

ECN 6338 Cours 4

Optimisation Statique sans contraintes

William McCausland

2023-02-01

Survol du cours 4

Optimisation univariée

1. méthode de dichotomie (bracketing)
2. méthode de Newton (ou de Newton-Raphson)

Exemple, maximisation du profit d'un monopole

1. valeur, gradient et matrice hessienne du profit
2. code pour les évaluations

Optimisation multivariée

1. méthode de Nelder-Mead
2. méthode de Newton
3. méthode de “direction set”
 - a. direction des axes de coordonnées
 - b. direction de descente (opposée au gradient)
 - c. direction Newton
 - d. direction BFGS

Mise en oeuvre en R et résultats

Méthode de dichotomie (bracketing)

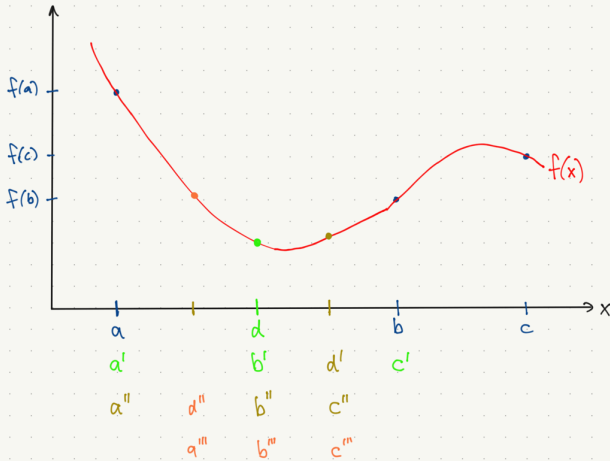


Figure 1: Méthode de dichotomie

Méthode de Newton en une dimension

- ▶ Considérez la fonction $f(x) = x - e^x$.
- ▶ Les deux premières dérivées sont

$$f'(x) = 1 - e^x, \quad f''(x) = -e^x$$

- ▶ $f(x)$ est convexe avec un maximum unique à $x = 0$.
- ▶ L'expansion quadratique de Taylor autour de x^k est

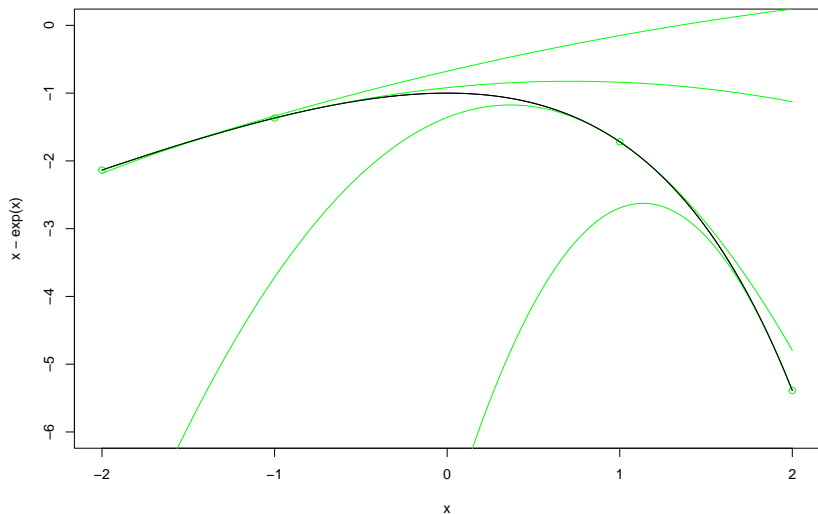
$$g(x) = f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) + \frac{1}{2}f''(x^k)(x - x^k)^2.$$

- ▶ Le maximum de g résoud l'équation $g'(x) = f'(x^k) + f''(x^k)(x - x^k) = 0$.
- ▶ La solution de $g'(x^{k+1}) = 0$ est $x^{k+1} = x^k - f'(x^k)/f''(x^k)$.
- ▶ Notez que

$$-\frac{f'(x)}{f''(x)} = \frac{1 - e^x}{e^x}.$$

- ▶ Pour $x^k \ll 0$, $x^{k+1} - x^k \approx e^{-x} \gg |x|$.
- ▶ Pour $x^k \gg 0$, $x^{k+1} - x^k \approx -1$.

