

POST-DOC OFFER

Algorithms for discrete multi-criteria optimization

Constraint programming & cost function networks

Contact : [Simon de Givry](mailto:Simon.de-givry@inrae.fr) (Simon.de-givry@inrae.fr),
[Thomas Schiex](mailto:Thomas.Schiex@inrae.fr) (Thomas.Schiex@inrae.fr).

BACKGROUND:

Constraint programming is a discrete optimization technology focused on constraint satisfaction/feasibility problems, approaching optimization by iteratively solving feasibility problems. Its generalization into weighted constraint programming (cost function networks) focuses on optimization problems, which also allows it to tackle machine learning problems defined on discrete stochastic graphical models (Markov fields, Bayesian networks).

The MIAT laboratory of INRAE in Toulouse is developing a weighted constraint programming tool, *toulbar2*, targeted on discrete optimization (<https://toulbar2.github.io/toulbar2>). *Toulbar2* is an open-source platform, integrating research work on graphical models and constraint programming carried out for more than twenty years in ANITI (INRAE, IRIT) and outside (Universities of Barcelona, Caen, Cork, Hong-Kong, Marseille, Montpellier, Prague, and INRIA Nice). The targeted software development follows good software engineering practices - quality standards, documentation, testing, integration and continuous integration - leading to a robust hybrid AI tool in production allowing its diffusion in the scientific and industrial community. *Toulbar2* is used in particular to assist the design of molecules (proteins) with applications in health and the environment.

Scientific fields concerned: discrete optimization, constraint programming (CPP), graphical models, protein design.

SUBJECT OF THE POSTDOC:

The goal of the PostDoc is to extend the capabilities of *toulbar2* to allow it to directly attack multi-criteria optimization problems combining a main optimization criterion, expressed as a master cost function network, and secondary criteria also expressed as cost function networks, and controlled by a maximum (and/or minimum) cost constraint. These

developments have a broad applicative interest and are motivated by a molecular design problem at the heart of the project funding the PostDoc (supported by the ANR SpaceHex project and the Institut Interdisciplinaire en Intelligence Artificielle de Toulouse (3IA ANITI). They involve algorithmic developments, focused computational developments in C++ (marginally in Python, for the PyToulbar2 API) and may lead to more theoretical questions aiming at identifying the expressive power of a value-constrained joint cost function, which can also be interpreted as a generalization of quadratic/MAX2SAT constraint.

The role of the postdoc will be to:

- develop, implement and characterize the algorithms needed for the solution of multi-criteria problems with the MIAT research team
- participate in the writing of scientific publications in English, from the writing to the testing of the algorithms
- to experiment and implement the developed algorithms on molecular design problems well mastered in the MIAT team.
- report on the progress of the work.

The PostDoc will use the computing resources - platform and computing power - available at INRAE MIAT and on the CALMIP server of ANITI.

KNOWLEDGE AND SKILLS

- Knowledge in discrete optimization, constraint programming or mathematical programming.
- Experience in C++ software development: design, development, git,...
- Required: Teamwork skills, good interpersonal skills
- Highly valued: Rigor and organizational skills
- Appreciated: Good command of English
- Technical environment: C++ under linux.

PRACTICAL CONDITIONS

Duration of one year.

Supervision: Simon de Givry / Thomas Schiex

Full time - daytime - telecommuting possible

Geographical location: **INRAE MIAT, 24 chemin de Borde Rouge, 31326 Castanet-Tolosan / B612 - ANITI - 3 Rue Tarfaya, 31400 Toulouse**

Bibliographic references: [see at the end of the document](#).

OFFRE DE POST-DOC

Algorithmes pour l'optimisation discrète multi-critères

Programmation par contraintes & réseaux de fonction de coûts

Contact : [Simon de Givry](mailto:Simon.de-givry@inrae.fr) (Simon.de-givry@inrae.fr),
[Thomas Schiex](mailto:Thomas.Schiex@inrae.fr) (Thomas.Schiex@inrae.fr).

CONTEXTE :

La programmation par contraintes est une technologie d'optimisation discrète focalisée sur les problèmes de satisfaction de contraintes/faisabilité, approchant l'optimisation par la résolution itérative de problèmes de faisabilité. Sa généralisation en programmation par contraintes pondérées (réseaux de fonctions de coût) se focalise sur des problématiques d'optimisation, ce qui lui permet aussi de s'attaquer à des problèmes d'apprentissage automatique définis sur des modèles graphiques (champs de Markov, réseaux Bayésiens).

