Optimisation-RO

Clément Royer

Certificat Chef de Projet IA - Université Paris Dauphine-PSL

11 octobre 2022

Intervenants

Clément Royer

- Maître de conférences @ Dauphine-PSL;
- Chaire tremplin en optimisation @ PRAIRIE;
- clement.royer@lamsade.dauphine.fr

Florentin Goyens

- Chercheur post-doctorant @ Dauphine-PSL;
- Membre junior optimisation @ PRAIRIE;
- florentin.goyens@dauphine.psl.eu

Informations utiles

En attendant Moodle/EduSign

https://github.com/clementwroyer/opt-ro-psl

- Transparents de cours;
- Matériel illustratif (notebooks Python).

Déroulé de la formation

- Mardi 11/10 après-midi (C. Royer) : Bases de l'optimisation et convexité;
- Mercredi 12/10 matin (C. Royer) : Optimisation non convexe;
- Mercredi 12/10 après-midi (F. Goyens) : Gradient stochastique;
- Jeudi 13/10 matin (C. Royer) : Optimisation sans dérivées;
- Jeudi 13/10 après-midi (F. Goyens) : Optimisation à grande échelle.

Pour la séance de ce matin

1. Introduction
2. Concepts de base en optimisation
3. Optimisation convexe

Table des matières

Terminologie

Ce dont tout le monde parle

- Sciences des données (data science);
- Analyse de données (data analysis);
- Fouille de données (data mining);
- Apprentissage machine/profond (machine/deep learning);
- Intelligence artificielle (IA);
- Big Data;
- ...

Terminologie

Ce dont tout le monde parle

- Sciences des données (data science);
- Analyse de données (data analysis);
- Fouille de données (data mining);
- Apprentissage machine/profond (machine/deep learning);
- Intelligence artificielle (IA);
- Big Data;
- ...

Ce dont nous allons parler

- Optimisation pour la science des données en général...
- ...et pour l'IA en particulier (ou vice-versa).

Ce que sera l'IA pour nous

Un ensemble de problèmes basés sur des données

- Extraction d'information à partir de la donnée : *statistiques*, *attributs principaux*, *structures*;
- Utilisation de cette information pour la prédiction du comportement de données futures.

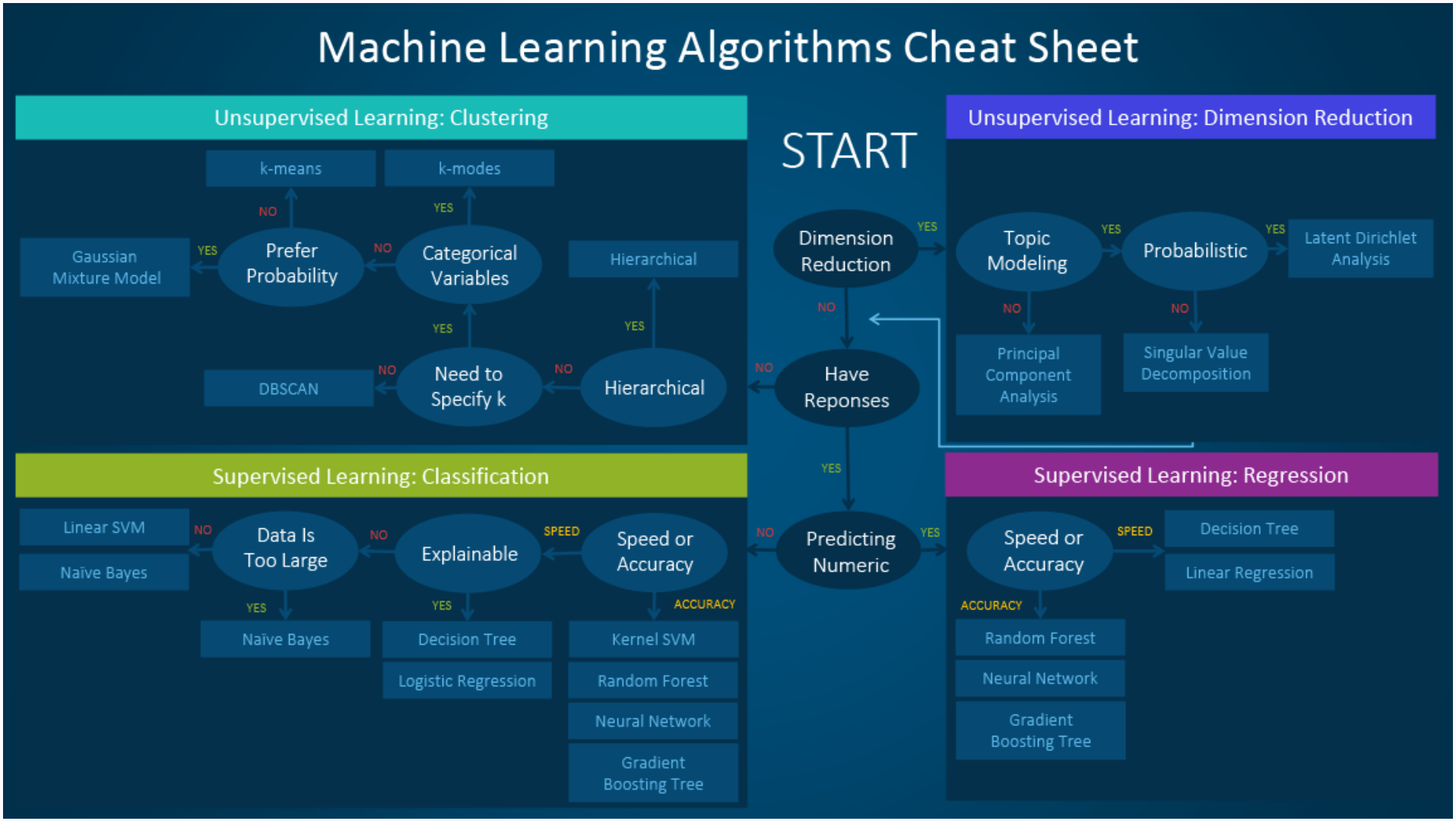
Ce que sera l'IA pour nous

Un ensemble de problèmes basés sur des données

- Extraction d'information à partir de la donnée : *statistiques*, *attributs principaux*, *structures*;
- Utilisation de cette information pour la prédiction du comportement de données futures.

