Métaheuristiques pour l'Optimisation Difficile

Master 1 - Systèmes Artificiels Complexes

Sébastien Verel
verel@i3s.unice.fr
www.i3s.unice.fr/∼verel

Équipe TEA - Université de Nice-Sophia Antipolis

28 février 2006

Plan

Modélisation de Problèmes

5	3			7				
6			1	9	5			
	9	8					6	
8				6				3
4			8		3			1
7				2				6
	6					2	8	
			4	1	9			5
				8			7	9

Résolution d'un problème :

Problème $\Rightarrow$ modélisation $\Rightarrow$ solution(s)

Modélisation :

- simplification de la réalité (nombre de paramètres, “bruit”, défauts...)

Conception d'un (bon) modèle :

- Connaissance experte du domaine
- Connaissance des méthodes de résolution (informatique)

Problèmes d'optimisation combinatoire

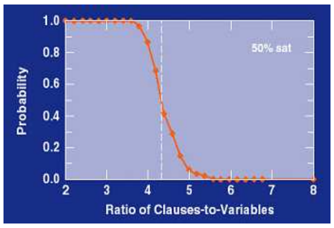
- MAX - SAT
- Coloration de graphe
- Voyageur de commerce (TSP)
- Quadratic Assignment Problem (QAP)
- Schudeling
- paysages NK
- Sudoku (coloration de graphe)

SAT

Premier problème NP-difficile

$$\bigwedge_{j=1}^{m} C_j$$

où $C_j = \bigvee_{i=1}^{k_j} l_{i,j}$ et
$l_i = x_n$ ou $\bar{x_n}$



- N variables booléennes : $\{x_1, x_2, ..., x_N\}$,
- m clauses : $\{C_1, C_2, ..., C_m\}$.
- k_j littérals par clause C_j : $\{l_{1,j}, l_{2,j}, ..., l_{k_j,j}\}$,

Transition de phase suivant $\alpha = \frac{m}{N}$

Applications : vérification de circuits, logique, informatique...

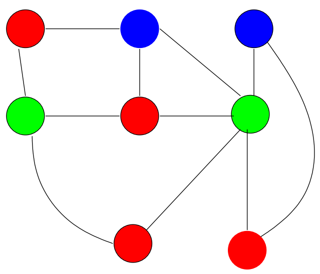
SAT / MAX - SAT

Maximiser le nombre de clauses C_j vérifiées

$$f(s) = \#\{C_j \ true\}$$

s est une solution de SAT ssi $f(s) = m$

Coloration de graphe



Graphe $G = (S, A)$, S ens. des sommets et A ens. des arcs

Coloration $\alpha : S \rightarrow C$ telle que si $(s, t) \in A$ alors $\alpha(s) \neq \alpha(t)$

Applications : affection de fréquence en téléphonie mobile, emploi du temps, coloration des cartes...

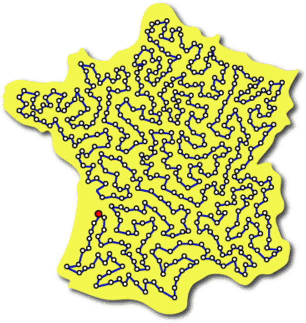
Sodoku : coloration de graphe ?

5	3			7				
6			1	9	5			
	9	8					6	
8				6				3
4			8		3			1
7				2				6
	6					2	8	
			4	1	9			5
				8			7	9

Graphe $G = (S, A)$,
$S = \{x_{i,j} \mid (i,j) \in \{1, \dots, n\}^2\}$
$A = \{(x_{i,j}, x_{i,j'}) \dots$
$(x_{i,j}, x_{i',j}) \dots$
$(x_{i,j}, x_{i',j'})\ \forall i,j \in \{k, k+\sqrt{n}\}\ i \neq j\}$

Ensemble des couleurs
$\{1_1, \dots, n_1, 1_2, \dots, n_2, \dots\}$

Voyageur de commerce (TSP)



Trouver le parcours le plus court passant par toutes les villes.

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} d_{x_i x_j}$$

avec :

- n : nombre de villes
- d_{rs} : distance entre les villes r et s.
- x une permutation :
  x_i est la i^{eme} ville traversée.

