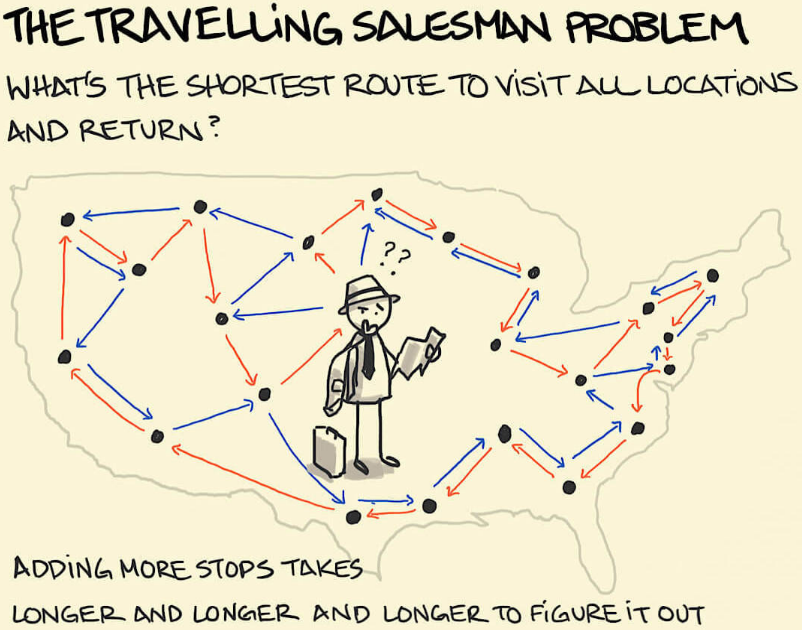
Résolution de problèmes de recherche opérationnelle par l'approche des flots sur les variétés

Guillaume Bouleux

Univ Lyon, INSA Lyon, UJM-Saint Etienne, DISP

guillaume.bouleux@insa-lyon.fr

GDR RO - PMNL
Montpellier 2022


THE TRAVELLING SALESMAN PROBLEM
WHAT'S THE SHORTEST ROUTE TO VISIT ALL LOCATIONS AND RETURN?
??
ADDING MORE STOPS TAKES
LONGER AND LONGER AND LONGER TO FIGURE IT OUT

Flots de gradient et système de Toda

Réécriture du problème sous forme matricielle

$$P_{opt} = \arg\min_{P \in \mathcal{P}} \text{Trace}\left(D^T P^T A P\right)$$

- $\hookrightarrow$ D est la matrice de distance entre les villes
- $\hookrightarrow$ A la matrice d'adjacence du graphe complet associé
- $\hookrightarrow$ P est la matrice de permutation des villes.
- $\hookrightarrow$ $\mathcal{P}$ est l'ensemble des matrices de rotation.

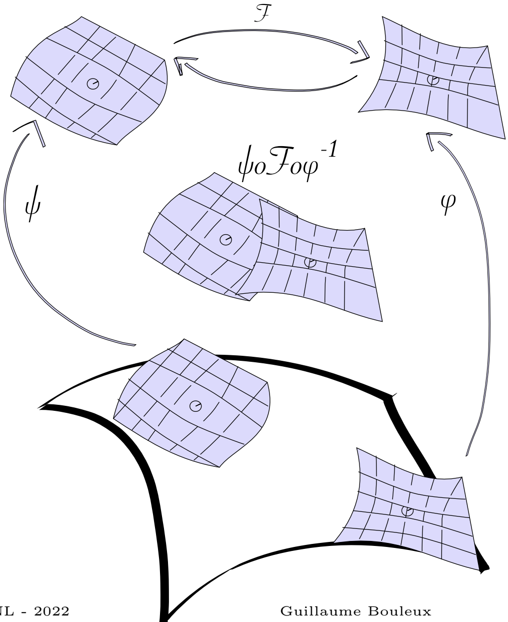
L'ensemble $\mathcal{P}$ est un sous-ensemble et un sous-groupe de l'ensemble des matrices orthogonales

