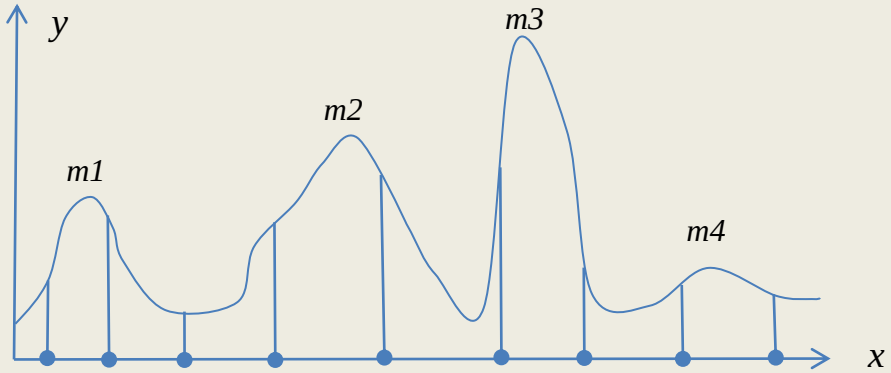
Les algorithmes génétiques

Exposé simple du problème

Soit à trouver le maximum d'une fonction complexe (pouvant même être inconnue ou non exprimable mathématiquement), offrant plusieurs solutions (la dérivée s'annule en plusieurs points). Les algorithmes génétiques permettent d'obtenir une bonne approximation de la solution.