Applications : transports...

Quadratic Assignment Problem (QAP)

- n objets, n emplacements
- f_{ij} : flot entre objects i et j,
- d_{rs} : distance entre emplacement r et s

Minimiser le flot total :

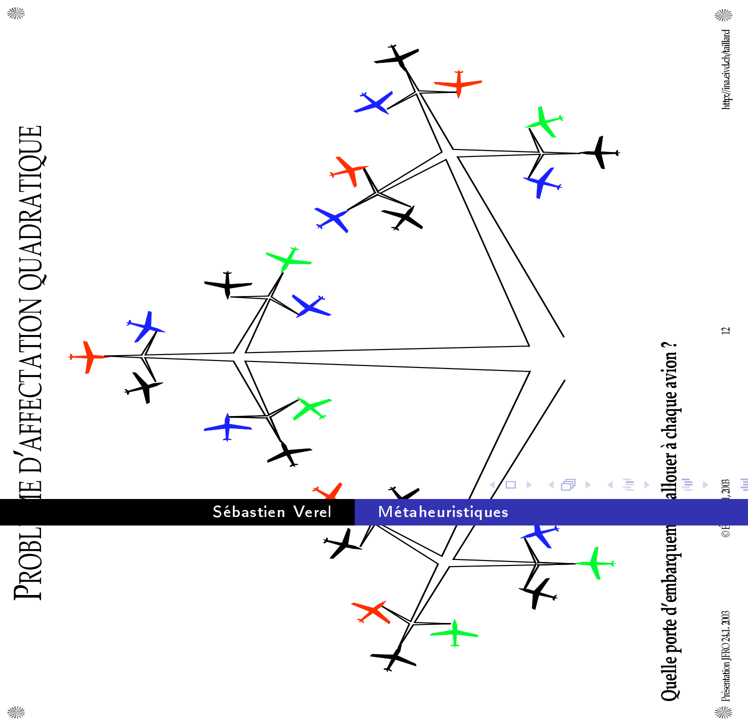
$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} f_{ij} d_{p_i p_j}$$

avec p une permutation :
p_i emplacement l'objet i.

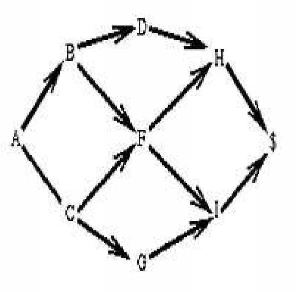
Applications : répartition de batiments ou de servives, affectation des portes d'aéroport, placement de modules logiques, claviers...

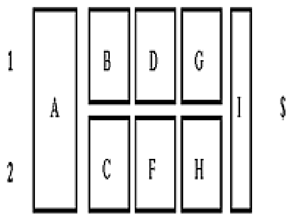
Quadratic Assignment Problem (QAP)

Exemple d'aprés Taillard.



Shop Scheduling problem





Ensemble d'opérations
$O = \{o_1, o_2, o_3, \ldots, o_p\}$
temps d'execution $p(o_i)$

Réalisés sur m machines
$M = \{M_1, \ldots, M_m\}$

Correspondant à n jobs (produits)
$J = \{J_1, \ldots, J_n\}$

Applications : emploi du temps, méthodes...

Paysages NK : Definition

$$f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f_i(x_i; x_{i_1}, \ldots, x_{i_K})$$

- N the size of genotypes
- $K \leq N - 1$ number of epistatic link
- x a genotype of $\{0,1\}^N$
- x_k the k^{th} locus of x
- $\{i_1, \ldots, i_K\} \subset \{1, \ldots, i-1, i+1, \ldots, N\}$
- $f_i : \{0,1\}^{K+1} \rightarrow [0,1]$

Application : modélisation de réseau d'entreprises, de protéine,...

exemple $N = 4$ $K = 2$

$$x = 0110$$

$x_1 x_2 x_4$	f_1
000	0.9
001	0.6
010	0.1
011	0.2
...	...

$x_1 x_2 x_3$	f_2
000	0.4
001	0.8
010	0.3
011	0.2
...	...

