

# *Projet NUMOPT*

*Optimisation Numérique*

*Rhône-Alpes*

THÈME 4A



*R*apport  
*d'**A*ctivité

2000



---

## Table des matières

|           |  |          |
|-----------|--|----------|
| <b>1</b>  | <b>Composition de l'équipe</b>   | <b>2</b> |
| <b>2</b>  | <b>Présentation et objectifs généraux</b>                                | <b>3</b> |
| <b>3</b>  | <b>Fondements scientifiques</b>  | <b>3</b> |
| <b>4</b>  | <b>Domaines d'applications</b>   | <b>4</b> |
| <b>5</b>  | <b>Logiciels</b>   | <b>4</b> |
| <b>6</b>  | <b>Résultats nouveaux</b>  | <b>5</b> |
| 6.1       | Caractérisation variationnelle des projections propres totales . . . . . | 5        |
| 6.2       | Chimie quantique . . . . .   | 5        |
| 6.3       | Coloration de graphes . . . . .  | 6        |
| 6.4       | Algorithmes pour la programmation semi-définie . . . . .                 | 6        |
| 6.5       | Traitement du signal . . . . .   | 6        |
| 6.6       | Synthèse d'ondelettes . . . . .  | 7        |
| 6.7       | Routage de communications multipoints . . . . .                          | 7        |
| 6.8       | Actions d'applications . . . . .   | 7        |
| <b>7</b>  | <b>Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)</b>     | <b>8</b> |
| <b>8</b>  | <b>Actions régionales, nationales et internationales</b>                 | <b>8</b> |
| <b>9</b>  | <b>Diffusion de résultats</b>  | <b>8</b> |
| 9.1       | Diffusion de logiciels . . . . .   | 8        |
| 9.2       | Animation de la communauté scientifique . . . . .                        | 9        |
| 9.3       | Enseignement universitaire . . . . .                                     | 9        |
| 9.4       | Autres enseignements . . . . .   | 9        |
| 9.5       | Participation à des colloques, séminaires, invitations . . . . .         | 9        |
| <b>10</b> | <b>Bibliographie</b>   | <b>9</b> |

## 1 Composition de l'équipe

### Responsable scientifique

Claude Lemaréchal [directeur de recherche]

### Assistante de projet

Françoise de Coninck [commune avec IS2, Sherpa]

### Personnel Inria

François Oustry [chargé de recherche]

Edmundo Rofman [directeur de recherche]

### Chercheurs invités

Pablo Lotito [Univ. Rosario (Argentine)]

Elina Mancinelli [Conicet et Univ. Rosario (Argentine), jusqu'à août]

Mabel Medina [Conicet et Univ. Rosario (Argentine), jusqu'à août]

Ricardo Katz [Conicet et Univ. Rosario (Argentine), 15 octobre - 15 novembre]

### Chercheur doctorant

Philippe Meurdesoif [boursier DGA]

### Stagiaires

Cécile Christin [ENS Lyon 1ère année, juillet-août]

Coralie Triadou [Ensimag 2ème année, juillet-septembre]

Sophie Volle [Ensimag 2ème année, juillet-septembre]

## 2 Présentation et objectifs généraux

Issu de l'ancien projet Promath et officiellement créé en juillet 1998, Numopt s'intéresse aux algorithmes d'optimisation numérique dans leurs divers aspects :

- *Recherche* de type fondamental, pouvant être motivée par des applications de pointe, ou concerner des sujets considérés comme importants par la communauté scientifique internationale ;
- *Développement* d'algorithmes d'optimisation, en vue non pas de problèmes particuliers mais de grandes classes de problèmes ;
- *Applications*, c'est-à-dire assistance à des partenaires industriels ou venant d'autres secteurs de la recherche, sur des problèmes spécifiques auxquels ils sont confrontés.

D'une façon générale, le contenu scientifique de nos travaux s'articule surtout autour des points privilégiés suivants : optimisation non différentiable, optimisation semi-définie positive, liens entre optimisation combinatoire et continue.

## 3 Fondements scientifiques

**Mots clés** : optimisation, algorithme numérique, convexité, relaxation lagrangienne, relaxation SDP, optimisation semi-définie positive, contraintes quadratiques.

