



Offre de thèse

Sujet : Apprentissage de représentation pour la résolution de problèmes combinatoires

LERIA UFR Sciences, 2 Boulevard Lavoisier 49045 Angers Cedex 01.

<https://leria.univ-angers.fr/>

Contacts

Sylvain Lamprier, Professeur au département Informatique de l'UFR Sciences à l'université d'Angers et membre du LERIA : *Deep learning* et apprentissage par renforcement.

sylvain.lamprier@univ-angers.fr

Olivier Goudet, Maître de conférences au département Informatique de l'UFR Sciences à l'université d'Angers et membre du LERIA : Apprentissage statistique et optimisation.

olivier.goudet@univ-angers.fr

Contexte de la thèse, le projet COMBO

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet COMBO de recherche fondamentale qui sera lancé en mars 2024 pour une durée de 4 ans (projet ANR 2023).

Le projet COMBO porte sur l'Apprentissage de Distributions de Boltzmann pour l'Optimisation Combinatoire. Il se situe à l'interface de l'apprentissage statistique (principalement apprentissage profond) et de l'optimisation combinatoire (principalement stochastique et évolutionnaire). Son originalité est de proposer un couplage entre les deux types d'approches, fondé sur 3 modules:

1. la recherche d'un plongement continu de l'espace combinatoire, respectant les régularités du domaine et/ou de la fonction objectif (e.g., propriétés d'invariance ou d'équivariance);
2. l'utilisation de ce plongement pour fonder une relaxation continue du problème combinatoire, supportant des recherches locales efficaces fondées sur le gradient;
3. le guidage de méthodes d'optimisation meta-heuristiques via des estimations de distributions probabilistes du problème, avec exploitation conjointe des deux espaces de représentation discrète et continu du problème;

Les retombées de ce projet visent la conception et la justification d'un couplage effectif entre l'apprentissage de représentations (notamment via des architectures neuronales type *Transformers*) et la modélisation évolutionnaire pour l'optimisation combinatoire. Un tel couplage favorisera les avancées algorithmiques et fondamentales. En particulier, l'analyse de convergence et la justification du mécanisme de transport proposé s'appuieront sur la forme close de la distribution cible.

Une vue générale du projet est présentée sur la Figure 1. La thèse proposée portera en particulier sur les tâches T1.1 et T21, des *Work Packages* (WP) 1 et 2.

