Projet ANR PRC Combo - LERIA, LISN, LISIC

Apprentissage de Distributions de Boltzmann pour l'Optimisation Combinatoire

---

Olivier Goudet, Sylvain Lamprier, Frédéric Saubion, Adrien Goëffon, Jin-Kao Hao, Nicolas Dupin
Michèle Sebag, Cyril Furtlehner
Sébastien Verel, Sara Tari

12/03/2024

Plan de la présentation

Approche générale

Exemple de problème combinatoire abordé - QUBO

- Problème d'optimisation binaire quadratique sans contrainte (QUBO) : trouver un vecteur $\mathrm{x} = [x_1, \dots, x_n]$ de taille n dans $\Omega = \{-1, 1\}^n$ maximisant la fonction $f : \Omega \to \mathbb{R}$ donnée par

$$f(\mathrm{x}) = \mathrm{x}^t \mathrm{Q} \mathrm{x}. \tag{1}$$

- Q est une matrice symétrique réelle de taille $n \times n$.
- **Modèle d'Ising** en physique statistique.
- **Problème générique et NP-difficile**.

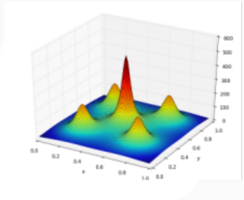
Applications et instances de QUBO

- **Nombreuses applications réelles** : ordonnancement de tâches, clustering en bio-informatique, conception de systèmes dans l'industrie [Kochenberger et al., 2014].
- Modèle d'entrée de nombreux algorithmes exécutés sur les nouveaux **ordinateurs quantiques** [Neven et al., 2008, Ronagh et al., 2016].
- $PUBO_i$ **: générateur d'instances QUBO** paramétrables développé par le LISIC [Tari et al., 2022].

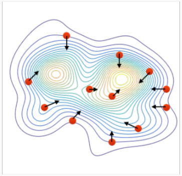
- Apprendre une distribution de Boltzmann définie sur Ω et donnée par

$$p(\mathbf{x}) \propto e^{\frac{1}{\gamma} f(\mathbf{x})}. \tag{2}$$

- **Analogie** : solutions candidates d'un algorithme évolutionnaire/échantillons d'une distribution.



$p(\mathbf{x}) \propto e^{\frac{1}{\gamma} f(\mathbf{x})}$



Exploration probabiliste / guidage

Deux thématiques

Un projet à la frontière entre deux thématiques :

1. Optimisation combinatoire/continue
   - Modélisation du problème, espace discret.
   - Etude des paysages de *fitness*.
   - Descente de gradient.
2. Apprentissage statistique, *machine learning*.
   - Convergence en probabilité vers la distribution cible.
   - Apprentissage de représentations.
   - Réseaux de neurones.

Équipes et partenaires

Synergies

- Au LERIA
  - **Equipe MOC** (Métaheuristiques et Optimisation Combinatoire) : Jin-Kao Hao, Frédéric Saubion, Adrien Goëffon, Nicolas Dupin.
  - **Equipe ARC** (Apprentissage et Représentation des Connaissances) : Sylvain Lamprier, Olivier Goudet.
- **Partenaires :**
  - LISN (Paris-Saclay) : apprentisage profond / optimisation / physique statistique (anciennement équipe TAO).
    - Michèle Sebag, Cyril Furtlehner.
  - LISIC (Nord-Pas-de-Calais) : optimisation combinatoire / étude des paysages de *fitness* / spécialistes du problème QUBO.
    - Sébastien Verel, Sara Tari.

Combo team

LERIA

Frédéric Saubion

Nicolas Dupin

Sylvain Lamprier

Adrien Goëffon

Jin-Kao Hao

Olivier Goudet

LISN

Michèle Sebag

Cyril Furtlehner

LISIC

Sebastien Verel

Sara Tari

Description scientifique du projet

WP1 : apprentissage de représentations probabilistes de Ω

- **Objectif** : converger en probabilité vers une distribution de Boltzmann définie sur l'espace discret Ω donnée par

$$p(\mathsf{x}) \propto e^{\frac{1}{\gamma}f(\mathsf{x})}, \tag{3}$$

  avec f la fonction de *fitness* du problème combinatoire.
- **Projection** dans un espace de représentation continu Z :

$$p(\mathsf{z}) \propto e^{\frac{1}{\gamma}\mathbb{E}_{\mathsf{x}\sim P(\mathsf{x}|\mathsf{z})}[f(\mathsf{x})]}. \tag{4}$$

- **Apprentissage** d'un modèle $P(\mathsf{x}|\mathsf{z})$ de décodage des structures discrètes (e.g. réseau de neurones *Transformer* ou *Graph Convolutional Neural network*).
- Optimiser z dans un espace continu avec des techniques de **descente de gradient** :

$$\nabla_{\mathsf{z}} \log p(\mathsf{z}) \propto \nabla_{\mathsf{z}}\mathbb{E}_{P(\mathsf{x}|\mathsf{z})}[f(\mathsf{x})] \tag{5}$$

WP2 : optimisation SVGD (Stein Variational Gradient Descent) [Liu and Wang, 2016]

- **Objectif** : faire converger une distribution q (modèle d'approximation), représentée selon un ensemble de particules $\{\mathbf{x}^d\}_{d=1}^D$, vers la distribution cible $p(\mathbf{x}) \propto e^{\frac{1}{\gamma} f(\mathbf{x})}$.
- **Minimisation de la divergence de Kullback-Leibler** $KL(q||p)$ avec l'opérateur ϕ^* appliqué itérativement à chaque particule $\mathbf{x}^d$ de la population :

$$\mathbf{x}^d \leftarrow \mathbf{x}^d + \epsilon \phi^*(\mathbf{x}^d), \forall d = 1 \cdots D, \tag{6}$$

$$\phi^*(\mathbf{x}^d) = \frac{1}{D} \sum_{e=1}^{D} \Big[\underbrace{k(\mathbf{x}^e, \mathbf{x}^d) \nabla_{\mathbf{x}^e} \log p(\mathbf{x}^e)}_{\text{force attractive}} + \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}^e} k(\mathbf{x}^e, \mathbf{x}^d)}_{\text{force repulsive}} \Big]. \tag{7}$$

- Choix d'un kernel $k(\cdot, \cdot)$ adapté au problème.

