

Optimisation stochastique - 1

Le recuit simulé



Optimisation stochastique

GREETINGS,
WALLY FOLLOWERS!
WOW, THE BEACH WAS
GREAT TODAY! I SAW
THIS GIRL STICK AN
ICE-CREAM IN HER
BROTHERS FACE, AND
THERE WAS A SAND-
CASTLE WITH A REAL
KNIGHT IN ARMOUR
INSIDE! FANTASTIC!

Wally

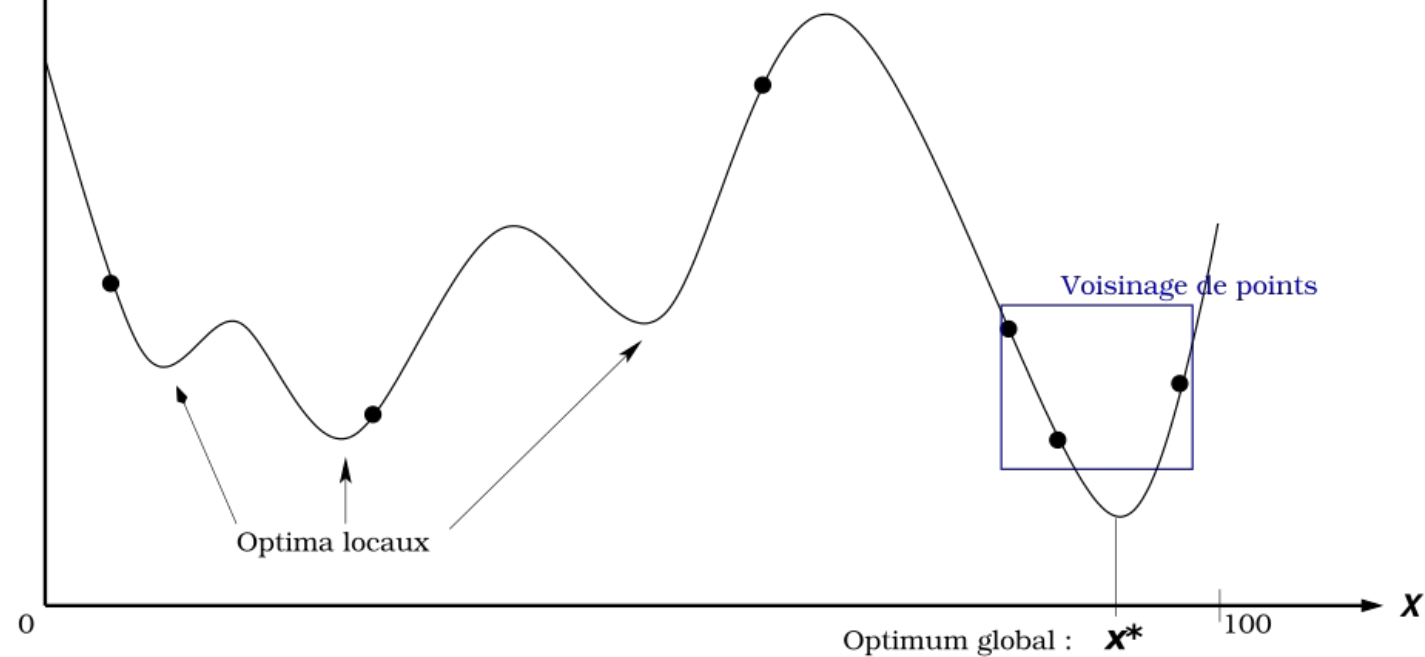


TO:
WALLY FOLLOWERS,
HERE, THERE,
EVERYWHERE.

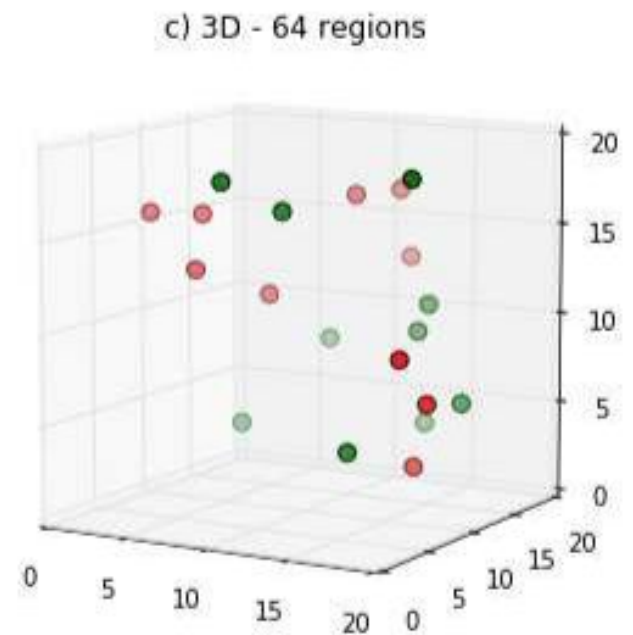
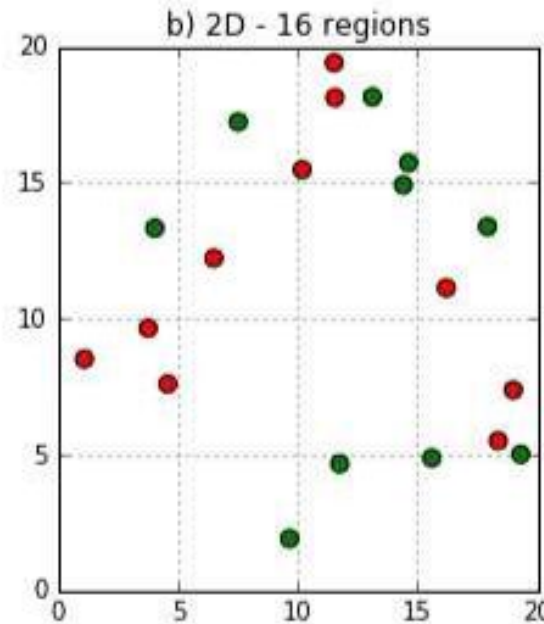
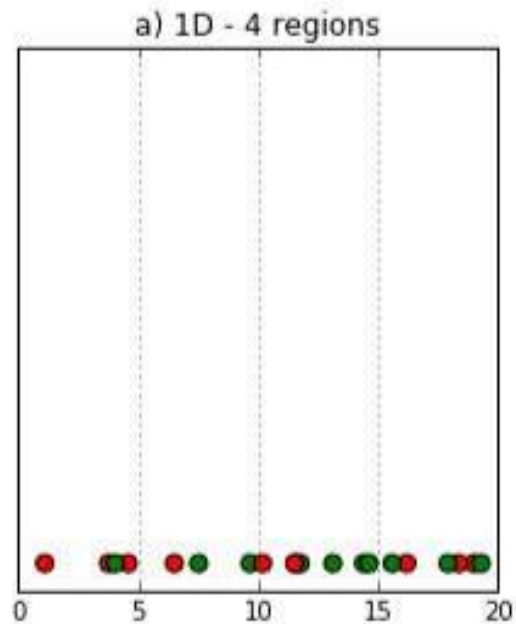


