Aide à la décision - R5.A.11

Méthodes d'optimisation pour l'aide à la décision

Déterminer le minimum d'une fonction

Descente de gradient *versus* recuit simulé

Michel Salomon

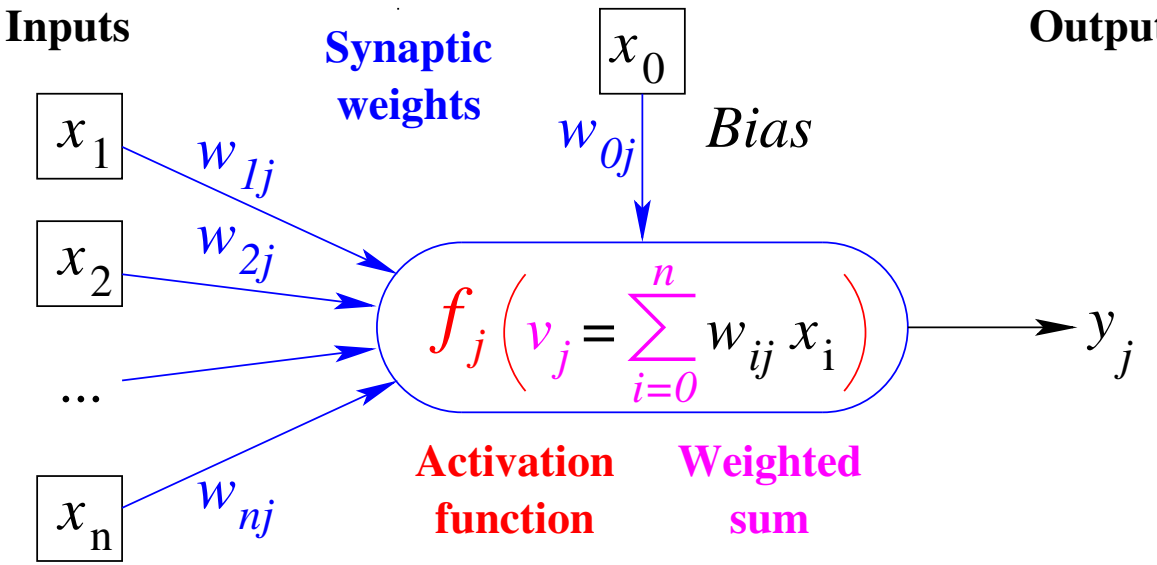
IUT Nord Franche-Comté
Département d'informatique

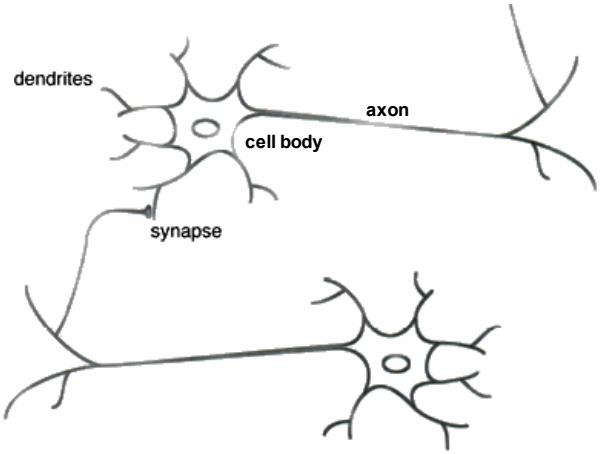
Illustration - *Machine Learning / Training*