WP3 : Hybridation discret/continu pour la résolution

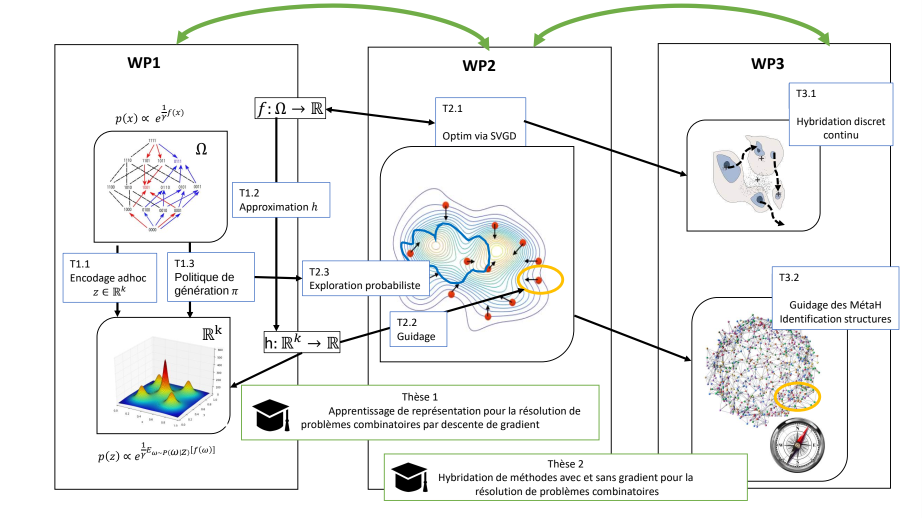
- Exemple de **formulation continue** du problème QUBO sur l'espace $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$:

$$x_i = cos(z_i), \quad \forall i = 1 \cdots n, \tag{8}$$

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^t \mathbf{Q} \mathbf{x} + \lambda(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n). \tag{9}$$

- **Méthode hybride** :
  - optimisation de $\mathbf{z}$ sur $\mathbb{R}^n$ avec des techniques de descente de gradient (e.g. SVGD).
  - ou optimisation de $\mathbf{x}$ sur $\{-1, 1\}^n$ avec des techniques d'optimisation discrète (e.g. méthode tabou).
- **Passage représentation discrète/continue** en cours de résolution :
  - Ajustement de la contrainte de relaxation avec λ.
  - Croisement entre deux solutions discrètes $\rightarrow$ donne une solution dans le continu.

Vue globale du projet



Montage du projet

Montage du projet

- LERIA : en pointe dans le domaine de l'optimisation combinatoire depuis plus de 20 ans.
- Depuis une dizaine d'années, des travaux en **apprentissage pour l'optimisation combinatoire** au LERIA.
  [Maturana et al., 2012, Goëffon and Lardeux, 2012, Zhou et al., 2016, Goudet et al., 2021, Grelier et al., 2023]
- **Nouvelle impulsion** - deux derniers recrutements :
  - **Nicolas Dupin** (MCF MOC) : proposition d'un sujet de recherche sur le passage du discret au continu (cf. WP3)
  - **Sylvain Lamprier** (Pr. ARC) : spécialiste apprentissage profond/apprentissage par renforcement (cf. WP1 et WP2)
- **Liens avec le LISIC :**
  - Sébastien Verel, collaborateur avec le LERIA.
  - Sara Tari, ancienne doctorante du LERIA.
- **Liens avec le LISN :**
  - Postdoc réalisé dans l'équipe TAO à Paris-Saclay.

Budget et dépenses prévues

- Budget :
  - Montant demandé à l'ANR 382 kE.
  - Coûts administratifs : 13.5%.
  - Montant effectif : 330 kE.
- Dépenses :
  - 1 Thèse LERIA - LISN : 120 kE.
  - 1 Thèse LERIA - LISIC : 120 kE.
  - 5 Stages : $\sim$ 15 kE
  - Frais de missions, conférences et autres : $\sim$ 35 kE.
  - Achat d'heures de calcul au centre de calcul régional des Pays de la Loire, GLiCID : 40 kE

Réferences

Goëffon, A. and Lardeux, F. (2012).
Autonomous local search algorithms with island representation.
In *International Conference on Learning and Intelligent Optimization*, pages 390–395. Springer.

Goudet, O., Duval, B., and Hao, J.-K. (2021).
Population-based gradient descent weight learning for graph coloring problems.
Knowledge-Based Systems, 212 :106581.

Grelier, C., Goudet, O., and Hao, J.-K. (2023).
Monte carlo tree search with adaptive simulation : a case study on weighted vertex coloring.
In *Evolutionary Computation in Combinatorial Optimization EvoCOP 2023*, pages 1–16. Springer.

Kochenberger, G., Hao, J.-K., Glover, F., Lewis, M., Lü, Z., Wang, H., and Wang, Y. (2014).