

Imports classiques

Nous allons tout d'abord lancer les imports classiques

```
In [ ]: %load_ext autoreload
%autoreload 2

%matplotlib inline

# Imports classiques
# - %load_ext autoreload et %autoreload 2 permettent de recharger automatiquement les modules modifiés sans relancer le kernel (pratique en développement)
# - %matplotlib inline active l'affichage des figures à l'intérieur du notebook
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import Optim as opt
import functions as func
```

Vous devez copier-coller ici votre algorithme de descente de Wolfe ainsi que

```
ls_wolfe_step_is_one
```

```
In [ ]: def ls_wolfe(x,function,step,descent,f,df) :
    """
        Recherche de pas satisfaisant les conditions de Wolfe (Armijo + curva

        Paramètres
        -----
        x : np.array
            Point courant.
        function : objet
            Doit fournir value(x) et grad(x) pour évaluer la fonction et son
        step : float
            Pas initial proposé pour la recherche de pas.
        descent : np.array
            Direction de descente (par exemple -H*grad ou -grad).
        f : float
            Valeur de la fonction en x (f(x)).
        df : np.array
            Gradient en x (\nabla f(x)).

        Retour
        -----
        x2, f2, df2, step2 : (np.array, float, np.array, float)
            Nouveau point, valeur, gradient et pas choisi.
    """
    step_min,step_max=0.,np.inf
    i=0
    mycontinue=True
    # dérivée directionnelle initiale <=> (\nabla f(x) , d); devrait être
    scal=np.dot(df,descent)
    step2=step
    # paramètres c1 (Armijo) et c2 (curvature)
    eps1,eps2=0.1,0.9
    while mycontinue :
        i=i+1
        mycontinue=False
        x2=x+step2*descent
        f2=function.value(x2)
        # Condition d'Armijo : si non satisfaite, réduire le pas
        if f2>f+eps1*step2*scal :
            step_max=step2
            step2=0.5*(step_min+step_max)
            mycontinue=True
        else :
            # Vérifier la condition de curvature
            df2=function.grad(x2)
            if np.dot(df2,descent) < eps2*scal :
                # si la condition de curvature n'est pas satisfaite, augm
                step_min=step2
                step2=min(0.5*(step_min+step_max),2*step_min)
                mycontinue=True
    return x2,f2,df2,step2

def ls_wolfe_step_is_one(x,function,step,descent,f,df) :
    """Variante qui force le pas initial à 1 (utile pour certaines méthod
    return ls_wolfe(x,function,1.,descent,f,df)
```

In []:

L-BFGS

Nous allons nous intéresser à l'algorithme Limited Memory BFGS. Cet algorithme est du type BFGS, c'est à dire qu'il estime l'inverse de la Hessienne de f . Le L dans le nom de l'algorithme signifie qu'il est à mémoire limitée, c'est à dire qu'il ne garde en mémoire que les L dernières itérations de calcul pour estimer la Hessienne.

L'algorithme est le suivant : Nous sommes à l'itération k , nous notons x_k l'itéré et nous avons stocké les vecteurs suivants pour tout $k_{min} \leq i \leq k$.

$$s_i = x_i - x_{i-1} \text{ et } y_i = \nabla f(x_i) - \nabla f(x_{i-1})$$

Et on a aussi stocké $\rho_i = \frac{1}{(s_i, y_i)}$. Tous les ρ_i doivent être positifs. L'algorithme est le suivant

$$r = -\nabla f(x_k)$$

Pour $i = k, k-1, \dots, k_{min}$

$$\alpha_i = \rho_i(s_i \cdot r)$$

$$r = r - \alpha_i y_i$$

$$r = \frac{(s_{k_{min}} \cdot y_{k_{min}})}{(y_{k_{min}} \cdot y_{k_{min}})} r \text{ Pour } i = k_{min}, k_{min} + 1, \dots, k //$$