$$O(n) = \left\{P \in GL(n) | PP^T = P^T P = I\right\}$$

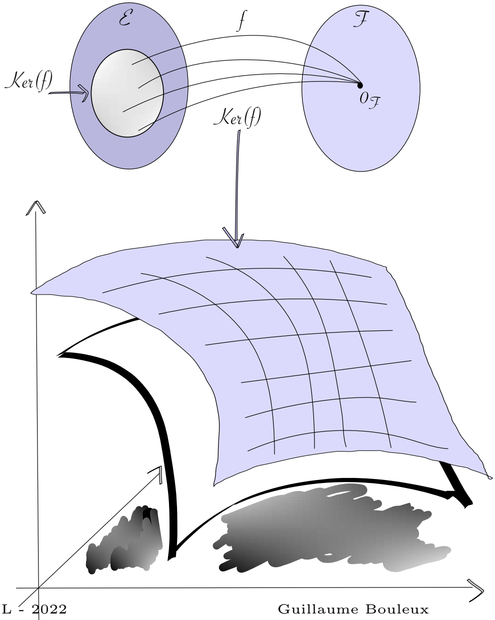
On se placera également sur l'ensemble des matrices de rotation

$$SO(n) = \left\{P \in O(n) | P^T P = I, det(P) = 1\right\}$$

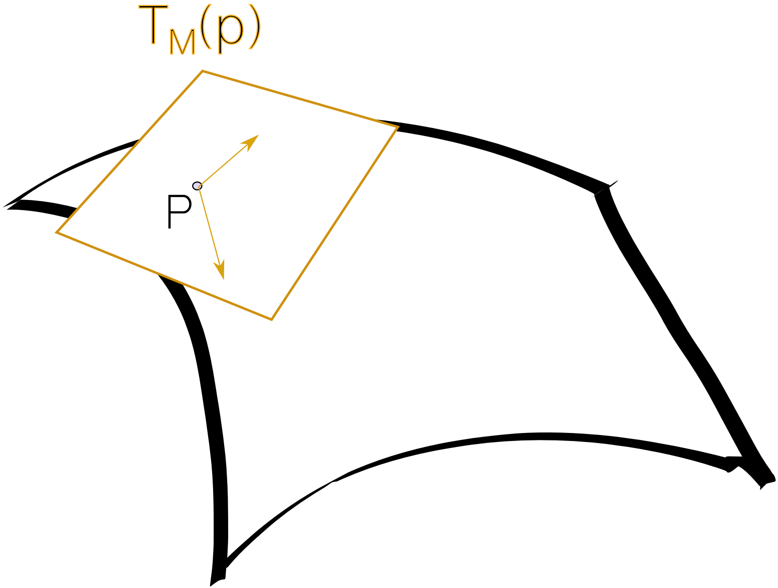
Quelques approches pour définir une variété



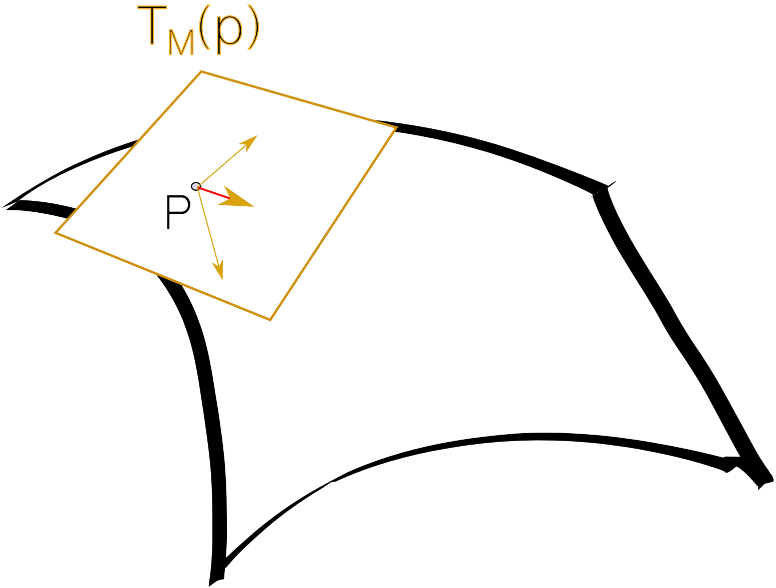
Quelques approches pour définir une variété