Ce projet concerne la minimisation numérique d'une fonction  $f$  de  $n$  variables sur un domaine  $D \subset \mathbb{R}^n$ , soit

$$\min f(x), \quad \text{avec } x = \{x_1, \dots, x_n\} \in D. \quad (1)$$

Divers cas de figure relèvent plus particulièrement de nos compétences. Leur énumération ci-dessous suit l'ordre décroissant de niveau théorique.

1. Cas où les dérivées premières de  $f$  sont discontinues. Pour ces problèmes, des algorithmes existent (méthodes de *faisceaux*, méthode du centre analytique), et sont implémentés et appliqués à des problèmes d'origines de plus en plus diverses. Nos recherches portent sur les possibilités d'accélération de ces algorithmes, ce qui implique de généraliser convenablement la notion de *second ordre* en un point où les dérivées premières n'existent pas.
2. *Problèmes combinatoires*, où  $D$  est un ensemble fini, typiquement un sous-ensemble de  $\{0, 1\}^n$ . Nous n'avons pas de compétence particulière dans ce vaste domaine ; mais il se trouve que *l'analyse convexe* y joue un rôle utile, encore méconnu de la communauté scientifique (*relaxation lagrangienne*, *relaxation semi-définie positive*). Nous nous plaçons ici à la charnière entre les trois domaines : continu-combinatoire-convexité.
3. Problèmes de valeurs propres, ou encore optimisation *semi-définie positive* (SDP). Ici,  $\mathbb{R}^n$  est en fait  $\mathbb{R}^{m(m+1)/2}$ , l'espace des matrices symétriques. Typiquement,  $f$  est alors la

valeur propre maximale (ou, de façon analogue,  $f$  est linéaire mais  $D$  est l'ensemble des matrices semi-définies positives). Nos travaux ont ici un double aspect ; applicatif d'une part (commande robuste, optimisation combinatoire – point 2. ci-dessus, . . .) concernant la *relaxation* SDP, et d'autre part méthodologique, résolvant les problèmes SDP par optimisation non différentiable (point 1.), qui vient ainsi compléter les méthodes de *points intérieurs*.

4. Problèmes plus “classiques” où  $D$  est soit l'espace  $R^n$  tout entier, soit défini par des *contraintes*  $c_i(x) \leq 0$ ,  $f$  et les  $c_i$  étant régulières ; éventuellement,  $n$  est grand ( $10^5$  et plus). Ici, nous jouons le plus souvent un rôle de conseillers, en diverses étapes : modélisation, choix d'une méthodologie, orientation vers les logiciels adaptés (*Modulopt*, projet Estime ou action Mocoa, ou encore bibliothèques externes).

## 4 Domaines d'applications

L'optimisation se présente potentiellement dans tous les secteurs économiques. Dès qu'un outil de simulation est au point, il peut être utilisé pour optimiser le système qu'il simule. Un autre domaine est l'*identification* de paramètres (projets Idopt ou Estime), où l'on doit minimiser l'écart entre des mesures et des prédictions théoriques.

De ce fait, il est impossible de donner une liste exhaustive de domaines d'application. Citons pêle-mêle des applications auxquelles l'Inria a été mêlé dans le passé, éventuellement via le projet Promath : gestion de la production, géophysique, finance, modélisation moléculaire, robotique, productique, réseaux, astrophysique, cristallographie, . . .

## 5 Logiciels

D'une façon générale, nos logiciels sont distribués de deux façons différentes : d'une part des codes de bibliothèque (type Modulopt), mis à disposition libre ou payante suivant l'utilisation qui en est faite ; d'autre part des logiciels spécifiques, développés pour une application donnée.

Les codes d'optimisation ci-dessous, très utilisés, ont été développés dans le cadre de l'ex projet Promath.

**Code M1QN3** Il s'agit d'un code d'optimisation sans contraintes pour problèmes à très grand nombre de variables ( $n \geq 10^3$ , a été utilisé pour  $n = 10^6$ ). Techniquement, il utilise un algorithme de BFGS à mémoire limitée avec recherche linéaire de Wolfe (voir [1, § 5.3] pour la terminologie).