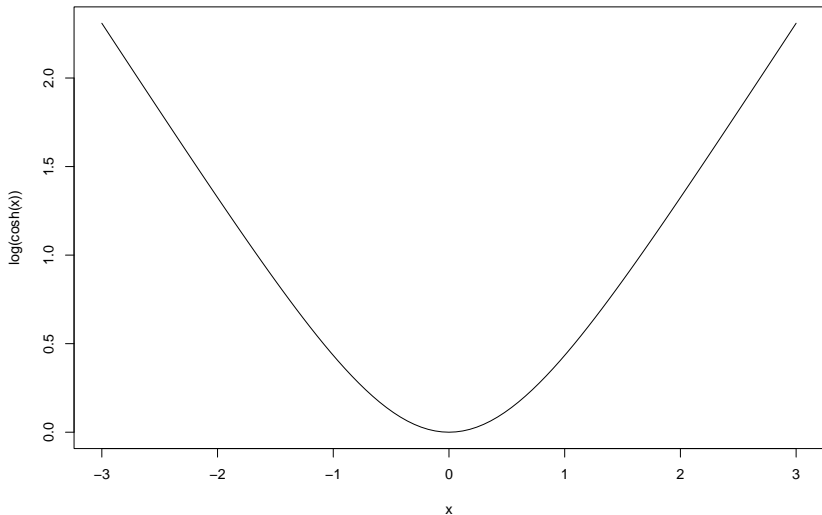
Pas de Newton pour $x = -2, -1, 1, 2$



Un pire cas : minimisation de $f(x) = \log \cosh x$

► $f'(x) = \tanh x$, $f''(x) = (1 - \tanh^2 x)$

```
x = seq(-3, 3, length=101)  
plot(x, log(cosh(x)), type='l')
```



Quasi-Newton en une dimension

- ▶ Supposons que la deuxième dérivée est coûteuse.
- ▶ Au lieu de calculer

$$x^{k+1} - x^k = -f'(x^k)/f''(x^k),$$

on peut calculer

$$x^{k+1} - x^k = -f'(x^k)/h^k,$$

où

$$h^k \equiv \frac{f'(x^k) - f'(x^{k-1})}{x^k - x^{k-1}}.$$

- ▶ h_k est la pente d'une corde qui approxime la pente de la tangente de $f'(x)$ à $x = x^k$.
- ▶ Attention : en plusieurs dimensions $H_k(x^k - x^{k-1}) = \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})$ donne n équations, pas assez pour déterminer H_k .

Problème du monopole (Judd, page 105)

- ▶ Un monopole produit deux biens, en quantités Y et Z .
- ▶ Les coûts de production sont linéaires

$$c_Y(Y) = C_Y Y, \quad c_Z(Z) = C_Z Z,$$

où $C_Y = 0.62$ et $C_Z = 0.60$.

- ▶ La demande est celle d'un consommateur avec utilité

$$U(Y, Z) = u(Y, Z) + M = (Y^\alpha + Z^\alpha)^{\eta/\alpha} + M,$$

où $\alpha = 0.98$, $\eta = 0.85$ et M représente les dépenses en autres biens.

- ▶ La demande est donnée par les équations

$$p_Y = u_Y(Y, Z), \quad p_Z = u_Z(Y, Z),$$

où p_Y et p_Z sont les prix de Y et Z .

Problème du monopole (cont.)