Composantes de l'IA/de la science des données

- Statistiques;
- Informatique (gestion de la donnée, calcul parallèle, etc);
- **Optimisation** pour la modélisation des problèmes et leur résolution par des algorithmes.



Source : https://blogs.sas.com/content/subconsciousmusings/2017/04/12/ machine-learning-algorithm-use/

Changement de paradigme

Optimisation numérique

- Montée en puissance en 1970-1980;
- Succès des algorithmes en ingénierie (chimique, aéronautique, etc).
- *Pratique standard en calcul scientifique:* utiliser une méthode de points intérieurs (basée sur Newton, développée dans les années 2000s).

Changement de paradigme

Optimisation numérique

- Montée en puissance en 1970-1980;
- Succès des algorithmes en ingénierie (chimique, aéronautique, etc).
- *Pratique standard en calcul scientifique:* utiliser une méthode de points intérieurs (basée sur Newton, développée dans les années 2000s).

Optimisation pour l'IA

- Problèmes basés sur de grands volumes de données;
- Les méthodes standard en optimisation ne sont pas les plus efficaces!

Pratique classique en IA: Utiliser une approche de gradient stochastique avec momentum (1950s + article théorique de 1983).

Les changements

Contexte de données massives/Big Data

- Les calculs usuels (fonction, dérivées) sont très coûteux car ils accèdent à **toute la donnée**.
- La précision souhaitée n'est pas forcément très grande en raison du bruit sur les données.

Les changements

Contexte de données massives/Big Data

- Les calculs usuels (fonction, dérivées) sont très coûteux car ils accèdent à **toute la donnée**.
- La précision souhaitée n'est pas forcément très grande en raison du bruit sur les données.

Communauté de l'IA

- Le problème d'optimisation est souvent un moyen plus qu'une fin;
- Propriétés statistiques des solutions;
- Théorie et pratique différentes de la communauté d'optimisation "classique".

Table des matières

Problème d'apprentissage statistique

Point de départ : Jeu de données $\{(\boldsymbol{x}_1, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$.

- $\boldsymbol{x}_i$ vecteur d'attributs à d coordonnées;
- y_i label binaire égal à 1 ou -1.

Problème d'apprentissage statistique

Point de départ : Jeu de données $\{(\boldsymbol{x}_1, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_n, y_n)\}$.

- $\boldsymbol{x}_i$ vecteur d'attributs à d coordonnées;
- y_i label binaire égal à 1 ou -1.

Exemple : classification de documents

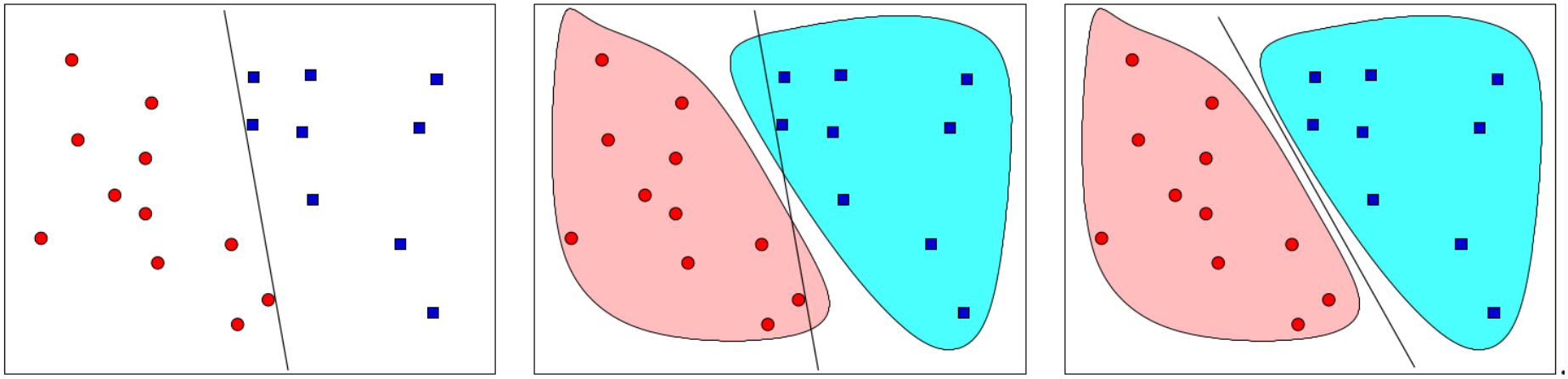
Soit un dictionnaire de d mots.

- $\boldsymbol{x}_i$ représente les mots contenus dans le document i:

$$[\boldsymbol{x}_i]_j = \begin{cases} 1 & \text{si le mot } j \text{ est dans le document } i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

- y_i égal à $+1$ si le document traite de l'automobile, à -1 sinon.

Différentes solutions



Source : S. J. Wright, Optimization Algorithms for Data Analysis, 2018.

- Points : $\boldsymbol{x}_i$, rouges/bleus : $y_i = 1/y_i = -1$;
- Nuages rouges/bleus : distribution des documents;
- Deux techniques de classification linéaires;
- Figure de droite : solution à marge maximale (SVM).

Deux points de vue sur le problème

Optimiseur

- Le problème peut être modélisé comme un programme quadratique convexe, et résolu de manière efficace;
- Potentiellement plusieurs solutions.

Deux points de vue sur le problème

Optimiseur

- Le problème peut être modélisé comme un programme quadratique convexe, et résolu de manière efficace;
- Potentiellement plusieurs solutions.

Applicatif

- Le modèle doit s'appliquer à tous les documents de la distribution $\Rightarrow$ généralisation;
- Mieux d'avoir une unique solution bien définie, qui ne varie pas trop par rapport aux données.

Deux points de vue sur le problème

Optimiseur

- Le problème peut être modélisé comme un programme quadratique convexe, et résolu de manière efficace;
- Potentiellement plusieurs solutions.

Applicatif

- Le modèle doit s'appliquer à tous les documents de la distribution $\Rightarrow$ généralisation;
- Mieux d'avoir une unique solution bien définie, qui ne varie pas trop par rapport aux données.

Après discussion (data scientist?)

- Prise en compte de certaines problématiques dans la formulation du problème $\Rightarrow$ Solution unique avec meilleure généralisation.
- Plus de connaissances sur le problème $\Rightarrow$ Meilleure optimisation.

