Functions. *Structural Multidisciplinary Optimization*, 45(1) :53–64, 2012.
- [2] M.A. Abramson, C. Audet, and J.E. Dennis, Jr. Generalized pattern searches with derivative information. *Mathematical Programming, Series B*, 100(1) :3–25, 2004.
- [3] M.A. Abramson, C. Audet, and J.E. Dennis, Jr. Filter pattern search algorithms for mixed variable constrained optimization problems. *Pacific Journal of Optimization*, 3(3) :477–500, 2007.
- [4] L. Adjengue, C. Audet, and I. Ben Yahia. A variance-based method to rank input variables of the Mesh Adaptive Direct Search algorithm. *Optimization Letters*, 8(5) :1599–1610, 2014.
- [5] S. Alarie, C. Audet, V. Garnier, S. Le Digabel, and L.-A. Leclaire. Snow water equivalent estimation using blackbox optimization. *Pacific Journal of Optimization*, 9(1) :1–21, 2013.
- [6] S. Alarie, C. Audet, B. Jaumard, and G. Savard. Concavity cuts for disjoint bilinear programming. *Mathematical Programming, Series A*, 90(2) :373–398, 2001.
- [7] C. Audet, C.-K. Dang, and D. Orban. Efficient use of parallelism in algorithmic parameter optimization applications. *Optimization Letters*, 7(3) :421–433, 2013.
- [8] C. Audet and J.E. Dennis, Jr. Pattern search algorithms for mixed variable programming. *SIAM Journal on Optimization*, 11(3) :573–594, 2001.
- [9] C. Audet and J.E. Dennis, Jr. Mesh adaptive direct search algorithms for constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 17(1) :188–217, 2006.
- [10] C. Audet and J.E. Dennis, Jr. A Progressive Barrier for Derivative-Free Nonlinear Programming. *SIAM Journal on Optimization*, 20(1) :445–472, 2009.
- [11] C. Audet, J.E. Dennis, Jr., and S. Le Digabel. Parallel space decomposition of the mesh adaptive direct search algorithm. *SIAM Journal on Optimization*, 19(3) :1150–1170, 2008.
- [12] C. Audet, J.E. Dennis, Jr., and S. Le Digabel. Trade-off studies in blackbox optimization. *Optimization Methods and Software*, 27(4–5) :613–624, 2012.
- [13] C. Audet, A. Ianni, S. Le Digabel, and C. Tribes. Reducing the Number of Function Evaluations in Mesh Adaptive Direct Search Algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, 24(2) :621–642, 2014.
- [14] C. Audet, S. Le Digabel, and C. Tribes. Dynamic scaling in the Mesh Adaptive Direct Search algorithm for blackbox optimization. To appear in *Optimization and Engineering*.
- [15] D.P. Bertsekas and J.N. Tsitsiklis. *Parallel and distributed computation : numerical methods*. Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA, 1989.
- [16] A.J. Booker, J.E. Dennis, Jr., P.D. Frank, D.B. Serafini, and V. Torczon. Optimization using surrogate objectives on a helicopter test example. In J. Borggaard, J. Burns, E. Cliff, and S. Schreck, editors, *Optimal Design and Control*, Progress in Systems and Control Theory, pages 49–58, Cambridge, Massachusetts, 1998. Birkhäuser.
- [17] A.J. Booker, J.E. Dennis, Jr., P.D. Frank, D.B. Serafini, V. Torczon, and M.W. Trosset. A Rigorous Framework for Optimization of Expensive Functions by Surrogates. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 17(1) :1–13, 1999.

- [18] A. Castelletti, F. Pianosi, X. Quach, and R. Soncini-Sessa. Assessing water reservoirs management and development in Northern Vietnam. *Hydrology and Earth System Sciences*, 16 :189–199, 2012.
- [19] P. Côté, C. Audet, N. Amaïoua, E. Bignon, Q. Desreumaux, A. Ihaddadene, Y. Mir, J. Rodriguez, and L. Zéphyr. Planning of the maintenance outages for a set of hydroelectric turbogenerators. Technical Report CRM-3350, Centre de Recherches Mathématiques, 2015.
- [20] Q. Desreumaux, P. Côté, and R. Leconte. Role of hydrologic information in stochastic dynamic programming : a case study of the Kemano hydropower system in British Columbia. *Canadian Journal of Civil Engineering*, 41(1) :839–844, 2014.
- [21] M.C. Ferris and O.L. Mangasarian. Parallel variable distribution. *SIAM Journal on Optimization*, 4(4) :815–832, 1994.
- [22] R. Fletcher and S. Leyffer. Nonlinear programming without a penalty function. *Mathematical Programming*, Series A, 91 :239–269, 2002.
