

Structures discrètes et applications en optimisation continue

/

Discrete structures with applications in continuous optimization

Le présent document est une proposition de sujet de thèse de doctorat offerte au LAMSADE (Laboratoire d'analyse et modélisation de systèmes pour l'aide à la décision, UMR 7243), unité de recherche de l'université Paris Dauphine-PSL. Le début de cette thèse est prévu en octobre 2021.

This document summarizes a thesis proposal offered at LAMSADE (Laboratoire d'analyse et modélisation de systèmes pour l'aide à la décision, UMR 7243), a research institute within Université Paris Dauphine-PSL. The intended starting date is October, 2021.

Sujet en français

Mots-clés Structures discrètes, Théorie des graphes, Optimisation continue, Optimisation sans dérivées.

Thématique/Contexte

Les structures discrètes telles que les graphes jouent un rôle majeur en sciences des données, à la fois dans la construction de modèles d'apprentissage, mais aussi en tant qu'ensembles dans lesquels évoluent les paramètres discrets de tels modèles que l'on cherchera à optimiser. Par ailleurs, de nombreux algorithmes d'optimisation continue reposent implicitement sur des choix effectués parmi un ensemble discret de possibilités, par exemple dans la sélection d'un sous-ensemble de jeu de données pour construire un gradient stochastique. Comme en témoigne l'effort récent de tisser des interactions entre les communautés d'optimisation combinatoire, d'optimisation continue et d'apprentissage, il existe un intérêt fort pour des algorithmes d'optimisation et d'apprentissage qui soient capables de traiter efficacement de tels aspects discrets.

Cette thèse s'inscrit à l'interface entre optimisation discrète et continue, et a pour but de proposer des liens entre les deux points de vue lorsque des structures discrètes sont en jeu.

Description de la problématique de recherche

Cette thèse vise à étudier des structures discrètes sous-jacentes aux problèmes et algorithmes d'optimisation. Ces structures peuvent être aussi bien explicites dans la formulation du problème d'optimisation

(contraintes d'intégralité sur les variables) qu'implicites durant la résolution de ce problème (choix discrets de sous-procédures à utiliser). On cherchera ainsi à identifier ces structures, et à les interpréter via des outils de mathématiques discrètes, tels que les graphes ou les matroïdes.

Notre cas d'étude privilégié sera celui de l'optimisation sans dérivées, une sous-branche de l'optimisation continue dont le but consiste à minimiser une fonction accessible sous la forme d'une boîte noire, souvent coûteuse: les problèmes de ce type en sciences des données incluent la calibration d'hyperparamètres et la recherche d'architectures neuronales. Les algorithmes développés dans ce cadre reposent généralement sur l'utilisation de directions ou de modèles construits par échantillonnage, ce qui induit naturellement une combinatoire liée à la dimension du problème. On cherchera à expliciter la nature combinatoire de ces structures afin de développer de nouvelles techniques d'optimisation sans dérivées. En parallèle, on considèrera également l'utilisation de ces structures dans le cas où les variables du problème sont elles-mêmes discrètes.

Dans un second temps, la thèse s'intéressera à la classe de problèmes d'optimisation sous-modulaire, qui contient à la fois des instances discrètes et continues, et a fait l'objet de récents travaux en apprentissage. On se concentrera notamment sur la notion de convexité discrète, dans le but de développer des algorithmes efficaces pour le cas discret basés sur l'utilisation de la convexité au sens continu. Réciproquement, nous étudierons aussi l'intérêt d'exploiter de telles structures convexes au sens discret au sein d'algorithmes d'optimisation continue.

Project description in English

Keywords Discrete structures, Graph theory, Continuous Optimization, Derivative-free optimization.

Context

Discrete structures such as graphs are ubiquitous in data science. Indeed, they arise both as building blocks of learning models and as sets containing the possible values of discrete parameters of these models, that are to be optimized upon. In addition, numerous continuous optimization algorithms rely implicitly on discrete decisions, e.g. while selecting a subset of examples within a dataset to build a stochastic gradient. As illustrated by recent initiatives to promote interactions between combinatorial optimization, continuous optimization, and machine learning, there is a demand for handling these discrete aspects in order to produce efficient optimization and learning techniques.

The thesis lies at the interface of discrete and continuous optimization, and will seek to build connections between both domains when the problems at hand involve discrete structures.

Thesis goals

This thesis will study discrete structures within optimization problems and algorithms. These structures can be explicit in the problem formulation (like integrality constraints), but may also arise in a more subtle, implicit manner in an algorithmic process (choosing among a discrete set of options at every iteration). We will identify both types of discrete structures, and provide interpretations based on discrete tools such as graphs or matroids.

Our main case study will be that of derivative-free optimization, a subfield of continuous optimization that aims at minimizing an expensive functional only available in a black-box form, which corresponds to several learning tasks such as hyperparameter calibration and neural architecture

search. The optimization techniques tailored to this framework typically exploit directions or models obtained via sampling, which naturally introduces combinatorial aspects related to the problem dimension. We will formalize these discrete aspects, and propose new derivative-free approaches in connections with this new interpretation. At the same time, we will investigate the use of such structures to handle discrete variables in derivative-free optimization.

A second avenue for investigation will be that of submodular optimization, a class of problems that includes both discrete and continuous formulations, and has recently attracted interest in machine learning. We will be particularly interested in the related notion of discrete convexity, aiming at developing efficient methods in a discrete setting based on the extensive body of work available in continuous convex optimization. Conversely, we will also study discrete convex structures that arise in continuous optimization methods.

Bibliographie/References

- [1] C. Audet and W. Hare. *Derivative-Free and Blackbox Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer International Publishing, 2017.
- [2] F. Bach. Submodular functions: from discrete to continuous domains. *Math. Program.*, 175:419–459, 2019.
- [3] L. Chen, M. Zhang, H. Hassani, and A. Karbasi. Black box submodular maximization: Discrete and continuous settings. In *Proceedings of the Twenty Third International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS)*, volume 108, pages 1058–1070. PMLR, 2020.
- [4] S. Gratton, C. W. Royer, L. N. Vicente, and Z. Zhang. Direct search based on probabilistic feasible descent for bound and linearly constrained problems. *Comput. Optim. Appl.*, 72:525–559, 2019.
- [5] J. Larson, S. Leyffer, P. Palkar, and S. M. Wild. A method for convex black-box integer global optimization. *J. Global Optim.*, 2021.
- [6] K. Murota. *Discrete convex analysis*. SIAM Monographs on Discrete Mathematics and Applications. SIAM, Philadelphia, 2003.
- [7] A. Schrijver. *Combinatorial Optimization – Polyhedra and Efficiency*. Algorithms and Combinatorics. Springer, Berlin Heidelberg, 2003.