$x_2 x_3 x_4$	f_3
000	0.2
...	...
101	0.9
110	0.1
111	0.5

$x_1 x_2 x_4$	f_4
000	0.1
001	0.2
010	0.8
011	0.0
...	...

$$\begin{aligned} f(x) &= \tfrac{1}{4}(f_1(010) + f_2(011) + f_3(110) + f_4(010)) \\ &= \tfrac{1}{4}(0.1 + 0.2 + 0.1 + 0.8) \\ &= 0.3 \end{aligned}$$

Retour à MAX-SAT

Comment résoudre ce genre de problèmes ?

$$(x_1 \vee x_2) \wedge (\bar{x_2} \vee x_3) \wedge (x_1 \vee \bar{x_3})$$

$$(x_4 \vee x_2 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee x_4 \vee x_5) \wedge (\bar{x_2} \vee x_1 \vee x_5) \wedge (\bar{x_2} \vee x_5 \vee x_4) \wedge (x_1 \vee \bar{x_3} \vee \bar{x_4})$$

Retour à MAX-SAT

mathématiquement ou ...

- Exhaustivement $n = 20$, $n = 100$, ...
- Aléatoirement
- Construction de solution (pas dans ce cours)
- Méthodes exactes (pas dans ce cours)

ou ...

Heuristiques

Heuristique : algorithme de résolution basé sur l"'expérience" ne fournissant pas nécessairement une solution optimale

On désire toutefois :

- Le plus souvent possible une solution proche de l'optimalité
- Le moins souvent possible un mauvaise solution (différent !)
- Une complexité "raisonnable"
- De la simplicité d'implémentation (code light en version de base...)

Metaheuristiques

Peu probable qu'un algorithme puisque résoudre tout problème

Métaheuristique : ensemble d'heuristiques définit à l'aide

- de paramètres décrivant l'ensemble des métaheuristiques
- d'une méthode de conception de l'ensemble d'heuristiques

Metaheuristisques de recherche locale

Algorithmes à population de solutions

- Algorithmes Evolutionnaires (EA) : Holland 1975 et même avant
- Algorithmes d'essaims particulaires (PSO) : R. Ebenhart et J. Kennedy 1995.
- Algorithmes de fourmis (ACO) : Bonabeau 1999

Metaheuristisques de recherche locale

Algorithmes à solution unique

- (Recherches aléatoire),
- Algorithmes de descente : Hill-Climber (HC), première-descente
- Recuit Simulé (SA) : Kirkpatrick *et al* 1983,
- Recherche Tabou (TS) : Glover 1986 - 89 -90,

Recherche Locale (LS)

3 indrégients indispensables :

- $\mathcal{S}$ ensemble des solutions (espace de recherche),
- $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ fonction objectif à maximiser (ou coût à minimiser)
- $\mathcal{V}(s)$ ensemble des voisins de s

Algorithme d'une Recherche Locale

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$
répéter
  choisir $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$
  $s \leftarrow s^{'}$
jusqu'à critère d'arrêt non verifié

Recherche Locale (LS)

Points critiques dans la conception d'une recherche locale :

- représentation des solutions : redondance, introduction connaissance du problème, complexité...
- voisinage : taille, continuité :
  $s^{'} \in \mathcal{V}(s), \delta(f(s^{'}), f(s)) \leq \epsilon$
  $\mathcal{V}(s) = \{s^{'} \mid s^{'} = op(s)\}$
- fonction f guide vers l'optimalité
- "choisir" un voisin

Autres : générateur aléatoire (!), choix d'implémentation (évaluation incrémentale), critère d'arrêt...

Recherche Aléatoire

Heuristique d'exploration maximale

Recherche aléatoire

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$
répéter
  choisir $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$ aléatoirement
  $s \leftarrow s^{'}$
jusqu'à Nbr d'éval. $\leq$ maxNbEval

- Algorithme inutilisable en pratique
- Algorithme de comparaison
- Opérateur local de base de nombreuses métaheuristiques

Hill-Climbing (HC) ou steepest-descent

Heuristique d'exploitation maximale.