- ▶ Le problème du monopole est la maximisation du profit :

$$\max_{Y, Z \geq 0} \Pi(Y, Z),$$

où

$$\Pi(Y, Z) = Yu_Y(Y, Z) + Zu_Z(Y, Z) - c_Y(Y) - c_Z(Z).$$

- ▶ Le revenu associé à Y est

$$Yu_Y(Y, Z) = Y \frac{\eta}{\alpha} (Y^\alpha + Z^\alpha)^{\eta/\alpha - 1} \alpha Y^{\alpha - 1} = \eta (Y^\alpha + Z^\alpha)^{\eta/\alpha - 1} Y^\alpha$$

- ▶ Après la même démarche pour Zu_Z on peut écrire

$$\begin{aligned} \Pi(Y, Z) &= \eta (Y^\alpha + Z^\alpha)^{\eta/\alpha - 1} (Y^\alpha + Z^\alpha) - c_Y(Y) - c_Z(Z) \\ &= \eta (Y^\alpha + Z^\alpha)^{\eta/\alpha} - C_Y Y - C_Z Z. \end{aligned}$$

Le problème en logarithmes de quantité

- Pour éviter l'évaluation de Π à $Y < 0$ où $Z < 0$, soit $y \equiv \log Y$, $z \equiv \log Z$.
- Notez que $\log(Y^\alpha) = \alpha y$ alors $Y^\alpha = e^{\alpha y}$.
- Le problème s'écrit $\max_{y,z} \pi(y,z)$, où

$$\pi(y,z) = \Pi(e^y, e^z) = \eta(e^{\alpha y} + e^{\alpha z})^{\eta/\alpha} - 0.62e^y - 0.60e^z.$$

Comment faire les graphiques en R

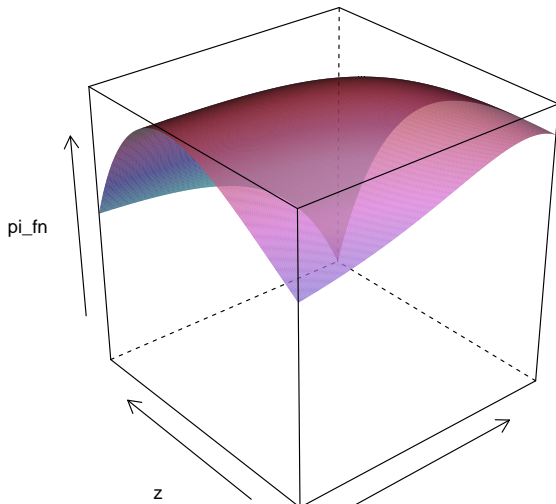
```
source('pi.R')
C = c(0.62, 0.60)           # Coûts marginaux
alpha = 0.98; eta = 0.85    # Paramètres de l'utilité

yz <- as.matrix(expand.grid(seq(-2, 1, length=301),
                             seq(0, 2, length=201)))
colnames(yz) <- c('y', 'z')
df <- data.frame(
  pi_fn = apply(yz, 1, pi_val, C, alpha, eta), yz)
df[1:5,]
```

```
##      pi_fn      y z
## 1 0.2690171 -2.00 0
## 2 0.2691787 -1.99 0
## 3 0.2693416 -1.98 0
## 4 0.2695057 -1.97 0
## 5 0.2696711 -1.96 0
```

