

# ECN 6338 Cours 4

## Optimisation Statique sans contraintes

William McCausland

2025-02-03

# 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

# Notes sur l'optimisation univariée

- ▶ Utile directement
- ▶ Utile pour les problèmes multivariés où la stratégie d'optimisation consiste en la répétition des étapes suivantes :
  - ▶ choix d'une direction de recherche,
  - ▶ optimisation univariée dans la direction de recherche (line search).

# Méthode de dichotomie (bracketing) pour un minimum

Il faut commencer dans un état  $(a, b, c)$ ,  $a < b < c$  où  $f(b) < \min(f(a), f(c))$ .

- ▶ Si la fonction est continue et cette condition tient, il doit y avoir un minimum local dans l'intervalle  $[a, c]$ .
- ▶ À chaque iteration, on calcule un nouvel état qui remplit les mêmes conditions.
- ▶ L'intervalle  $[a, c]$  rapetisse à chaque itération.
- ▶ On arrête quand  $c - a < \epsilon$ , où  $\epsilon$  mesure la tolerance.

# Une itération de la méthode de dichotomie

Les étapes pour trouver un état  $(a', b', c')$ ,  $a' < b' < c'$  où  $f(b') < \min(f(a'), f(c'))$  et  $c' - a' < c - a$  :

1. Trouver  $d$  :

$$d = \begin{cases} \frac{a+b}{2} & b - a < c - b, \\ \frac{b+c}{2} & b - a \geq c - b. \end{cases}$$

2. Évaluer  $f(d)$ .

3. Trouvez  $(a', b', c')$  :

$$(a', b', c') = \begin{cases} (d, b, c) & d < b, f(d) > f(b), \\ (a, d, b) & d < b, f(d) < f(b), \\ (b, d, c) & d > b, f(d) < f(b), \\ (a, b, d) & d > b, f(d) > f(b). \end{cases}$$

# Méthode de dichotomie (graphique)

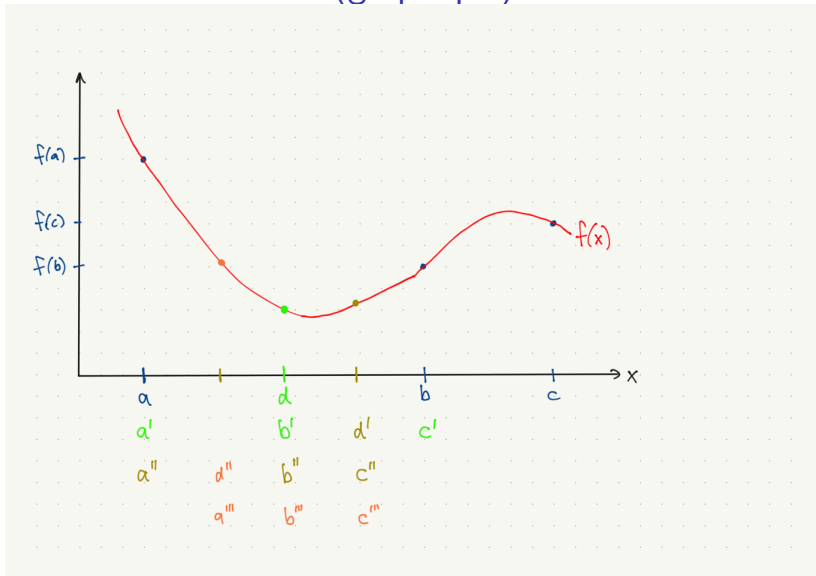


Figure 1: Méthode de dichotomie pour trouver un minimum

# Notes sur la méthode de dichotomie

## Avantages

- ▶ L'intervalle rapetisse toujours par au moins  $1/4$  par itération.
- ▶ Une seule évaluation de  $f(\cdot)$  par itération ; pas de dérivées à évaluer.
- ▶ Robuste aux fonctions avec des coudes et des parties concaves.

## Désavantages

- ▶ On ne peut pas profiter de l'information dans les dérivées.