$f(X)$

Optimisation

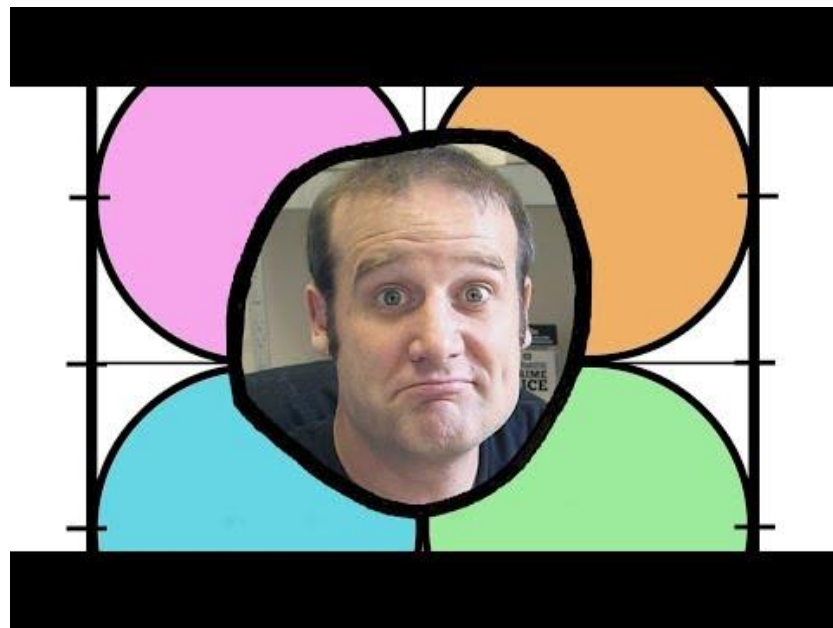
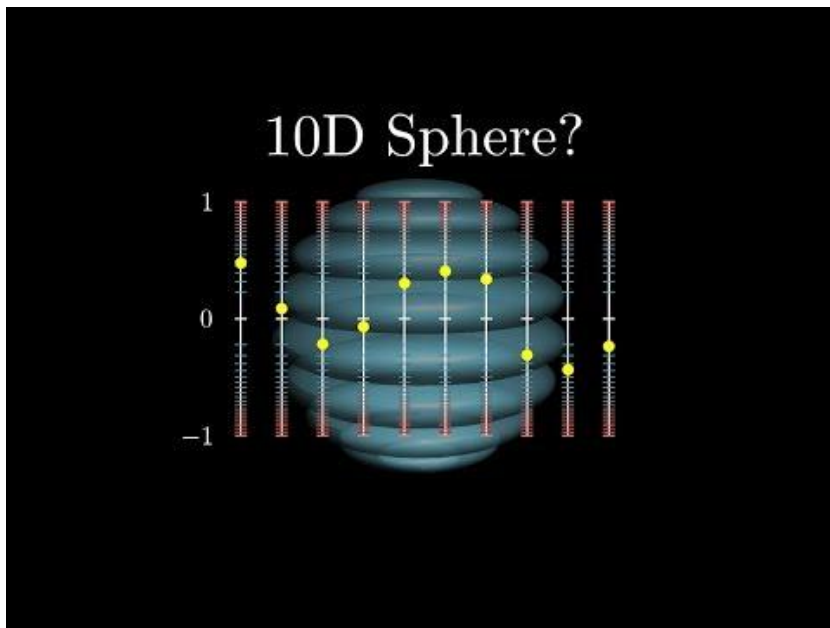


