Aix*Marseille université	MASTER 2 INFORMATIQUE PARCOURS IAAA, UE MIA
Année 2021-22	**DM 2 : optimisation**

Exercice 1 Trouvez le parallépipède rectangle (pavé droit) dont la surface (somme des aires des six faces) est maximale parmi tous les parallépides rectangles de diagonale $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = L$, où L est un nombre réel strictement positif fixé et x_1, x_2, x_3 sont les longueurs des côtés du parallépipède rectangle.

Exercice 2 Preuve de convergence de la descente de gradient avec règle d'Armijo.

Dans cet exercice, on va démontrer le théorème suivant :

Théorème. (Stationarité des points limites de la descente de gradient avec règle d'Armijo.)

> Soit $f : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$, de classe C^1. Soit (x_k) une suite de points générée par l'application de la méthode de descente de gradient avec règle d'Armijo à f en partant de $x_0 \in \mathbf{R^n}$. Alors, tout point limite x^* de (x_k) est un point stationnaire de f, i.e. $\nabla f(x^*) = 0$.

Rappels d'analyse :

- Un point limite, aussi appelé valeur d'adhérence d'une suite (u_k), est un point l tel qu'il existe une sous-suite extraite de (u_k) qui converge vers l, c'est à dire qu'il existe une fonction $\phi : \mathbf{N} \to \mathbf{N}$ strictement croissante telle qu'on ait :

$$\lim_{k \to +\infty} u_{\phi(k)} = l.$$

- Toute suite monotone de nombres réels converge vers un nombre fini ou diverge vers l'infini (vers $+\infty$ pour une suite croissante et vers $-\infty$ pour une suite décroissante).
- Si g est continue et $\lim_{k \to +\infty} u_k = l$, alors $\lim_{k \to +\infty} g(u_k) = g(l)$.
- Théorème des accroissements finis : si a et b sont deux réels avec $a < b$ et $f : [a, b] \to \mathbf{R}$ est une fonction continue sur $[a, b]$ et dérivable sur $]a, b[$, alors il existe un réel $c \in]a, b[$, tel que :

$$\frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(c).$$

- Théorème de Bolzano-Weierstrass : de toute suite bornée de vecteurs de $\mathbf{R}^n$, on peut extraire une sous-suite convergente.

On va raisonner par l'absurde. Supposons que $\hat{x}$ est un point limite de (x_k) avec $\nabla f(\hat{x}) \neq 0$.

1. Montrer que la suite $(f(x_k))$ converge vers $f(\hat{x})$.

2. En déduire que la suite $(-\alpha_k \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k))$ converge vers 0, où α_k est le pas utilisé dans la descente de gradient avec règle d'Armijo à l'étape k, i.e. $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$.

3. Par hypothèse, on peut extraire de (x_k) une suite $(x_{\phi(k)})$ qui converge vers $\hat{x}$. Montrer que $(\alpha_{\phi(k)})$ converge vers 0.

4. En déduire qu'il existe un entier k_0 tel que pour tout entier $k \geq k_0$, le pas initial s n'est pas satisfaisant et on le réduit au moins une fois quand on applique la règle d'Armijo à l'étape $\phi(k)$ (en le multipliant par β).

5. En déduire que pour tout $k \geq k_0$, on a

$$\frac{f\left(x_{\phi(k)}\right) - f\left(x_{\phi(k))} - \delta_k \frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|}\right)}{\delta_k} < \sigma \nabla f\left(x_{\phi(k)}\right)^T \frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|},$$

   où $\delta_k = \frac{\alpha_{\phi(k)}}{\beta} \|\nabla f\left(x_{\phi(k)}\right)\|$ et σ et β sont les paramètres utilisés pour l'application de la règle d'Armijo.