# Méthode de Newton en une dimension pour un maximum

- ▶ 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

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

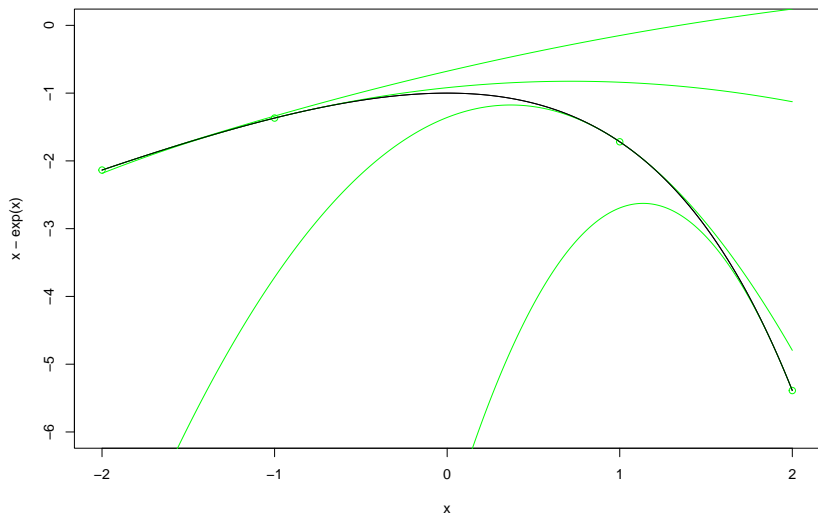
- ▶ Le maximum de l'expansion  $g$  résoud l'équation  $g'(x) = f'(x^k) + f''(x^k)(x - x^k) = 0$ .
- ▶ La solution de  $g'(x^{k+1}) = 0$  est  $x^{k+1} = x^k - f'(x^k)/f''(x^k)$ .
- ▶ Notez que

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

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



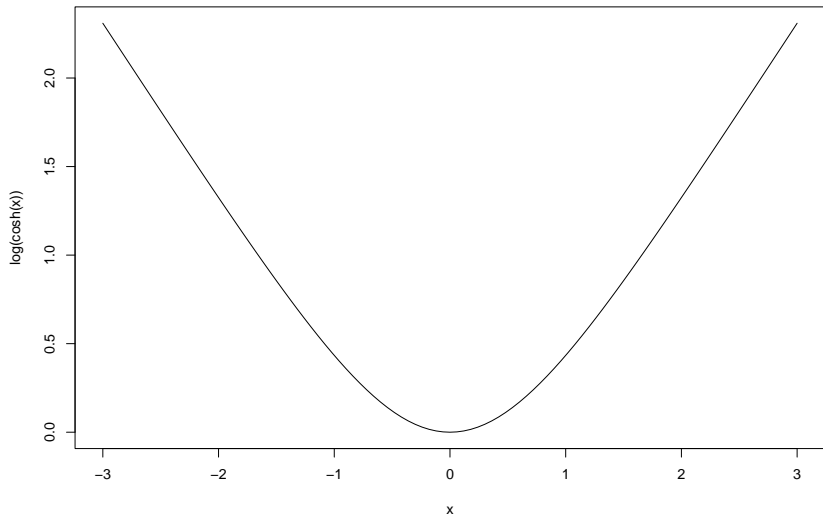
Pas de Newton pour  $x = -2, -1, 1, 2$



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

►  $f'(x) = \tanh x$ ,  $f''(x) = (1 - \tanh^2 x) > 0$

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



# Notes sur la méthode de Newton

## Avantages

- ▶ Convergence très rapide près de la solution, où la deuxième dérivée ne change pas beaucoup.

## Désavantages

- ▶ La méthode ne marche pas quand la fonction n'est pas concave (max) ou convexe (min).
- ▶ Même pour une fonction concave (max) ou convexe (min)  $x^k$  peut diverger.
- ▶ Il faut calculer deux dérivées de la fonction.