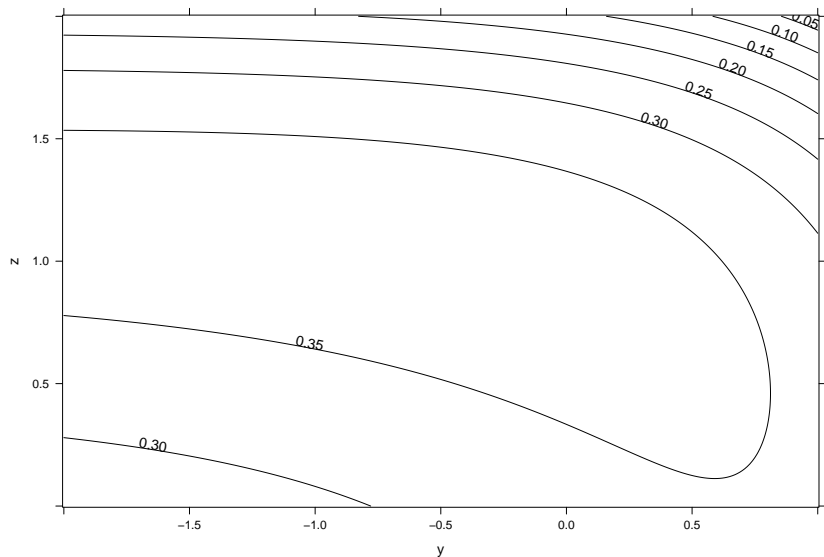
Graphique 1

```
wireframe(pi_fn ~ y*z, data = df, shade=T)
```



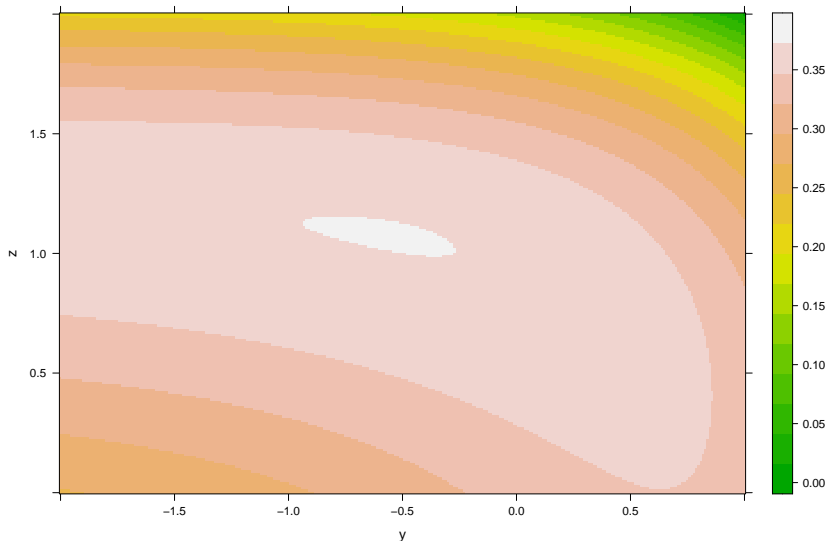
Graphique II

```
contourplot(pi_fn ~ y*z, data=df, cuts=12)
```



Graphique III

```
levelplot(pi_fn ~ y*z, data=df, shade=T, col.regions = terr
```



Gradient et matrice hessienne

Valeur : $\pi(y, z) = \Pi(e^y, e^z) = \eta(e^{\alpha y} + e^{\alpha z})^{\eta/\alpha} - C_Y e^y - C_Z e^z$.

Gradient :

$$\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{x}^\top} = \eta^2 (e^{\alpha y} + e^{\alpha z})^{\eta/\alpha - 1} \begin{bmatrix} e^{\alpha y} \\ e^{\alpha z} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_Y e^y \\ C_Z e^z \end{bmatrix}$$

Matrice hessienne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \pi}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^\top} &= \alpha \eta^2 \left(\frac{\eta}{\alpha} - 1 \right) (e^{\alpha y} + e^{\alpha z})^{\eta/\alpha - 2} \begin{bmatrix} e^{\alpha y} \\ e^{\alpha z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\alpha y} & e^{\alpha z} \end{bmatrix} \\ &\quad + \alpha \eta^2 (e^{\alpha y} + e^{\alpha z})^{\eta/\alpha - 1} \begin{bmatrix} e^{\alpha y} & 0 \\ 0 & e^{\alpha z} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_Y e^y & 0 \\ 0 & C_Z e^z \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Un formule plus générale

► Soit $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ et $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$.

