Problème n°2
Optimisation sur le simplexe

⋆ Exercice 1 – Simplexe

Mots-clefs : Ensembles convexes

Soit $n \in \mathbb{N}^*$. On appelle *simplexe* l'ensemble suivant :

$$\Sigma_n = \left\{ x \in (\mathbb{R}^+)^n \mid \|x\|_1 = 1 \right\}$$

(a) Représenter graphiquement Σ_1 et Σ_2.

(b) Montrer que Σ_n est un ensemble convexe pour tout $n \in \mathbb{N}^*$.

⋆⋆ Exercice 2 – Projection sur le simplexe

Mots-clefs : Projection sur un convexe • Qualification de contraintes • Conditions KKT

*On reprend les notations de l'**Exercice 1**.*

(a) Justifier que la projection sur Σ_n existe et est unique.

(b) Soit $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Écrire le problème de la projection de x^0 sur Σ_n comme un problème d'optimisation lisse sous contraintes différentiables qualifiées.

(c) Écrire le lagrangien associé à ce problème puis les conditions d'optimalité de Karush–Kuhn–Tucker. S'agit-il de conditions nécessaires ? suffisantes ?

(d) Déterminer $\mathrm{proj}_{\Sigma_n}(x^0)$. *On pourra commencer par étudier le cas $n = 2$.*

⋆⋆ Exercice 3 – Pseudo-distances de Bregman

Mots-clefs : Fonctions convexes • Sous-différentiabilité

Soit $\mathcal{X}$ un espace de Hilbert. Soit $b : \mathcal{X} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction strictement convexe, différentiable sur $\mathrm{int}(\mathrm{dom}\, b)$. On appelle *pseudo-distance de* Bregman *associée à* b la fonction définie par

$$\forall\,(x,y) \in \mathcal{X}^2, \qquad D_b(x,y) := \begin{cases} b(x) - b(y) - \langle \nabla b(y), x-y \rangle & \text{si } (x,y) \in \mathrm{dom}\, b \times \mathrm{int}(\mathrm{dom}\, b) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

(a) Montrer que $D_b(x,y) \geq 0$ pour tout $(x,y) \in \mathrm{dom}\, b \times \mathrm{int}(\mathrm{dom}\, b)$, que $D_b(x,y) > 0$ si $x \neq y$ et que $D_b(x,x) = 0$. Est-ce que D_b définit une distance ?

(b) Soit $n \in \mathbb{N}^*$ et $M \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive. On considère la fonction définie par

$$\forall\, x \in \mathbb{R}^n, \qquad b(x) = \frac{1}{2}\,\|x\|_M^2 = \langle M\,x, x \rangle$$

Montrer que

$$\forall\, x,y \in \mathbb{R}^n, \qquad D_b(x,y) = \frac{1}{2}\,\|x-y\|_M^2$$

(c) Soit $n \in \mathbb{N}^*$. On adopte la convention $0 \ln 0 = 0$ et on considère la fonction définie sur $\mathbb{R}^n$ par

$$\forall\, x \in \mathbb{R}^n, \qquad b(x) = \begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^n x_i \ln x_i & \text{si } x \in \Sigma_n \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Calculer D_b.

> Cette fonction b est connue sous le nom d'*entropie de* Shannon. Si $n = 1$, alors la pseudo-distance de Bregman associée est aussi appelée *distance de* Kullback–Leibler.

(d) Soit $y \in \mathcal{X}$ fixé. Montrer que $x \mapsto D_b(x,y)$ est une fonction strictement convexe sous-différentiable, différentiable à l'intérieur de son domaine. Quel est son domaine ? Calculer son gradient partout où il existe.

(e) Soit $(x,y,z) \in \operatorname{dom} b \times \operatorname{int}(\operatorname{dom} b) \times \operatorname{int}(\operatorname{dom} b)$. Montrer que

$$D_b(x,y) + D_b(x,z) + D_b(y,z) = \langle \nabla b(z) - \nabla b(y), x - y \rangle$$

(f) En déduire que

$$\forall\, (x,y) \in \operatorname{int}(\operatorname{dom} b) \times \operatorname{int}(\operatorname{dom} b), \qquad D_b(x,y) + D_b(y,x) = \langle \nabla b(x) - \nabla b(y), x - y \rangle$$

et que, si b est fortement convexe de module α, alors

$$\forall\, (x,y) \in \operatorname{int}(\operatorname{dom} b) \times \operatorname{int}(\operatorname{dom} b), \qquad D_b(x,y) + D_b(y,x) \geq \alpha \, \|x - y\|^2$$

> Cette dernière propriété permet généralement de remplacer la distance euclidienne quadratique par une pseudo-distance de Bregman dans les algorithmes de type proximal (comme par exemple la méthode du gradient projeté, voir **Exercice 4** et suivants) et dans leurs preuves de convergence. On verra dans l'**Exercice 6** l'intérêt qu'une telle substitution peut revêtir.