## 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 l'équation analogue  $H_k(x^k - x^{k-1}) = \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})$  donne  $n$  équations, pas assez pour déterminer  $H_k$ ,  $n \times n$  et symétrique.

## 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 pour  $Y$  et  $Z$  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 (suite)

- ▶ 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  $\Pi$  à  $Y < 0$  où  $Z < 0$ , soit  $y \equiv \log Y$ ,  $z \equiv \log Z$ .
- Notez que  $\log(Y^\alpha) = \alpha y$  et  $Y^\alpha = e^{\alpha y}$ .
- 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

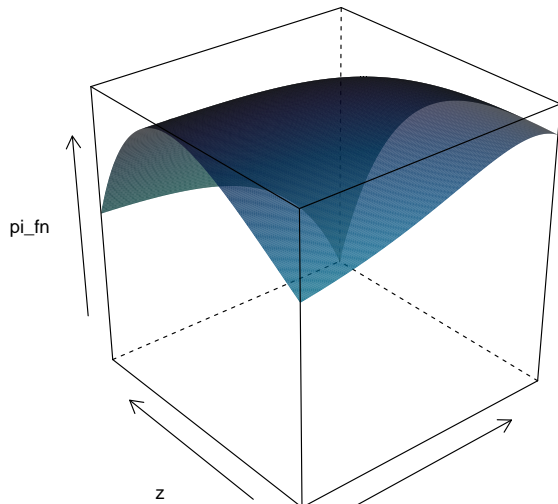
yz <- as.matrix(expand.grid(seq(-2, 1, length=301),
                             seq(0, 2, length=201)))
colnames(yz) <- c('y', 'z')
df <- data.frame(
  pi_fn = apply(yz, 1, pi_val, C, alpha, eta), yz)
df[1:5,]
```

```
##      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
```



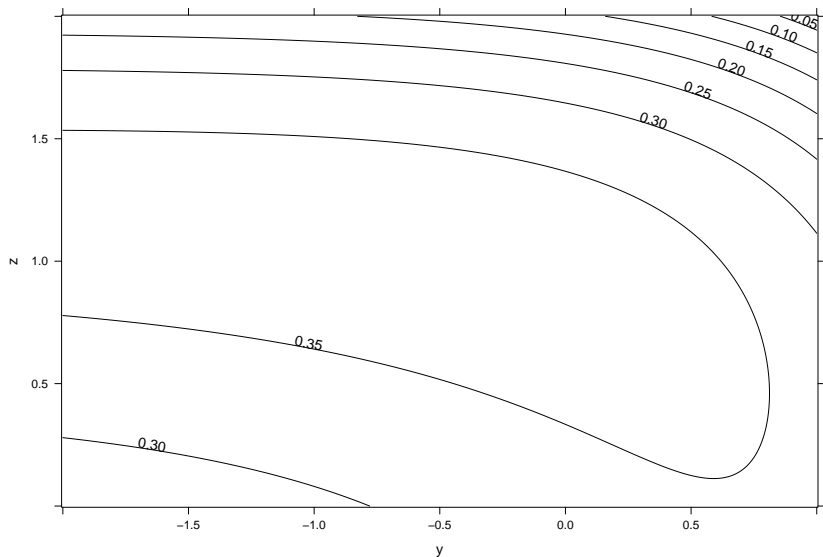
# Graphique 1

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



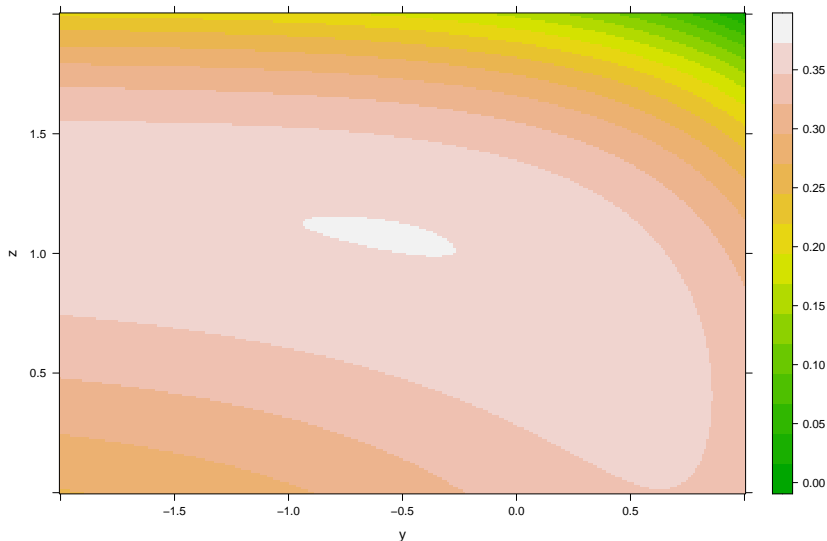
## Graphique II