$$\beta_i = \rho_i(y_i \cdot r)$$

$$r = r + (\alpha_i - \beta_i) s_i$$

rend r

Fonctions sur les listes

Vous aurez sans doute besoin des fonctions suivantes pour les listes

```

In [ ]: # Exemples d'opérations sur les listes en Python
# Ces courtes démonstrations servent à rappeler la syntaxe et quelques mé

a=[(2*i,3*i) for i in range(5)] # création d'une liste de tuples
print(a)
print(a[3],a[-1]) # accès par index (positif et négatif)
print('*** Pop ***')
a.pop(0) # suppression du premier élément
print(a)
print('*** Parcours ***')
for e,f in a : # parcours de la liste de tuples
    print(e,'et',f)
print('*** Parcours Inverse***')
for e in reversed(a) : # parcours inversé
    print(e)
b=[e**2 for e,f in a] # comprehension de liste
print(b)
print('*** Parcours de deux listes ensembles***')
for (m,(t,p)) in zip(b,a) : # zipper deux listes pour itérer en par
    print(m,'et',t,'et encore',p)
print('*** Append ***')
print(b)
b.append(546) # ajout d'un élément
print(b)
print('*** Inversion ***')
c=list(reversed(b)) # inversion en créant une nouvelle liste
print(c)

print(len(b)) # longueur de la liste

[(0, 0), (2, 3), (4, 6), (6, 9), (8, 12)]
(6, 9) (8, 12)
*** Pop ***
[(2, 3), (4, 6), (6, 9), (8, 12)]
*** Parcours ***
2 et 3
4 et 6
6 et 9
8 et 12
*** Parcours Inverse***
(8, 12)
(6, 9)
(4, 6)
(2, 3)
[4, 16, 36, 64]
*** Parcours de deux listes ensembles***
4 et 2 et encore 3
16 et 4 et encore 6
36 et 6 et encore 9
64 et 8 et encore 12
*** Append ***
[4, 16, 36, 64]
[4, 16, 36, 64, 546]
*** Inversion ***
[546, 64, 36, 16, 4]
5

```

Class BFGS

Créez une classe `BFGS` ci dessous, sa fonction `__init__` sera de la forme `__init__(self, nb_stock_max=8)` où `nb_stock_max` est le nombre maximum d'itérations prises en compte. Cette fonction créera aussi une liste vide appelée `stock` qui conserve les s_i, g_i, ρ_i . Elle devra aussi créer une liste vide nommée `last_iter`.

```
In [ ]: class BFGS() :
    """Classe L-BFGS (mémoire limitée) qui stocke les derniers (s,y,rho)

    nb_stock_max : nombre maximum de couples (s,y) à conserver.
    """

    def __init__(self, nb_stock_max=8, verbose=True):
        self.nb_stock_max = nb_stock_max
        # ``stock`` contiendra des triplets [s, y, rho]
        self.stock = []
        # ``last_iter`` garde le dernier (x, g) pour calculer s et y
        self.last_iter = []

    def push(self, x, g):
        """Enregistre (s_k, y_k, rho_k) calculés à partir de x et g actuels

        Si rho <= 0, on détecte un problème numérique et on vide le stock
        """

        if self.last_iter != []:
            s = x - self.last_iter[0]
            y = g - self.last_iter[1]
            denom = np.dot(y, s)
            # éviter division par zéro
            if denom == 0:
                rho = np.inf
            else:
                rho = 1.0 / denom
            if rho > 0:
                # maintien de la taille maximale du stock
                if len(self.stock) == self.nb_stock_max:
                    self.stock.pop(0)

            self.stock.append([s, y, rho])

        else:
            # en cas d'instabilité, on vide le stock (sécurité simple)
            self.stock = []

        # sauvegarde pour la prochaine itération
        self.last_iter = [x, g]

    def get(self, grad):
        """Calcule la direction r = H_k * (-grad) via la "two-loop recursion

        Si aucun élément en stock, on rend simplement -grad.
        """
```

```

"""
q = -grad
if len(self.stock) == 0 :
    # pas d'information de quasi-Newton disponible
    pass
else :
    # Liste pour stocker les alpha temporaires (dans l'ordre d'apparition)
    L_a = []

    # Première passe : on parcourt le stock de la fin au début
    for s,y,rho in reversed(self.stock) :
        alpha = rho * np.dot(s,q)
        L_a.append(alpha)
        q = q - alpha * y

    L_a.reverse()

    # Scaling initial (gamma) : assure une bonne échelle initiale
    gamma = np.dot(self.stock[0][0], self.stock[0][1]) / np.dot(s,y)

    # B0 est implicitement gamma*I, on applique au vecteur q
    B0 = gamma * np.ones(len(grad))

    q = B0 * q

    # Deuxième passe : on réapplique les s avec les beta correspondants
    for (s, y, rho), alpha in zip(self.stock, L_a):
        beta = rho * np.dot(y, q)
        q = q + s * (alpha - beta)

return q

def dc(self,x,function,df) :
    """Mise à jour du stock puis calcul de la direction via `get`.

    Conçu pour être passé comme paramètre `dc` aux algorithmes de descente
    """
    self.push(x,df)
    return self.get(df)

```

Push

Nous allons maintenant créer une fonction `push(self, x, grad)` qui enregistre s_k, g_k, ρ_k . Pour cela, on a besoin de $x_{k-1}, \nabla f(x_{k-1})$. Si ils existent, ils se trouvent dans la liste `self.last_iter`. Ensuite on peut calculer s_k, g_k et ρ_k .