Bilan de l'exemple

- Possible de définir des problèmes d'optimisation basés sur des données et de les résoudre efficacement;
- Potentiellement décorrélé du but originel : trouver un modèle sur la distribution des données.

Bilan de l'exemple

- Possible de définir des problèmes d'optimisation basés sur des données et de les résoudre efficacement;
- Potentiellement décorrélé du but originel : trouver un modèle sur la distribution des données.

Autres problématiques

- Quantité massive d'attributs *(tous les mots du dictionnaire)* ?
- Quantité massive de données *(articles Wikipedia)* ?
- Classification impossible par modèles linéaires ?

Bilan de l'exemple

- Possible de définir des problèmes d'optimisation basés sur des données et de les résoudre efficacement;
- Potentiellement décorrélé du but originel : trouver un modèle sur la distribution des données.

Autres problématiques

- Quantité massive d'attributs *(tous les mots du dictionnaire)* ?
  Réduction de dimension, recherche de parcimonie.
- Quantité massive de données *(articles Wikipedia)* ?
  Algorithmes stochastiques.
- Classification impossible par modèles linéaires ?
  Optimisation non linéaire.

Objectifs du cours

- Fournir une boîte à outils moderne en optimisation;
- En lien avec la pratique courante en IA et sciences des données.

Procédure

- Présenter des problématiques et des algorithmes associés;
- Les fondements théoriques;
- Des applications.

Table des matières

Table des matières

Notations

Cadre restreint

- Optimisation sur des variables réelles;
- En dimension finie;
- On utilisera la structure d'espace classique.

Mes notations pour aujourd'hui

- Scalaires : $a, b, c, \ldots$
- Vecteurs : $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}, \ldots$
- Matrices : $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}, \ldots$
- Ensembles : $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \ldots$

- $\mathbb{R}^d$: ensemble des vecteurs à $d \geq 1$ coordonnées réelles;
- Pour tous $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ et $i \in \{1, \ldots, d\}$, $x_i \in \mathbb{R}$ est la i-ème coordonnée de $\boldsymbol{x}$: $\boldsymbol{x} = [x_i]_{1 \leq i \leq d}$;
- On représente $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ en colonnes : $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix}$;
- On utilise des vecteurs lignes comme "transposés" de vecteurs colonnes : $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} := [x_1 \cdots x_d]$;

Opérations vectorielles

- *Addition dans* $\mathbb{R}^d$: $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z} := [x_i + z_i]_{1 \leq i \leq n}$;
- *Multiplication d'un vecteur de* $\mathbb{R}^n$ *par un réel :* $\lambda \boldsymbol{x} := [\lambda x_i]_{1 \leq i \leq n}$.

Norme euclidienne sur $\mathbb{R}^n$

La norme euclidienne (ou norme ℓ_2) d'un vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ est donnée par

$$\|\boldsymbol{x}\| := \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}.$$

Produit scalaire sur $\mathbb{R}^n$

Pour tous $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$, défini par

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z} := \sum_{i=1}^{n} x_i \, z_i.$$

On a ainsi $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}$ et $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|^2$.

Matrices

- $\mathbb{R}^{n\times m}$: matrices à n lignes et m colonnes;
- $\mathbb{R}^{n\times 1} \simeq \mathbb{R}^n$.

Matrice transposée

Soit $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{A}_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times m}$. La *matrice transposée de* $\boldsymbol{A}$, notée $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$, est la matrice à d lignes et n colonnes telle que

$$\forall i = 1, \ldots, n,\ \forall j = 1, \ldots, m, \qquad \left[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right]_{ij} = \boldsymbol{A}_{ji}.$$

Matrices

- $\mathbb{R}^{n\times m}$: matrices à n lignes et m colonnes;
- $\mathbb{R}^{n\times 1} \simeq \mathbb{R}^n$.

Matrice transposée

Soit $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{A}_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times m}$. La *matrice transposée de* $\boldsymbol{A}$, notée $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$, est la matrice à d lignes et n colonnes telle que

$$\forall i = 1, \ldots, n, \ \forall j = 1, \ldots, m, \qquad \left[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right]_{ij} = \boldsymbol{A}_{ji}.$$

Matrices carrées

- $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$;
- $\boldsymbol{A}$ est dite *symétrique* si $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$.

Inversion et singularité

- Une matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est dite *inversible* s'il existe $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n \times,}$ telle que $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{AB} = \mathrm{I}_n$, avec I_n matrice identité de $\mathbb{R}^{n \times n}$.
  Dans ce cas, $\boldsymbol{B}$ est l'unique matrice vérifiant cette propriété : on l'appelle l'*inverse de la matrice* $\boldsymbol{A}$ et on la note $\boldsymbol{A}^{-1}$.

Inversion et singularité

- Une matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est dite *inversible* s'il existe $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n \times,}$ telle que $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{AB} = \mathrm{I}_n$, avec I_n matrice identité de $\mathbb{R}^{n \times n}$.
  Dans ce cas, $\boldsymbol{B}$ est l'unique matrice vérifiant cette propriété : on l'appelle l'*inverse de la matrice* $\boldsymbol{A}$ et on la note $\boldsymbol{A}^{-1}$.
- Une matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ est *singulière* s'il existe $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ non nul tel que $\boldsymbol{Ax} = 0$.
  Une matrice non singulière est dite *de rang plein* $\min\{m, n\}$.

Inversion et singularité

- Une matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est dite *inversible* s'il existe $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n \times,}$ telle que $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{AB} = \mathrm{I}_n$, avec I_n matrice identité de $\mathbb{R}^{n \times n}$.
  Dans ce cas, $\boldsymbol{B}$ est l'unique matrice vérifiant cette propriété : on l'appelle l'*inverse de la matrice* $\boldsymbol{A}$ et on la note $\boldsymbol{A}^{-1}$.
- Une matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ est *singulière* s'il existe $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ non nul tel que $\boldsymbol{Ax} = 0$.
  Une matrice non singulière est dite *de rang plein* $\min\{m, n\}$.

Caractère (semi)-défini positif

Une matrice symétrique $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est dite *semi-définie positive* si

$$\forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n, \quad \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{v} \geq 0.$$

Elle est *définie positive* lorsque $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{v} > 0$ pour tout vecteur $\boldsymbol{v}$ non nul.