**Participants** : Jean-Charles Gilbert [projet Estime – correspondant], Claude Lemaréchal [correspondant].

**Code M2QN1** Code d'optimisation pour (petits) problèmes avec contraintes de bornes uniquement :  $D$  est un pavé de  $R^n$ . Il utilise la méthode de BFGS avec recherche de Wolfe et gestion de contraintes actives.

**Participant** : Claude Lemaréchal [correspondant].

**Code N1CV2** Minimisation sans contraintes d'une fonction convexe (non différentiable), par une méthode de faisceaux de type proximal ([1, Chap.7], [2, Chap.XV]).

**Participants** : Claude Lemaréchal [correspondant], Claudia Sagastizábal [correspondante].

**Modulopt** Outre des codes d'optimisation tels que ceux ci-dessus, la bibliothèque Modulopt comporte des instances de problèmes d'application, réels ou académiques. Elle constitue ainsi un champ d'expérience fonctionnant dans les deux sens : expérimenter un nouvel algorithme sur une batterie de problèmes-tests, ou bien choisir parmi plusieurs codes celui qui s'adapte le mieux à un problème donné.

**Participant** : Claude Lemaréchal [correspondant].

## 6 Résultats nouveaux

La présentation de nos activités ci-dessous est faite en procédant du plus théorique au plus appliqué.

### 6.1 Caractérisation variationnelle des projections propres totales

**Participant** : François Oustry.

Suite de la collaboration avec M. Overton (Courant Institute). Nous redémontrons, dans le cas de matrices symétriques réelles, le résultat de Kato sur les projections propres. La démonstration traditionnelle de [Kat80, §II.1.4] utilise une lourde machinerie à base de fonctions (complexes) holomorphes, notre approche ne fait appel qu'à l'analyse convexe et à la géométrie différentielle élémentaire. La publication de ces résultats est en cours<sup>[OO00]</sup>.

### 6.2 Chimie quantique

**Participant** : François Oustry.

Suite de la collaboration avec B. Braams (Courant Institute). Le travail de synthèse<sup>[BO00]</sup> actuellement en cours concerne l'application de la dualité lagrangienne et de l'optimisation de valeurs propres à la chimie quantique. Nous avons montré que le problème de Hartree-Fock (dans sa version discrétisée) est en fait NP-difficile : il n'existe pas d'algorithme polynomial (en

---

[Kat80] T. KATO, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag, New York, 1980.

[OO00] F. OUSTRY, M. OVERTON, «Variational analysis of the total eigenprojection for symmetric matrices», 2000, en préparation.

[BO00] B. BRAAMS, F. OUSTRY, «Hartree-Fock variational problem: NP-hardness and semidefinite relaxations», 2000, en préparation.

le nombre d'électrons) pour résoudre ce problème. Nous proposons alors un nouvel algorithme d'approximation qui utilise une relaxation convexe (obtenue par dualité lagrangienne donnant lieu à un problème d'optimisation de valeurs propres); résultats présentés dans [9].

### 6.3 Coloration de graphes

**Participants** : Claude Lemaréchal, Philippe Meurdesoif.

Rappelons qu'il s'agit du travail de thèse de Ph. Meurdesoif. En utilisant une formulation particulière du problème de coloration, nous avons pu donner une justification naturelle à la borne de Karger-Motwani-Sudan<sup>[KMS98]</sup>; cela a permis un renforcement de cette borne, analogue au renforcement de Schrijver<sup>[Sch79]</sup> pour la borne de Lovász<sup>[Lov79]</sup>; résultats présentés dans [12], [11]. Par ailleurs, nous travaillons sur une autre formulation bien adaptée aux relaxations SDP telles que décrites dans [3]. Cette formulation augmente substantiellement la dimension du problème relaxé, mais permet d'entrevoir la possibilité de nombreux renforcements impossibles avec l'ancienne formulation.

### 6.4 Algorithmes pour la programmation semi-définie

**Participant** : François Oustry.

Nous avons réalisé une interface permettant de minimiser par rapport à  $x$  la valeur propre maximale d'une matrice  $A(x)$  (assemblée en Scilab) par une méthode de faisceau fondée sur une adaptation de N1CV2 (voir §5) aux méthodes de faisceaux spectrales [7, 6]. Les éléments propres utiles de  $A(x)$  sont calculés (en Fortran) à l'aide de la librairie Arpack. C'est ce logiciel, encore expérimental, qui a été utilisé par exemple pour nos diverses applications telles que décrites en sections 6.5 et 6.6.