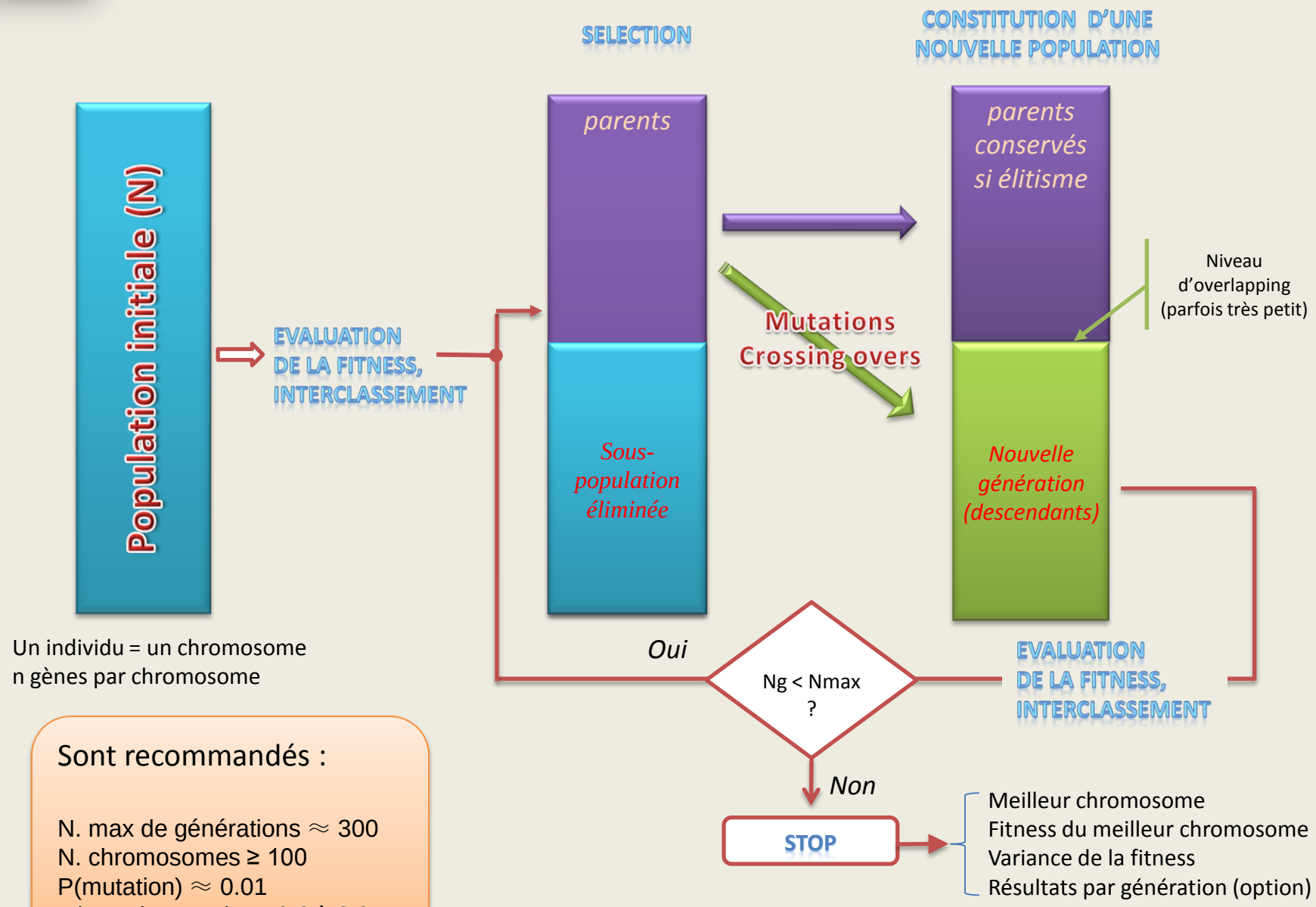


L'idée consiste à distribuer un certain nombre de points sur l'axe des *x* (points alors appelés *gènes*). Chacun d'entre eux correspond, par application de la fonction *f*(*x*), à une valeur, disons : *y*.

- Les *gène*s ayant les « meilleurs *y* » vont être sélectionnés pour générer de nouveaux gènes qui vont remplacer les plus faibles.
- Cette opération va se renouveler sur un nombre important de « générations ».
- Lorsque l'algorithme n'améliore plus le meilleur résultat, disons pour $x = \Theta$, on considère que l'on a identifié le meilleur gène, et donc que le max $f(x) = f(\Theta)$.

John Henry Holland (2 février 1929 - 9 août 2015) est un scientifique américain, professeur de psychologie et professeur d'ingénierie électrique et de sciences informatiques à l'université du Michigan (Ann Arbor). Il a été un pionnier dans les systèmes complexes et non linéaires. Il est le père des algorithmes génétiques. A lire : *Hidden Order.*

Principe général de fonctionnement des algorithmes génétiques



Un individu = un chromosome
n gènes par chromosome

Sont recommandés :

N. max de générations ≈ 300
N. chromosomes ≥ 100
P(mutation) ≈ 0.01
P(crossing over) ≈ 0.6 à 0.9

- Les Algorithmes Génétiques (GA) font partie de la programmation évolutive (*evolutionnary programming* [1]), c'est-à-dire bio-inspirée.
- Ils forment une classe d'heuristiques[2] permettant d'adresser un nombre considérable de problèmes dans tous les domaines.
- Ils sont utiles lorsque l'obtention de solutions exactes est impossible ou bien inatteignables en temps raisonnable.
- Leur complexité est en $O(n\text{Ln}(n))$, n étant le nombre de variables à estimer

Par comparaison le problème du voyageur de commerce (dit NP-difficile) est en $O(n!)$ pour un algorithme déterministe (exploration de toutes les solutions !)

NB VILLES	*NB POSSIBILITES*	*TEMPS DE CALCUL*
5	120	120µs
10	181440	0.18 ms
15	43 MILLIARDS	12 h
20	60 E +15	1928 ans
25	310 E + 21	9,8 Milliards A.

1 *Ne pas confondre avec la programmation dynamique*

2 *Une heuristique est une méthode de calcul qui fournit rapidement (en temps polynomial) une solution réalisable, pas nécessairement optimale, pour un problème d'optimisation NP-difficile.*

Encodage des gènes

Encodage binaire

Chromosome A	101100101100101011100101
Chromosome B	111111100000110000011111

Tout nombre réel peut être encodé en un chaine de 0 et 1 (bit string) par une opération d'encodage (pour crossing-overs et mutations) puis décodée pour évaluer la fitness de la fonction.