6. En déduire que pour tout $k \geq k_0$, il existe $\gamma_k \in]0, \delta_k[$, tel que

$$\nabla f\left(x_{\phi(k)} - \gamma_k \frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|}\right)^T \frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|} < \sigma \nabla f\left(x_{\phi(k)}\right)^T \frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|}.$$

   (Indice : utiliser le théorème des accroissements finis.)

7. Montrer que $\lim_{k\to+\infty} \gamma_k = 0$.

8. Montre qu'il existe une sous-suite extraite de $\left(\frac{\nabla f(x_{\phi(k)})}{\|\nabla f(x_{\phi(k)})\|}\right)$ qui converge vers un vecteur $v \in \mathbf{R}^n$. (Indice : utiliser le théorème de Bolzano-Weierstrass.)

9. Montrer que :

$$\nabla f(\hat{x})^T v \leq 0.$$

   (Indice : utiliser les résultats des question 6, 7 et 8.)

10. Montrer qu'il existe une fonction strictement croissante $\psi : \mathbf{N} \to \mathbf{N}$, telle que :

$$\nabla f(\hat{x})^T v = \lim_{k\to+\infty} \|\nabla f\left(x_{\psi\circ\phi(k)}\right)\|_2.$$

11. Conclure.

Exercice 3 Écart dual pour le problème du sac à dos.

On considère n objets avec des poids associés $w_1, w_2, \ldots, w_n$, et des valeurs associées $v_1, v_2, \ldots, v_n$. On veut sélectionner un sous-ensemble de ces objets tel que la somme des poids associés aux éléments de ce sous-ensemble ne dépasse pas un réel $A > 0$ donné et tel que la somme des valeurs associées aux éléments de ce sous-ensemble soit maximisée.

1. Montrer que le problème peut être formulé comme suit :

$$\begin{aligned} &\text{minimiser } f(x) = -\sum_{i=1}^{n} v_i x_i \\ &\text{avec } \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \leq A \\ &\text{et pour tout } i \in \{1, 2, \ldots, n\},\ x_i \in \{0, 1\}. \end{aligned} \tag{Problème du sac à dos}$$

2. Trouver graphiquement la solution du problème dual et représenter graphiquement l'écart de dualité pour $n = 5$, $(w_1, w_2, w_3, w_4, w_5) = (1, 2, 3, 4, 5)$ et $(v_1, v_2, v_3, v_4, v_5) = (3, 1, 6, 2, 5)$.
3. Calculer explicitement la fonction duale dans le cas général.
4. Trouver la solution du problème dual. (Indice : on peut faire l'hypothèse, sans perte de généralité, que $\frac{v_1}{w_1} \leq \frac{v_2}{w_2} \leq \cdots \leq \frac{v_n}{w_n}$ et étudier la valeur de la fonction duale en fonction de la position de son argument par rapport aux v_i/w_i.)
5. On considère maintenant le problème relaxé :

$$\begin{aligned} &\text{minimiser } f(x) = -\sum_{i=1}^{n} v_i x_i \\ &\text{avec } \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \leq A \\ &\text{et pour tout } i \in \{1, 2, \ldots, n\},\ x_i \in [0, 1]. \end{aligned} \tag{Problème du sac à dos relaxé}$$

   Justifier qu'il n'y a pas d'écart de dualité pour ce problème.
6. Montrer que le problème dual du problème relaxé atteint le même maximum que le problème dual du problème original.
7. Utiliser les conditions d'optimalité primale-duale vues en cours pour obtenir la solution du problème primal relaxé.

8. Montrer que cette solution est faisable pour le problème primal original et en déduire que :

$$q^* \leq f^* \leq q^* + \max_{1 \leq i \leq n} v_i,$$

où f^* est la solution du problème primal original et q^* est la solution du problème dual original.

Exercice 4 Moindre carrés linéaires avec régularisation ℓ_2 (ridge regression) et ℓ_1 (LASSO).