La malédiction de la dimension



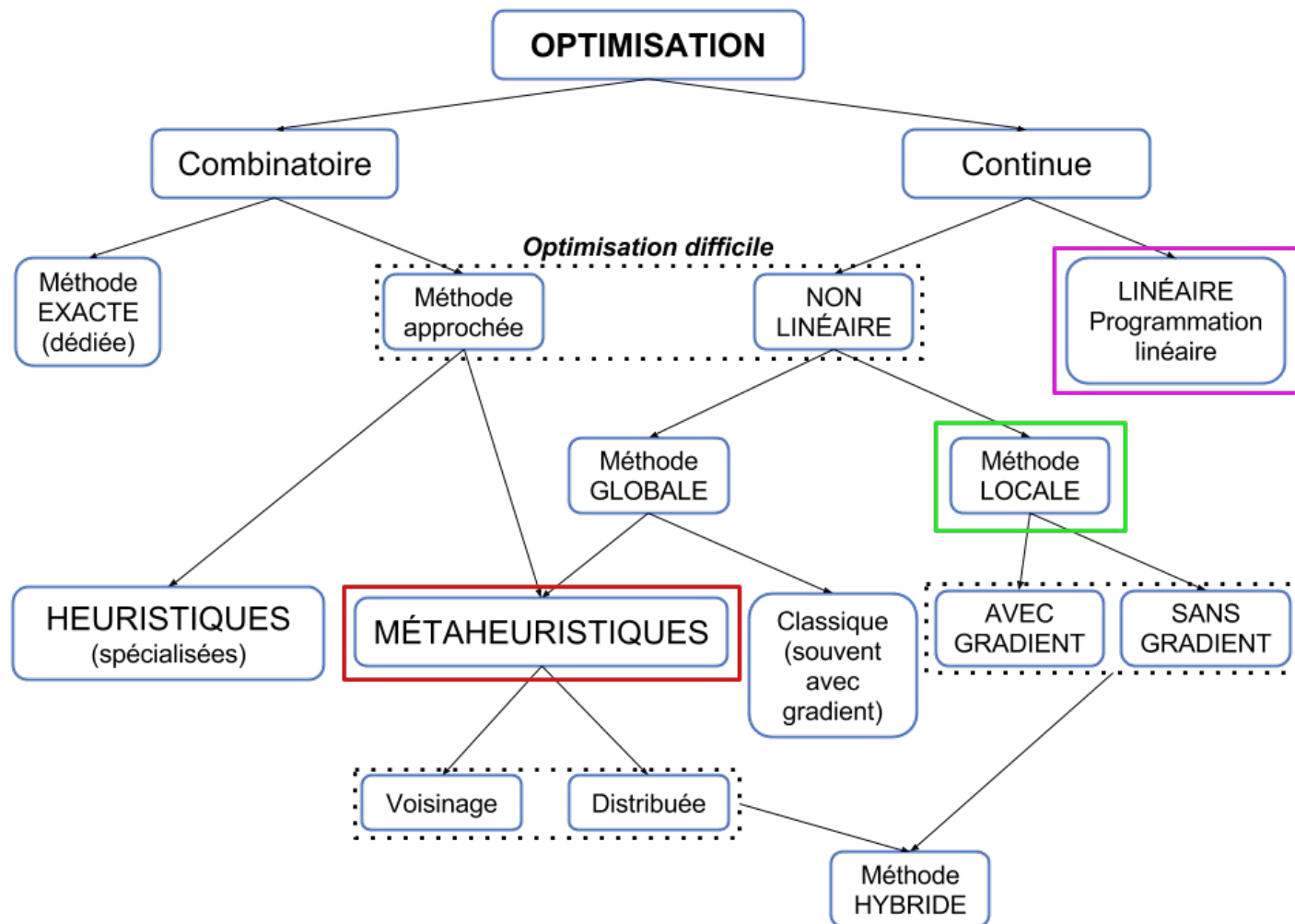
<http://cleverowl.uk/2016/02/06/curse-of-dimensionality-explained/>

Malédiction de la dimension



Cours science des données de Stéphane Mallat

L'apprentissage face à la malédiction de la grande dimension

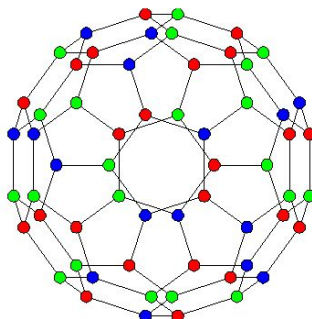


Typologie de problèmes

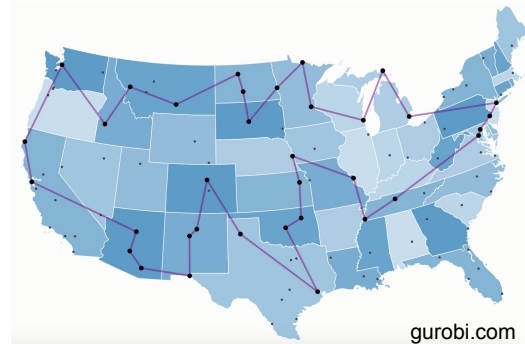
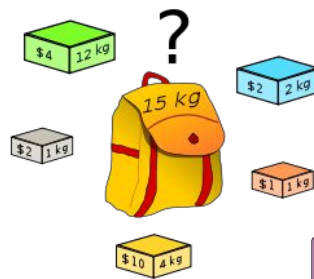
- **Optimisation difficile (problèmes NP-difficiles) ;**
- **Problème de minimisation / maximisation ;**
- **Problèmes mono-objectif**, multi-objectifs, “many”-objectifs ;
- **Problèmes à variables discrètes / continues** / mixtes ;
- Problèmes sous contraintes ;
- Problèmes à grande dimension ;
- Problèmes dynamiques.

Typologie de problèmes à variables discrètes

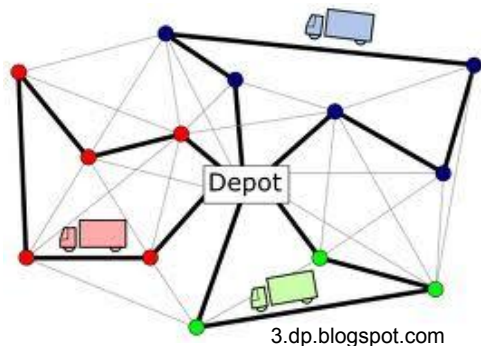
- Voyageur de commerce
- Tournée de véhicules
- Coloration de graphe
- Sac à dos
- Planification...