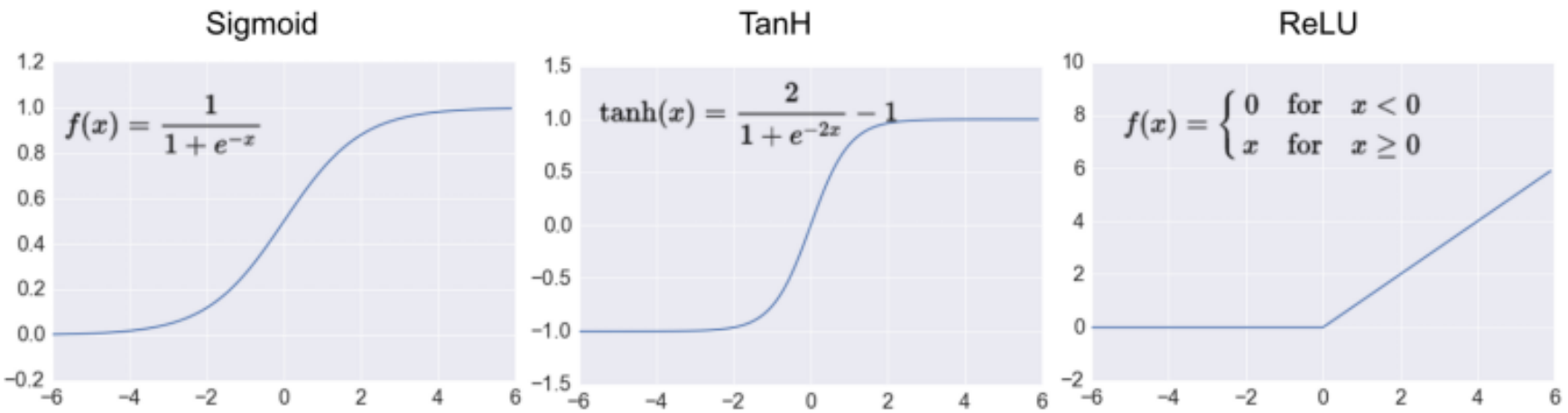
Classification des algo. de *Machine Learning* / Apprentissage auto.

- Apprentissage supervisé
  - Ensemble d'entraînement (ou d'apprentissage) avec les réponses correctes (cibles ou étiquettes - paires (X, Y^t))
  - L'entraînement vise à généraliser pour fournir des réponses correctes pour de nouvelles entrées (X') en **minimisant** les erreurs de prédiction
- Apprentissage non supervisé
  - Les étiquettes/réponses correctes ne sont pas disponibles
- Apprentissage semi-supervisé
  - Des données d'entrée partiellement étiquetées sont disponibles
- Apprentissage par renforcement
  - L'algorithme reçoit une mesure de la qualité d'une action
  - Il explore et essaie différentes possibilités pour trouver comment effectuer correctement une tâche donnée (apprentissage par essais) et **maximiser** la qualité à long terme

Réseau de neurones - composant de base : le neurone

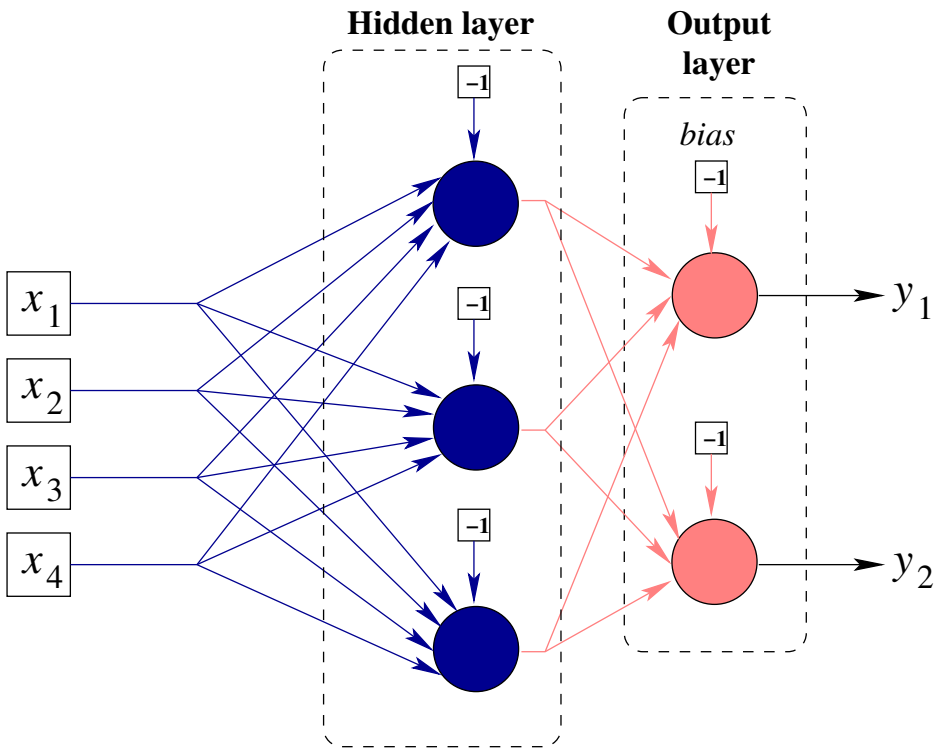






Réseau de neurones - perceptron multicouches

- Des neurones organisés en couches
- Classification (exemples avec Playground TensorFlow) ; régression