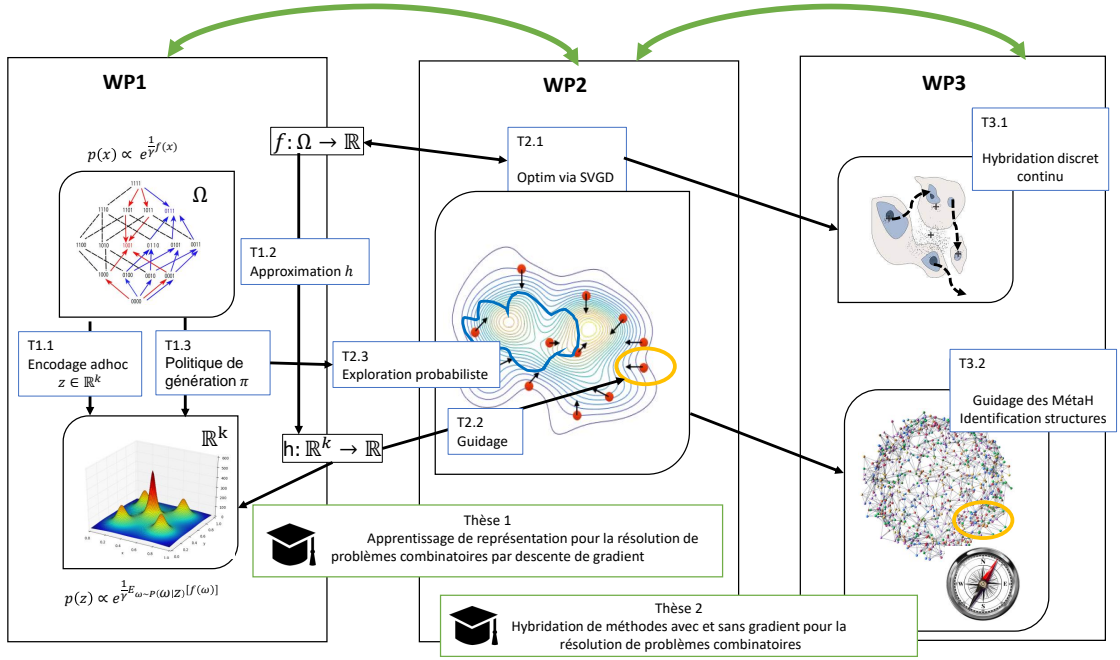


Figure 1: Vue générale du projet

Description du sujet

L'idée centrale du projet est de converger en probabilité vers une distribution objectif constante, de type distribution de Boltzmann $p(\omega) \propto e^{\frac{1}{\gamma}f(\omega)}$, avec f la fonction objectif à maximiser, pour approximer le paysage d'optimisation de problèmes combinatoires complexes, sur lesquels les méthodes exactes se heurtent à des difficultés de convergence, et les méthodes approchées basées sur des heuristiques ou métaheuristiques sans gradient sont limitées par des coûts computationnels importants. Ce type de distribution de Boltzmann (ou distribution de maximum d'entropie) permet de placer le problème d'optimisation dans un cadre théorique probabiliste sur l'espace support des solutions admissibles, donnant accès à différents outils d'approximation et d'analyse efficaces. Une fois la distribution approximée, la découverte de ses modes (correspondant aux différents optima locaux de la fonction à optimiser) peut s'en trouver particulièrement facilitée, en fonction d'un mécanisme d'échantillonnage sur l'espace support.

L'approximation de distributions de probabilité est un champ très actif pour lequel il existe de nombreux outils, notamment via des méthodes de Chaines de Markov de Monte-Carlo (MCMC) et d'inférence variationnelle. Alors que les MCMC sont garanties de converger asymptotiquement vers la distribution cible, mais dans un temps parfois prohibitif, l'inférence variationnelle classique induit souvent un biais important du fait du choix de la famille de distribution paramétrique utilisée pour approximer p . Une difficulté particulière associée aux distributions de Boltzmann provient de sa fonction de partition (inconnue et dont l'estimation très coûteuse voire inenvisageable est requise pour la majorité des méthodes précitées). Or, la méthode émergente dite de *Stein Variational Gradient Descent* (SVGD [6]) présente le grand avantage de ne pas requérir le facteur de normalisation de la distribution, permettant de se focaliser uniquement sur des rapports d'énergie entre zones de l'espace. L'idée est de s'appuyer sur une distribution d'approximation q , représentée par des particules dans l'espace support, où la répartition de ces particules est représentative de la masse de probabilité dans cet espace. Spécifiquement, la distribution cible p est approchée par un mécanisme itératif de déplacement des particules sur l'espace support, dont le point fixe peut être caractérisé.

La méthode SVGD [6] vise à faire converger une distribution q , représentée selon un ensemble de particules $\{x_i\}_{i=1}^n$, vers la cible p , dont on ne connaît pas nécessairement la fonction de partition. Les auteurs de [6] établissent une connexion entre la KL-divergence et l'opérateur de Stein $\mathcal{A}_p\phi(x) = \phi(x)\nabla_x \log p(x)^T + \nabla_x \phi(x)$, en prouvant que : $\nabla_\epsilon K(q_{[T]}||p)|_{\epsilon=0} = -\mathbb{E}_{x \sim q}[\text{trace}(\mathcal{A}_p\phi(x))]$, où $q_{[T]}$ correspond à la distribution des particules de q après une transformation de chacune d'elles