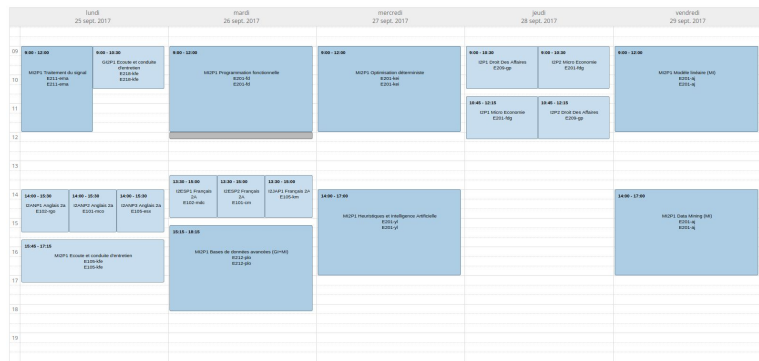
mathworks.com



gurobi.com

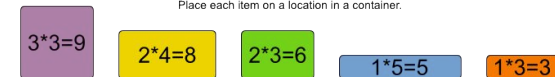


3.dp.blogspot.com

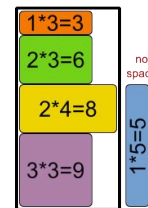


Bin packing

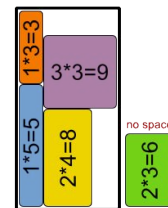
Place each item on a location in a container.



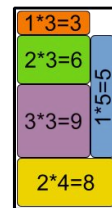
Largest size first



Largest side first

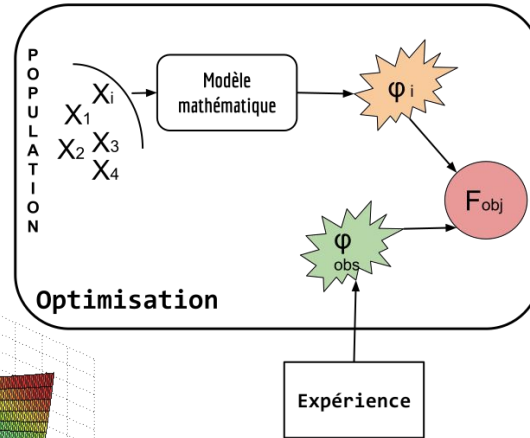
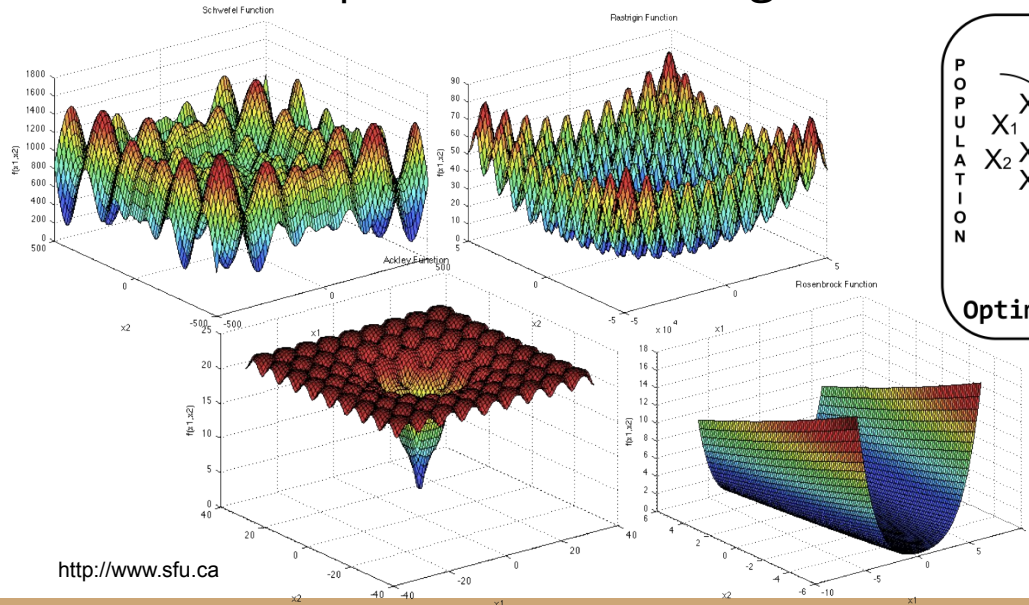


Drools Planner



Typologie de problèmes à variables continues

- Fonction analytique (benchmarks) ;
- Expression non analytique (code de calcul, problème inverse) ;
- Autres problèmes variés (géométrie, chimie, physique)...