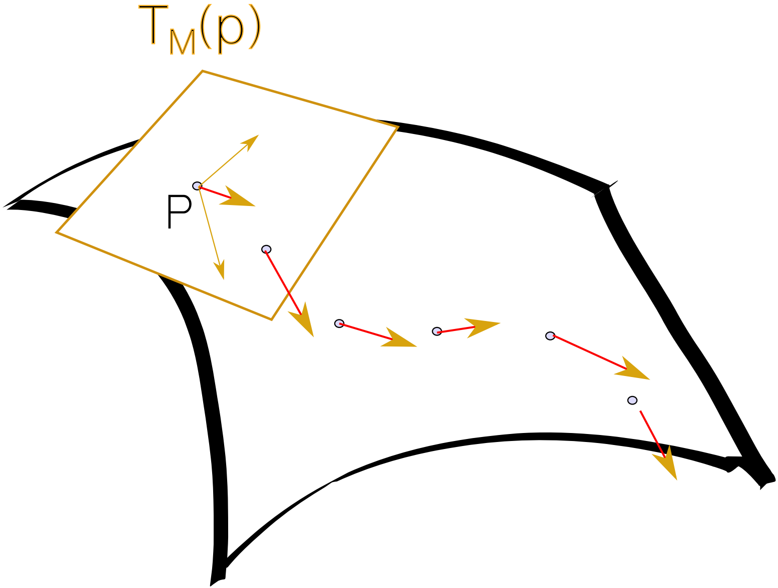
Espace Tangent



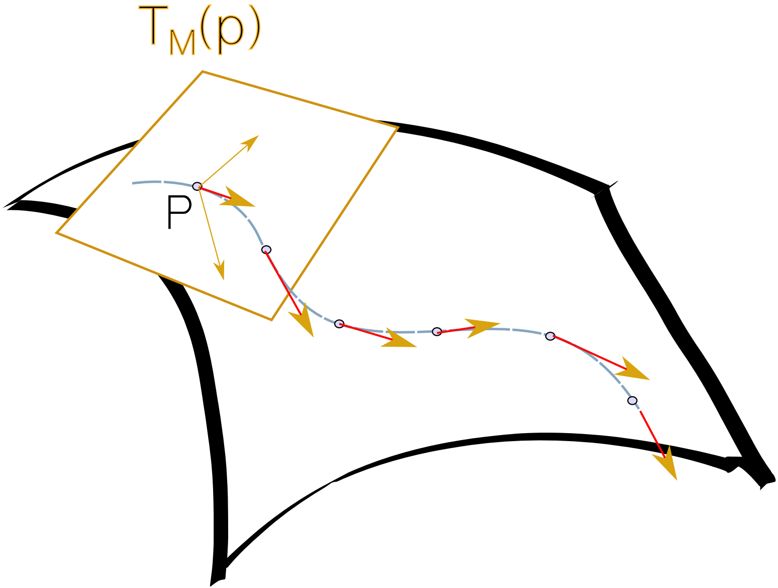
Espace Tangent



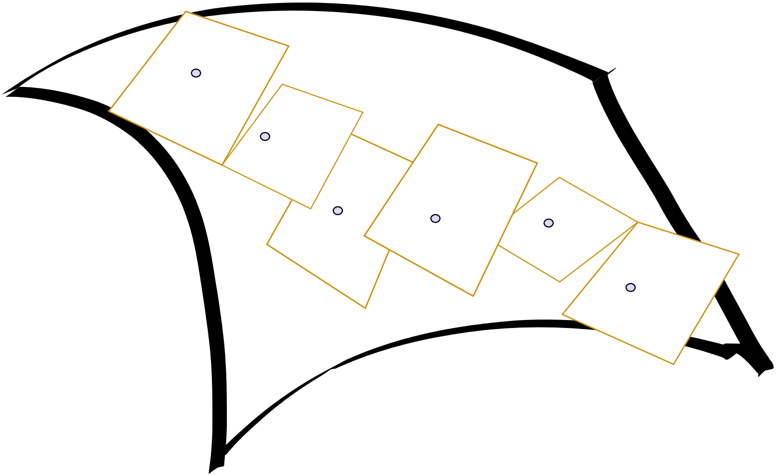
Champ de vecteurs et Flot



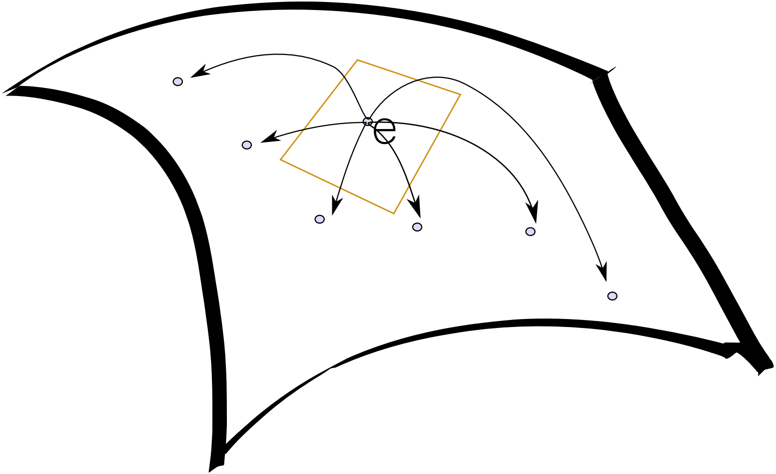
Champ de vecteurs et Flot



Groupe de Lie



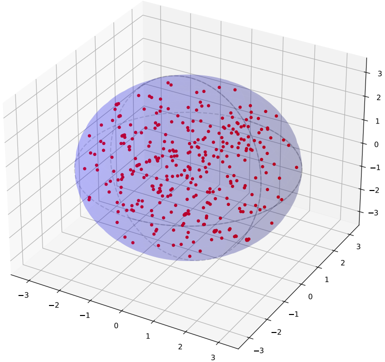
Groupe de Lie



Représentation de SO(3)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -w_1 & w_2 \\ w_1 & 0 & -w_3 \\ -w_2 & w_3 & 0 \end{pmatrix} \quad , A \in so(3) \text{ et } (w_1, w_2, w_3) \in \mathbb{R}^3$$

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



Une représentation du groupe SO(3)

Les solutions - flots de gradient

Dans ce contexte il est montré que la solution optimale est

$$\dot{P} = -\nabla f(P)$$

avec $f(P) = \mathrm{Trace}\left(D^T P^T A P\right)$ et $\dot{P} = \lim_{t \to 0} \frac{P_{k+1} - P_k}{t}$ qui constitue bien un système dynamique, un flot sur la variété $SO(n)$.

$\hookrightarrow$ Cela signifie que la trajectoire va rester sur $SO(n)$.

Le flot de gradient a finalement pour expression

$$\begin{aligned} \dot{P} &= P\left[P^T A P, D\right] \\ &= P(P^T A P D - D P^T A P) \end{aligned}$$

avec $[.,.]$ le commutateur ou crochet de Lie

Exemples de résolution

(Continuous relaxations for the traveling salesman problem)

$$\begin{aligned}\dot{P} &= -(1-k)P(P^TAPD - DP^TAP) \\ &\quad -k\,P(P\circ P)^TP - P^T(P\circ P)\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}\dot{P} &= -P(P^TAPD - DP^TAP) \\ &\quad -\lambda P(P\circ P)^TP - P^T(P\circ P) \\ \dot{\lambda} &= \frac{1}{3}Trace\left(P^T(P-(P\circ P))\right)\end{aligned}$$

