

Émergence par neuro-évolution d'algorithmes de recherche pour l'optimisation combinatoire

Sujet de thèse en informatique

Université d'Angers – LERIA

Encadrement : Adrien Goëffon, Olivier Goudet

Contexte et objectifs

Cette thèse est dédiée à faire émerger automatiquement, par des mécanismes d'évolution et d'apprentissage artificiels, de nouvelles stratégies de résolution spécifiquement adaptées à différentes classes de problèmes d'optimisation combinatoire.

Une instance de problème d'optimisation combinatoire est composée d'un espace de solutions \mathcal{X} et d'une fonction objectif $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$. Résoudre (\mathcal{X}, f) revient à déterminer $\arg \text{opt}_{x \in \mathcal{X}} f(x)$ ou bien, de manière approchée, à identifier une solution x^* qui optimise autant que possible la valeur $f(x^*)$. Les algorithmes de recherche approchés génériques de type *métaheuristiques* [9] proposent d'échantillonner (explorer) l'espace \mathcal{X} , relativement à une stratégie de guidage. À chaque pas de recherche, la stratégie choisit une ou plusieurs nouvelles solutions à évaluer, en s'appuyant notamment sur les observations et informations accumulées jusqu'alors. L'efficacité d'un tel algorithme réside dans sa capacité à inclure dans son échantillonnage une solution de la meilleure qualité possible, et peut varier considérablement selon les propriétés des instances de problèmes à résoudre.

Dans un travail récent [2], nous avons proposé de représenter un algorithme de recherche locale [4] par un réseau de neurones artificiels, ce qui a permis de découvrir de nouvelles stratégies performantes et bien adaptées à chaque distribution d'instances rencontrée. Nous avons également étendu l'approche de manière à faire émerger de nouveaux algorithmes à estimation de distribution [6], modélisés avec des réseaux de neurones, pour des problèmes *boîte noire* pseudo-booléens. Différentes classes d'algorithmes de recherche peuvent ainsi être représentées par différents modèles de réseaux de neurones, selon les observations à disposition à chaque pas de recherche et la nature de l'action à effectuer. Les perspectives de recherche d'une telle approche sont novatrices et les résultats préliminaires émanant des premiers prototypes d'algorithmes découverts par neuro-évolution, pour les différentes classes de problème étudiées, sont particulièrement prometteurs.

Le principe général à développer est l'évolution artificielle de ces réseaux de neurones représentant des algorithmes de recherche, à la manière de ce qui a été récemment fait pour l'étude de l'émergence de nouveaux moyens de locomotions par des intelligences artificielles dans des environnements complexes [3]. Un premier schéma d'évolution simple et déjà expérimenté avec succès dans nos travaux est de voir le problème d'optimisation des paramètres du réseau de neurones comme un problème boîte noire dans un espace continu, qui peut être résolu par une stratégie d'optimisation évolutionnaire classique comme l'algorithme CMA-ES [7]. On envisagera également d'appliquer des principes de

neuro-évolution plus complexes permettant de prendre en compte différentes topologies de réseaux (cf. algorithme NEAT [5]). Une autre approche pour la neuro-evolution pourra être d'utiliser des algorithmes d'apprentissage par renforcement de type REINFORCE [12] qui appliquent directement une méthode de gradient sur la politique à apprendre.

L'évaluation d'un réseau de neurones rend compte de l'espérance de la qualité de l'échantillonnage relativement à une distribution cible d'instances de problèmes d'optimisation combinatoire, et pourra être raffinée via d'autres critères comme la complexité de la stratégie (de façon à trouver la stratégie à la fois la plus performante possible, mais aussi la plus simple possible, selon un critère de complexité à définir). Le problème combinatoire sous-jacent est ainsi transposé en problème d'optimisation continue dans l'espace des paramètres du réseau de neurones, et indirectement dans l'espace des algorithmes de résolution modélisés de cette manière.

Nous nous intéresserons donc à définir des correspondances entre modèles de réseaux de neurones et modèles d'algorithmes de recherche évolutionnaires, ainsi qu'aux principes d'évolution artificielle de ces réseaux (évaluation, opérateurs de croisement et de mutation) pouvant être approfondis par l'analyse de paysages de fitness de réseaux de neurones [8]. En outre, nous analyserons les stratégies émergentes en nous intéressant à l'explicabilité des modèles calculés dans le langage commun des métaheuristiques. Il est prévu de consacrer des études distinctes sur les cadres plus ou moins restrictifs d'algorithmes de recherche suivants : hill-climber, recherche locale itérée, recherche tabou, algorithme à estimation de distribution, algorithmes génétiques, stratégies d'évolution.