Table des matières

Optimisation ?

- Recherche opérationnelle;
- Prise de décision;
- Sciences de la décision;
- Programmation mathématique;
- Optimisation mathématique.

$\Rightarrow$ Tous ces concepts peuvent correspondre à de l'optimisation.

Optimisation ?

- Recherche opérationnelle;
- Prise de décision;
- Sciences de la décision;
- Programmation mathématique;
- Optimisation mathématique.

$\Rightarrow$ Tous ces concepts peuvent correspondre à de l'optimisation.

Ma définition

Le but de l'optimisation est de prendre la meilleure décision parmi un ensemble de possibilités.

Du côté machine

Langages typiques des optimiseurs

- `C/C++/Fortran` (calcul à hautes performances)
- `Matlab, Python,Julia` (interprétés).

Du côté machine

Langages typiques des optimiseurs

- `C/C++/Fortran` (calcul à hautes performances)
- `Matlab, Python,Julia` (interprétés).

Langages de modélisation

- `GAMS, AMPL, CVX, Pyomo` sont génériques;
- `MATPOWER, PyTorch` sont spécifiques à un domaine;
- La plupart peuvent être interfacés avec les langages ci-dessus.

Du côté mathématique

Un **problème** de minimisation sur d paramètres réels s'écrit sous la forme :

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

Du côté mathématique

Un **problème** de minimisation sur d paramètres réels s'écrit sous la forme :

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- $\boldsymbol{x}$ representé les **variables de décision**, supposées continues;
- d est la dimension du problème (on prendra toujours $d \geq 1$);
- $f(\cdot)$ est la fonction objectif/de coût/de perte;
- $\mathcal{X}$ est l'ensemble réalisable/admissible regroupant les contraintes sur les variables de décision.

Du côté mathématique

Un **problème** de minimisation sur d paramètres réels s'écrit sous la forme :

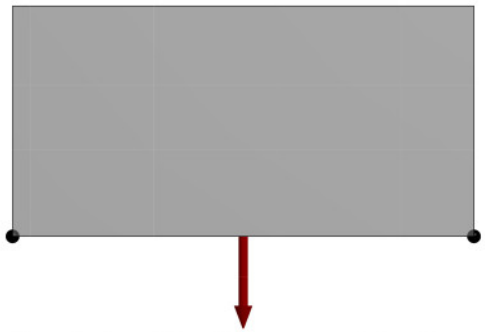
$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- $\boldsymbol{x}$ representé les **variables de décision**, supposées continues;
- d est la dimension du problème (on prendra toujours $d \geq 1$);
- $f(\cdot)$ est la fonction objectif/de coût/de perte;
- $\mathcal{X}$ est l'ensemble réalisable/admissible regroupant les contraintes sur les variables de décision.

Maximiser f revient à minimiser $-f$.

Exemple : Optimisation de charpente (Stolpe, 2017)

(a) *Design domain with dimensions* 2×1*, boundary conditions, and external load.*



(b) *Optimal design for the wheel problem for a ground structure with* 61×31 *nodes and* $1,786,995$ *potential bars.*

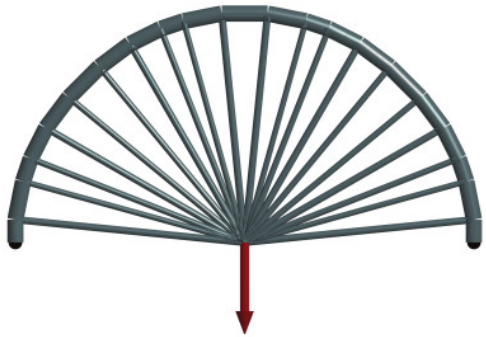


Figure 2.4. *Optimal design of (half) a wheel.*

Table 2.2. *Numerical results obtained by the primal simplex method in IBM ILOG CPLEX for the single-load truss topology design problems listed in Table* 2.1.

Problem	Number of nodes	Itn.	CPU (s)	Objective
Cantilever	41×11	71,823	10.6	22.5593
Cantilever	81×21	719,298	496.6	22.4726
Michell	31×21	199,292	48.9	9.0244
Michell	61×41	1,917,377	2335.6	9.0066
Wheel	21×11	38,906	3.9	3.1708
Wheel	41×21	700,623	230.2	3.1565
Wheel	61×31	3,097,263	2755.5	3.1499

Exemple : Optimisation multidisciplinaire (Martins, 2017)