Encodage permutation

Chromosome A	1 5 3 2 6 4 7 9 8
Chromosome B	8 5 6 7 2 3 1 4 9

Très spécifique aux problèmes d'ordonnancement. On cherche un ordre optimal de la séquence (par exemple des trajets entre villes, de taches à effectuer…)

Encodage par valeurs

Chromosome A	1.2324 5.3243 0.4556 2.3293 2.4545
Chromosome B	ABDJEIFJDHDIERJFDLDFLFEGT
Chromosome C	(back), (back), (right), (forward), (left)

Nécessite des opérateurs de cross over et mutation particuliers. Par exemple on additionne (ou soustrait) une petite valeur au réel pour provoquer une mutation, on effectue D = 1.5P1 – 0.5P2 pour les cross over (croisement linéaire de wright).

Exemple de l'encodage binaire de valeurs réelles

- *Soit d le nombre de décimales désiré (la précision).*
- *Soient x_{max} et x_{min} les bornes supérieures et inférieures de l'intervalle de variation pour x*
- *Soit n la taille minimale de la chaîne binaire.*
- *n est alors le plus petit entier tel que :* $|x_{max} - x_{min}|.10^d \leq 2^n$ (1)

Ainsi, pour x Є [-1.28,1.28], si l'on veut une précision de 2 décimales, il faudra prendre $n = 8$ pour le codage. En effet, comme : $(1.28 + 1.28).10^2 = 256$ et que $2^8 = 256$,
On en déduit que n = 8 est le plus petit entier qui satisfait la relation (1).

- Quand $n = 8$ et x Є [-1.28,1.28], la chaîne binaire 00000000 correspondra alors à la borne inférieure $x_{min} = -1.28$ alors que 11111111 représentera la borne supérieure $x_{max} = +1.28$.
- Les valeurs intermédiaires sont linéairement réparties entre les deux bornes. De ce fait, on peut associer une valeur de x à n'importe quelle chaîne de longueur $n = 8$, grâce à la formule suivante :

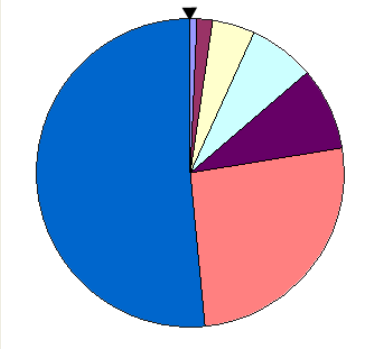
$$(2^n - 1).(x - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min})$$

SELECTION – Roulette wheel

La sélection permet d'identifier les gènes devant se reproduire

Séquence	Valeur	U(x)	% de chance de reproduction	% cumulés
00011010	0.1015625	0.364990	0.364990 / 2.595947 = 0.14	0.14
11011110	0.8671875	0.460693	0.460693 / 2.595947 = 0.18	0.14 + 0.18 = 0.32
10111010	0.7265625	0.794678	0.794678 / 2.595947 = 0.31	0.32 + 0.31 = 0.63
01101100	0.4218750	0.975586	0.975586 / 2.595947 = 0.37	0.63 + 0.37 = 1.00
	TOTAL =	2.595947		

On tire un nombre p∈ [0,1[. Soit p = 0.55, dans la colonne 5 on trouve que le chromosome N°3 est sélectionné. *D'après J.M. Alliot (directeur du Centre International de Mathématiques et d'Informatique de Toulouse).*



- Roulette wheel, représentation schématique. Les aires sont proportionnelles aux fitness des gènes.
- En réitérant cette opération, on sélectionne les gènes devant subir des mutations et/ou des crossing-over avec un partenaire.

SELECTION – par rang

Variante de la roulette. Les chromosomes sont classés par rang (1 à N) de fitness. L'aire de représentation de la roulette est proportionnelle au rang du chromosome

SELECTION – par tournoi

On tire au hasard plusieurs individus dans la population. Le meilleur est gardé, les individus médiocres ont donc quelques chances d'être conservés.

SELECTION – steady state « état stable »

- Ici, on sélectionne les *n* meilleurs chromosomes comme parents. Il seront conservés (tous ou partie) si on a choisi un algorithme avec élitisme. Cette méthode est très utilisée car moins couteuse en temps.
- On effectue un crossing-over (selon une certaine probabilité) entre deux parents pour produire deux descendants. Les mutations sont appliquées (selon une certaine probabilité) aux parents pour produire des descendants.