Les problèmes d'optimisation combinatoires étudiés en priorité seront des problèmes pseudo-bouliens, avec des expérimentations conduites au moyen de modèles de fonction NK et QUBO/UBQP. Notons que le modèle QUBO permet d'unifier de nombreux problèmes d'optimisation et suscite un vif intérêt dans la communauté scientifique [1]. On pourra disposer aussi du générateur d'instance *PUBO_i* récemment proposé [10, 11] pour étudier différentes classes d'instances QUBO ayant des propriétés variées.

Les travaux de cette thèse visent à retrouver par neuro-évolution des principes évolutionnaires connus et à en faire émerger des originaux, mais aussi à emprunter un schéma de résolution alternatif pouvant permettre de résoudre plus efficacement certains problèmes d'optimisation combinatoire.

Profil recherché et candidature

Diplômé(e) (ou en dernière année) d'un Master ou diplôme d'ingénieur en informatique, doté(e) de bonnes aptitudes en algorithmique et programmation et d'un intérêt particulier pour l'optimisation combinatoire, la résolution approchée de problèmes (algorithmique évolutionnaire, métaheuristiques) et l'apprentissage profond.

Pour faire acte de candidature, il suffit d'envoyer un CV assorti des relevés de notes du supérieur (y compris l'année courante) à :

- adrien.goeffon@univ-angers.fr
- olivier.goudet@univ-angers.fr

Références

- [1] Fred W. Glover, Gary A. Kochenberger, Rick Hennig, and Yu Du. Quantum bridge analytics I : a tutorial on formulating and using QUBO models. *Ann. Oper. Res.*, 314(1) :141–183, 2022.
- [2] Olivier Goudet, Mohamed Salim Amri Sakhri, Adrien Goëffon, and Frédéric Saubion. Emergence of new local search algorithms with neuro-evolution. In *24th European Conference on Evolutionary Computation in Combinatorial Optimisation*, Aberystwyth, UK, April 2024.
- [3] Nicolas Heess, Dhruva TB, Srinivasan Sriram, Jay Lemmon, Josh Merel, Greg Wayne, Yuval Tassa, Tom Erez, Ziyu Wang, SM Eslami, et al. Emergence of locomotion behaviours in rich environments. *arXiv preprint arXiv :1707.02286*, 2017.
- [4] Holger H Hoos and Thomas Stützle. Stochastic local search. In *Handbook of Approximation Algorithms and Metaheuristics*, pages 297–307. Chapman and Hall/CRC, 2018.
- [5] Reeba Mehmood Khan. A review study on neuro evolution. *Int. J. Sci. Res. Eng. Trends*, 7 :181–185, 2021.
- [6] Martin S. Krejca and Carsten Witt. Theory of estimation-of-distribution algorithms. In Benjamin Doerr and Frank Neumann, editors, *Theory of Evolutionary Computation - Recent Developments in Discrete Optimization*, Natural Computing Series, pages 405–442. Springer, 2020.
- [7] Ilya Loshchilov and Frank Hutter. CMA-ES for hyperparameter optimization of deep neural networks. *arXiv preprint arXiv :1604.07269*, 2016.
- [8] Matheus Nunes, Paulo M Fraga, and Gisele L Pappa. Fitness landscape analysis of graph neural network architecture search spaces. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*, pages 876–884, 2021.
- [9] Kenneth Sörensen, Marc Sevaux, and Fred W. Glover. A history of metaheuristics. In Rafael Martí, Panos M. Pardalos, and Mauricio G. C. Resende, editors, *Handbook of Heuristics*, pages 791–808. Springer, 2018.
- [10] Sara Tari, Gabriela Ochoa, Matthieu Basseur, and Sébastien Verel. On the global structure of puboi fitness landscapes. In *Proceedings of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, pages 247–250, 2023.
- [11] Sara Tari, Sébastien Verel, and Mahmoud Omidvar. PUBO_i : A tunable benchmark with variable importance. In *European Conference on Evolutionary Computation in Combinatorial Optimization (Part of EvoStar)*, pages 175–190. Springer, 2022.
- [12] Junzi Zhang, Jongho Kim, Brendan O’Donoghue, and Stephen Boyd. Sample efficient reinforcement learning with reinforce. In *Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence*, volume 35, pages 10887–10895, 2021.