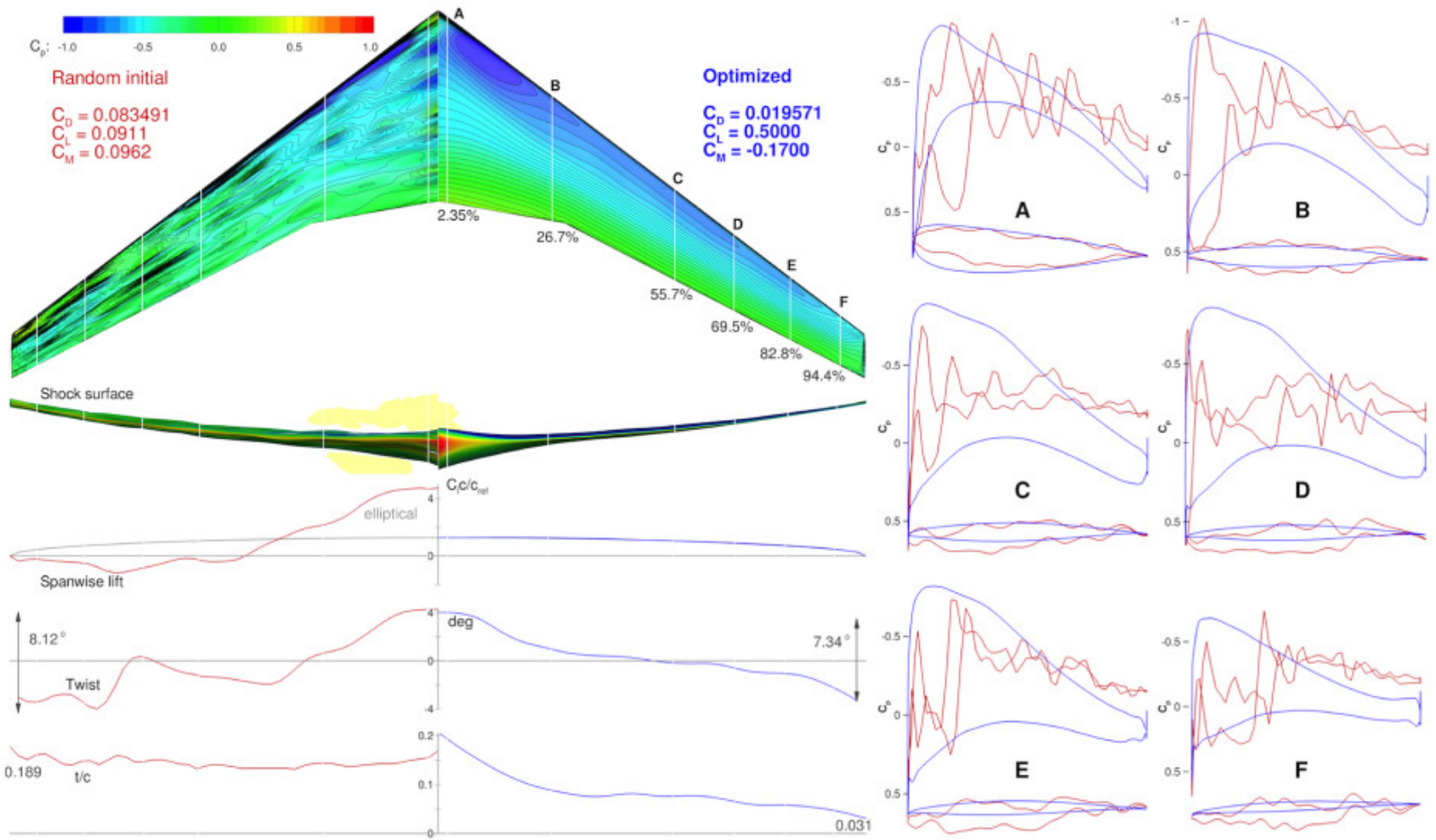


Figure 19.1. *The optimization starts from a random geometry (left/red) and converges to an optimal wing (right/blue). Originally appeared in* [1245] *and* [1053].

Premières définitions

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ est dit **admissible** ou **réalisable** si $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$.

Premières définitions

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ est dit **admissible** ou **réalisable** si $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$.
- $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^d$ est une **solution du problème** si

$$\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{X} \quad \text{et} \quad f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}^*)\ \forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}.$$

L'ensemble des solutions du problème est noté

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{argmin}} \left\{ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \right\}.$$

Premières définitions

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ est dit **admissible** ou **réalisable** si $\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$.
- $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^d$ est une **solution du problème** si

$$\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{X} \quad \text{et} \quad f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}^*)\ \forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}.$$

  L'ensemble des solutions du problème est noté

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{argmin}} \left\{ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \right\}.$$

- La **valeur optimale du problème** est notée

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \left\{ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X} \right\}.$$

Premières définitions (2)

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- Le problème est dit **irréalisable** si l'ensemble des contraintes est vide : $\mathcal{X} = \emptyset$. Dans ce cas, on a par convention

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\operatorname{argmin}} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = \emptyset \quad \text{et} \quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = +\infty.$$

  Si $\mathcal{X}$ n'est pas vide, le problème est dit réalisable.

Premières définitions (2)

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\, f(\boldsymbol{x}) \quad \text{s. c. } \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}$$

- Le problème est dit **irréalisable** si l'ensemble des contraintes est vide : $\mathcal{X} = \emptyset$. Dans ce cas, on a par convention

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\operatorname{argmin}} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = \emptyset \quad \text{et} \quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = +\infty.$$

  Si $\mathcal{X}$ n'est pas vide, le problème est dit réalisable.

- Le problème est dit **non borné** lorsque $\mathcal{X}$ est non vide mais que f n'est pas minorée sur $\mathcal{X}$. Dans ce cas, on note

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\operatorname{argmin}} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = \emptyset \quad \text{et} \quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{X}\} = -\infty.$$

  Pour un problème de minimisation (resp. de maximisation), on parlera de problème non minoré (resp. non majoré).

Table des matières

L'échelle Linderoth-Luedtke-Leyffer (2016)

Pour une classe de problèmes donnés, jusqu'à quelles dimensions suis-je prêt à vous parier qu'un solveur du marché résout votre problème ?

L'échelle Linderoth-Luedtke-Leyffer (2016)

Pour une classe de problèmes donnés, jusqu'à quelles dimensions suis-je prêt à vous parier qu'un solveur du marché résout votre problème ?

Classe de problème	Nb. variables
Programme linéaire	5×10^7
Programme quadratique convexe	5×10^5
Programme conique	5×10^4
Programme quadratique non convexe	300
Problème non convexe	100.

L'échelle Linderoth-Luedtke-Leyffer (2016)

Pour une classe de problèmes donnés, jusqu'à quelles dimensions suis-je prêt à vous parier qu'un solveur du marché résout votre problème ?

Classe de problème	Nb. variables
Programme linéaire	5×10^7
Programme quadratique convexe	5×10^5
Programme conique	5×10^4
Programme quadratique non convexe	300
Problème non convexe	100.

La **convexité** est une notion essentielle en optimisation !

Quels modèles d'optimisation

Idée principale : Les modèles les plus utilisés sont ceux dont on sait calculer des solutions **de manière efficace**.

Quels modèles d'optimisation

Idée principale : Les modèles les plus utilisés sont ceux dont on sait calculer des solutions **de manière efficace**.

Cas fondamental : Programmation convexe

- Minimiser une fonction f convexe :

$$\forall (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in (\mathbb{R}^d)^2, \forall \alpha \in [0,1], \quad f(\alpha \boldsymbol{x} + (1-\alpha)\boldsymbol{y}) \leq \alpha f(\boldsymbol{x}) + (1-\alpha) f(\boldsymbol{y})$$

- Sous contraintes convexes :

$$\forall (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathcal{X}^2, \forall \alpha \in [0,1], \quad \alpha \boldsymbol{x} + (1-\alpha)\boldsymbol{y} \in \mathcal{X}.$$

En général, possible de calculer efficacement des solutions, potentiellement pour des millions de variables !