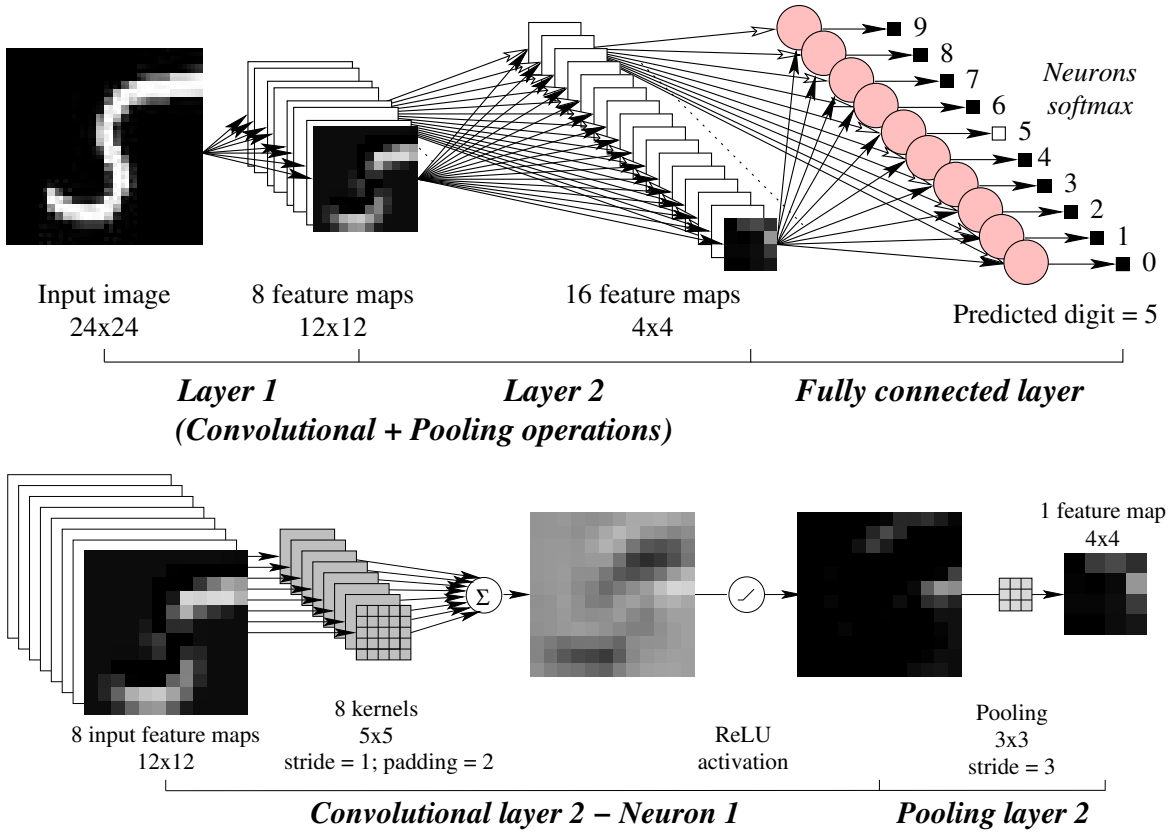


Apprentissage supervisé des poids à partir de données du jeu d'entraînement

$(X, Y^t) = ((x_1, x_2, x_3, x_4), (y_1^t, y_2^t))$ de manière à minimiser $\| Y - Y^t \|^2$

Réseau de neurones - apprentissage profond (*Deep Learning*)

- Un “grand” nombre de couches, d’autres types de neurones, ...
- Une des archi. phares : réseau de neurones convolutionels



MNIST problem - Poids synaptiques = convolution kernels

Réseau de neurones - l'apprentissage (ou entraînement) - 1/2

Qu'attend-t-on d'un réseau de neurones ?

- Qu'il apprenne de "stimulations" provenant de son environ.

Que fait la phase d'apprentissage ?