► Alors

$$\frac{\partial f(g(x))}{\partial x} = f'(g(x)) \frac{\partial g(x)}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 f(g(x))}{\partial x \partial x^\top} = f''(g(x)) \frac{\partial g(x)}{\partial x^\top} \frac{\partial g(x)}{\partial x} + f'(g(x)) \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x \partial x^\top}$$

Le calcul du gradient et de la matrice hessienne

```
pi_val_grad_hess <- function(x, C, alpha, eta) {  
  eta_sur_al <- eta/alpha; eta2 = eta * eta  
  X <- exp(x)                # Vecteur de quantités  
  X_al <- exp(alpha*x)       # Vecteur de quantités  $X_i^{\alpha}$   
  Q = sum(X_al)  
  Q_m2=Q^(eta_sur_al-2); Q_m1=Q_m2*Q; Q_m0=Q_m1*Q  
  
  # Valeur v, gradient g, hessienne h du profit pi  
  v = eta*Q_m0 - t(C) %*% X  
  g = (eta2*Q_m1) * X_al - C*X  
  h = (alpha*eta2*(eta_sur_al-1)*Q_m2) * X_al %*% t(X_al) -  
      (alpha*eta2*Q_m1) * diag(X_al) - diag(C*X)  
  list(valeur=v, gradient=g, hessien=h)  
}
```

Vérification numérique des calculs I

```
C = c(0.62, 0.60)           # Coûts marginaux
alpha = 0.98; eta = 0.85    # Paramètres de l'utilité

# Point d'expansion, pas, deuxième point d'évaluation
x1 = c(2, 1)
h = c(-0.001, 0.002)
x2 = x1 + h

# Valeur, gradient, matrice hessienne aux points x1, x2
vgh1 = pi_val_grad_hess(x1, C, alpha, eta)
vgh2 = pi_val_grad_hess(x2, C, alpha, eta)

# Valeur à x2 de deux expansions de Taylor autour de x1
v2_1 = vgh1$ valeur + vgh1$gradient %*% h
v2_2 = v2_1 + 0.5 * t(h) %*% vgh1$hessien %*% h
```

Vérification numérique des calculs II

```
vgh2$valeur - vgh1$valeur
```

```
##                [,1]
```

```
## [1,] 0.0003729129
```

```
v2_1 - vgh1$valeur
```

```
##                [,1]
```

```
## [1,] 0.0003738301
```

```
v2_2 - vgh1$valeur
```

```
##                [,1]
```

```
## [1,] 0.000372913
```

Vérification numérique des calculs III

```
vgh2$gradient - vgh1$gradient
```

```
## [1] 0.0009541977 -0.0004401634
```

```
vgh1$hessien %*% h
```

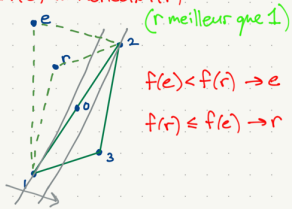
```
## [1]
```

```
## [1,] 0.0009551851
```

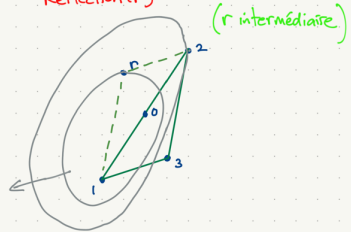
```
## [2,] -0.0004395381
```

Nelder-Mead (méthode de simplex, méthode de polytope)

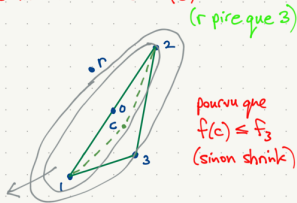
Expansion (e) ou Reflection (r)



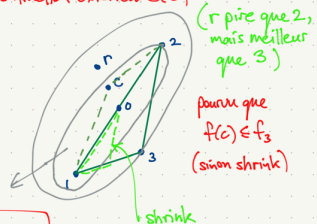
Reflection (r)



Contraction intérieure (c)



Contraction extérieure (c)



$f_3 \geq f_2 \geq f_1$ dans tous les cas

Figure 2: Nelder Mead en deux dimensions

Notes sur la méthode Nelder-Mead

Avantages

- ▶ Simple à programmer, à comprendre
- ▶ Marche pour les fonctions avec des discontinuités, des coudes
- ▶ On fournit seulement le code pour évaluer la fonction (pas de gradient, pas de matrice hessienne).