Elitisme

- L'élitisme consiste à décider combien de gènes de la génération parentale seront conservés tels quels dans la population à l'itération suivante (en général un faible % des meilleurs gènes/chromosomes). Leur nombre défini celui des gènes éliminés. Les gènes éliminés sont choisi parmi ceux ayant les fitness les plus faibles.
- S'il n'y a pas d'élitisme, tous les gènes reproducteurs sont éliminés de la population après reproduction.

Mutations et Crossing-overs

Soit le nombre 185 = Σi 2i codé en binaire :

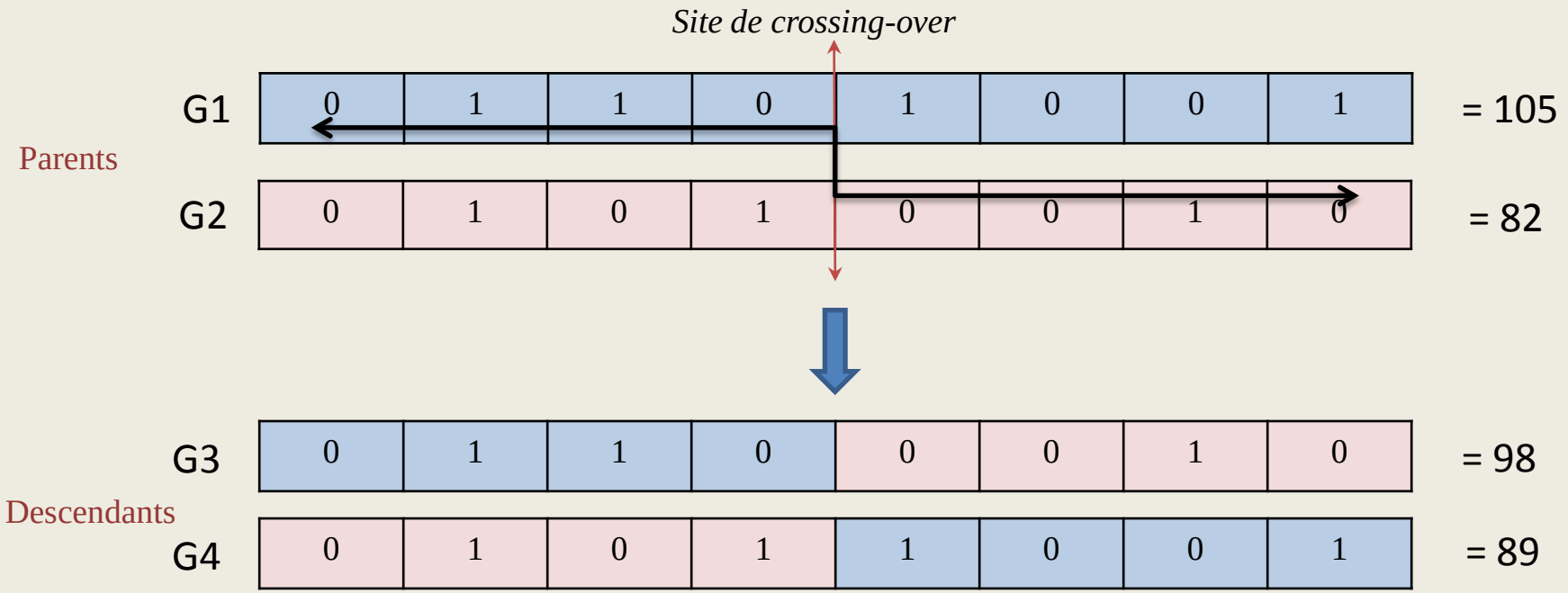
valeurs	2^7	2^6	2^5	2^4	2^3	2^2	2^1	2^0
bits	1	0	1	1	1	0	0	1