- Modifie les paramètres ajustables (poids synaptiques et biais)
- Utilise des règles pour les mettre à jour itérativement

Que signifie "stimuler" ou entraîner un réseau de neurons ?

- Utiliser données pour le guider la mise à jour des paramètres

Qu'est-ce que l'apprentissage supervisé ?

L'optimisation des poids synaptiques et biais pour minimiser l'erreur de sortie / la prédiction (MSE $= \| Y - Y^t \|^2$)

Réseau de neurones - l'apprentissage (ou entraînement) - 2/2

Entraîner un réseau de neurones revient à résoudre
un problème d'optimisation généralement non linéaire

Un réseau bien entraîné est capable de généraliser

- N'importe quelle méthode d'optimisation pourrait être utilisée
- En pratique une méthode de descente de gradient
  - Une méthode d'optimisation locale
    - converge vers un minimum local
  - Comment est calculer le gradient (des poids synaptiques et biais)
    - Grâce à l'algorithme de rétropropagation du gradient
  - Variantes de la descente de gradient
    - Descente batch ou lot (*batch gradient descent*)
    - Descente stochastique (*stochastic gradient descent - SGD*)
    - Descente par mini-batch (*mini-batch gradient descent*)
  - Méthodes d'optimisation avancées à base du gradient
    - *Momentum*, *Adagrad*, etc.

Optimisation - terminologie et méthodes étudiées

Description générale d'un problème d'optimisation

- Étant donné un ensemble Ω de
  - configurations ;
  - ou solutions admissibles

  du probléme à résoudre et une fonction objectif f ;
- trouver le minimum x' de f par rapport à l'ensemble Ω
- Soit x' qui vérifie

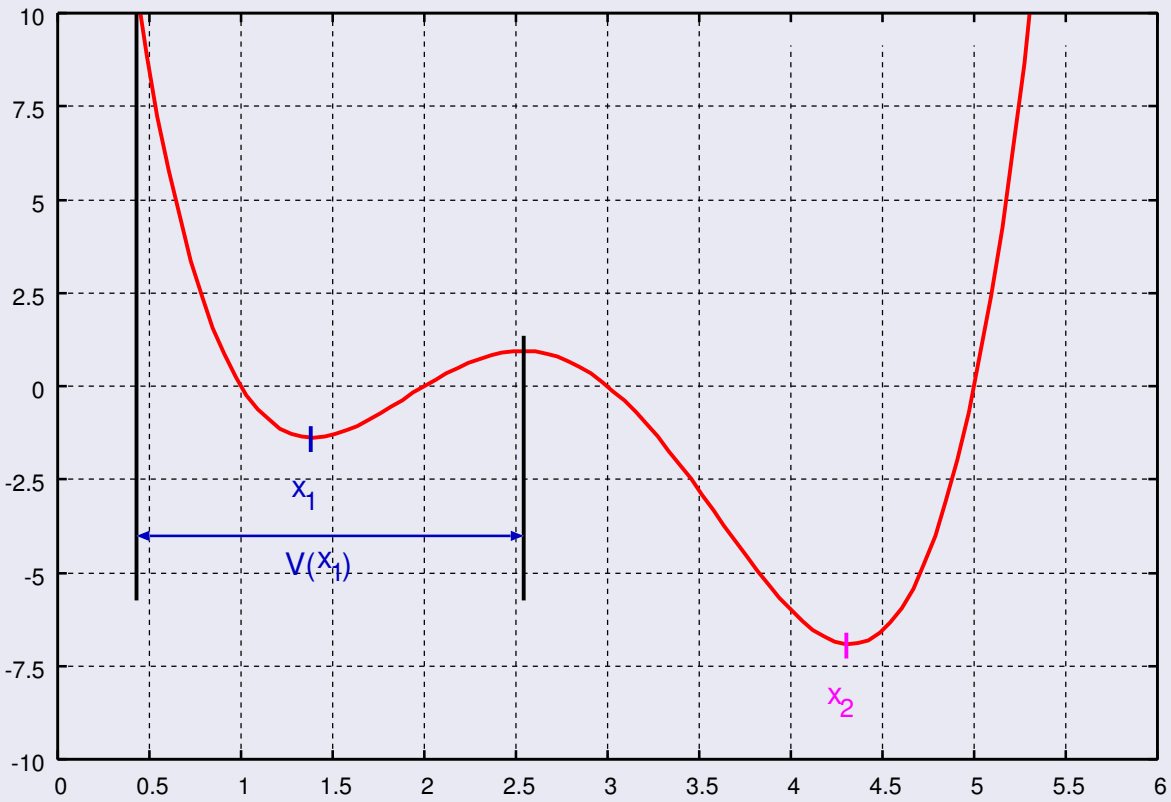
$$x' \in \Omega \text{ et } f\left(x'\right) = \min_{x \in \Omega} f\left(x\right)$$