⋆ Exercice 4 – Opérateur de Moreau généralisé

Mots-clefs : Fonctions convexes • Opérateur proximal

*On reprend les notations de l'**Exercice 1** et de l'**Exercice 3**.* Soit $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction convexe. Soit $x^0 \in \operatorname{int}(\operatorname{dom} b)$. On s'intéresse au problème d'optimisation suivant :

$$\min_{x \in \mathcal{X}} f(x) + D_b(x, x^0) \tag{$\mathcal{P}_1$}$$

(a) Lorsque $b = \|\cdot\|^2/2$, à quoi correspondent les solutions de $(\mathcal{P}_1)$?

(b) Justifier que $(\mathcal{P}_1)$ admet au plus une solution.

(c) Montrer que si b est fortement convexe, alors $(\mathcal{P}_1)$ admet exactement une solution.

(d) Montrer que la solution de $(\mathcal{P}_1)$, si elle existe, appartient à l'ensemble $\operatorname{dom} f \cap \operatorname{dom} b$.

(e) Montrer que si b et f ont un domaine fermé d'intersection non vide, alors $(\mathcal{P}_1)$ admet exactement une solution.

(f) Comment peut-on interpréter l'éventuelle solution du problème $(\mathcal{P}_1)$ lors que f est la fonction indicatrice d'un ensemble convexe fermé non vide $\mathcal{C}$?

⋆⋆ Exercice 5 – Application : Gradient projeté avec une métrique non euclidienne

Mots-clefs : Projection sur un convexe • Forward-Backward Splitting • Opérateur proximal

*On reprend les notations de l'**Exercice 1**, de l'**Exercice 3** et de l'**Exercice 4**.* Soit $\mathcal{C} \subset \mathcal{X}$ un ensemble convexe fermé non vide et $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction convexe différentiable sur un ouvert contenant $\mathcal{C}$. On s'intéresse au problème d'optimisation suivant :

$$\min_{x \in \mathcal{C}} f(x)$$

On rappelle les itérations de la méthode du gradient projeté pour la résolution de ce problème :

$$x_0 \in \mathcal{C} \qquad \text{et} \qquad \forall\, k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = \mathrm{proj}_{\mathcal{C}}(x_k - \tau\, \nabla f(x_k))$$

(a) Montrer que les itérations de la méthode du gradient projeté peuvent se réécrire

$$x_0 \in \mathcal{C} \qquad \text{et} \qquad \forall\, k \in \mathbb{N}, \quad x_{k+1} = \arg\min_{x \in \mathcal{C}} \left\{ \langle x, \nabla f(x_k) \rangle + \frac{1}{2\,\tau} \|x - x_k\|^2 \right\}$$

> On reconnaît l'opérateur proximal associé à la fonction $x \mapsto \tau\, \langle x, \nabla f(x_k) \rangle$.

On cherche à généraliser l'algorithme du gradient projeté à une métrique non euclidienne. Pour cela, on a deux possibilités : remplacer la métrique euclidienne par une pseudo-distance de Bregman dans la projection (variante I) :

$$x_{k+1} = \arg\min_{x \in \mathcal{C}} \left\{ \frac{1}{\tau}\, D_b(x, x_k - \tau\, \nabla f(x_k)) \right\}$$

ou dans l'opérateur de Moreau (variante II) :

$$x_{k+1} = \arg\min_{x \in \mathcal{C}} \left\{ \langle x, \nabla f(x_k) \rangle + \frac{1}{\tau}\, D_b(x, x_k) \right\}$$

(b) Obtient-on le même algorithme ? Comparer en particulier les hypothèses d'application des deux algorithmes considérés et les conditions sur les pas de temps.

> Il s'agit d'un aspect récurrent lorsque l'on généralise des concepts ou des démarches à une classe d'objets plus large : il est généralement difficile de conserver dans la généralisation toutes les propriétés initiales. Ainsi, dans le cas de la métrique euclidienne, les deux algorithmes proposés dans la question (b) sont rigoureusement équivalents ; ce n'est plus le cas lorsque la métrique n'est plus euclidienne. Suivant les besoins, il peut alors être plus intéressant de considérer l'une ou l'autre de deux généralisations possibles de l'algorithme du gradient projeté.

⋆⋆⋆ Exercice 6 – Application : Optimisation sur le simplexe

Mots-clefs : Conditions KKT

*On reprend les notations de l'**Exercice 1**, de l'**Exercice 3** et de l'**Exercice 4**.* Soit $n \in \mathbb{N}^*$ et $b \in \mathbb{R}^n$. On s'intéresse au problème d'optimisation suivant :

$$\min_{x \in \Sigma_n} \langle b, x \rangle \tag{$\mathcal{P}_2$}$$

(a) Résoudre exactement le problème $(\mathcal{P}_2)$.

(b) Écrire l'algorithme du gradient projeté pour la résolution du problème $(\mathcal{P}_2)$. On réécrira la n-ème itération de cet algorithme sous la forme d'un problème d'optimisation sous contraintes $(\mathcal{P}_n)$.

(c) Écrire le lagrangien associé au problème $(\mathcal{P}_n)$. Justifier que les contraintes sont qualifiées.

(d) Écrire les conditions de KARUSH-KUSH-TUCKER pour ce problème. Résoudre le système obtenu et en déduire les solutions du problème $(\mathcal{P}_n)$.