Si ρ_k est positif, alors on enregistre le triplet (s_k, g_k, ρ_k) à la fin de la liste `self.stock`, en vérifiant `self.stock` ne doit contenir au maximum que les dernières `self.nb_stock_max` itérations (si nécessaire on retire le tout premier élément de `self.stock`).

Si ρ_k est négatif, quelquechose c'est mal passé, on vide le `self.stock`.

A la fin, on n'oublie pas de mettre x_k et $\nabla f(x_k)$ dans `self.last_iter` pour être sûr de les y trouver la prochaine fois.

Get

Nous allons maintenant créer une fonction `get(self, grad)` qui modifie la direction de descente et applique l'algorithme ci-dessus. Cette fonction doit nous rendre le `r` final. Si le `self.stock` est vide, cette fonction doit nous rendre `-grad`

dc

Nous créons maintenant une fonction `dc(self,x,function,df)` qui applique tout d'abord `self.push` puis `self.get`, elle rend le résultat de la fonction de `self.get`.

C'est l'heure de tester ...

Lancez une méthode de Newton_Wolfe sur votre fonction préférée et à chaque itération calculez ce que donnerait un L-BFGS. Comparez les angles des directions entre la méthode de Newton et le L-BFGS, comparez aussi le ration des normes. Ensuite lancez un LBFGS avec recherche de pas de Wolfe sur vos tests préférez et obtenez le comportement de Newton_Wolfe sans le calcul de la Hessienne...

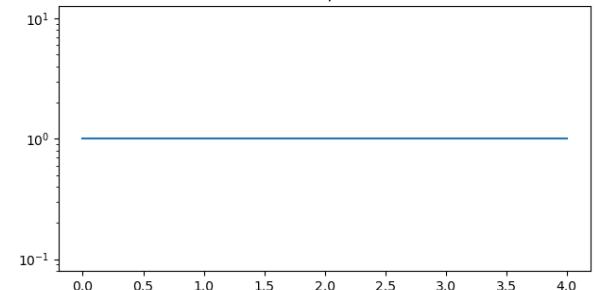
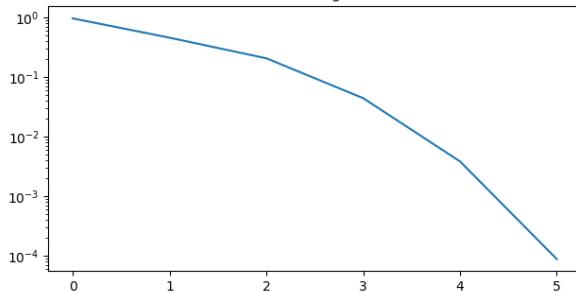
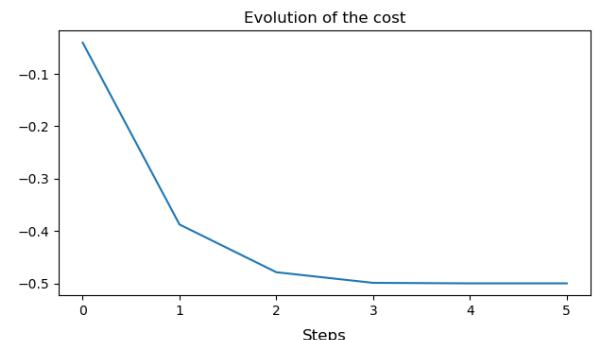
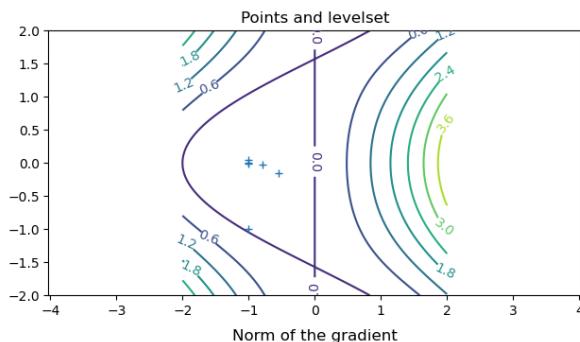
```
In [ ]:
f=func.rosen()
x0=np.array([-1,-1])
B=BFGS()
res=opt.main_algorithm(f,0.1,x0,ls=ls_wolfe_step_is_one,dc=B.dc,verbose=True)
opt.graphical_info(res,f)

f=func.Rosen()
x0=np.array([8,2])
B=BFGS()
res=opt.main_algorithm(f,1,x0,ls=ls_wolfe_step_is_one,dc=B.dc,verbose=False)
print("iter : {:3d} cost :{:1.3e} grad :{:1.3e} comp=[{:4d},{:4d},{:4d}]"
      .format(len(res['list_costs']),res['list_costs'][-1],res['list_grad']
opt.graphical_info(res,f)
```