Hill Climbing

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$
répéter
  Choisir $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$ telle que $f(s^{'})$ est maximale
  $s \leftarrow s^{'}$
jusqu'à s optimum local

- Algorithme de comparaison
- Opérateur local de base de métaheuristique

Une variante : first-descent

Première descente

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$
répéter
  Choisir $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$ aléatoirement
  si $f(s) \leq f(s^{'})$ **alors**
    $s \leftarrow s^{'}$
  fin si
jusqu'à s optimum local OU nbr d'éval. $\leq$ maxNbEval

Recuit Simulé (Simulated Annealing)

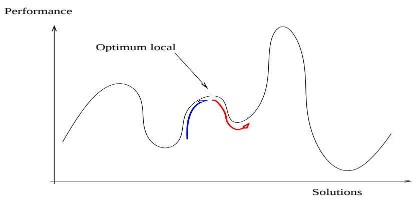
Utilisé depuis les années 80,

- Metropolis (1953) simulation du refroidissement de matériaux (Thermodynamique)
- Kirkpatrick *et al* (IBM 1983) utilisation pour la résolution de problème d'optimisation.

But : échapper aux optima locaux
Principe : probabilité non nulle de sélection d'une solution voisine dégradée

Recuit Simulé : analogie

Système physique	Problème d'optimisation
Energie	fonction objectif
Etats du système	solution
États de basse énergie	bonne solution
Température	paramètre de contrôle



Recuit Simulé

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$ et temperature initiale T
répéter
  choisir aléatoirement $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$, $\Delta = f(s^{'}) - f(s)$
  si $\Delta > 0$ **alors**
    $s \leftarrow s^{'}$
  sinon
    u nombre aléatoire de $[0,1]$
    si $u < e^{\frac{\Delta}{T}}$ **alors**
      $s \leftarrow s^{'}$
    fin si
  fin si
  update temperature T
jusqu'à Critère d'arrêt vérifié

Recuit Simulé : remarques

Si $\Delta < 0$ alors la probabilité $\exp(\frac{\Delta}{T})$ est proche de 0 lorsque :

- la différence $|\Delta = f(s^{'}) - f(s)|$ est grande
- la temperature est petite

Conséquences :

- lorsque température grande (début de la recherche) :
  $\longrightarrow$ recherche aléatoire
- lorsque température petite (fin de la recherche) :
  $\longrightarrow$ Hill-Climbing

Recuit Simulé : température initiale

Evaluer $\Delta_0 = f(s_0^{'}) - f(s_0)$:

- Choisir n (grand si possible) solutions aléatoires initiales s_0 et une solution voisine $s_0^{'}$
- calculer la moyenne de Δ_0 sur l'échantillon

Température initiale T_0 telle que $\tau_0 = e^{\frac{\Delta_0}{T_0}}$ désiré :
qualité "médiocre" ($\tau_0 = 0.50$) : démarrage à haute température
qualité "bonne" ($\tau_0 = 0.20$) : démarrage à basse température

Recuit Simulé : décroissance de “température”

décroissance suivant une loi géométrique $T_{k+1} = \alpha T_k$
souvent $0.8 \leq \alpha < 1.0$

Changement par pallier de température suivant l'une des deux conditions :

- $12.N$ perturbations acceptées (mouvements de solution)
- $100.N$ perturbations tentées (mouvement ou non mouvement)

où N est un paramètre qui décrit la taille du problème (nombre de villes, de variables...)

Recuit Simulé : Critère d'arrêt

Arrêt aprés 3 palliers successifs sans aucune acceptation.

Recuit Simulé : Remarques

- Toutes ces indications ne sont pas universelles :
  L'analyse du problème et l'expérience de concepteur permettent de les adapter
- Vérifier votre générateur aléatoire
- La qualité du résultat doit dépendre "peu" de l'exécution de l'algorithme

Premières Applications : dans le placement de circuits électroniques

Recuit Simulé : Bibliographie

E. Aarts, J. Korst : « Simulated Annealing and Boltzmann machine » John Wiley, New-York 1989

P. Siarry : « La méthode du recuit simulé : théorie et application » ESPCI - IDSET , 10 rue Vauquelin, Paris 1989

Recherche Tabou (Tabu Search)

Introduite par Glover en 1986 :
«Future paths for Integer Programming and Links to Artificial Intelligence», Computers and Operations Research, 5 :533-549, 1986.