On souhaite à présent appliquer la variante II de la méthode du gradient projeté, avec une métrique non euclidienne, telle que proposée dans l'**Exercice 5**. Pour cela, on choisit pour b l'entropie de SHANNON (voir **Exercice 3**).

(e) Écrire la n-ème itération de cet algorithme sous la forme d'un problème d'optimisation $(\mathcal{P}'_n)$.

(f) Écrire les conditions de KARUSH-KUSH-TUCKER pour ce problème. Résoudre le système obtenu et en déduire les solutions du problème $(\mathcal{P}'_n)$.

(g) Comparer le coût computationnel des deux algorithmes considérés dans cet exercice.

> La variante proposée est bien moins coûteuse en calculs que la méthode du gradient projeté. Cependant, il faut garder en tête que, pour pouvoir remplacer raisonnablement la méthode initiale par sa variante, il faut tout d'abord démontrer la convergence de la variante. Ensuite, même si chaque itération est plus efficace dans la variante, il n'est pas acquis que la vitesse de convergence globale (le nombre d'itérations nécessaire pour satisfaire un critère d'arrêt choisi) soit nécessairement meilleure pour la variante. En l'absence de preuve théorique, c'est souvent empiriquement que l'on se prononcera en faveur de l'une ou l'autre méthode.

⋆⋆⋆ Exercice 7 – Application : Préconditionnement

Mots-clefs : Fonctions convexes • Opérateur proximal • Règle de FERMAT

*On reprend les notations de l'**Exercice 1**, de l'**Exercice 3** et de l'**Exercice 4**.* Soit $n \in \mathbb{N}^*$ et $M \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive. On pose

$$\forall\, x, y \in \mathbb{R}^n, \qquad \langle x, y\rangle_M := \langle M\, x, y\rangle$$

(a) Montrer que $\langle\cdot,\cdot\rangle_M$ définit un produit scalaire. On note $\|\cdot\|_M$ la norme issue de ce produit scalaire.

(b) Montrer que $\|\cdot\|_M$ est une fonction strictement convexe.

Soit $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction convexe. Soit $x^0 \in \mathbb{R}^n$. On considère l'ensemble suivant :

$$\underset{x\in\mathbb{R}^n}{\arg\min} \left\{ f(x) + \frac{1}{2}\, \|x - x^0\|_M^2 \right\}$$

(c) Montrer que cet ensemble contient exactement un élément.

(d) Montrer que l'unique élément x^+ de cet ensemble est caractérisé par la relation

$$0 \in \partial f(x^+) + M\,(x^+ - x^0)$$

Justifier ainsi la notation

$$(\mathrm{I} + M^{-1}\partial f)^{-1}(x^0) = \underset{x\in\mathbb{R}^n}{\arg\min} \left\{ f(x) + \frac{1}{2}\, \|x - x^0\|_M^2 \right\}$$

(e) Supposons que f est une fonction séparable en chacune des coordonnées de la variable x, c'est-à-dire que

$$\forall\, x = (x_{(i)})_{1\le i\le n} \in \mathbb{R}^n, \qquad f(x) = f_1(x_{(1)}) + \cdots + f_n(x_{(n)})$$

Montrer que, si M est une matrice diagonale, de diagonale $(m_1, \ldots, m_n) \in \mathbb{R}^n$ avec $m_i > 0$ pour tout $i \in [\![\, 1\,;\, n\,]\!]$, alors

$$(\mathrm{I} + M^{-1}\partial f)^{-1}(x^0) = \left\{ \left(\mathrm{prox}_{f_i/m_i}(x^0_{(i)}) \right) \right\}_{1\le i\le n}$$

Quel intérêt se dégage de cette observation ?

Dans le cas séparable, on voit que l'utilisation d'un préconditionneur M pour un algorithme de type proximal permet d'adapter le pas de temps dans chaque direction (ainsi, si f_i est très régulière, alors on peut choisir un pas de temps plus grand dans la direction associée). Évidemment, dans le cas de la minimisation d'une fonction séparable, il aurait simplement suffi de considérer indépendamment chaque composante séparable du problème. L'intérêt de l'introduction du préconditionnement se révèle dans des problèmes composites de la forme

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(A\,x)$$

dans lesquels la présence de l'opérateur linéaire A ne permet plus d'exploiter immédiatement la séparabilité de f. Il est en revanche possible, en recourant à la dualité de Fenchel, de revenir à une formulation dans laquelle la séparabilité de f est à nouveau exploitable.

Pour aller plus loin

Pseudo-distances de Bregman : Lev M. Bregman, *The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming.* USSR computational mathematics and mathematical physics, 1967.

Gradient projeté avec une métrique non euclidienne : Amir Beck and Marc Teboulle. *Mirror descent and nonlinear projected subgradient methods for convex optimization.* Operations Research Letters, 2003.

Préconditionnement : Thomas Pock and Antonin Chambolle. *Diagonal preconditioning for first order primal-dual algorithms in convex optimization.* In 2011 International Conference on Computer Vision. IEEE, 2011.