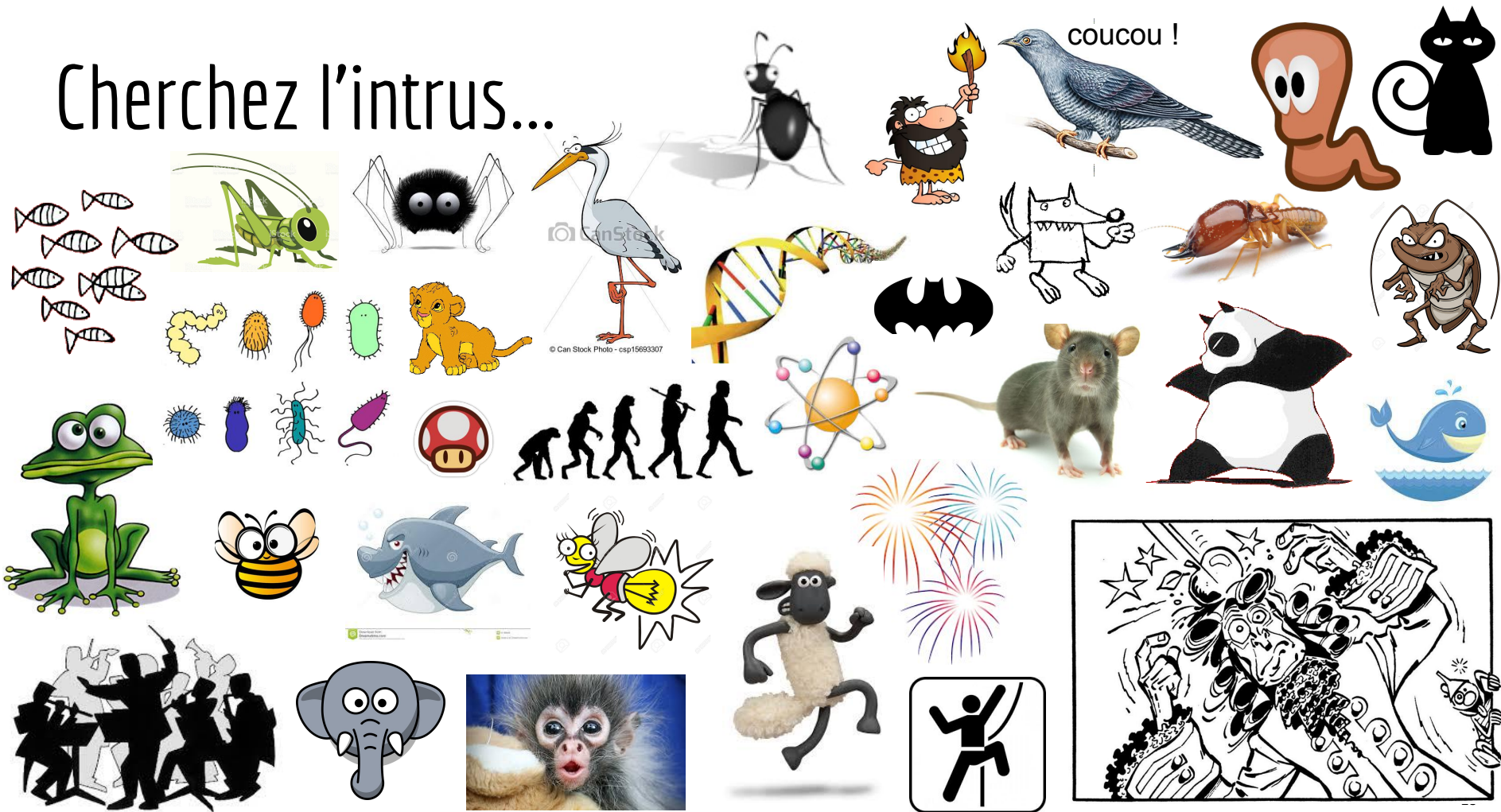


Métaheuristiques

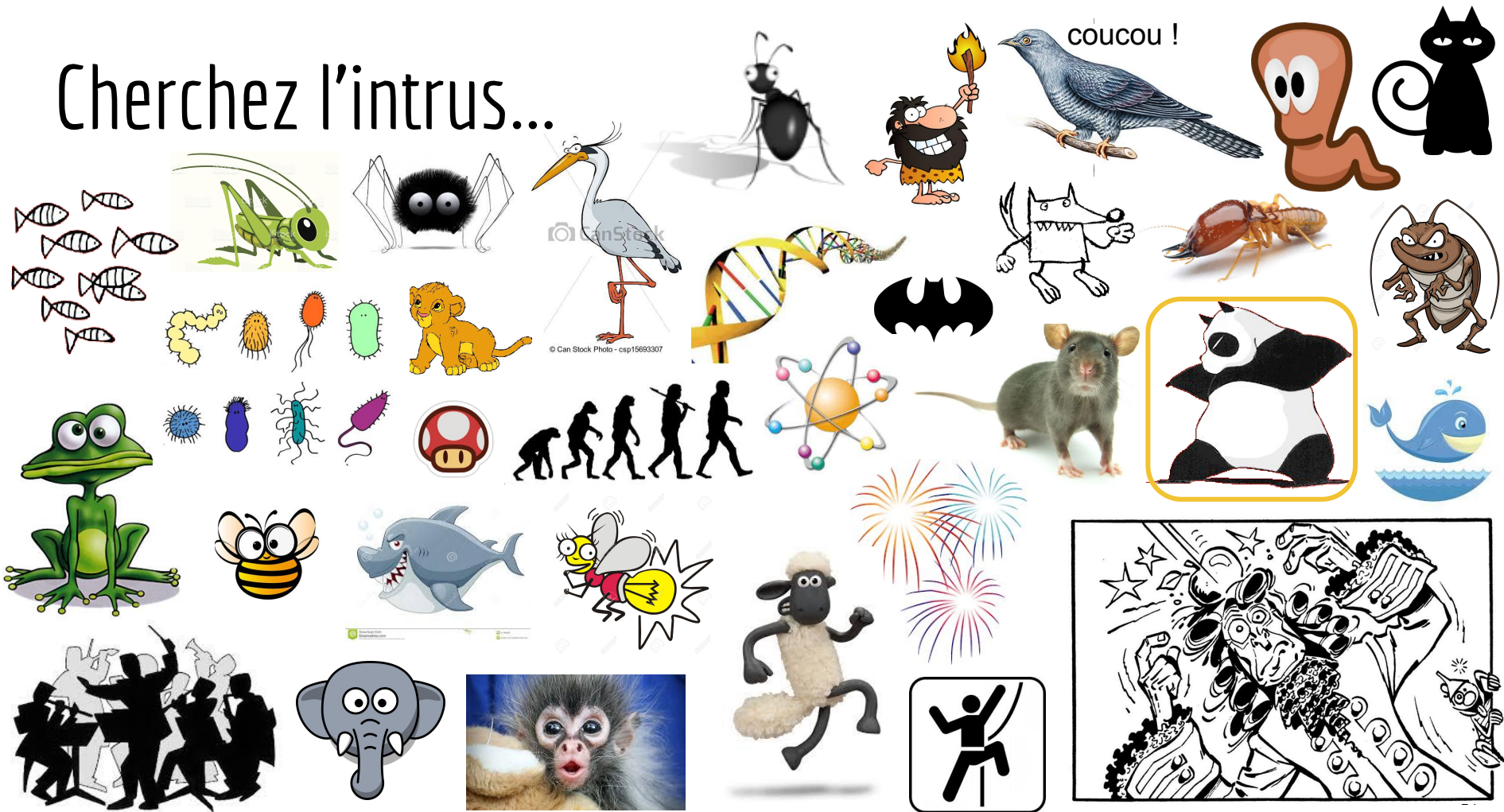
Ce sont des méthodes :

- globales ;
- stochastiques ;
- génériques même si dépendantes du contexte continu/discret ;
- **qui ne garantissent pas l'optimalité ;**
- basées sur des analogies avec la biologie, la physique, l'éthologie...

