# Exemples de problèmes d'optimisation en apprentissage automatique

Quadratique convexe

Dérivable convexe

Convexe non-dérivable

Convexe avec contraintes

Non-convexe dérivable

Non-convexe non dérivable

Combinatoire



### Moindres carrés

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^{\top} \beta + \varepsilon_i$ 

 $x_i$ : variables explicatives pour l'observation i

 $\beta$  : vecteur des paramètres du modèle

 $\varepsilon_i$ : bruit

Problème d'optimisation

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p}} \frac{1}{2} \|X\beta - y\|_{2}^{2} = \min_{\beta \in \mathbb{R}^{p}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_{i}^{\top}\beta - y_{i})^{2}$$

$$X \in \mathbb{R}^{n \times p}, y \in \mathbb{R}^n$$



## Régularisation de Tikhonov (ridge regression)

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^{\top} \beta + \varepsilon_i$ On veut forcer  $\beta$  à ne pas avoir des coefficients immenses

Problème d'optimisation

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{p}} \frac{1}{2} \| X \beta - y \|_{2}^{2} + \frac{\lambda}{2} \| \beta \|_{2}^{2}$$

$$X \in \mathbb{R}^{n \times p}, y \in \mathbb{R}^n, \lambda > 0$$



## Régression logistique

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^\top w + w_0 + \varepsilon_i$ 

Classification :  $y_i \in \{-1, 1\}$ 

Classifieur:

$$h: x \mapsto \operatorname{sign}(\langle x, w \rangle + w_0) \qquad (w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R})$$

Problème d'optimisation

$$\min_{w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log(1 + \exp(-y_i(x_i^\top w + w_0))) + \frac{\lambda}{2} ||w||^2$$



#### Lasso

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^{\top} \beta + \varepsilon_i$ On veut un vecteur de paramètre  $\beta$  parcimonieux (beaucoup de coefficients égaux à 0)

Problème d'optimisation

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|X\beta - y\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_1$$

$$X \in \mathbb{R}^{n \times p}, y \in \mathbb{R}^n, \lambda > 0$$
  
 $\|\beta\|_1 = \sum_{i=1}^p |\beta_i|$  pas dérivable mais séparable



## Séparateurs à Vaste Marge (SVM)

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^\top w + w_0 + \varepsilon_i$ 

Classification :  $y_i \in \{-1, 1\}$ 

Classifieur:

$$h: x \mapsto \operatorname{sign}(\langle x, w \rangle + w_0) \qquad (w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R})$$

Problème d'optimisation

$$\min_{w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n C \max(0, 1 - y_i(x_i^\top w_i + w_0)) + \frac{1}{2} ||w||^2$$



#### SVM dual

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^\top w + w_0 + \varepsilon_i$ 

Classification :  $y_i \in \{-1, 1\}$ 

Problème d'optimisation

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \sum_{j=1}^p (\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i X_{i,j})^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i$$
$$0 \le \alpha_i \le C, \forall i, \qquad \sum_{i=1}^n y_i \alpha_i = 0$$

$$w_j = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i X_{i,j}$$



#### Réseaux de neurones

Modèle non-linéaire :  $y_i = f(x_i, w) + \varepsilon_i$ 

Exemple : 1 couche cachée avec H neurones

$$f(x, w) = \sigma\left(\sum_{i=1}^{H} w_i v_i \left(\sum_{i=j}^{p} w_{i,j} x_j\right)\right)$$

 $\sigma, v_1, \dots, v_H$  sont appelées fonctions d'activation

Problème d'optimisation

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{H+Hp}} \sum_{i=1}^{n} \|y_i - f(x_i, w)\|^2$$



#### **ACP et NMF**

A matrice de taille  $n \times p$  ACP :

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times k}, V \in \mathbb{R}^{k \times p}} \|A - UV\|_F^2$$

NMF:

$$\min_{U \in \mathbb{R}^{n \times k}, V \in \mathbb{R}^{k \times p}} ||A - UV||_F^2$$

$$U_{i,j} \ge 0, V_{j,l} \ge 0$$



#### 0-1 Loss

Modèle linéaire :  $y_i = x_i^\top w + w_0 + \varepsilon_i$ 

Classification :  $y_i \in \{-1, 1\}$ 

Classifieur:

$$h: x \mapsto \operatorname{sign}(\langle x, w \rangle + w_0) \qquad (w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R})$$

Problème d'optimisation

$$\min_{w \in \mathbb{R}^p, w_0 \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n \mathbb{1}(y_i(x_i^\top w + w_0) < 0)$$



### K plus proches voisins

 $x_0$  fixé, on cherche les K plus proches voisin de  $x_0$ 

$$\min_{s \in \mathbb{Z}^n} \sum_{i=1}^n s_i ||x_0 - x_i||$$
$$0 \le s_i \le 1, \forall i$$
$$\sum_{i=1}^n s_i = K$$



#### K-means

On cherche à partitionner les points  $(x_j)_{1 \le j \le n}$  en K ensembles  $S_1, \dots S_K$ 

$$\min_{S_1,...,S_K} \sum_{k=1}^K \sum_{x_j \in S_i} ||x_j - \mu_k||^2$$

$$\mu_k = \frac{1}{|S_k|} \sum_{x_j \in S_i} x_j, \forall k$$

$$S_j \cap S_i = \emptyset, \forall i, j$$

$$S_1 \cup \dots S_K = \{1, \dots, n\}$$