Inconvénients

- ▶ Lente : elle peut prendre beaucoup d'évaluations

La méthode Newton

La méthode Newton est $x^{k+1} - x^k = -H(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$, où $H(x^k)$ est la matrice hessienne de f évaluée à x^k .

Avantages

- ▶ La convergence est quadratique près de la solution.
- ▶ Elle marche bien quand la matrice hessienne ne change pas beaucoup et reste définie positive.
- ▶ Il y a des modifications qui surmontent souvent les inconvénients.

Inconvénients

- ▶ Elle marche moins bien quand les valeurs propres de $H(x^k)$ deviennent petites ou négatives. (Illustration plus tard.)
- ▶ La matrice hessienne est souvent coûteuse à évaluer.

Méthodes du type “direction set”

L'algorithme générique : faire les étapes suivantes jusqu'à ce que $\|x^k - x^{k+1}\| < \epsilon(1 + \|x^k\|)$, pour les tolérances δ et ϵ choisies :

1. Calculer une direction $s^k \in \mathbb{R}^n$.
2. Faire une recherche linéaire : trouver $\lambda_k = \arg \min_{\lambda} f(x^k + \lambda s^k)$.
3. $x^{k+1} = x^k + \lambda_k s^k$.

Si $\|\nabla f(x^k)\| < \delta(1 + f(x^k))$, réclamer le succès.

Quelques directions possibles

Directions possibles

1. direction des axes de coordonnées : $s^k = e_{(k \bmod n+1)}$
2. direction opposée au gradient : $s^k = -\nabla f(x^k)$
3. direction Newton : $s^k = -H(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$
4. direction BFGS : $s^k = -H_k^{-1} \nabla f(x^k)$ (H_k décrit plus tard)

Considérations pour faire un choix de direction

1. Coût d'évaluation de $f(x^k)$, $\nabla f(x^k)$ et $H(x^k)$.
2. Coût de ∇f relatif aux coûts de ses éléments :
 - a. un cas extrême : $f(x) = f_1(x_1) + \dots + f_n(x_n)$.
 - b. un cas avec "rendements à l'échelle" : $f(x) = g(h(x))$, avec g et h scalaires : $g'(h(x))$ est un factor commun du gradient.
3. Variations de $H(x)$ et la courbature de la fonction.
4. Régions de non-convexité.
5. Alignement des valeurs propres de la matrice hessienne et les axes de coordonnées.
6. Besoin de calculer la matrice hessienne de toute façon?