selon: $T(x) = x + \epsilon\phi(x)$. La minimisation de la KL est alors tout à fait liée à la divergence de Stein, définie par : $\mathbb{S}(q, p) = \max_{\phi \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{x \sim q}[\text{trace}(\mathcal{A}_p \phi(x))]$. Calculer la divergence de Stein étant impraticable directement, il est possible de remplacer cette divergence par une approximation basée sur des noyaux reproductifs, où l'idée est de restreindre l'espace des projections ϕ à l'ensemble des fonctions de la boule unitaire dans l'espace de Hilbert \mathcal{H} associé au noyau : $\mathbb{S}(q, p) = \max_{\phi \in \mathcal{H}} \{\mathbb{E}_{x \sim q}[\text{trace}(\mathcal{A}_p \phi(x))], \text{t.q. } \|\phi\|_{\mathcal{H}} \leq 1\}$. Sous ces restrictions, la maximisation de la formulation de la divergence de Stein a une forme close : $\phi^*(\cdot) = \mathbb{E}_{x \sim q}[\mathcal{A}_p k(x, \cdot)]$, où $k(x, x')$ correspond au noyau défini positif du RKHS \mathcal{H} . Le noyau RBF $k(x, x') = \exp(-\frac{1}{h}\|x - x'\|_2^2)$ est couramment employé. Afin de minimiser la divergence KL selon les positions des particules de q , on considère alors la transformation : $x_i \leftarrow x_i + \epsilon\phi^*(x_i), \forall i = 1 \dots n$, avec

$$\phi^*(x_i) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left[\underbrace{k(x_j, x_i) \nabla_{x_j} \log p(x_j)}_{\text{force attractive}} + \underbrace{\nabla_{x_j} k(x_j, x_i)}_{\text{force repulsive}} \right].$$

Le terme de *force attractive* de cette formulation tend à attirer les particules vers les zones de forte densité de probabilité selon la distribution cible, correspondant alors à l'aspect exploitation du problème d'optimisation. Le terme de *force repulsive* amène les particules à se repousser les unes par rapport aux autres en fonction de leur valeur de proximité selon le noyau considéré, permettant ainsi l'exploration de l'espace de recherche au-delà des zones à forte densité. SVGD a déjà été employée avec succès pour résoudre divers problèmes impliquant des distributions de probabilités, comme l'entraînement d'un auto-encodeur variationnel (VAE) [7] ou bien la paramétrisation de politiques neuronales en apprentissage par renforcement profond [1]. Diverses extensions de SVGD ont été proposées, notamment une version sans gradient [3] basée sur des ratios d'échantillonnage préférentiel (entre une distribution d'instrumentation et la distribution cible), ayant été appliquée à des données discrètes dans [2], et dont on pourra s'inspirer dans ce projet.

L'application de SVGD pour des problèmes d'optimisation combinatoire, qui n'a pas encore été abordée dans la littérature à notre connaissance, paraît particulièrement prometteuse. Néanmoins, l'utilisation de ce genre de techniques nécessite que l'on dispose de relaxations ou de représentations continues de l'espace du problème considéré, dont la recherche constituera un axe important du projet, en conjonction de la mise en place des processus d'optimisation bayésienne envisagés. Le projet repose sur les hypothèses suivantes (naturelles pour certains types de problèmes, plus exploratoires pour d'autres) : 1) l'espace du problème et sa structure peuvent être plongés dans un espace continu, où la fonction objectif (globale ou non) peut être définie, 2) la représentation peut capturer les régularités du paysage donné par la fonction objectif, 3) et enfin, ce plongement, et son interprétation probabiliste, permettront l'usage de méthodes de gradient efficaces, permettant l'analyse théorique des solutions.

Étapes de la thèse

Les grandes étapes prévisionnelles de la thèse sont les suivantes. Ces étapes pourront évidemment évoluer en fonction de l'avancée des réalisations et des souhaits du candidat. L'idée étant de commencer l'exploration de la mise en oeuvre des techniques envisagées par des cas simples, en augmentant la complexité de manière progressive. De nombreuses extensions et solutions de repli pourront être envisagées.