- [23] U.M. García-Palomares, E. Costa-Montenegro, R. Asorey-Cacheda, and F.J. González-Castaño. Adapting derivative free optimization methods to engineering models with discrete variables. *Optimization and Engineering*, 13(4) :579–594, 2012.
- [24] Mathieu Lemyre Garneau. Modelling of a solar thermal power plant for benchmarking blackbox optimization solvers. Master’s thesis, École Polytechnique de Montréal, 2015.
- [25] R.B. Gramacy and S. Le Digabel. The mesh adaptive direct search algorithm with treed Gaussian process surrogates. *Pacific Journal of Optimization*, 11(3) :419–447, 2015.
- [26] J.H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems : Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. MIT Press, Cambridge, 1992.
- [27] D.R. Jones, M. Schonlau, and W.J. Welch. Efficient Global Optimization of Expensive Black Box Functions. *Journal of Global Optimization*, 13(4) :455–492, 1998.
- [28] M. Laguna, F. Gortázar, M. Gallego, A. Duarte, and R. Martí. A black-box scatter search for optimization problems with integer variables. *Journal of Global Optimization*, 58(3) :497–516, 2014.
- [29] S. Le Digabel, M.A. Abramson, C. Audet, and J.E. Dennis, Jr. Parallel Versions of the MADS Algorithm for Black-Box Optimization. In *Optimization days*, Montreal, May 2010. GERAD. Slides available at [https://www.gerad.ca/Sebastien.Le.Digabel/talks/2010\\_JOPT\\_25mins.pdf](https://www.gerad.ca/Sebastien.Le.Digabel/talks/2010_JOPT_25mins.pdf).
- [30] R.M. Lewis and V. Torczon. Rank ordering and positive bases in pattern search algorithms. Technical Report 96–71, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, Mail Stop 132C, NASA Langley Research Center, Hampton, Virginia 23681–2199, 1996.
- [31] G. Liuzzi, S. Lucidi, and F. Rinaldi. Derivative-Free Methods for Mixed-Integer Constrained Optimization Problems. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 164(3) :933–965, 2015.
- [32] A.L. Marsden, M. Wang, J.E. Dennis, Jr., and P. Moin. Optimal aeroacoustic shape design using the surrogate management framework. *Optimization and Engineering*, 5(2) :235–262, 2004.
- [33] M. Minville, D. Cartier, C. Guay, L.-A. Leclaire, C. Audet, S. Le Digabel, and J. Merleau. Improving process representation in conceptual hydrological model calibration using climate simulations. *Water Resources Research*, 50 :5044–5073, 2014.

- [34] J. Müller. MISO : mixed-integer surrogate optimization framework, 2015. To appear in *Optimization and Engineering*.
- [35] J. Müller, C.A. Shoemaker, and R. Piché. SO-MI : A surrogate model algorithm for computationally expensive nonlinear mixed-integer black-box global optimization problems. *Computers and Operations Research*, 40(5) :1383–1400, 2013.
- [36] J. Müller, C.A. Shoemaker, and R. Piché. SO-I : a surrogate model algorithm for expensive nonlinear integer programming problems including global optimization applications. *Journal of Global Optimization*, 59(4) :865–889, 2014.
- [37] E. Newby and M.M. Ali. A trust-region-based derivative free algorithm for mixed integer programming. *Computational Optimization and Applications*, 60(1) :199–229, 2015.
- [38] T.D. Plantenga. HOPSPACK 2.0 User Manual. Technical Report SAND2009-6265, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, October 2009.
- [39] E. Polak and M. Wetter. Precision control for generalized pattern search algorithms with adaptive precision function evaluations. *SIAM Journal on Optimization*, 16(3) :650–669, 2006.
- [40] S. Séguin, P. Côté, and C. Audet. Short-term unit commitment and loading problem. Technical Report G-2014-21, Les cahiers du GERAD, 2014. To appear in *IEEE Transactions on Power Systems*.
- [41] B. Talgorn, S. Le Digabel, and M. Kokkolaras. Statistical Surrogate Formulations for Simulation-Based Design Optimization. *Journal of Mechanical Design*, 137(2) :021405–1–021405–18, 2015.
- [42] V. Torczon. On the convergence of pattern search algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, 7(1) :1–25, 1997.
- [43] A.I.F. Vaz and L.N. Vicente. A particle swarm pattern search method for bound constrained global optimization. *Journal of Global Optimization*, 39(2) :197–219, 2007.
- [44] L.N. Vicente. Implicitly and densely discrete black-box optimization problems. *Optimization Letters*, 3(3) :475–482, 2009.