### 6.5 Traitement du signal

**Participants** : Cécile Christin, Anatoli Iouditski [projet is2], François Oustry.

Une suite  $\{x_i\}_{i=1}^n$  de bits transmise à distance, et de ce fait bruitée, donne par filtrage une sortie  $b \in R^m$ . Pour reconstituer  $x$  connaissant le filtre, on choisit une méthode de moindres carrés:  $\min |Ax - b|^2$  sous contraintes  $x_i \in \{0, 1\}$ . Nous avons choisi de traiter ce problème par relaxation SDP suivant la méthodologie [3], ce qui donne d'excellents résultats, voir [13]. L'une des retombées est le problème suivant: en arrondissant la solution relaxée obtenue, on obtient la solution  $x$  exacte si le bruit est suffisamment petit; peut-on estimer le niveau maximum de bruit ainsi tolérable? Cette question a fait l'objet d'un travail commun avec A. Nemirovski (Technion) au cours de son séjour dans le projet is2.

---

[KMS98] D. KARGER, R. MOTWANI, M. SUDAN, «Approximate graph coloring by semidefinite programming», *Journal of the ACM* 45, 2, 1998, p. 246-265.

[Sch79] A. SCHRIJVER, «A comparison of the Delsarte and Lovász bounds», *IEEE Trans. on Information Theory* IT 25, 1979, p. 425-429.

[Lov79] L. LOVÁSZ, «On the Shannon capacity of a graph», *IEEE Trans. on Information Theory* IT 25, 1979, p. 1-7.



## 6.6 Synthèse d'ondelettes

**Participants :** Paulo Gonçalves [projet IS2], Claude Lemaréchal, François Oustry, Coralie Triadou.

Pour analyser un signal fortement irrégulier, il est souhaitable de le décomposer suivant une base d'ondelettes  $\{\psi_k\}$  orthogonales relativement à un noyau idoine :  $\int L(t)\psi_k(t)\psi_{k'}(t)dt = 0$ . On désire par ailleurs minimiser leur énergie  $J(\psi) = \sum_k E(\psi_k)$ , où  $E(\psi)$  est le produit des moments d'ordre 2 de  $\psi$  et de  $F\psi$  ( $F$ : transformée de Fourier). Cela se traduit par la minimisation d'une fonction quartique sous contraintes quadratiques, ce qui se prête bien à la relaxation SDP. Sur ce problème, la relaxation est trop grossière pour donner des résultats intéressants. Une façon de la renforcer est de tenir compte de la contrainte  $E(\psi_k) \geq 1/(16\pi^2)$  (redondante dans le problème primal mais pas dans le dual). Cela conduit à des difficultés pour minimiser le lagrangien, non encore résolues à ce jour, motivant une prolongation du travail sur ce sujet ; les informations nécessaires figurent dans [14].

## 6.7 Routage de communications multipoints

**Participants :** Claude Lemaréchal, Sophie Volle.

Une question toujours mal élucidée est : quelles sont les performances comparées des diverses méthodes existantes d'optimisation non différentiable (méthodes de sous-gradient, des plans sécants, de faisceaux, du centre analytique) ? France Telecom R&D nous a communiqué une application : routage d'une communication issue d'un sommet d'un réseau et destinée à plusieurs sommets (télé-enseignement adressé à plusieurs élèves par exemple). Un modèle possible se prête bien à la génération de colonnes, qui peut être stabilisée par une méthode de faisceaux. L'exploitation de cette application ne pouvait se faire qu'au sein du projet, compte tenu des nombreux droits de propriété (FT R&D, Max Planck Institute, Eurodécision, Ilog, EDF). Le "monstre" ainsi créé n'a pu donner de résultats tangibles ; les difficultés rencontrées sont exposées en [15]. Ce rapport expose également un sous-produit (positif) de l'étude, améliorant le schéma de génération de colonnes adopté par FT R&D pour ce problème.