1. Mise en oeuvre de SVGD à un cadre d'optimisation continue, sur des problèmes simples, de type QUBO (cf. section suivante) et comparaison avec d'autres méthodes d'optimisation type CMAES sur ces problèmes continus;
2. Mise en oeuvre de SVGD sur des problèmes discrets permettant des représentations probabilistes simples via échantillonnage de bernoulli de k variables indépendantes lors du décodage pour le problème des NK landscapes (cf. section suivante);
3. Recherche d'espaces de représentation permettant la prise en compte des dépendances entre composantes des structures discrètes manipulées (notamment via définition de distances selon une représentation régulière des différentes solutions candidates, voir les pistes imaginées dans le dossier complet du projet);
4. Apprentissage de représentations compactes plus efficaces, permettant une réduction de la dimensionnalité des espaces manipulés;

Exemples de Problèmes combinatoires abordés dans le cadre de cette thèse

- **Le problème d’optimisation binaire quadratique sans contrainte ou QUBO (PB1)** a pour objectif de trouver un vecteur $x = [x(1), \dots, x(n)]$ de taille n maximisant la fonction $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$ donnée par $f(x) = x^t Q x$, avec Q une matrice symétrique réelle de taille $n \times n$ et x^t le vecteur transposé de x . De nombreux problèmes réels NP-difficiles et NP-complets peuvent être formulés dans ce cadre d’optimisation [5], tels que les problèmes d’ordonnancement de tâches dans un environnement de calcul parallèle, le *clustering* de données d’expression de gènes en bio-informatique ou la conception de systèmes de fabrication dans l’industrie.
- **Le modèle NK (PB2)** [4] permet de décrire un paysage de fitness dont la taille du problème et la rugosité (déterminant le nombre de minimum locaux) sont paramétrables. Une fonction NK $f_{\text{NK}} : \{0, 1\}^n \rightarrow [0, 1)$ est définie comme une somme $f_{\text{NK}}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \gamma_i(x_i, x_{l_{i1}}, \dots, x_{l_{iK}})$ de N sous-fonctions pseudo-booléennes $\gamma_i : \{0, 1\}^{K+1} \rightarrow [0, 1[$. Le paramètre K permet de régler le degré d’interaction entre les variables et de contrôler la difficulté du problème d’optimisation.

Profil recherché

Cette thèse nécessite de bonnes compétences en programmation, ainsi qu’une appétence pour le raisonnement en grande dimension et l’apprentissage statistique. Une connaissance de Python ainsi que de Pytorch (bibliothèque de développement de réseaux de neurones) serait appréciée.

Localisation

Cette thèse sera localisée au LERIA UFR Sciences, 2 Boulevard Lavoisier 49045 Angers Cedex 01.

References

- [1] Nicolas Castanet, Sylvain Lamprier, and Olivier Sigaud. Stein variational goal generation for reinforcement learning in hard exploration problems. *arXiv preprint arXiv:2206.06719*, 2022.
- [2] Jun Han, Fan Ding, Xianglong Liu, Lorenzo Torresani, Jian Peng, and Qiang Liu. Stein variational inference for discrete distributions. In *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pages 4563–4572. PMLR, 2020.
- [3] Jun Han and Qiang Liu. Stein variational gradient descent without gradient. In Jennifer Dy and Andreas Krause, editors, *Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning*, volume 80 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 1900–1908. PMLR, 10–15 Jul 2018.
- [4] Stuart A Kauffman and Edward D Weinberger. The nk model of rugged fitness landscapes and its application to maturation of the immune response. *Journal of theoretical biology*, 141(2):211–245, 1989.
- [5] Gary Kochenberger, Jin-Kao Hao, Fred Glover, Mark Lewis, Zhipeng Lü, Haibo Wang, and Yang Wang. The unconstrained binary quadratic programming problem: a survey. *Journal of Combinatorial Optimization*, 28(1):58–81, 2014.
- [6] Qiang Liu and Dilin Wang. Stein variational gradient descent: A general purpose bayesian inference algorithm. *Advances in neural information processing systems*, 29, 2016.
- [7] Yunchen Pu, Zhe Gan, Ricardo Henao, Chunyuan Li, Shaobo Han, and Lawrence Carin. Stein variational autoencoder. *arXiv preprint arXiv:1704.05155*, 2017.