Table des matières

Forme de base

$$\begin{cases} \text{minimiser}_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. c.} & g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0, \quad i = 1, \ldots, m \\ & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \quad i = 1, \ldots, \ell, \end{cases}$$

avec $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ convexe, $g_i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ convexe pour tout i et $h_i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ affine pour tout i.

Programmes linéaires (LP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} & \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ \text{s. c.} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq 0, \end{array}$$

avec $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^d$, $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times d}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$.

- Problème canonique en optimisation;
- Possible de résoudre des problèmes avec des millions/milliards de variables.

Exemple : Programmes quadratiques (QP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ \text{s. c.} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq 0, \end{array}$$

avec $\boldsymbol{H} \in \mathbb{R}^{d\times d}$, $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^d$, $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times d}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$.

- Extension du cas sans contraintes avec contraintes linéaires;
- Peut avoir une solution même si $\boldsymbol{H} \succeq 0$!

Exemples : Programmes coniques d'ordre deux (SOCP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d} & \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ \text{s. c.} & \|\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}_i\| \leq \boldsymbol{c}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+d_i, \quad i=1,\ldots,n. \end{array}$$

avec pour tout $i = 1, \ldots, m$, $\boldsymbol{A}_i \in \mathbb{R}^{n_i \times d}$, $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^{n_i}$, $\boldsymbol{c}_i \in \mathbb{R}^d$ et $d_i \in \mathbb{R}$.

- Généralisent LP et QP;
- Peuvent être résolus efficacement.

Exemples : Programmes semi-définis positifs (SDP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{d \times d}} & \operatorname{trace}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) \\ \text{s. c.} & \operatorname{trace}(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) = b_i, \quad i = 1, \ldots, n \\ & \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \succ 0, \end{array}$$

avec $\boldsymbol{C}, \boldsymbol{A}_1, \ldots, \boldsymbol{A}_n \in \mathbb{R}^{d \times d}$ et $\boldsymbol{b} = [b_i] \in \mathbb{R}^n$. [a]

[a] $\operatorname{trace}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}) = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} U_{ij} V_{ij}$.

- Généralisent LP et QP;
- Possible de les résoudre en temps polynomial, mais les calculs algébriques peuvent être coûteux;
- Problèmes souvent de grandes tailles (relaxations de problèmes continus ou combinatoires).

Exemples : Programmation conique (CP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{d \times d}} & \text{trace}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) \\ \text{s. c.} & \text{trace}(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) = b_i, \quad i = 1, \ldots, n \\ & \boldsymbol{X} \in \mathcal{K}, \end{array}$$

où $\boldsymbol{C}, \boldsymbol{A}_1, \ldots, \boldsymbol{A}_n \in \mathbb{R}^{d \times d}$, $\boldsymbol{b} = [b_i] \in \mathbb{R}^n$.

Exemples : Programmation conique (CP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{d \times d}} & \text{trace}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) \\ \text{s. c.} & \text{trace}(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) = b_i, \quad i = 1, \ldots, n \\ & \boldsymbol{X} \in \mathcal{K}, \end{array}$$

où $\boldsymbol{C}, \boldsymbol{A}_1, \ldots, \boldsymbol{A}_n \in \mathbb{R}^{d \times d}$, $\boldsymbol{b} = [b_i] \in \mathbb{R}^n$.
L'ensemble $\mathcal{K}$ est un cône pointé de $\mathbb{R}^{d \times d}$:

- $\lambda \boldsymbol{X} \in \mathcal{K}$ pour tous $\boldsymbol{X} \in \mathcal{K}$, $\lambda > 0$;
- $\mathcal{K} \cap (-\mathcal{K}) = \{0\}$.

Exemples : Programmation conique (CP)

$$\begin{array}{ll} \text{minimiser}_{\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{d \times d}} & \operatorname{trace}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) \\ \text{s. c.} & \operatorname{trace}(\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) = b_i, \quad i = 1, \ldots, n \\ & \boldsymbol{X} \in \mathcal{K}, \end{array}$$

où $\boldsymbol{C}, \boldsymbol{A}_1, \ldots, \boldsymbol{A}_n \in \mathbb{R}^{d \times d}$, $\boldsymbol{b} = [b_i] \in \mathbb{R}^n$.
L'ensemble $\mathcal{K}$ est un cône pointé de $\mathbb{R}^{d \times d}$:

- $\lambda \boldsymbol{X} \in \mathcal{K}$ pour tous $\boldsymbol{X} \in \mathcal{K}$, $\lambda > 0$;
- $\mathcal{K} \cap (-\mathcal{K}) = \{0\}$.

- Généralise tout ce qui précède !
- Formulation utilisée par des bibliothèques spécialisées (`cvxpy`) et des solveurs commerciaux (`MOSEK`).

Outline

Schéma de résolution

Pour les classes majeures

- LP, QP, SDP, SOCP;
- D'autres classes non traitées ici.

Dans la suite

- On illustre les notions dans le cadre des programmes linéaires;
- On donne l'idée derrière les méthodes dites de points intérieurs.

Cas des programmes linéaires

Problème de base (dit primal)

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}}\ \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \quad \text{s. c.} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{x}\geq 0,$$

$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times d}$, $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^m$.

Problème dual (aussi LP !)

$$\underset{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m,\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^d}{\text{maximiser}}\ \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \quad \text{s. c.} \quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{s}=\boldsymbol{c},\ \boldsymbol{s}\geq 0.$$

Conditions de KKT

Si $\boldsymbol{x}^*\in\mathbb{R}^d$ est une solution, il existe $\boldsymbol{y}^*\in\mathbb{R}^m$ et $\boldsymbol{s}^*\in\mathbb{R}^d$ tels que

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{b}, && \boldsymbol{x}^*\geq 0,\\ &\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^*+\boldsymbol{s}^*=\boldsymbol{c}, && \boldsymbol{s}^*\geq 0,\\ &x_i s_i=0\ \forall i=1,\ldots,d. \end{aligned}$$

Dualité forte en programmation linéaire

Théorème

Pour tout programme linéaire,

i) Soit ce problème et son dual ont chacun une solution, et l'ensemble vérifie les conditions de KKT;

ii) Soit un des deux problèmes n'a pas de solution, et l'ensemble réalisable de l'autre est vide (problème irréalisable);

iii) Soit les deux ensembles réalisables sont vides.