## 6.8 Actions d'applications

**Participants :** Pablo Lotito, Elina Mancinelli, Mabel Medina, Edmundo Rofman.

**Coulée continue des alliages binaires** L'étude, menée avec la participation du Laboratoire Madylam, ENSHM de Grenoble, s'est conclue avec la thèse de M. Medina [4]. Elle s'est d'abord orientée vers la simulation des transferts couplés mis en jeu dans la solidification d'un lingot d'alliage métallique linéaire. Elle s'est ensuite tournée vers l'optimisation des paramètres introduits dans le modèle par la convection forcée (brassage électromagnétique) afin de réduire les zones de croissance dendritique.

**Régulation et optimisation du trafic urbain** Travaux menés en collaboration avec les projets Metalau et Meval. Outre l'étude liée au trafic urbain (voir rapport d'activité 1999), l'at-

tention s'est portée sur la modélisation du trafic sur voie circulaire, avec ou sans dépassement. Plusieurs résultats ont été obtenus sur les vitesses moyennes et l'évolution des bouchons (voir rapport d'activité Metalau et Meval). Nous travaillons actuellement sur la planification optimale du trafic avec temps de parcours non linéaires (dépendant non seulement de la longueur de l'arc mais de l'intensité du trafic).

## 7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

**Participant** : Claude Lemaréchal.

Nous participons au contrat RNRT Rococo (Recherche Opérationnelle et COntraintes pour la COncception de réseau) dont les acteurs principaux sont FT R&D, Ilog et le LRI.

## 8 Actions régionales, nationales et internationales

**Actions nationales** C. Lemaréchal est trésorier du Groupe Mode de la Smi ; membre du jury pour le Prix Blaise Pascal 2000.

E. Rofman est membre du comité scientifique des journées "Contrôle optimal et EDP" à l'occasion du 60ème anniversaire de A. Bensoussan ; co-éditeur du volume préparé à cette occasion – voir [10] ; organisateur et conférencier de la session commémorative du 60ème anniversaire de l'Institut Beppo Levi, Rosario (Argentine).

**Actions internationales** C. Lemaréchal est membre du jury pour le Prix Dantzig 2000.

### Invitation de chercheurs étrangers

- A. Lewis (Univ. Waterloo, 1 semaine)
- M. Overton (Courant Institute, 1 semaine),
- Radu Stefan (Cesame, Belgique, 1 semaine)

## 9 Diffusion de résultats

### 9.1 Diffusion de logiciels

Les codes d'optimisation suivants ont été mis à disposition pour usage académique.

- M2QN1 : JRC-EC, Ispra (J.-M. Lellouche, modèle couplé physique-biologie pour applications océaniques).
- SG2QN (code semblable à M2QN1, mais avec calcul des dérivées par différences finies) : Memscap, Grenoble (B. Affour, simulation d'un circuit imprimé).
- M1QN3 (commun avec Estime) : Cereve, Champs s/Marne (B. Sportisse, assimilation de données en pollution atmosphérique).
- N1CV2 : LMSGC, Champs s/Marne (E. Dimnet, évolution de solides avec impacts et frottement de Coulomb).

## 9.2 Animation de la communauté scientifique

- C. Lemaréchal est éditeur associé au Siam Journal of Optimization.
- F. Oustry est membre du groupe de travail Inria sur la didactique.

## 9.3 Enseignement universitaire

- Thèses de L. Chauvier, Université de Paris 1, O. Briant, Université Joseph Fourier, D. DeWolf, Université de Lille 3 (C. Lemaérchal, rapporteur).

## 9.4 Autres enseignements

- Ensimag 2e année “Optimisation” (C. Lemaréchal, F. Oustry, Ph. Meurdesoif, 9h de cours, 18h de TP).
- Université de Louvain-la-Neuve, Graduate Course in Control “Dissipativité, Dualité et LMIs”, novembre 2000 (F. Oustry, 6h de cours)