```
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 du profit du monopole

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 :

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

## 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)

(Conventions de la page Wikipedia et non du livre de Judd, illustration de la recherche d'un minimum)

En  $n$  dimensions, l'état est  $x_1, \dots, x_{n+1}$  (sommets d'un simplexe) tel que

$$f(x_1) < f(x_2) < \dots < f(x_n) < f(x_{n+1}).$$

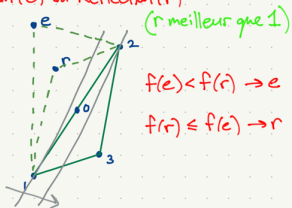
Autres points d'intérêt :

- ▶  $x_0$ , le centroïde des points  $x_1, x_2, \dots, x_n$ ,
- ▶  $x_r = x_0 + \alpha(x_0 - x_{n+1})$ ,  $\alpha > 0$ , un point de reflection (r).
- ▶  $x_e = x_0 + \gamma(x_0 - x_{n+1})$ ,  $\gamma > \alpha$ , un point d'expansion (e).

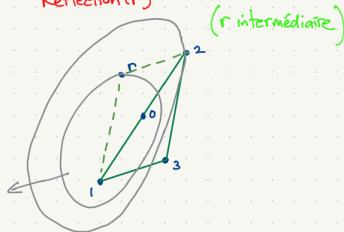
Une étape donne un autre ensemble de  $n + 1$  points, qu'il faut trier.

# Nelder-Mead, graphiques

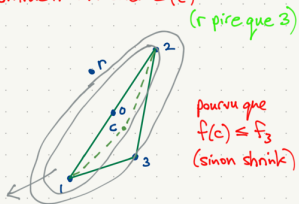
Expansion (e) ou Reflection (r)



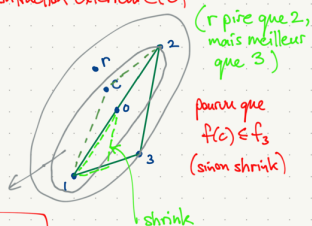
Reflection (r)



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  $\delta$  et  $\epsilon$  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 ; sinon, indiquer la convergence à un point non-optimal.

# Quelques directions possibles (pour un minimum)

## 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  $\nabla f$  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 de la courbature de la fonction.
4. Régions de non-convexité.
5. Alignement des vecteurs propres de la matrice hessienne et les axes de coordonnées.
6. Besoin de calculer la matrice hessienne de toute façon?