Cherchez l'intrus...



Cherchez l'intrus...



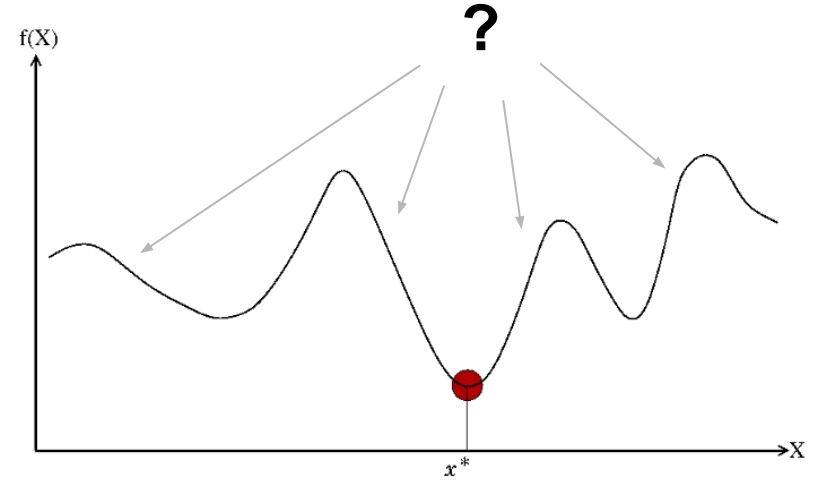
Éléments constitutifs et stratégies

Elles sont généralement composées de :

- Un ou plusieurs (population(s)) candidats faisables initiaux ;
- Une stratégie de génération de nouveau candidat basée sur l'aléatoire ;
- Un critère d'acceptation d'un nouveau candidat ;
- Des coefficients de contrôle de comportement de l'algorithme ;
- Le partage d'information, l'utilisation d'une mémoire de candidats explorés ;
- Un critère de convergence.

Initialisation

- Aléatoirement
- Manière intelligente
 - sampling
 - hypercubes latins
 - séquence de Halton
 - ...



Dilemme

Exploration

VS

Exploitation



Voisinage

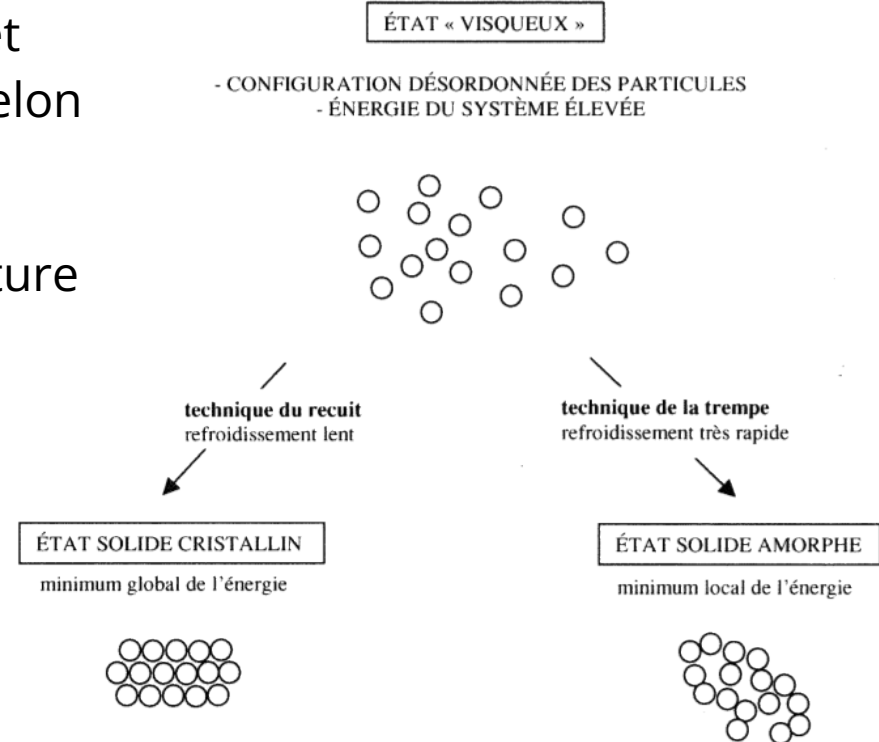
- Définition :
 - Cas des variables discrètes : décalage de composantes de la donnée,
 - Cas des variables continues : hyper(sphère | cube) centré autour de la donnée.
- Stratégies :
 - Voisinage géographique,
 - Voisinage social,
 - Voisinage aléatoire.
- Méthodes du gradient, Newton-Raphson, dichotomie, polytope de Nelder-Mead...
- Hybridation avec des méthodes de recherche locale.

Le recuit simulé

Pour l'histoire... un peu de physique !

Le recuit est une technique qui permet d'améliorer la qualité d'un matériau selon la méthode suivante :

- On le porte à très haute température pour le liquéfier
- On abaisse progressivement la température pour stabiliser la structure du matériau



Le recuit simulé (simulated annealing)

- Métaheuristique variante de l'algorithme de Metropolis-Hastings (voir exemple [ici](#)) ;
- Proposée en 83 par Kirkpatrick, Gelatt et Vecchi et en 85 par Cerny ;
- Première métaheuristique proposée ;
- Adaptée aux problèmes discrets (originellement au placement de composants électroniques sur un circuit imprimé).