But : échapper aux optima locaux
Principe : Introduction d'une notion de mémoire dans la stratégie d'exploration

Interdiction de reprendre des solutions déjà (ou récemment) rencontrées

Recherche Tabou (Tabu Search)

Choisir solution initiale $s \in \mathcal{S}$
Initialiser Tabou M
répéter
  choisir $s^{'} \in \mathcal{V}(s)$ telle que :
  ($f(s^{'})$ meilleure solution de $\mathcal{V}(s)$ ET Critère d'aspiration vérifié)
  OU $f(s^{'})$ meilleure solution de $\mathcal{V}(s)$ non taboue
  $s \leftarrow s^{'}$
  update Tabou M
jusqu'à Critère d'arrêt vérifié

Recherche Tabou : mémoire des tabous

Les tabous sont souvent des mouvements tabous pendant une durée

exemple : problème maxsat avec $n = 6$
$M = (0, 3, 0, 0, 0, 0)$
le deuxième bit ne peut être modifié pendant 3 itérations.
$M = (1, 2, 0, 0, 2, 5)$
seuls bits non tabou 3 et 4

Lorsqu'un mouvement est effectué :
interdiction pendant n itérations
Si n trop faible, tabou peu efficace
Si n trop grand, les solutions sont "à flanc de coteau".

$\longrightarrow$ Stratégie de diversification

Recherche Tabou : Mémoire à long terme

Statistique sur les mouvements :
Repérer les mouvements trop utilisés (difficulté de recherche, optimum local...)

Fréquence $freq(m)$ d'utilisation d'un mouvement m :
pénalisation du mouvement m par ajout d'interdiction en fonction de $freq(m)$.

Recherche Tabou : Critère d'aspiration

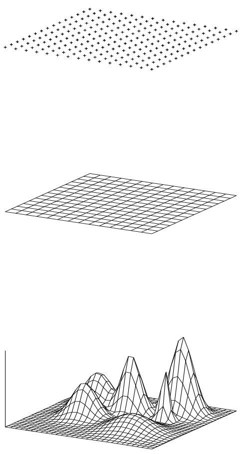
Enlever le caractère tabou d'une solution :

Lorsque la solution est la meilleure jamais rencontrée

Recherche Tabou : Bibliographie

Glover *et al* : «Tabu Search» Kluwer Academic Publishers, 1997

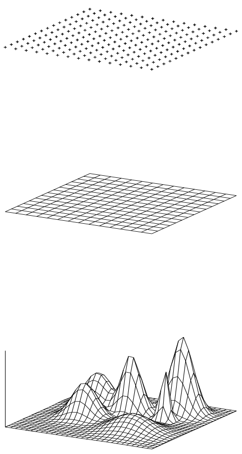
Paysage Adaptatif



Origine Biologique (Wright 1930) :
Modélisation évolution des espèces

Utiliser pour modéliser des systèmes dynamiques :
physique statistique, évolution moléculaire, écologie, etc

Optimisation combinatoire



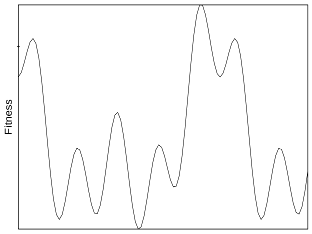
Paysage adaptatif $(\mathcal{S}, \mathcal{V}, f)$:

- $\mathcal{S}$: ensemble de solutions potentielles,
- $\mathcal{V} : \mathcal{S} \rightarrow 2^{\mathcal{S}}$: relation de voisinage,
  - $\mathcal{V}(x) = \{y \mid y = op(x)\}$
  - $\mathcal{V}(x) = \{y \mid d(y, x) \leq 1\}$
- $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$: fonction à optimiser.

Intérêts du concept

- Relation entre description géométrique d'un problème et dynamique de recherche
- Pertinence du choix de l'opérateur
- Connaissance de la géométrie du problème
  $\Rightarrow$ conception de métaheuristiques adaptées

Paysage Multimodal



paysage multimodal

Optimum local : aucune solution voisine de meilleure performance.