Dualité forte en programmation linéaire

Théorème

Pour tout programme linéaire,

i) Soit ce problème et son dual ont chacun une solution, et l'ensemble vérifie les conditions de KKT;

ii) Soit un des deux problèmes n'a pas de solution, et l'ensemble réalisable de l'autre est vide (problème irréalisable);

iii) Soit les deux ensembles réalisables sont vides.

Conséquences

- Trouver une solution revient à trouver un triplet vérifiant les contraintes de chaque problème !
- C'est ce que font les approches de points intérieurs, de manière primale-duale ou duale.

Principe

- Partir d'un triplet $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s})$ réalisable pour le problème et son dual avec $\boldsymbol{x} > 0$ et $\boldsymbol{s} > 0$.
- Appliquer la méthode de Newton au système de KKT

$$\begin{cases} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* & = & \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^* + \boldsymbol{s}^* & = & \boldsymbol{c} \\ x_i s_i & = & 0 \ \forall i = 1, \ldots, d. \end{cases}$$

- Obtenir un nouveau point "intérieur" avec une valeur $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{s}$ réduite.

Points intérieurs

Principe

- Partir d'un triplet $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s})$ réalisable pour le problème et son dual avec $\boldsymbol{x} > 0$ et $\boldsymbol{s} > 0$.
- Appliquer la méthode de Newton au système de KKT

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* & = & \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^* + \boldsymbol{s}^* & = & \boldsymbol{c} \\ x_i s_i & = & 0 \ \forall i = 1, \ldots, d. \end{array} \right.$$

- Obtenir un nouveau point "intérieur" avec une valeur $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{s}$ réduite.

Ça marche !

- Vitesses de convergence en théorie;
- Très bonnes performances en pratique;
- Implémentations très sophistiquées.

Conclusions : Programmation convexe

Algorithmiquement

-

Table des matières

Données

- Jeu de données à n éléments (individus, échantillons, etc);
- Chaque élément i est caractérisé par un vecteur $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^d$ d'attributs ainsi qu'un label $b_i \in \mathbb{R}$.

$$\Rightarrow \text{Matrice } \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d} \text{ et vecteur } \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Cadre

Données

- Jeu de données à n éléments (individus, échantillons, etc);
- Chaque élément i est caractérisé par un vecteur $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^d$ d'attributs ainsi qu'un label $b_i \in \mathbb{R}$.

$$\Rightarrow \text{Matrice } \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d} \text{ et vecteur } \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

But

On cherche un modèle linéaire $h : \boldsymbol{a} \mapsto \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ qui prédise correctement les b_i d'après les $\boldsymbol{a}_i$.

- Les modèles linéaires (dans le bon espace) sont souvent une bonne approximation;
- Utilisation d'algèbre linéaire (intérêt à la fois théorique et numérique).

Prédiction idéale

- Un vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ tel que $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = b_i$ pour tout i;
- Ces n equations peuvent s'écrire sous la forme d'un système linéaire: $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

Des modèles aux systèmes linéaires

Prédiction idéale

- Un vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ tel que $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = b_i$ pour tout i;
- Ces n equations peuvent s'écrire sous la forme d'un système linéaire: $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

Résoudre des systèmes d'équations linéaires

- Une histoire d'algèbre linéaire;
- L'existence de solutions ne dépend que de $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{b}$.

Juste de l'algèbre linéaire ?

Un mauvais jeu de données

- $\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{a}_2 = \cdots = \boldsymbol{a}_n = 1$ $(d = 1)$;
- $b_1, \ldots, b_n$ sont distincts (typique de mesures bruitées).

Juste de l'algèbre linéaire ?

Un mauvais jeu de données

- $\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{a}_2 = \cdots = \boldsymbol{a}_n = 1$ $(d = 1)$;
- $b_1, \ldots, b_n$ sont distincts (typique de mesures bruitées).

Expliquer les données par un modèle linéaire

- On cherche $\boldsymbol{x} = x \in \mathbb{R}$ tel que $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = a_i x = b_i \ \forall i$;
- Système linéaire :

$$\begin{cases} x = b_1 \\ x = b_2 \\ \vdots \\ x = b_n \end{cases}$$

Juste de l'algèbre linéaire ?

Un mauvais jeu de données

- $\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{a}_2 = \cdots = \boldsymbol{a}_n = 1$ $(d = 1)$;
- $b_1, \ldots, b_n$ sont distincts (typique de mesures bruitées).

Expliquer les données par un modèle linéaire

- On cherche $\boldsymbol{x} = x \in \mathbb{R}$ tel que $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} = a_i x = b_i \ \forall i$;
- Système linéaire :

$$\begin{cases} x = b_1 \\ x = b_2 \\ \vdots \\ x = b_n \end{cases}$$

- Ce système n'a pas de solution !
- En revanche, il existe une solution au problème de "coller aux données" ("data fitting").

Trois problèmes d'approximation

Pb 1) Approximation de Chebyshev

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_\infty := \max_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Pb 2) Approximation robuste/en norme ℓ_1

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_1 := \sum_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Pb 3) Moindres carrés linéaires

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2 := \sum_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|^2.$$

Pb 1) Approximation de Chebyshev

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_\infty := \max_{1\le i\le n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Reformulation en programme linéaire

$$\begin{array}{lll}
\text{minimiser} & \underset{\substack{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d \\ t\in\mathbb{R},\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^{2n}}}{} & t \\
\text{s. c.} & & -t-\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b_i+s_i = 0, \quad i=1,\dots,n \\
& & -t+\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i+s_{n+i} = 0, \quad i=1,\dots,n \\
& & t \ge 0 \\
& & s_i \ge 0 \quad i=1,\dots,2n.
\end{array}$$

Pb 1) Approximation de Chebyshev

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_\infty := \max_{1\le i\le n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Reformulation en programme linéaire

$$\begin{array}{lll}
\text{minimiser} & \underset{\substack{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d \\ t\in\mathbb{R},\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^{2n}}}{} & t \\
\text{s. c.} & & -t-\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b_i+s_i = 0, \quad i=1,\dots,n \\
& & -t+\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i+s_{n+i} = 0, \quad i=1,\dots,n \\
& & t \ge 0 \\
& & s_i \ge 0 \quad i=1,\dots,2n.
\end{array}$$

- Programme linéaire à $d+2n+1$ variables;
- Résolution aisée via les points intérieurs;
- Donne la solution et la valeur optimale du problème d'origine !