## 9.5 Participation à des colloques, séminaires, invitations

- Congrès nationaux : Roadef, Nantes, janvier 00 (1 exposé) ; Groupe Mode, Toulouse, mars 00.
- 4th Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, mars 00 (1 exposé).
- Continuous Optimization, Oberwolfach, janvier 00 (1 exposé invité).
- École de printemps “Computational Combinatorial Optimization”, Dagstuhl, mai 00 (1 mini-cours).
- Advances in Convex Analysis and Global Optimization, Samos, juin 00 (1 exposé invité).
- École d’hiver “New methods in discrete mathematics”, l’Alpe d’Huez, mars 00.
- “Nonlinear Analysis 2000”, New-York, juin 00 (1 exposé invité).
- Début de collaboration avec l’Université de Berkeley : “Worst-case value at risk and robust asset allocation”. Invitation 1 semaine, juillet 00.
- Int. Symp. on Mathematical Programming, Atlanta, août 00 (2 exposés invités).
- Séminaires aux universités d’Avignon, Grenoble, Montpellier, Rome ; Air France.

## 10 Bibliographie

### Ouvrages et articles de référence de l’équipe

- [1] J. BONNANS, J. GILBERT, C. LEMARÉCHAL, C. SAGASTIZÁBAL, *Optimisation Numérique: aspects théoriques et pratiques*, Springer Verlag, Paris, 1997.
- [2] J.-B. HIRIART-URRUTY, C. LEMARÉCHAL, *Convex Analysis and Minimization Algorithms*, Springer-Verlag, 1993.
- [3] C. LEMARÉCHAL, F. OUSTRY, «Semi-definite relaxations and Lagrangian duality with application to combinatorial optimization», *Rapport de Recherche n° 3710*, INRIA, 1999, soumis à *Mathematical Programming*.

## Thèses et habilitations à diriger des recherches

- [4] M. MEDINA, *Ségrégation par solidification en présence de convection naturelle ou forcée*, thèse de doctorat, INPG, 2000.

## Articles et chapitres de livre

- [5] L. BACAUD, C. LEMARÉCHAL, A. RENAUD, C. SAGASTIZÁBAL, «Bundle methods in stochastic optimal power management: a disaggregated approach using preconditioners», *Computational Optimization and Applications*, 2001, à paraître.
- [6] C. HELMBERG, F. OUSTRY, «Bundle Methods to minimize the maximum eigenvalue function», *in: Handbook on Semidefinite Programming. Theory, Algorithms and Applications*, L. V. R. Saigal et H. Wolkovicz (éditeurs), Kluwer, 2000.
- [7] C. LEMARÉCHAL, F. OUSTRY, «Nonsmooth algorithms to solve semidefinite programs», *in: Advances in Linear Matrix Inequality Methods in Control*, L. E. Ghaoui et S.-I. Niculescu (éditeurs), *Advances in Design and Control, 2*, SIAM, 2000, p. 57–77.
- [8] C. LEMARÉCHAL, A. RENAUD, «A geometric study of duality gaps, with applications», *Mathematical Programming*, 2001, à paraître.

## Communications à des congrès, colloques, etc.

- [9] B. BRAAMS, F. OUSTRY, «Hartree-Fock variational problem: NP-hardness and semidefinite relaxations», *in: Nonlinear Analysis 2000*, New York, 2000.
- [10] R. GONZALEZ, G. REYERO, E. ROFMAN, «On coupled systems and decomposition techniques related to jonction problems. Study of the symmetric case», *in: Optimal Control and Partial Differential Equations*, J. Menaldi, E. Rofman, A. Sulem (éditeurs), IOS Press, Amsterdam, 2001, à paraître.
- [11] P. MEURDESOF, «Strengthening the Lovász  $\vartheta(\overline{G})$  bound for Graph Coloring», *in: Math.Prog. Symp.*, Atlanta, 2000.
- [12] P. MEURDESOF, «Un renforcement de la borne de Lovász pour la coloration de graphes», *in: Congrès Roadef*, Nantes, 2000.

## Divers

- [13] C. CHRISTIN, «Méthode de relaxation semi-définie appliquée au traitement numérique des signaux», 2000, Rapport de stage.
- [14] C. TRIADOU, «Optimisation semi-définie appliquée à la synthèse d'ondelettes», 2000, Rapport de stage.
- [15] S. VOLLE, «Méthode de faisceaux pour la résolution de gros problèmes linéaires : expérimentation sur un problème de routage de communications multipoints», 2000, Rapport de stage.