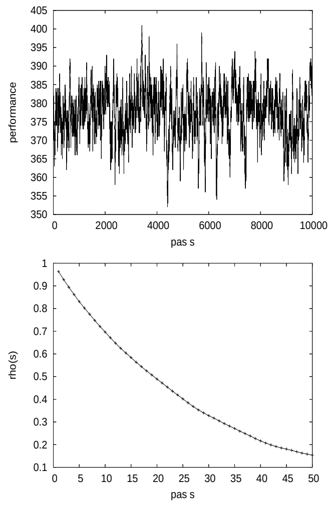
- Difficulté liée au nombre
- Taille des bassins d'attraction

Estimation : Marche adaptative

$(s_0, s_1, \ldots)$ où $\quad s_{i+1} \in \mathcal{V}(s_i)$
$\qquad f(s_i) < f(s_{i+1})$

- Terminaison sur optimum local
- Longueur : indice de distance inter-optima

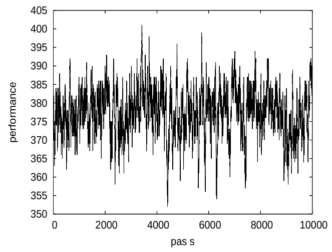
Paysage Rugueux

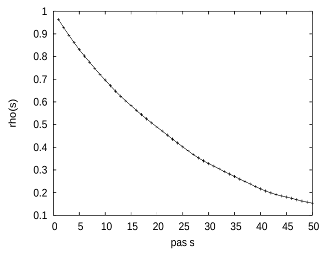


Autocorrélation lors d'une marche aléatoire (Weinberger 1996)
Longueur de corrélation $\tau = \frac{1}{\rho(1)}$

- τ petit : paysage rugueux
- τ grand : paysage lisse

Paysage Rugueux





Autocorrélation lors d'une marche aléatoire (Weinberger 1996)
Longueur de corrélation $\tau = \frac{1}{\rho(1)}$

- τ petit : paysage rugueux
- τ grand : paysage lisse

conjecture
(Stadler 92, Garcia 97) :

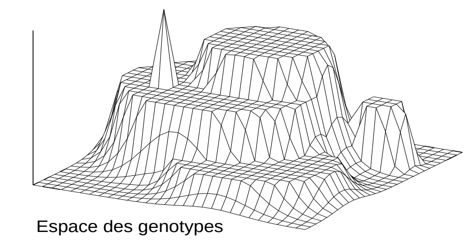
$$M \approx |\mathcal{S}|/|\mathcal{B}(x,\tau)|$$

Paysage Neutre

Théorie de la neutralité (Kimura $\approx$ 1960)

Théorie de la mutation et de la dérive aléatoire

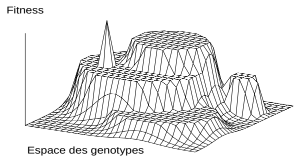
Rôle prépondérant des mutations sans influence sur la performance



- Géométrie de plateaux
- Degré de neutralité
- Réseaux de neutralité (Schuster 1994, structure secondaire de l'ARN)

Paysage Neutre
Évolution artificielle

Prise en compte depuis les années 80 en évolution artificielle : redondance (Goldberg 87)



Présence dans :

- Programmation génétique
- Contrôleur de robot
- Conception de circuit (Cartesian GP)
- Étiquetage de graphe (MinLA)

Paysage neutre

Optimisation combinatoire

Plusieurs possibilités :

- Diminuer la neutralité :
  conjecture : redondance nuit aux performances
- Utiliser une métaheuristique adaptée :
  conjecture : neutralité est intrisèque
- Augmenter la neutralité par un choix de codage redondant :
  conjecture : éviter les optima locaux

Paysage neutre

Optimisation combinatoire

Plusieurs possibilités :

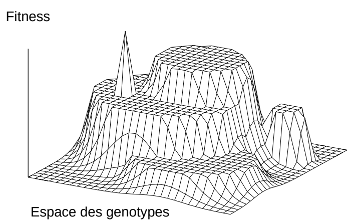
- Diminuer la neutralité :
  conjecture : redondance nuit aux performances
- Utiliser une métaheuristique adaptée :
  conjecture : neutralité est intrisèque
- Augmenter la neutralité par un choix de codage redondant :
  conjecture : éviter les optima locaux