# Illustration des directions (pour un minimum)

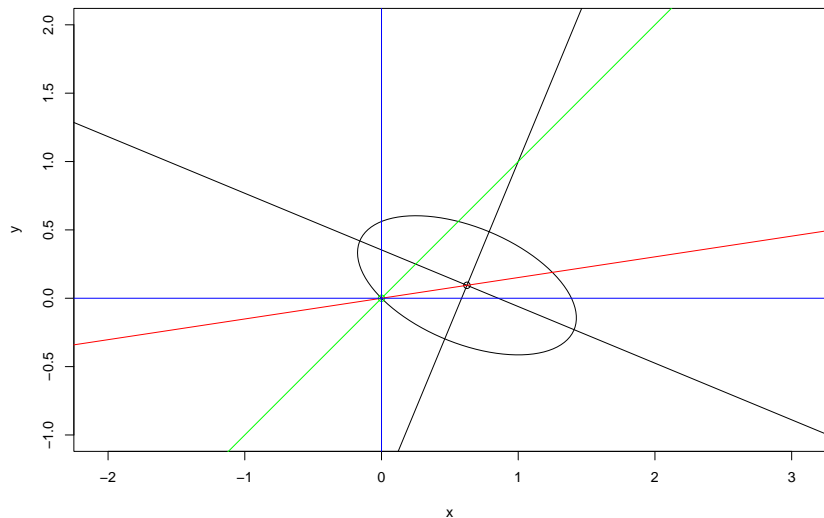
Dans les graphiques suivantes,

- ▶ 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  $\theta$ ,  $D = \text{diag}(\lambda)$
- ▶ 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



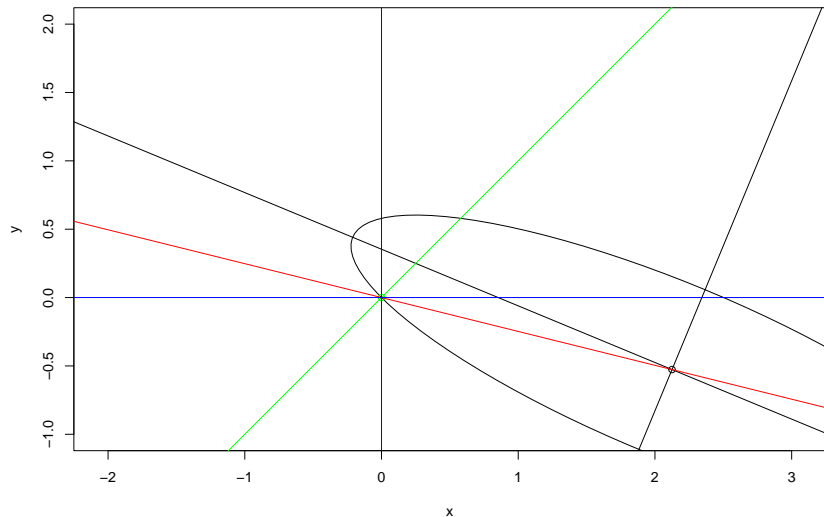
## Example 1

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



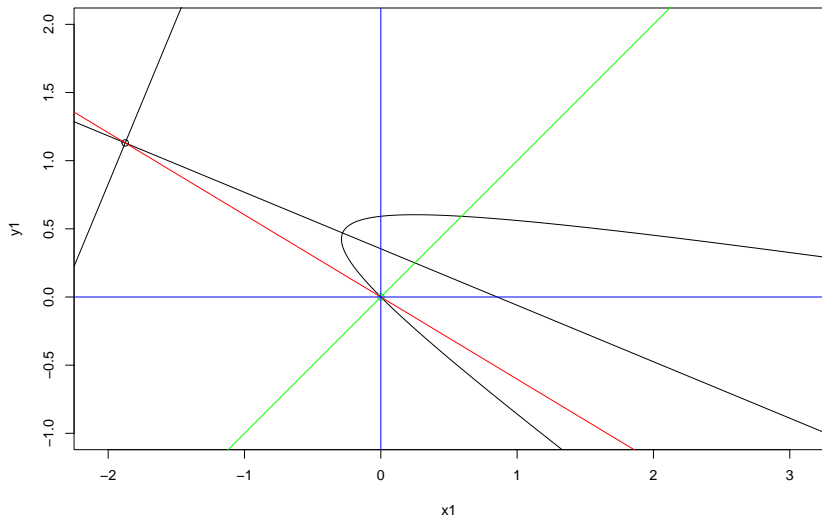
## Example 2

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



### Exemple 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](#) :

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

Calculer  $b_k = A_k^{-1} y_k$  prend  $O(n^2)$  opération ; La mise à jour,  $O(n^2)$  opérations :

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

## 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)