La mutation consiste à modifier l'un des bits de cet octet. Si les mutations sont équiprobables entre tous les bits, lorsque celle-ci intervient sur un bit de poids fort (à gauche), la valeur s'en trouve fortement changée. Par exemple la mutation :

valeurs	2^7	2^6	2^5	2^4	2^3	2^2	2^1	2^0
bits	0	0	1	1	1	0	0	1

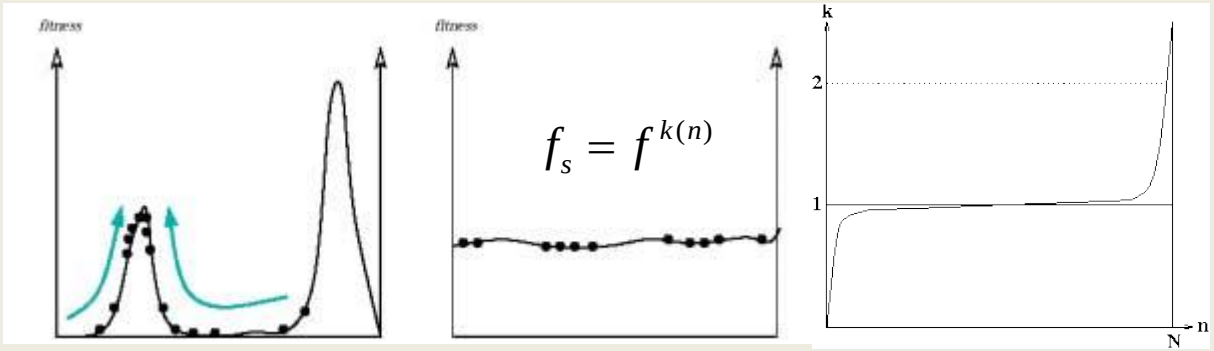
Change la valeur 185 en 57 du gène. Les mutations permettent donc une exploration en largeur de l'espace dans lequel se trouve le gène (ici [0,256]). Mais si le gène en question a déjà l'une des meilleures fitness, on aura peu de chance d'améliorer celle-ci au moyen de la mutation qui peut potentiellement le déplacer fortement. C'est pourquoi, il est recommandé d'appliquer une probabilité faible à l'occurrence mutation (de l'ordre de 0.1)

On appliquera plus fréquemment (avec une probabilité de l'ordre de 0.8) le crossing-over entre deux gènes de la génération parentale et ayant une bonne fitness. En effet, le crossing-over conserve les bits de poids forts de chacun des parents.



- Le crossing-over permet donc d'explorer les valeurs intermédiaires entre les deux parents
- Le site du crossing-over peut être choisi au hasard, selon une loi de probabilité, autour du centre des gènes.

Les pièges



Lorsque l'espace de recherche présente de très forts gradients,, il peut y avoir une convergence prématurée vers un maximum local (à gauche).

Le remède s'appelle le **scaling** : par une mise à échelle artificielle (linéaire ou exponentielle), on réduit l'amplitude de fitness entre chromosomes. La sélection se fait alors non plus sur la véritable fitness *f* (à gauche) mais sur son image après scaling : *fs* (milieu). Les chromosomes les moins performants ne sont alors pas (peu) pénalisés et continuent de se reproduire, de la même façon que les meilleurs…

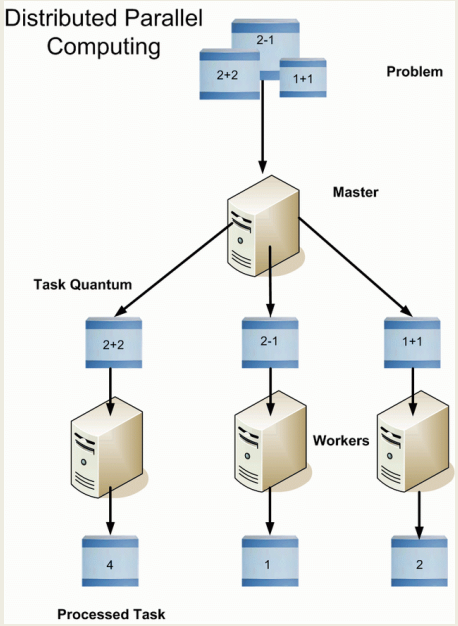
Cette méthode présente l'inconvénient de gêner la convergence en fin de processus, car l'on souhaiterait alors favoriser les meilleurs. Pour éviter cela, le scaling exponentiel est préférable, car l'on peut faire varier le paramètre k au cours des générations (à droite), avec une formule du type :

$$k(n) = (\tan(\frac{n\pi}{2(N+1)}))^{0.1}$$ n = n° de génération, N = n° de l'ultime génération