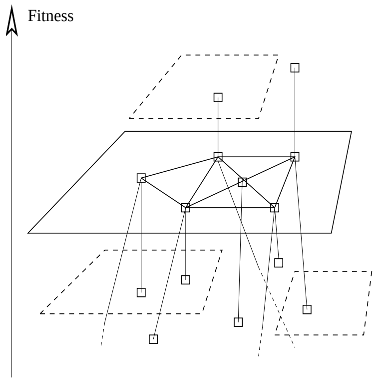
Meilleure description et connaissance des paysages neutres

$\longrightarrow$ Concevoir de nouvelles métaheuristiques

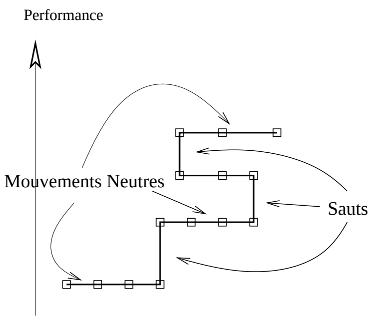
$\longrightarrow$ Évaluer la pertinence d'un codage

Réseaux de neutralité (Schuster 1994)

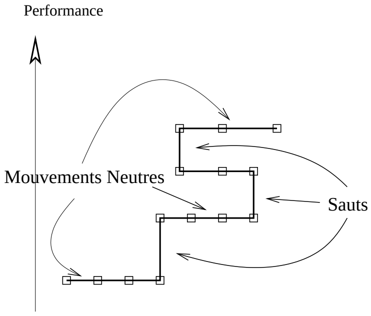


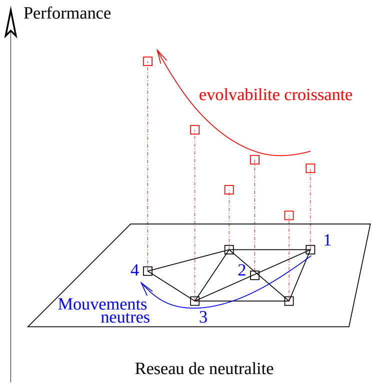


Recherche Périscopique (Scuba Search)



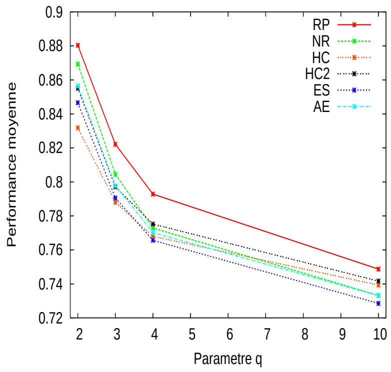
Recherche Périscopique (Scuba Search)



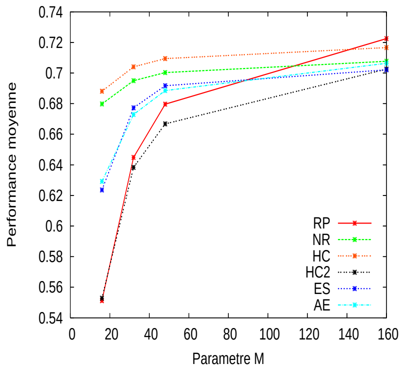


Mouvements neutres guidés par l'évolvabilité

Performances moyennes sur $N = 64$ et $K = 4$



paysage NK_q



paysage NK_M

Conclusion

- Problèmes d'optimisation combinatoire fréquents dans l'industrie (et fondamentaux en informatique théorique)
- Métaheuristiques de recherche locale :
  $\longrightarrow$ Recherche aléatoire
  $\longrightarrow$ Hill-climbing et first-ascent
  $\longrightarrow$ Recuit simulé
  $\longrightarrow$ Recherche tabou
- Paysage de Fitness : métaphore qui permet
  $\longrightarrow$ l'analyse du lien entre métaheurisque et problème
  $\longrightarrow$ imaginer de nouvelles metaheurisques (recherche périscopique)
- Propriété principale :
  $\longrightarrow$ rugosité : optima locaux, structure de corrélation
  $\longrightarrow$ neutralité : réseau de neutralité