Méthodes étudiées

- Méthode d'optimisation locale, déterministe
  - Descente de gradient
- Méthode d'optimisation globale, stochastique
  - Recuit simulé

Fonction objectif considérée

$f(x) = (x-1)\cdot(x-2)\cdot(x-3)\cdot(x-5)$ sur $[0;6]$



- x_1 est un minimum local sur le voisinage $V(x_1)$;
- x_2 est le minimum global

Descente de gradient - fonction objectif de dimension 1

- Permet de trouver un minimum d'une fonction dérivable
- Si la fonction est dérivable, alors un minimum x' vérifie :

$$f'(x') = \frac{\partial f}{\partial x}(x') = 0$$

dans le cas de la fonction considérée sa dérivée $f'(x)$ est :

$$f'(x) = \frac{\partial f}{\partial x}(x) = 4 \cdot x^3 - 33 \cdot x^2 + 82 \cdot x - 61$$

- Résoudre l'équation $f'(x) = 0$ revient donc à trouver les racines d'un polynôme de degré 3 $\rightarrow$ difficile
- La descente de gradient trouve un minimum x' itérativement :
  - À partir d'une valeur initiale x^0 (plus ou moins bien choisie)
  - on construit une suite de valeurs x^k qui converge vers un minimum de la fonction objectif

Descente de gradient - fonction objectif de dimension 1

- La méthode repose sur l'observation qu'en un point a la fonction f décroît le plus rapidement dans la direction opposée à celle de f' en a. En effet :

$$f'(a) = \frac{\partial f}{\partial x}(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

d'où :

  - si $f'(a) > 0 \Rightarrow f(a+h) > f(a)$
    $\rightarrow$ f décroît dans la direction des x négatifs
  - si $f'(a) < 0 \Rightarrow f(a+h) < f(a)$
    $\rightarrow$ f décroît dans la direction des x positifs

- Ainsi, en définissant x^{k+1} comme suit :

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \cdot f'\left(x^k\right) = x^k - \gamma \cdot \frac{\partial f}{\partial x}\left(x^k\right) \qquad (1)$$

pour $\gamma > 0$ suffisamment petit on a $f\left(x^{k+1}\right) \leq f\left(x^k\right)$

Descente de gradient

Remarques sur γ

- ce nombre s'appelle le pas ;
- sa valeur influe sur la vitesse de convergence ;
- elle influe également sur le minimum trouvé qui sera plus ou moins proche du minimum exact ;
- si le pas est trop grand, la méthode peut avoir un comportement chaotique voire diverger ;
- le pas peut éventuellement varier à chaque itération

Détection de la convergence

- Arrêter les calculs lorsque les valeurs successives de x sont suffisamment voisines

$$\left| x^{k+1} - x^k \right| \leq \epsilon$$

- Arrêter les calculs lorsqu'on a effectué un max. d'itérations

Descente de gradient - fonction objectif de dimension sup.

- La descente de gradient trouve un minimum x' itérativement :
  - À partir d'un vecteur initial x^0 (plus ou moins bien choisi)
  - on construit une suite de vecteurs x^k qui converge vers un minimum de la fonction objectif
- La formule (1) définissant x^{k+1} devient :

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \cdot \nabla f\left(x^k\right)$$

où ∇f désigne le gradient de f (d'où le nom de la méthode)

- Comme

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x)\right)^T$$

on a la mise à jour suivante pour la i-ème composante de x^k

$$x_i^{k+1} = x_i^k - \gamma \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i}\left(x^k\right)$$