Pb 2) Approximation en norme ℓ_1

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_1 := \sum_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Pb 2) Approximation en norme ℓ_1

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_1 := \sum_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Reformulation en programme linéaire

$$\begin{array}{lll}
\text{minimiser}_{\substack{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d \\ t^+,t^-\in\mathbb{R}^n}} & \sum_{i=1}^n \left(t_i^+ + t_i^-\right) & \\
\text{s. c.} & \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b_i - t_i^+ + t_i^- = 0 & i=1,\ldots,n \\
& t_i^+ \geq 0 & i=1,\ldots,n \\
& t_i^- \geq 0 & i=1,\ldots,n
\end{array}$$

Pb 2) Approximation en norme ℓ_1

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_1 := \sum_{1\leq i\leq n} |\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|.$$

Reformulation en programme linéaire

$$\begin{array}{lll}
\underset{\substack{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d \\ t^+,t^-\in\mathbb{R}^n}}{\text{minimiser}} & \sum_{i=1}^n \left(t_i^+ + t_i^-\right) & \\
\text{s. c.} & \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b_i - t_i^+ + t_i^- = 0 & i=1,\ldots,n \\
& t_i^+ \geq 0 & i=1,\ldots,n \\
& t_i^- \geq 0 & i=1,\ldots,n
\end{array}$$

- Programme linéaire à $d+2n$ variables;
- Résolution aisée via les points intérieurs;
- Donne la solution et la valeur optimale du problème d'origine !

Formulation du problème

Étant donné $\{(\boldsymbol{a}_i, b_i)\}_{1 \leq i \leq n}$ avec $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^d$, on considère le problème d'optimisation :

$$\underset{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}),$$

avec $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ et $\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$.

Pb 3) Moindres carrés linéaires

Formulation du problème

Étant donné $\{(\boldsymbol{a}_i, b_i)\}_{1 \leq i \leq n}$ avec $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^d$, on considère le problème d'optimisation :

$$\underset{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}),$$

avec $\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ et $\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$.

Propriété

- Programme quadratique **sans contraintes**;
- Peut être résolu sans points intérieurs.

$$\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2 .$$

Outil : Décomposition en valeurs singulières

La matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times d}$ peut s'écrire

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U} \left[\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & 0\cdots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots 0 & \sigma_r & 0 \\ \hline 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{array}\right] \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}},$$

où $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ et $\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ sont des matrices orthogonales, et $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ sont les valeurs singulières (non nulles) de $\boldsymbol{A}$.

Thèorème (Inverse de Moore-Penrose)

Soit $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ et sa décomposition

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U} \left[\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & 0 \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots 0 & \sigma_r & 0 \\ \hline 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{array}\right] \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}},$$

avec $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$. Alors, la **pseudo-inverse de $\boldsymbol{A}$** est définie par

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{V} \left[\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{\sigma_1} & 0 \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots 0 & \frac{1}{\sigma_r} & 0 \\ \hline 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{array}\right] \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}.$$

$$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times d}, \qquad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}.$$

Théorème

Pour tout $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$ est la solution du problème aux moindres carrés

$$\underset{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2.$$

de norme minimale. Pour tout $\hat{\boldsymbol{x}} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2$, on a :

$$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times d}, \qquad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}.$$

Théorème

Pour tout $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$ est la solution du problème aux moindres carrés

$$\underset{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d}{\text{minimiser}} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2.$$

de norme minimale. Pour tout $\hat{\boldsymbol{x}} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2$, on a :

- $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}\|^2 = \|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|^2$;
- $\|\boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}\| \leq \|\hat{\boldsymbol{x}}\|$.

Un exemple

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Une solution

- Le problème minimiser$_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2n} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2$ possède une infinité de solutions;
- Parmi celles-ci $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$ est de norme minimale;
- Cette solution est la moyenne $\boldsymbol{x}^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n b_i$!

Lien avec la régression linéaire

Qualité de la solution des moindres carrés

- Meilleure approximation possible en termes d'erreurs;
- Solution déterministe quand $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_i$ fixés.

Lien avec la régression linéaire

Qualité de la solution des moindres carrés

- Meilleure approximation possible en termes d'erreurs;
- Solution déterministe quand $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_i$ fixés.

En présence de données bruitées

- Approche statistique : supposer que $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^* + \boldsymbol{\epsilon}$ avec $\boldsymbol{\epsilon}$ vecteur aléatoire de loi connue;
- Calculer l'estimateur du **maximum de vraisemblance** en résolvant un problème d'optimisation;
- Équivalent aux moindres carrés pour $\boldsymbol{\epsilon}$ suivant une loi gaussienne/normale;
- Équivalent à la régression ℓ_1 pour $\boldsymbol{\epsilon}$ suivant une loi de Laplace.

Conclusions

Optimisation (en IA et au-delà)

- Outil de modélisation;
- Outil de résolution de problèmes;
- Outil numérique!

Optimisation convexe

- Outil de prédilection;
- Large spectre de modélisation;
- Capacité de résolution à grande échelle.

Les grands classiques

- Programmation linéaire;
- Moindres carrés linéaires.

Références

Ouvrages:

- T. Terlaky, M. F. Anjos, S. Ahmed (Eds.), *Advances and Trends in Optimization with Engineering Applications*. MOS-SIAM Series on Optimization, 2017.
- S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2009.
- S. Boyd and L. Vandenberghe, *Introduction to Applied Algebra: Vectors, Matrices, and Least Squares*. Cambridge University Press, 2018.

Codes :

- `scipy/numpy` : bibliothèque de base en calcul scientifique pour Python.
- `cvxpy` : résolution de problèmes convexes en Python (existe aussi en MATLAB).

Fin de la première partie

Aujourd'hui

- Outils d'optimisation existants, problèmes que l'on peut résoudre;
- Focus : programmation convexe.

Demain

- Matin : Optimisation non convexe.
- Après-midi : Optimisation stochastique.

Fin de la première partie

Aujourd'hui

- Outils d'optimisation existants, problèmes que l'on peut résoudre;
- Focus : programmation convexe.

Demain

- Matin : Optimisation non convexe.
- Après-midi : Optimisation stochastique.

Merci beaucoup !