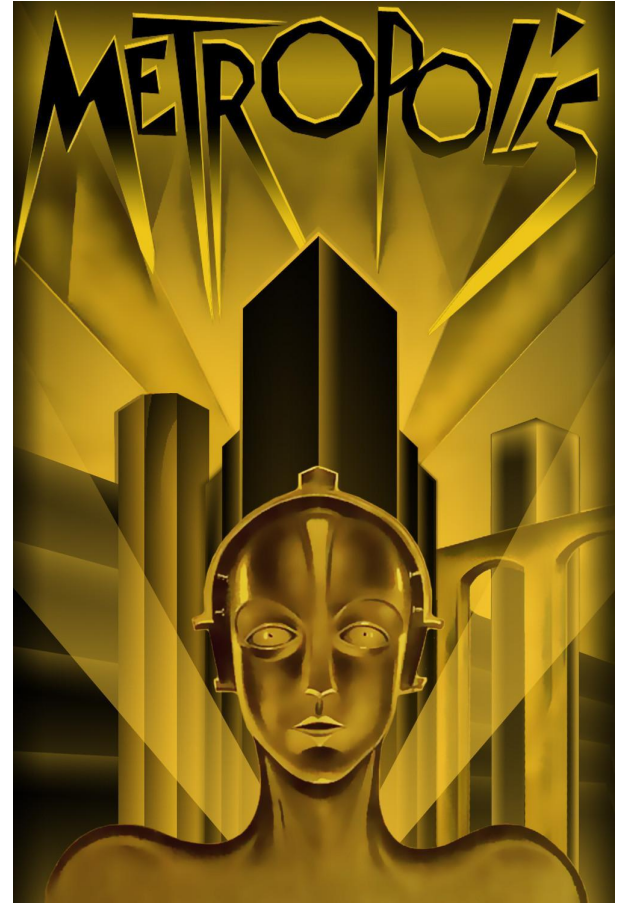
Le recuit simulé - l'analogie

- La fonction f à minimiser est l'énergie du système ;
- Un candidat faisable X représente un état du matériau ;
- L'équilibre thermodynamique est atteint lors d'un palier de température ;
- À température T , une perturbation du candidat courant est acceptée avec probabilité basée sur le critère de Metropolis.

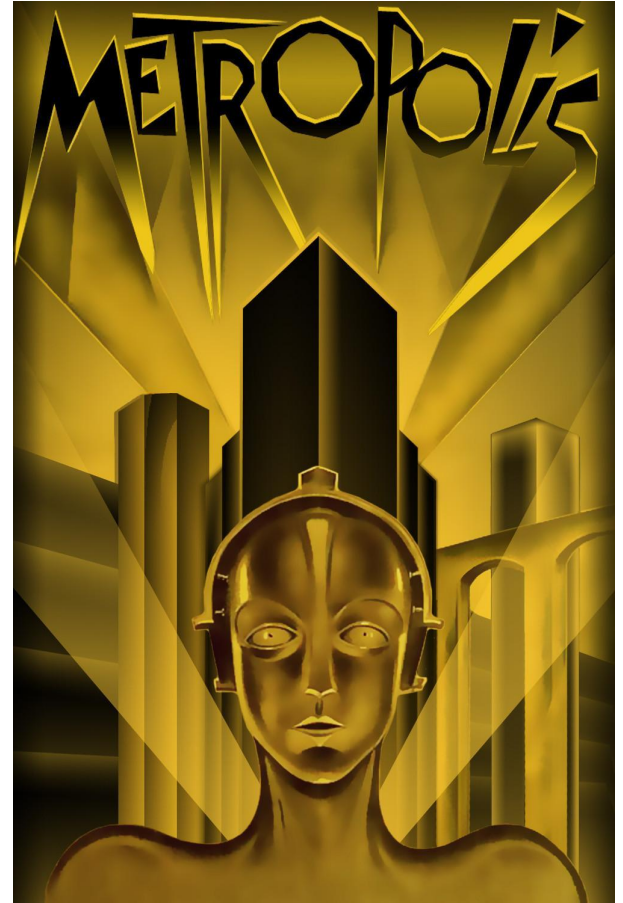
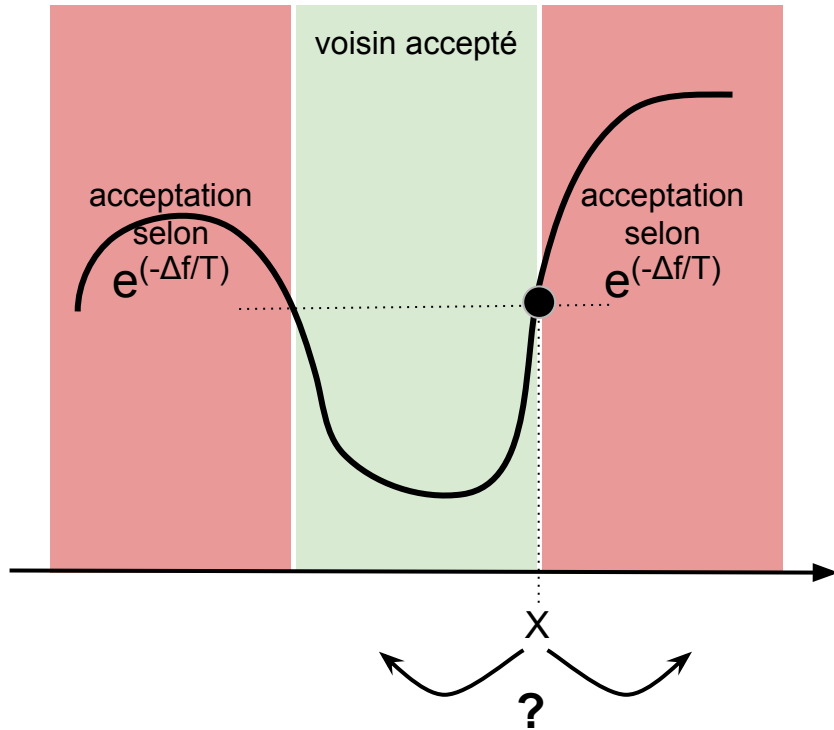
Critère de

```
critereMetropolis( $\Delta f, T$ ) :  
  //minimisation  
  Si  $\Delta f \leq 0$  alors  
    retourner VRAI  
  sinon  
    retourner  $\text{aléa}(0,1) < e^{(-\Delta f/T)}$ 
```

- $\Delta f \leq 0$, le voisin est accepté ;
- Une petite variation vers un voisin moins bon a plus de chance d'être acceptée qu'une importante ;
- Cette fonction est **stochastique**.



