MÉTHODES D'OPTIMISATION STOCHASTIQUES

Xavier Olive

avec l'aide de Nathalie Bartoli, Gaspard Berthelin, Alexandre Gondran, Olivier Poitou et Rémy Priem

OBJECTIFS DU COURS

- appréhender les situations dans lesquelles les méthodes stochastiques (métaheuristiques) sont pertinentes;
- comprendre les grandes familles d'algorithmes d'optimisation stochastique;
- ▶ manipuler (parfois coder) trois algorithmes parmi les plus utilisés et les essayer sur des problèmes « jouets ».

Évaluation Chaque binôme devra étudier une méthode d'optimisation non couverte par le cours et la présenter devant le groupe lors de la dernière séance (le 4 décembre).

DÉROULÉ DES SÉANCES

- ▶ 13 novembre : Recuit simulé – Simulated annealing
- ► 18 novembre : Algorithmes génétiques – *Genetic algorithms*
- ➤ 20 novembre : CMA-ES
- ▶ 4 décembre Présentations

BRAINSTORMING

MÉTAHEURISTIQUES

- ► Ant colony optimisation
- ► Artificial bee colony
- Genetic algorithms (advanced version)
- ▶ Harmony search
- ▶ Particle swarm optimisation
- ► Shuffled frog leaping
- ► Stochastic (constraint based) local search
- ► Tabu search
- Cross-entropy method?

MÉTAHEURISTIQUES

- ► Ant colony optimisation
- Artificial bee colony
- ► Genetic algorithms (advanced version)
- ► Harmony search
- ▶ Particle swarm optimisation
- ► Shuffled frog leaping
- ► Stochastic (constraint based) local search
- ► Tabu search
- Cross-entropy method?

Consigne: Présenter chaque méthode de manière intuitive. Une démonstration sur un problème jouet sera valorisée (codée par vos soins *ou* récupérée sur le net)

INTRODUCTION

OPTIMISATION: DÉFINITION

$$\min_x f(x)$$

Notations:

- ightharpoonup x est un vecteur de variables, ou d'inconnues;
- ightharpoonup f est une fonction objectif, ou fonction d'évaluation.

La *modélisation* d'un problème consiste à identifier des variables et une fonction objectif.

OPTIMISATION CONTRAINTE × NON-CONTRAINTE

$$\min_{x} f(x)$$
 en respectant $c(x)$

Notations:

ightharpoonup c est une fonction *contrainte*, à valeurs dans $\{\top,\bot\}$.

Dans le cas d'une optimisation non contrainte, on a

$$\forall x : c(x)$$

OPTIMISATION CONTINUE × DISCRÈTE

Les variables x peuvent être à valeurs dans :

- ▶ un ensemble *continu*, comme ℝ;
- ▶ un ensemble discret, comme Z;
- \blacktriangleright un ensemble *fini*, comme $\{0,1\}$.

Les variables d'un problème peuvent prendre leurs valeurs sur des ensembles de nature différente.

OPTIMISATION GLOBALE × LOCALE

- Les méthodes de résolution adaptées à certains problèmes garantissent de trouver le minimum global s'il existe.
- Pour d'autres types de problèmes, il est difficile de savoir qu'on a trouvé un minimum global : les algorithmes convergent vers des minima locaux.

OPTIMISATION STOCHASTIQUE × DÉTERMINISTE

- Les méthodes de résolution peuvent toujours converger de la même manière : on parle de méthode déterministe.
- ➤ Si deux exécutions du programme convergent différemment, on parle alors de méthode stochastique. Attention à la graine de votre programme!

MÉTHODES CLASSIQUES

- Programmation non linéaire (gradient, gradient conjugué, BGFS, etc.);
- Programmation linéaire (simplexe; Dantzig, 1947);
- ▶ Programmation linéaire en nombres entiers (MILP);
- ► Programmation par contraintes (CSP)

MÉTHODES CLASSIQUES

- Programmation non linéaire (gradient, gradient conjugué, BGFS, etc.);
- Programmation linéaire (simplexe; Dantzig, 1947);
- ▶ Programmation linéaire en nombres entiers (MILP);
- Programmation par contraintes (CSP)
- Pour MILP et CSP, la taille du problème et/ou des domaines peut être un facteur fortement limitant.