Fonction (x,y) --> 1/2*x^2 +x*cos(y)

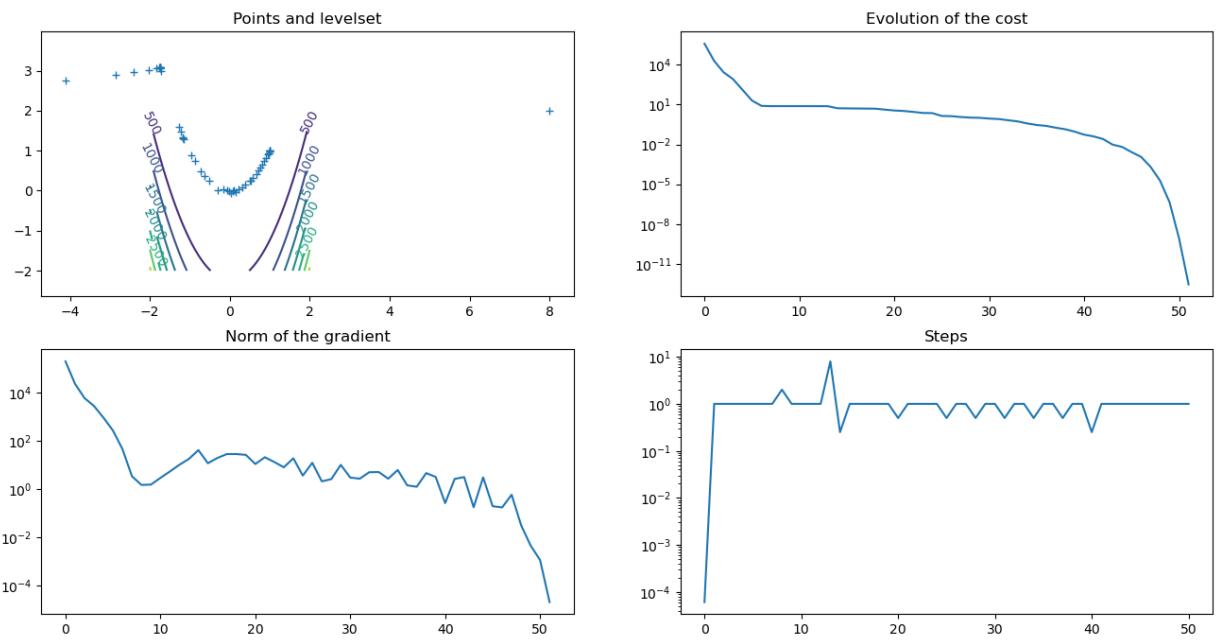
```
iter= 0 f=-4.030e-02 df=9.589e-01 comp=[ 1, 1, 0]
iter= 1 f=-3.876e-01 df=4.552e-01 comp=[ 2, 3, 0]
iter= 2 f=-4.787e-01 df=2.055e-01 comp=[ 3, 5, 0]
iter= 3 f=-4.990e-01 df=4.415e-02 comp=[ 4, 7, 0]
iter= 4 f=-5.000e-01 df=3.843e-03 comp=[ 5, 9, 0]
iter= 5 f=-5.000e-01 df=8.867e-05 comp=[ 6, 11, 0]
```

Success !!! Algorithm converged !!!