Critère de



Algorithme du recuit simulé (minimisation)

```
X, un candidat,  $f_x = f(X)$  énergie du système, T Température initiale
 $X_{\min} \leftarrow X$ 
 $f_{\min} \leftarrow f(X)$ 
Tant que T >  $T_{\min}$  et non critèreConvergence()
    Tant que non équilibreThermodynamique() // palier de température
         $X_{\text{vois}} \leftarrow \text{perturbation}(X)$ 
         $\Delta f = f(X_{\text{vois}}) - f_x$ 
        Si critèreMetropolis( $\Delta f, T$ ) alors
             $X \leftarrow X_{\text{vois}}$ 
             $f_x \leftarrow f(X_{\text{vois}})$ 
            Si  $\Delta f < 0$  et  $f(X_{\text{vois}}) < f_{\min}$  alors
                 $f_{\min} \leftarrow f(X_{\text{vois}})$ 
                 $X_{\min} \leftarrow X_{\text{vois}}$ 
            Fin si
        Fin si
    Fin si
    Fin tant que
    T  $\leftarrow$  refroidissement(T)
Fin tant que
```

Recuit simulé : critères de convergence

Permet de terminer l'algorithme selon plusieurs conditions :

- La température atteint une valeur minimale ;
- Le nombre d'évaluations atteint une limite ;
- Le temps d'exécution atteint une limite ;
- Il n'y a pas eu d'amélioration depuis un certain nombre d'itérations.

Recuit simulé : équilibre thermodynamique

Permet de “fouiller” autour d’un bon candidat en cours :

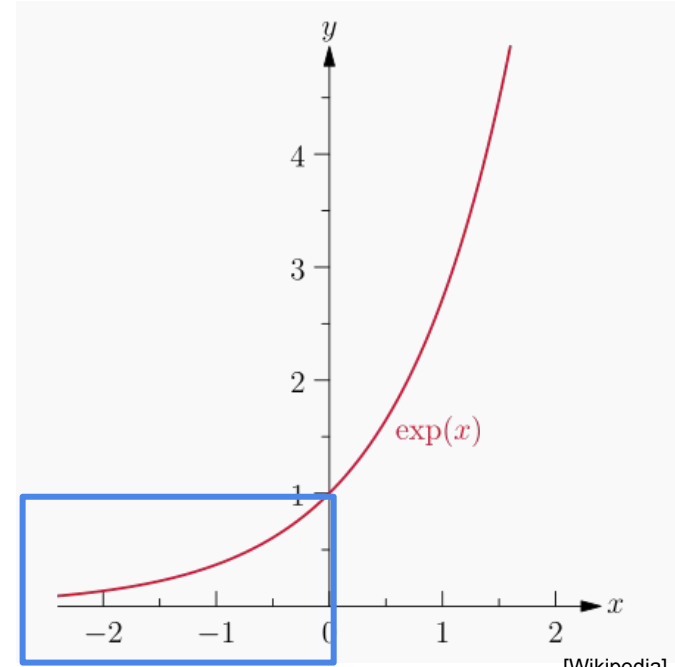
- Le nombre d’évaluations atteint une limite ;
- Il n’y a pas eu d’amélioration depuis un certain nombre d’itérations.

Recuit simulé : refroidissement

- À haute température, la valeur du critère de Metropolis est proche de 1, la plupart des candidats dégradants sont acceptés :



- À faible température, la valeur du critère de Metropolis tend vers 0, la plupart des candidats dégradants sont rejetés :



Espace de variation du
critère de Metropolis

[Wikipedia]

Recuit simulé : refroidissement

Permet de diminuer la probabilité d'acceptation d'un candidat non améliorant selon le critère de Metropolis :

- Une forte décroissance empêche une exploration convenable, l'algorithme converge rapidement vers un minimum local ;
- Une faible décroissance permet une forte exploration lors des premières itérations de l'algorithme et rend peu probable la sélection d'un candidat dégradant ;
- À $T=\infty$, tout candidat dégradant est accepté ; à $T=0$, aucun candidat dégradant n'est accepté.

Recuit simulé : refroidissement

Différents schémas de réduction de la température :

- Géométrique (si l'on ne considère pas les paliers...) : $T_{k+1} = \alpha.T_k$, le plus couramment utilisé ;
- Logarithmique : $T_k = \mu / \log(1+k)$, où k : nb de paliers et μ une constante.
Très coûteux en temps de calcul, peu utilisée ;
- Exponentiel : $T_k = T_0.exp(-k/\tau)$, où k : nb de paliers et τ une constante ;
- Ésotérique : on peut remonter la température selon un critère particulier.

Recuit simulé : perturbation

- Génère un nouveau candidat au **voisinage** de celui en cours ;
- Influence de la distance entre ces deux candidats (hypervolume du voisinage) ;
- Spécifique au problème à résoudre (discret/continu).

No free lunch theorem [Wolpert and Macready]

Des restaurants (méthodes de résolution) possèdent un menu proposant des plats (problèmes) à différents prix (performance de résolution). Chaque restaurant propose les même plats mais à des prix différents.

Il n'existe pas de menu parfait pour un omnivore.

Un exemple d'application...



Optimisation sans cervelle...



Richard Buckland : simulated annealing

part 1:



part 2 :





That's all folks !