MÉTAHEURISTIQUES

C'est la solution de secours quand les méthodes classiques sont inefficaces : on obtient une solution de bonne qualité en un temps raisonnable.

- ▶ On cherche au hasard x_{k+1} dans le voisinage de x_k , en combinant aspects d'optimisation et d'exploration.
- Métaphores de comportements observés dans la nature.
- ► Métaheuristique = méthode stochastique générique à adapter à chaque problème.

RULE OF THUMB

Ces méthodes sont efficaces quand :

- la fonction d'évaluation est de type boîte noire;
- ▶ le problème se formalise bien en MILP/CSP mais le domaine est trop grand (cf. complexité);
- ▶ la fonction d'évaluation est bruitée (→ CMA-ES);

MÉTAHEURISTIQUES

Deux grandes classes de méthodes :

- les méthodes par trajectoire : on manipule un élément à la fois dans l'espace des solutions pour tenter de construire une trajectoire qui converge vers un optimum.
 - recherche locale, recuit simulé, etc.
- les méthodes par population : on manipule plusieurs éléments à la fois ; les meilleurs éléments guident la génération de la population à l'itération suivante.
 - algorithmes génétiques, essaims particulaires, etc.



RECUIT SIMULÉ – SIMULATED ANNEALING

Méthode par trajectoire inspirée de la métallurgie

- ightharpoonup On choisit au hasard une solution initiale à **énergie** E_0 et une **température initiale** élevée T_0 ;
- ightharpoonup À chaque itération, on choisit un voisin de l'état précédent, qui correspond à une variation d'énergie ΔE :
 - si $\Delta E < 0$, la modification est appliquée;
 - sinon, on l'accepte avec une probabilité $e^{-\frac{\Delta E}{T}}$.
- La température suit une loi décroissante.

À VOUS DE JOUER

L'algorithme étant facile, nous allons le coder tout en nous assurant d'avoir bien compris où se situe la vraie difficulté :

- ▶ le choix des paramètres;
- la définition d'un voisinage.

Nous allons le développer sur une fonction 2D générée aléatoirement, puis le tester sur un plus gros problème.



ALGORITHMES GÉNÉTIQUES

Méthode par population, l'évolution selon Darwin

- ▶ On choisit au hasard une population¹ initiale de taille fixée;
- ➤ **Sélection**: à chaque itération, on choisit des éléments parmi les mieux évalués;
- ► Croisement : à chaque itération, on hybride les éléments sélectionnés pour générer la génération suivante ;
- ► Mutation : à chaque itération, une partie de la population est légèrement modifiée pour la génération suivante ;
- ▶ Élitisme : à chaque itération, on s'assure de ne pas perdre les meilleurs éléments
 - 1. On parle ici de chromosome.

À VOUS DE JOUER

Aujourd'hui encore, nous allons coder cette méthode pour :

- essayer différentes stratégies de sélection, croisement et mutation sur un problème jouet;
- ▶ trouver des tailles de population, taux de croisement et de sélection efficaces pour notre problème.

```
initialize population
foreach iteration :
    evaluate population
    append the k best elements into your new population
    for a1, a2 in selection(population) :
        b1, b2 = cross(a1, a2)
        "sometimes" mutate b1 and/or b2
        append b1, b2 to your new population
```

OPÉRATEURS DE SÉLECTION

► Tournoi :

Tirer deux éléments au hasard, garder le meilleur des deux.

► Roulette russe :

Tirer un élément au hasard (loi uniforme), avec une probabilité proportionnelle à l'évaluation de chaque élément.

OPÉRATEURS DE CROISEMENT

- Croisement en un point :
 On découpe les chromosomes en un point tiré au hasard.
- Croisement en deux points : On découpe les chromosomes en deux points tirés au hasard
- Croisement uniforme :On tire au sort pour chaque gène si on échange ou pas.