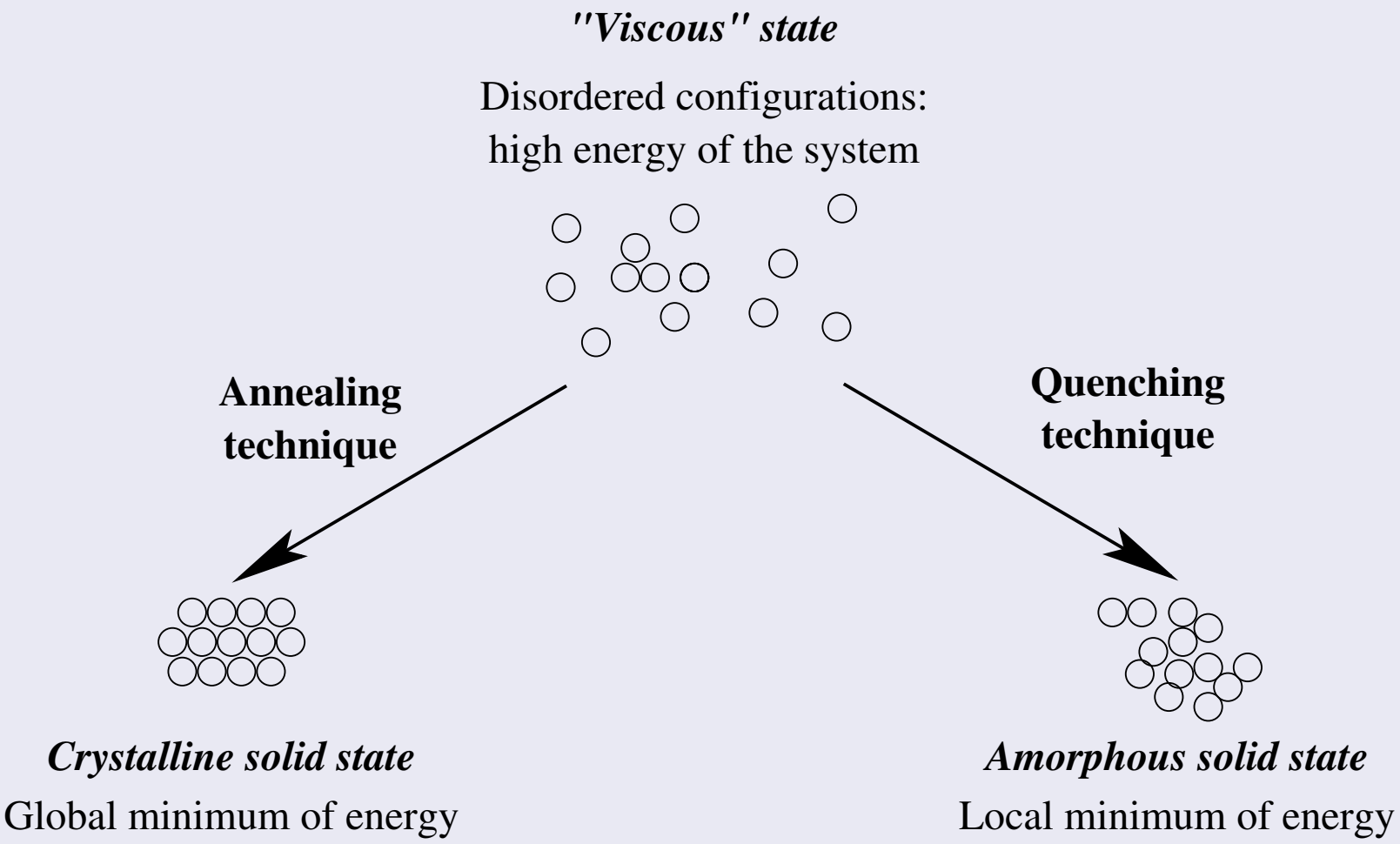
Recuit simulé - origine et principe

Origine du recuit simulé (*Simulated Annealing*)

- Obtenu par analogie avec :
  - le phénomène thermodynamique de recuit des métaux ;
  - le processus de refroidissement pour cristalliser un liquide
- Principe
  - Initialement, le métal est porté à haute température
  - Ensuite on le refroidit progressivement :
    - à haute température les atomes sont agités
      $\rightarrow$ configurations atomiques équiprobables ;
    - à basse température les atomes s'organisent
      $\rightarrow$ structure atomique parfaite, proche de l'état d'énergie minimale
  - Contrainte
    - refroidissement lent $\rightarrow$ ne pas rester bloqué par un min. local