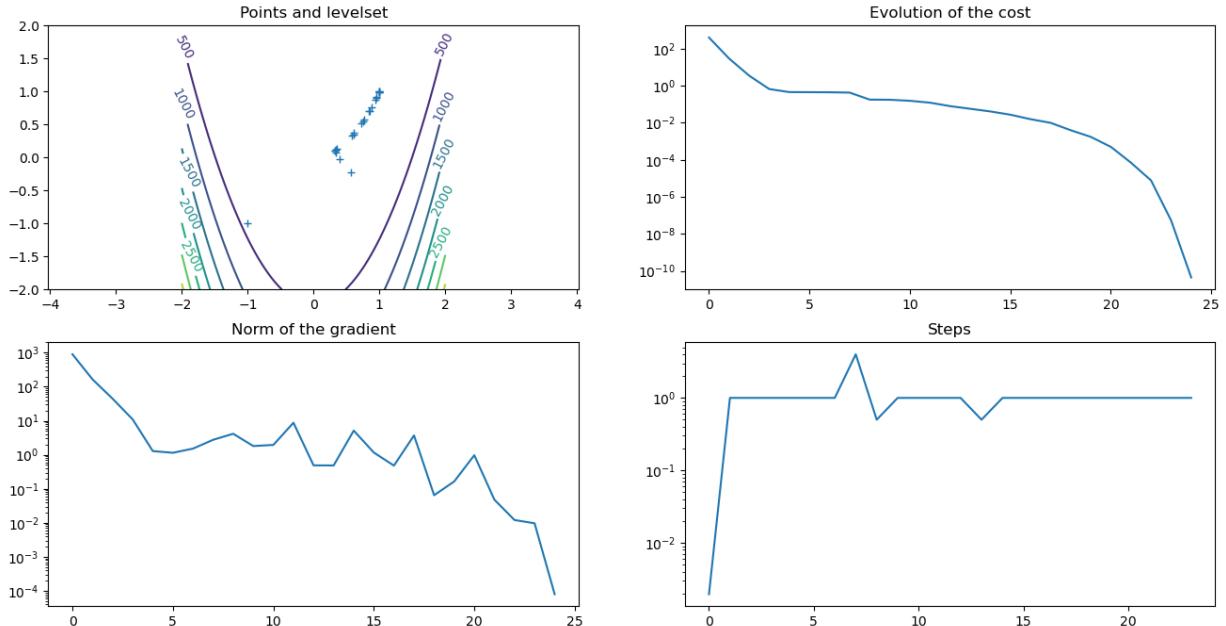
Fonction (x,y) --> 100*(y-x^2)^2 +(1-x)^2

```
iter : 52 cost :2.871e-13 grad :2.117e-05 comp=[ 80, 107, 0]
```



```
In [ ]: f=func.Rosen()
x0=np.array([-1,-1])
B=BFGS()
res=opt.main_algorithm(f,1,x0,ls=ls_wolfe_step_is_one,dc=B.dc,verbose=False)
print("iter : {:3d} cost :{:1.3e} grad :{:1.3e} comp=[{:4d},{:4d},{:4d}]"
      .format(len(res['list_costs']),res['list_costs'][-1],res['list_grad']
opt.graphical_info(res,f)
```

Fonction $(x,y) \rightarrow 100*(y-x^2)^2 + (1-x)^2$
iter : 25 cost : $4.379e-11$ grad : $7.989e-05$ comp=[38, 51, 0]



Comparaison

Votre objectif est de regarder la documentation de `scipy.optimize`, de comprendre le code suivant et de comparer votre algorithme de BFGS+Wolfe avec les algorithmes disponibles dans `scipy.optimize`

```
In [ ]: # Comparaison avec scipy.optimize.minimize
# On utilise la fonction de Rosenbrock comme exemple; minimize utilise des méthodes bien optimisées (BFGS, L-BFGS-B, etc.) ; on compare le comportement et le nombre d'évaluations.
f=func.Rosen()
x0=np.array([-1,-1])
from scipy.optimize import minimize
# appelée avec jac=f.grad pour fournir le gradient analytique
res=minimize(f.value,x0,jac=f.grad)
```

Fonction (x,y) --> 100*(y-x^2)^2 +(1-x)^2

```
In [ ]: # Affichage du résultat renvoyé par scipy et des compteurs d'évaluations
print(res)
print(f.nb_eval,f.nb_grad)
```

```
message: Optimization terminated successfully.
success: True
status: 0
fun: 1.8499214547674284e-16
x: [ 1.000e+00  1.000e+00]
nit: 31
jac: [ 2.763e-07 -1.261e-07]
hess_inv: [[ 5.083e-01  1.016e+00]
            [ 1.016e+00  2.036e+00]]
nfev: 40
njev: 40
40 40
```

```
In [ ]:
```

```
In [ ]:
```