Avec $\circ$ le produit de Hadamard entre les matrices.
Possibilité algoritmique de résolution par itération Eulérienne du type

$$\begin{aligned}P_{k+1} &= P_k - \alpha_k \nabla f(P) \\ &= P_k - \alpha_k P[P_k^TAP_k, D]\end{aligned}$$

Peu recommandé à moins d'avoir une très bonne initialisation.
Il est préférable d'utiliser le gradient de Riemann et de résoudre

$$P_{k+1} = P_k e^{\alpha_k[P_k^TAP_k, D]}$$

Orbite adjointe

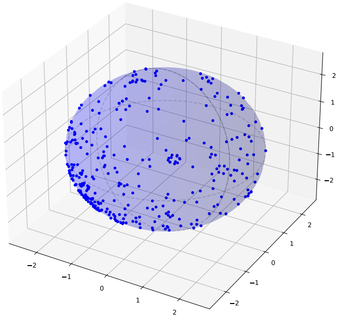
la représentation du groupe de Lie G sur son algèbre de Lie $\mathfrak{g}$ est donnée par

$$Ad(g)X = gXg^{-1}, g \in G \; X \in \mathfrak{g}$$

et l'orbite adjointe par

$$\mathcal{O}(X) = \{Ad(g)X | g \in G, X \in \mathfrak{g}\}$$

.

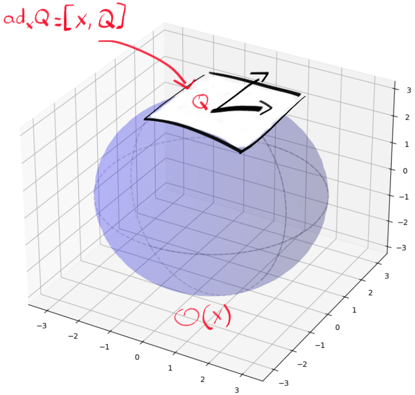


Représentation adjointe

De plus, la représentation du groupe de Lie sur son algèbre de Lie est quant à elle définie par

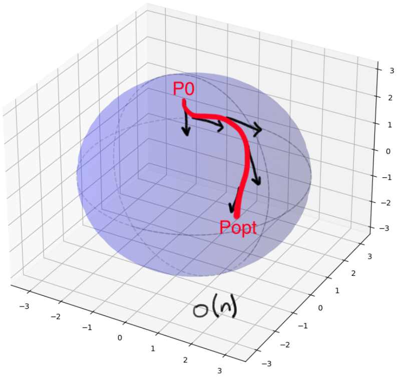
$$ad_x(Y) = [X, Y]$$

.



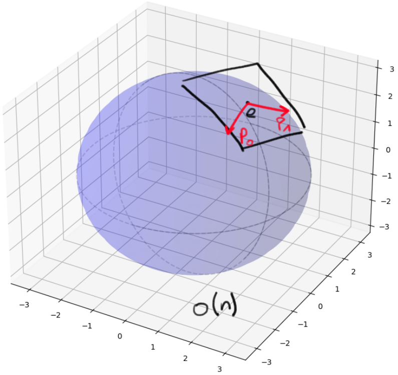
Flot sur O(n) (SO(n)) et flot sur les orbites adjointes

L'optimisation se faisant sur l'espace O(n) ou sur SO(n), nous pouvons utiliser la structure de groupe de Lie



Flot sur O(n) (SO(n)) et flot sur les orbites adjointes

Ainsi, le flot de gradient $P[P^T AP, D]$ peut s'étudier sur l'algèbre de Lie.



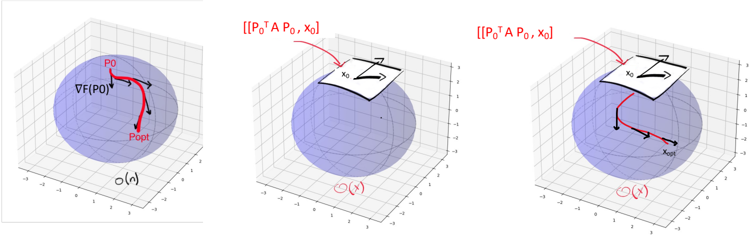
En particulier, la forme $P^T AP$ correspond à une représentation

Flot sur O(n) (SO(n)) et flot sur les orbites adjointes

Comme $A, D \in Sym(n)$ l'ensemble des matrices symétriques alors

$\hookrightarrow$ la représentation adjointe $P^T AP$, $\forall P \in \mathrm{O(n)}$ est une orbite de l'action adjointe pour A complexifié.