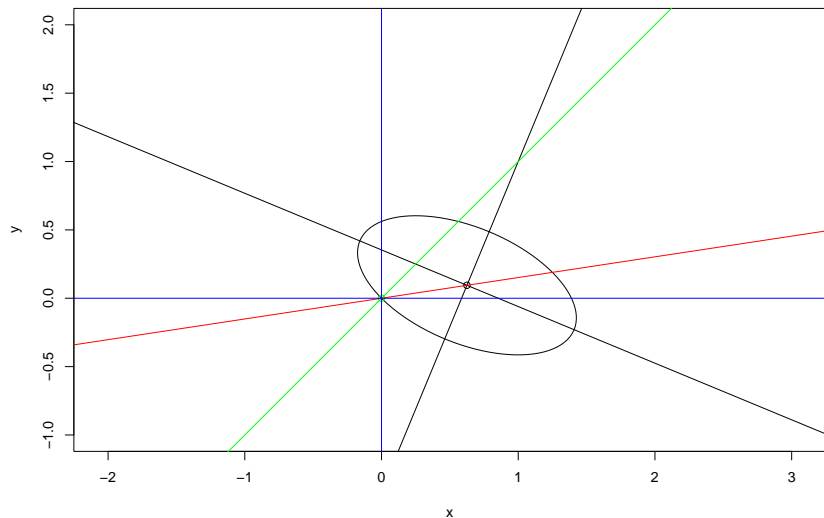
Illustration des directions

Dans les graphiques suivantes,

- ▶ Le point du départ (x^k) et le gradient sont normalisés :
 - ▶ $x^k = (0, 0)$ (vert)
 - ▶ $\nabla f(x^k) = (-1, -1)$ (direction en vert)
- ▶ La matrice hessienne est spécifiée en termes de la décomposition en éléments propres $H = QDQ^\top$ où Q est la matrice de rotation pour un angle θ , $D = \text{diag}(\lambda)$
- ▶ En noir :
 - ▶ le point x^{k+1} après un pas de Newton
 - ▶ la courbe de niveau de l'approximation quadratique
 - ▶ les vecteurs propres (directions de courbature maximale et minimale)
- ▶ En rouge : la direction de Newton

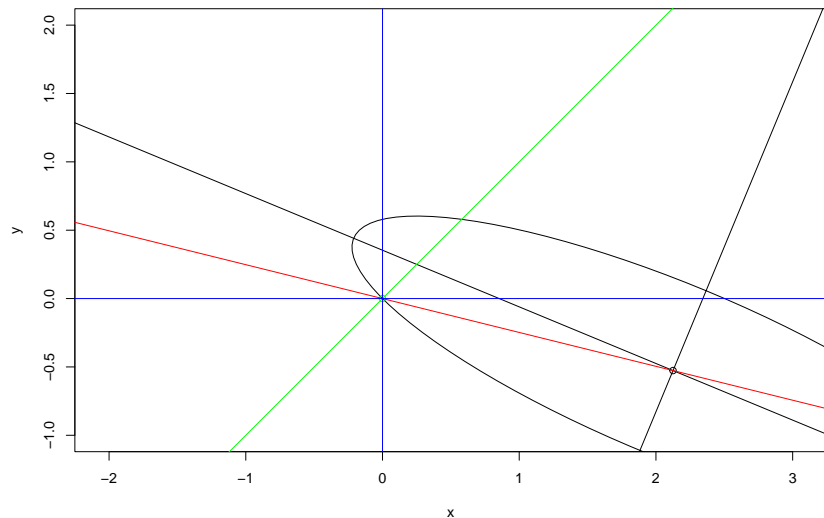
Example 1

```
source('conic.R'); grad <- c(-1, -1)
nc <- Newton_conic(grad, theta=pi/8, lambda=c(1, 4))
Newton_plot(grad, nc)
```



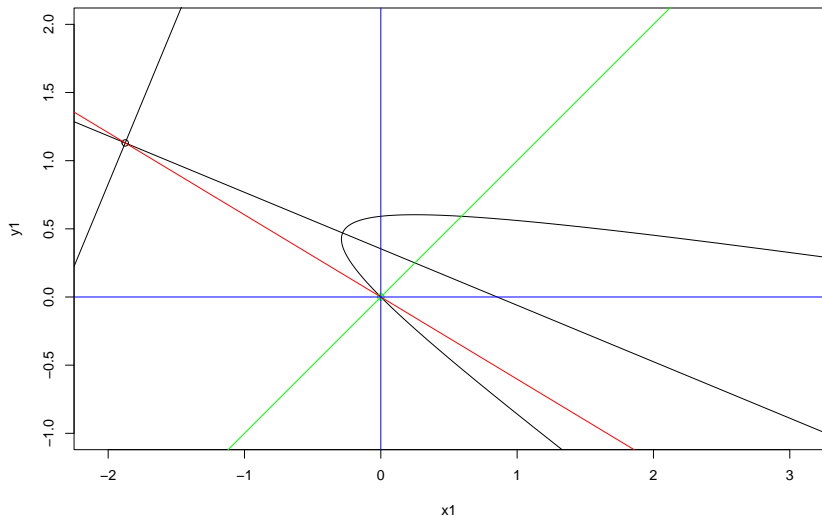
Example 2

```
nc <- Newton_conic(grad, theta=pi/8, lambda=c(0.25, 4))
Newton_plot(grad, nc)
```