Avantages

- Ils ont un grand pouvoir d'exploration en largeur de l'espace de solution.
- Ils peuvent traiter un problème multi-objectifs (on veut optimiser une fonction selon plusieurs critères)
- Ils peuvent fournir plusieurs solutions dans le cas de problèmes multimodaux.
- Ils peuvent converger même quand le problème comporte des éléments stochastiques
- Ils sont facilement parallélisables pour un gain de temps calcul = on distribue la population en *n* sous-populations sur autant de machines (distributed computing) ou cœurs d'une machine unique (parallel computing). Un mécanisme de rendez-vous reconstitue l'ensemble de la population avant la génération suivante (Message Parsing Interface: MPI, OpenMPI).

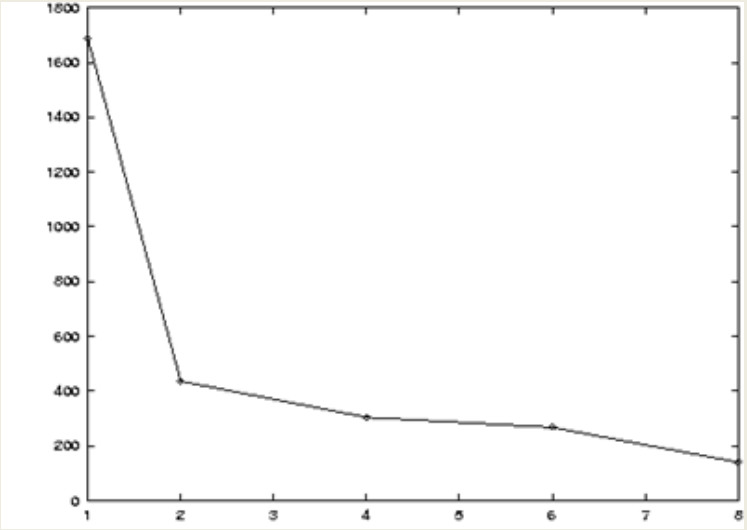
Principe du parallélisme par distribution



Exemple de code R permettant de transformer des données (transformData()) en utilisant les 6 cœurs d'une machine de bureau :

```
library(foreach)                                    # 2 packages
library(doSNOW)
cl <- makeCluster(6, type="SOCK")                   # on utilise 6 cœurs
registerDoSNOW(cl) uID <- unique(ID)
foreach(i=icount(length(uID)) %dopar% {
transformData(dat[dat$ID==uID[i],]) }
stopCluster(cl)
```

Évolution du temps de calcul en fonction du nombre de machines (cœurs)



Limites et difficultés

- Ils sont (beaucoup) moins efficaces (temps et résultats) qu'un algorithme déterministe vis-à-vis d'un problème donné.
- Il ne garantissent en aucun cas que la solution obtenue est la meilleure, ni l'unique.
- Les nombreux paramètres qui les contrôlent sont délicats à régler (probabilités, scaling, élitisme, overlap…), et il n'existe pas de règle définitive à ce sujet.
- Le choix de codage est arbitraire. Cela peut influencer grandement la vitesse de convergence.
- Ils peuvent avoir des difficultés à converger localement.
- Afin de garantir la robustesse des algorithmes évolutifs, le calcul d'un très grand nombre de fitness (parfois de l'ordre de plusieurs centaines de milliers).
- Ils peuvent éprouver des difficultés à gérer des contraintes nombreuses et complexes.

Quelques références

Calcul parallèle

Scilab : http://ats.cs.ut.ee/u/kt/hw/scilabpvm/

R : http://cran.fhcrc.org/web/views/HighPerformanceComputing.html

Algorithmes génétiques

Scilab: https://help.scilab.org/docs/5.4.0/fr_FR/section_3aae18570efc509132b58dad425a00af.html

R : http://cran.r-project.org/web/packages/GA/index.html

Voir aussi dans la page : http://sites.unice.fr/coquillard/links.html