$\hookrightarrow$ elle décrit un champs iso-spectral.



Le double crochet de Lie

Par le changement de variable

$$H = P^T A P$$

On obtient l'expression du flot

$$\dot{H} = -\left[H, \left[H, d\psi(H)\right]\right]$$

Pour toute fonction objective ψ.

En particulier pour $\psi(H) = \mathrm{Trace}(HA)$ alors on a

$$\dot{H} = \left[H, \left[H, A\right]\right]$$

Relation avec les valeurs propres

Pour toutes matrices d'adjacence diagonales le flot

$$\dot{\tilde{H}} = [\tilde{H}, [\tilde{H}, \Lambda]]$$

avec $\Lambda = U^T A U$, $\tilde{H} = U^T H(t) U$, $U \in O(n)$ pour lequel $\tilde{H} = i\ \tilde{H}$ et $\Lambda = i\ \Lambda$

est

un champ de gradient sur l'espace tangent de l'orbite adjointe

$$\mathcal{O}(A_0) = P A_0 P^{-1}$$

.

- $\hookrightarrow$ C'est la projection du flot P le long de la courbe $P(t)A_0P^{-1}(t)$.
- $\hookrightarrow$ $P(t)A_0P^{-1}(t)$ est une iso-surface spectrale

Ce qui constitue la route vers un système de Toda !

Système de Toda

(Double bracket flows, toda flows and rigid body toda)

$$H(x,y) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} y_k^2 + \sum_{k=1}^{n-1} e^{x_k - x_{k+1}}$$

Avec les équations Hamiltonienne

$${}_k = \frac{\partial H}{\partial y_k} = y_k \qquad {}_k = -\frac{\partial H}{\partial x_k} = e^{x_{k-1}-x_k} - e^{x_k - x_{k+1}}$$

Grâce au changement de variables proposé par Flaschka

$$a_k = \frac{1}{2}e^{(x_k - x_{k+1})/2} \quad b_k = -\frac{1}{2}y_k$$

les équations Hamiltoniennes peuvent se mettre sous la forme d'une paire de Lax

$$\frac{d}{dt}L = [B, L]$$

où

$$\mathrm{L} = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & 0 & \cdots & & 0 \\ a_1 & b_1 & a_2 & \cdots & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & \cdots & & b_{n-1} & a_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \qquad \mathrm{B} = \begin{pmatrix} 0 & a_1 & 0 & \cdots & & 0 \\ -a_1 & 0 & a_2 \cdots & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & \cdots & & 0 & a_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & -a_{n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

Que faut-il retenir ?

- ↪ Nouveau solveur possible par ces approcahes moyennant une heuristique (2-opt, k-opt,. . .)
- ↪ L'approche par les variétés permet de s'affranchir de certaines contraintes
- ↪ Un formalisme mathématique bien précis : variétés, formes symplectiques, flots,. . .

Vers l'infini et l'au-delà !

Theorem (Schur-Horn)

Soit H une matrice hermitienne et $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ avec $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ et $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ les valeurs propres de H et ses éléments diagonaux. Soit Σ_n le groupe de permutation agissant sur $\mathbb{R}^N$, alors a $\subset \Sigma_n \lambda$ qui est l'enveloppe convexe des permutations de λ.

- ↪ L'ensemble des équilibres du champs de vecteur gradient $\dot{\tilde{H}}$ coïncident avec les valeurs critiques des permutations.
- ↪ L'image de la projection orthogonale de l'orbite adjointe est le polytope des permutations.
- ↪ Le champ de vecteur gradient est un système de Toda ...