Le laboratoire MIAT de l'INRAE de Toulouse développe un outil de programmation par contraintes pondérées, *toulbar2*, ciblé sur l'optimisation discrète (<https://toulbar2.github.io/toulbar2>). *Toulbar2* est une plateforme open-source, intégrant des travaux de recherche sur les modèles graphiques et la programmation par contraintes menés depuis plus de vingt ans dans ANITI (INRAE, IRIT) et à l'extérieur (Universités de Barcelone, Caen, Cork, Hong-Kong, Marseille, Montpellier, Prague, et INRIA Nice). Le développement logiciel visé suit des bonnes pratiques du génie logiciel – norme de qualité, documentation, tests, intégration et diffusion continue – aboutissant à un outil d'IA hybride robuste en production permettant sa diffusion dans la communauté scientifique et industrielle. *Toulbar2* est en particulier utilisé pour assister la conception de molécules (protéines) avec des applications en santé et environnement.

Champs scientifiques concernés : optimisation discrète, programmation par contraintes (PPC), modèles graphiques, design de protéines.

SUJET DU POSTDOC :

Le but du PostDoc est d'étendre les capacités de *toulbar2* pour lui permettre d'attaquer directement des problèmes d'optimisation multicritères combinant un critère d'optimisation principal, exprimé sous la forme d'un réseau de fonction de coût maître et de critères secondaires eux aussi exprimés sous forme de réseaux de fonctions de coût, et contrôlés par une contrainte de

coût maximum (et/ou minimum). Ces développements ont un intérêt applicatif large et sont motivés par une problématique de design moléculaire au cœur du projet finançant le PostDoc (soutenu par le projet ANR SpaceHex et l'Institut Interdisciplinaire en Intelligence Artificielle de Toulouse (3IA ANITI). Ils impliquent des développements algorithmiques, des développements informatiques en C++ (marginalelement en Python, pour l'API PyToulbar2) et peuvent mener à des questions plus théoriques visant à cerner le pouvoir expressif d'une fonction de coût jointe contrainte en valeur, que l'on peut aussi interpréter comme une généralisation de contrainte quadratique/MAX2SAT.

Le postdoc aura pour rôle de :

- développer, implémenter et caractériser les algorithmes nécessaires pour la résolution de problèmes multi-critères avec l'équipe de recherche MIAT.
- participer à la rédaction de publications scientifiques en anglais, de la rédaction à l'expérimentation des algorithmes
- expérimenter et mettre en œuvre les algorithmes développés sur des problématiques de design moléculaire bien maîtrisées dans l'équipe MIAT.
- faire un reporting sur l'avancement des travaux.

Le PostDoc utilisera les moyens informatiques – plateforme et puissance de calcul mis à disposition à INRAE MIAT et sur le serveur CALMIP d'ANITI.

CONNAISSANCES ET COMPÉTENCES

- Connaissances en optimisation discrète, programmation par contraintes ou programmation mathématique.
- Expérience en développement logiciel C++ : conception, développement, git,...
- Requis: Aptitudes au travail en équipe, bon relationnel
- Très apprécié: Rigueur et sens de l'organisation
- Apprécié: Maîtrise de l'anglais
- Environnement technique : C++ sous linux.

CONDITIONS PRATIQUES

Durée d'un an.

Encadrement : Simon de Givry / Thomas Schiex

Temps plein – horaires en journée - Télétravail possible

Localisation géographique : **INRAE MIAT, 24 chemin de Borde Rouge, 31326 Castanet-Tolosan / B612 - ANITI - 3 Rue Tarfaya, 31400 Toulouse**

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- B. Hurley, B. O'Sullivan, D. Allouche, G. Katsirelos, T. Schiex, M. Zytnicki and S. de Givry. Multi-Languages Evaluation of Exact Solvers in Graphical Model Discrete Optimization. Proc. of CPAIOR 2016, Banff, Canada.
- MC. Cooper, S. de Givry, M. Sanchez, T. Schiex, M. Zytnicki, T. Werner. Soft Arc Consistency Revisited. Artificial Intelligence, 2010.
- Beldjilali, A., Montalbano, P., Allouche, D., Katsirelos, G., & De Givry, S. (2022, July). Parallel Hybrid Best-First Search. In The 28th International Conference on Principles and Practice of Constraint Programming.
- Allouche, D., André, I., Barbe, S., Davies, J., de Givry, S., Katsirelos, G., ... & Traoré, S. (2014). Computational protein design as an optimization problem. Artificial Intelligence, 212, 59-79.
- Ruffini, Manon, Jelena Vucinic, Simon de Givry, George Katsirelos, Sophie Barbe, and Thomas Schiex. "Guaranteed diversity and optimality in cost function network based computational protein design methods." Algorithms 14, no. 6 (2021): 168.
- Martin C. Cooper, Simon de Givry, Thomas Schiex. Graphical Models: Queries, Complexity, Algorithms. Proc. STACS'2020, Montpellier, France, 2020.
- Rahman, Tahrira and Rouhani, Sara and Gogate, Vibhav. Novel Upper Bounds for the Constrained Most Probable Explanation Task. Proc. of NeurIPS 2021, 9613-9624.