On a vu en cours que, dans le cadre de l'optimisation sans contraintes, quand on ajoute des hypothèses de convexité, la condition nécessaire d'extremum local du premier ordre $\nabla f = 0$ peut devenir une condition nécessaire et suffisante de minimum global. De la même manière, dans un cadre d'optimisation sous contraintes, avec des hypotheèses de convexité appropriée, les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) peuvent devenir des condition nécessaires et suffisantes de minimum global. Plus précisément on a le théorème suivant.

Théorème. (Conditions KKT sous hypothèses de convexité et condition de Slater.)

Soit f, $(e_i)_{i=1}^{n_E}$ et $(c_i)_{i=1}^{n_I}$ des fonctions de $\mathbf{R}^m$ vers $\mathbf{R}$, *convexes* et de classe $\mathcal{C}^1$. Si la condition de Slater pour la qualification des contraintes est vérifiée—c'est à dire s'il existe $x_0 \in \mathbf{R}^m$, tel que pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_I\}$ on a : soit $c_i(x_0) > 0$, soit c_i est une fonction affine—alors les deux propositions suivantes sont équivalentes.

- $\mathcal{P}_1(x^*)$: il existe $\lambda_E^* \in \mathbf{R}^{n_E}$ et $\lambda_I^* \in \mathbf{R}^{n_I}$, tels que :
  1. $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_E^*, \lambda_I^*) = 0$, où $\mathcal{L}(x, \lambda_E, \lambda_I) = f(x) - \sum_{i=1}^{n_E} \lambda_{E,i} e_i(x) - \sum_{i=1}^{n_I} \lambda_{I,i} c_i(x)$
  2. $c_i(x^*) = 0$ pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_E\}$
  3. $c_i(x^*) \geq 0$ pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_I\}$
  4. $\lambda_{I,i} \geq 0$ pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_I\}$
  5. $\lambda_{I,i} c_i(x^*) = 0$ pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_I\}$
- $\mathcal{P}_2(x^*)$: x^* est un minimum global de f sur l'ensemble des $x \in \mathbf{R}^d$ tels que $e_i(x) = 0$ et $c_j(x) \geq 0$ pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, n_E\}$ et pour tout j dans $\{1, 2, \ldots, n_I\}$.

Soit $L > 0$, y une matrice colonne de taille n et A une matrice de taille n par m. On considère le problème d'optimisation sous contraintes suivant :

$$\text{Minimiser } \|Ax - y\|_2, \text{ pour } x \in \mathbf{R}^m \text{ tel que } \|x\|_2 \leq L. \qquad \text{(ridge regression V1)}$$

On note X^* l'ensemble des solutions globales de ce problème d'optimisation.

1. Montrer qu'il existe $L_1 > 0$, tel que $X^* = X_1^*$, où X_1^* est l'ensemble des solutions globales du problème d'optimisation :

$$\text{Minimiser } \|Ax - y\|_2^2, \text{ pour } x \in \mathbf{R}^m \text{ tel que } \|x\|_2^2 \leq L_1. \qquad \text{(ridge regression V2)}$$

2. Montrer que le problème *ridge regression V2* satisfait les conditions du théorème ci-dessus.
3. Montrer qu'il existe un nombre réel $\lambda > 0$, tel que $X_1^* = X_2^*$, où X_2^* est l'ensemble des solutions globales du problème d'optimisation (non contraint mais « pénalisé ») :

$$\text{Minimiser } \|Ax - y\|_2^2 + \lambda\|x\|_2^2, \text{ pour } x \in \mathbf{R}^m. \qquad \text{(ridge regression V3)}$$

4. Montrer que pour toute matrice M de taille n par m et tout réel $\delta > 0$, $M^T M + \delta I_m$ est inversible. (On pourra montrer, par exemple, que la matrice est symmétrique définie positive et utiliser le théorème spectral pour conclure.)
5. Montrer que le problème *ridge regression V3* (et par conséquent les deux autres) possède toujours une unique solution $x^* = (A^T A + \lambda I)^{-1} A^T y$.
6. Montrer que x^* tend vers la solution de norme euclidienne minimale d'un problème des moindres carrés non contraint quand λ tend vers 0 par valeurs positives. (Indice : commencer par le cas où $m = n = 1$, puis le cas où A est diagonale, puis le cas général.)