Recuit simulé - origine et principe

Origine du recuit simulé (*Simulated Annealing*)



Recuit simulé - simulation du phénomène de recuit - 1/2

Distribution de Gibbs / Boltzmann (mécanique statistique)

$$P(x) = \frac{1}{Z_T} \cdot \exp\left(-\frac{E(x)}{K_B \cdot T}\right)$$

où :

- $x \in \Omega$ (une configuration du système physique) ;
- E est une fonction d'énergie définie sur Ω ;
- T est la température

Algorithme de Metropolis (1953) - Simulation à T constante

- Suite de configurations obtenues par réarrangement élementaire

$$P(y|x) = \min\left(1, \exp\left(-\frac{E(y) - E(x)}{T}\right)\right)$$

Recuit simulé - simulation du phénomène de recuit - 2/2

Impact de la valeur de la température sur $P(y|x)$

- Quand T est grand alors $P(y|x)$ est proche de 1
  - Même si $E(y)$ est bien plus grand que $E(x)$
  - La fraction est proche de 0

À haute température
n'importe quelle configuration est acceptée

- Quand T est petit
  - Si $E(y) \leq E(x)$ alors $P(y|x) = 1$
  - Si $E(y) > E(x)$ alors $P(y|x)$ tend vers 0

À basse température
seule une config. faisant baisser l'énergie est acceptée

Recuit simulé - analogie optimisation / syst. physique

Problème d'optimisation	**Système physique**
Fonction de coût/objectif $f(x)$	Énergie libre $E(x)$
Variables du problème	«Coordonnées» des atomes
Trouver une bonne configuration	Trouver un état de basse énergie

$\Rightarrow$ **algorithme du recuit simulé (Kirkpatrick *et al.* - 1983)**

Algorithme basé sur deux procédures

- Procédure d'échantillonnage de la distribution
  - Phase d'exploration $\rightarrow$ Notion de voisinage
  - Phase d'acceptation $\rightarrow$ Utilisation de l'algo. de Metropolis
- Procédure de refroidissement
  - Schéma de décroissance de la température

Recuit simulé - algorithme - 1/2

- Capacité à éviter les minima locaux
  - Acceptation probabiliste de config. d'énergie plus élevée
  - Probabilité d'autant plus élevée que T est grande
- Choix des paramètres (convergence en un temps fini)
  - T^0 doit être choisie de sorte que pratiquement toutes les configurations proposées soient acceptées
  - Les paliers de température doivent être suffisamment long $\rightarrow$ atteindre la distribution stationnaire de Gibbs/Boltz.
  - Baisse de température entre deux paliers pas trop rapide
- Choix des paramètres (en pratique)
  - T^0 et longueur d'un palier choisis à l'issue d'expérimentations
  - Schéma de température exponentiel

$$T^k = T^0 \times \alpha^k, k \in \mathbb{N} \text{ et } 0 < \alpha < 1$$

  - Critéres d'arrêt possibles
    - Le pourcentage de config. acceptées passe sous un seuil fixé ;
    - la variance de l'énergie est faible ;
    - choix d'une température minimale

Recuit simulé - algorithme - 2/2

Description de la version de Metropolis

1: $k = 0$
2: $T^k = T^0$ // Température initiale
3: $x^k = x^0$ // Configuration initiale
4: **repeat**
5: **repeat**
6: Tirer aléatoirement $y \in V(x^k)$ // Une configuration voisine de x^k
7: **if** $\Delta E = \left(E(y) - E(x^k)\right) < 0$ ou $\exp\left(-\frac{\Delta E}{T^k}\right) > \mu$, $\mu \in [0;1]$ tiré selon une loi uniforme **then**
8: $x^{k+1} = y$
9: **else**
10: $x^{k+1} = x^k$
11: **end if**
12: **until** fin de palier
13: $T^{k+1} = g\left(T^k\right)$ // g est strictement décroissante
14: $k = k + 1$
15: **until** critère d'arrêt vérifié