Example 3

```
source('conic.R')  
nc <- Newton_conic(grad, theta=pi/8, lambda=c(-0.25, 4))  
Newton_plot(grad, nc)
```



La méthode BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

- ▶ Les méthodes quasi-Newton (comme BFGS) utilisent une matrice H_k au lieu de la matrice hessienne de la méthode Newton.
- ▶ Deux conditions désirables : (les deux tiennent pour BFGS)
 - ▶ condition de corde pour H_k :

$$H_k(x^k - x^{k-1}) = \nabla f(x^k)^\top - \nabla f(x^{k-1})^\top$$

- ▶ H_k définie positive (une garantie que $s_k \equiv -H_k^{-1}\nabla f(x^k)$ est une direction de descente)
- ▶ La mise à jour de H_k est

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k z_k z_k^\top H_k}{z_k^\top H_k z_k} + \frac{y_k y_k^\top}{y_k^\top z_k},$$

où $z_k = x^{k+1} - x^k$, $y_k = \nabla f(x^{k+1})^\top - \nabla f(x^k)^\top$.

Mise à jour de rang un

Problème : résoudre la suite de systèmes $y_k = A_k b_k$, où $A_{k+1} = A_k + u_k u_k^\top$.

La solution directe prend $O(n^3)$ opérations :

- ▶ mise à jour A_k , $O(n^2)$,
- ▶ décomposition de cholesky, $O(n^3)$,
- ▶ substitutions avant et arrière, $O(n^2)$.

Une solution plus efficace implique la mise à jour de A_k^{-1} , avec le formule [Sherman-Morrison](#) :

$$(A \pm uu^\top)^{-1} = A^{-1} \mp \frac{A^{-1}uu^\top A^{-1}}{1 + u^\top A^{-1}u}.$$

La mise à jour prend $O(n^2)$ opérations :

- ▶ $v = A^{-1}u$, $O(n^2)$,
- ▶ Numérateur, vv^\top , $O(n^2)$; dénominateur, $1 + u^\top v$, $O(n)$
- ▶ $b_k = A_k^{-1}y_k$, $O(n^2)$.

Résultats, Nelder-Mead

```
source('pi.R')  
optim(c(1,1), pi_minus, gr=pi_grad_minus, C, alpha, eta,  
      method='Nelder-Mead')
```

```
## $par  
## [1] -0.5627079  1.0769163  
##  
## $value  
## [1] -0.3731764  
##  
## $counts  
## function gradient  
##          53          NA  
##  
## $convergence  
## [1] 0  
##  
## $message  
## NULL
```


Résultats, BFGS

```
optim(c(1,1), pi_minus, gr=pi_grad_minus, C, alpha, eta,  
      method='BFGS')
```

```
## $par  
## [1] -0.5561409  1.0758744  
##  
## $value  
## [1] -0.3731763  
##  
## $counts  
## function gradient  
##          25          23  
##  
## $convergence  
## [1] 0  
##  
## $message  
## NULL
```

Programmation linéaire

Le problème canonique est

$$\max_{x \in \mathbb{R}^n} c^T x \text{ tel que } Ax \leq b, x \geq 0.$$

Méthodes par points intérieurs (crédit, Wikipédia)