En prenant toujours $L > 0$, y une matrice colonne de taille n et A une matrice de taille n par m, on considère à présent le problème d'optimisation sous contraintes suivant :

$$\text{Minimiser } \|Ax - y\|_2, \text{ pour } x \in \mathbf{R}^m \text{ tel que } \|x\|_1 \leq L. \qquad \text{(LASSO V1)}$$

On note X^* l'ensemble des solutions globales de ce problème d'optimisation.

7. Montrer que $X^* = X_1^*$, où X_1^* est l'ensemble des solutions globales du problème d'optimisation :

$$\text{Minimiser } \|Ax - y\|_2^2, \text{ pour } x \in \mathbf{R}^m \text{ tel que } \|x\|_1 \leq L. \qquad \text{(LASSO V2)}$$

8. Montrer que le problème *LASSO V2* ne satisfait pas les conditions du théorème ci-dessus.
9. Montrer que $x \in X_1^*$ si et seulement si il existe $x_+ \in \mathbf{R}^m$ et $x_- \in \mathbf{R}^m$, tels que $x = x_+ - x_-$, pour tout i dans $\{1, 2, \ldots, m\}$, $x_{+,i} \geq 0$ et $x_{-,i} \geq 0$, et $(x_+, x_-) \in X_2^*$, où X_2^* est l'ensemble

des solutions globales du problème d'optimisation :

$$\text{Minimiser } \|Ax_+ - Ax_- - y\|_2^2, \text{ pour } x_+ \in \mathbf{R}^m,\ x_- \in \mathbf{R}^m \text{ tels que} \qquad \text{(LASSO V3)}$$
$$\text{pour tout } i \in \{1, 2, \ldots, m\},\ x_{+,i} \geq 0,$$
$$\text{pour tout } i \in \{1, 2, \ldots, m\},\ x_{-,i} \geq 0,$$
$$\sum_{i=1}^{m} x_{+,i} + \sum_{i=1}^{m} x_{-,i} \leq L.$$

10. Montrer que le problème *LASSO V3* satisfait les conditions du théorème ci-dessus.
11. Soit $(x_+^*, x_-^*) \in X_2^*$. On note $x^* = x_+^* - x_-^* \in X_1^*$. Montrer qu'il existe $\lambda > 0$, tel que :

$$\text{pour tout } j \in \{1, 2, \ldots, m\} \text{ tel que } x_j \neq 0,\ 2a_j^T(y - Ax) = \lambda \mathrm{sgn}(x_j),$$
$$\text{pour tout } j \in \{1, 2, \ldots, m\} \text{ tel que } x_j = 0,\ 2|a_j^T(y - Ax)| \leq \lambda,$$

où a_j est la j-ième colonne de A et $\mathrm{sgn}(u)$ est 0 si $u = 0$, 1 si $u > 0$ et -1 sinon.

Remarquez que ce résultat montre que les solutions du problème sont parcimonieuses : si la valeur absolue de la covariance entre le j-ième régresseur a_j et le résiduel $y - Ax$ est inférieure à $m\lambda$, un poids $x_j = 0$ est associé à ce régresseur.

12. Montrer que si $\lambda \geq \lambda_{\max} = \max_{1 \leq j \leq m} |a_j^T y|$, alors $0 \in X^*$.
13. Calculer et comparer les solutions des problèmes de *ridge regression*, *LASSO* et moindres carrés classique pour une matrice A orthogonale et commenter.
14. Dans le cas général, les équations de la question 11, ne permettent pas d'obtenir directement les coefficients de x^* qui sont différents de 0 et leur signe. Justifier l'utilisation d'un algorithme de descente de gradient projeté pour obtenir une solution du problème *LASSO V3* et calculer les équations de mise à jour correspondantes.