Équation de la diffusion - définition

- Définie par Aluffi *et al.* - 1985 / Geman *et al.* - 1986
- Équation différentielle stochastique
  - Configuration du type $x^t = (x_1^t, \ldots, x_n^t)^T$

$$dx^t = -\nabla E(x^t) \cdot dt + \sqrt{2 \cdot T^t} \cdot dw^t$$

  - La fonction doit vérifiée : $\lim_{||x|| \to \infty} E(x) = +\infty$
  - T^t est la température à l'instant $t \in \mathbb{R}^+$
  - w^t est un mouvement brownien dans $\mathbb{R}^n$ (marche au hasard)
- Échantillonne également la distribution de Gibbs / Boltzmann

$$P\left(x^t\right) = \frac{1}{Z_T} \cdot \exp\left(-\frac{E(x^t)}{K_B \cdot T^t}\right)$$

$\Rightarrow$ **variante du recuit simulé**

Équation de la diffusion - principe

- Décomposition de l'équation en deux termes

$$\begin{aligned} \delta_1^t &= -\nabla E(x^t) \cdot dt \\ \delta_2^t &= \sqrt{2 \cdot T^t} \cdot dw^t \end{aligned}$$

  - Terme 1 $\rightarrow$ descente de gradient
  - Terme 2 $\rightarrow$ perturbation aléatoire
    - À haute temp. $\rightarrow$ possibilité de sortir d'un minimum local
    - À basse temp. $\rightarrow$ perturbation négligeable $\rightarrow$ descente de gradient

- Algorithme basé sur deux étapes
  - Résolution itérative de l'équation
    - Discrétisation de l'équation par la méthode d'Euler-Cauchy
  - Étape de refroidissement

Équation de la diffusion - algorithme

Description pseudo-code

1: $t = 0$
2: $T = T^0$ // Température initiale
3: $\Delta P^t = P^0$ // Pas de temps initial
4: $x^t = x^0$ // Configuration initiale
5: **repeat**
6: $\quad \Delta w_i^t = N(0, \Delta P^t)$
7: $\quad x_i^{t+\Delta P^t} = x_i^t - \frac{\partial E}{\partial x_i}(x^t) \cdot \Delta P^t + \sqrt{2 \cdot T^t} \cdot \Delta w_i^t, i \in 1, \ldots, n$
8: $\quad T^{t+\Delta P^t} = g(T^t)$ // g et h sont strictement décroissantes
9: $\quad \Delta P^{t+\Delta P^t} = h(\Delta P^t)$
10: $\quad t = t + \Delta P^t$
11: **until** critère d'arrêt vérifié

Équation de la diffusion - convergence et paramètres

- Conditions de convergence
  - Condition sur la fonction d'énergie E
  - Condition sur la température T^t

$$\lim_{t \to \infty} T^t \geq \frac{c}{\ln(2+1)}, c \text{ suffisamment grand}$$

  - Condition sur le pas de temps dt
    - dt doit être suffisamment «petit» et tendre vers zéro
- Choix des paramètres
  - Paramètres commun avec le recuit simulé classique
    - Même approche que pour le recuit simulé
  - Paramètre spécifique à cette méthode : le pas de temps
    - Schéma de décroissance exponentiel (idem que pour la température)

$$\begin{aligned} T^{t+\Delta P^t} &= \alpha_T \times T^t, 0 < \alpha_T < 1 \\ \Delta P^{t+\Delta P^t} &= \alpha_P \times \Delta P^t, 0 < \alpha_P < 1 \end{aligned}$$

Travail à faire - comparer descente de gradient et recuit

Écrire du code implémentant les étapes suivantes

Utiliser `Python`, `pyplot` et `animation` de `matplotlib`

1. Écrire une fonction calculant $f(x)$ et une autre $f'(x)$
2. Afficher $f(x)$ avec $x \in [0; 6]$ avec `pyplot`
3. Écrire une fonction `descenteGradient` qui prend en entrée un point de départ x^0, une valeur pour γ, et un nombre max. d'itérations pour arrêter la descente (nombre de x calculés)
4. Afficher sur le graphe de $f(x)$ les points successifs trouvés
5. Écrire une fonction `recuitSimule` qui prend en entrée un point de départ x^0, une température initale T^0, une longueur de palier de temp., une valeur pour α pour faire décroître T, et un nombre max. de températures comme critère d'arrêt
6. Afficher sur le graphe de $f(x)$ les points successifs trouvés
7. Faire une animation (vidéo) montrant l'exploration du recuit