Techniques Algorithmiques pour le Calcul Scientifique (LI364)

Cours n°2 : Introduction à l'optimisation (1/2)

Stef Graillat

Université Pierre et Marie Curie (Paris 6)

Résumé du cours précédent

- Présentation de l'arithmétique à virgule flottante
- Introduction au logiciel MATLAB
- Introduction à la Symbolic Math Toolbox de MATLAB

Objectifs du cours

- Existence et unicité des extrémas
- Condition nécessaire et suffisante vérifiées par les extrémas
- Algorithme pour le calcul d'extréma en dimension 1

Champs d'application

L'optimisation intervient dans tous les domaines. On peut citer par exemple

- la finance
- l'économe
- le contrôle optimal
- la météorologie
- le traitement d'image
- la gestion de la production d'électricité
- la biologie moléculaire
- etc.

Références principales

- **Scientific Computing, An Introductory Survey, Michael .T. Heath, McGraw-Hill, 2002** (ce cours est basé sur le livre et les transparents associés)
- Scientific Computing with Case Studies, Dianne P. O'Leary, SIAM, 2009
- Nonlinear Optimization, Jorgue Nocedal et Stephen Wright, Springer, 2006
- Introduction à l'Analyse Numérique Matricielle et à l'Optimisation, Philippe G. Ciarlet, Dunod, 1982
- Analyse numérique et optimisation, Grégoire Allaire, Éditions de l'École polytechnique, 2005
- L'optimisation, J.B. Hiriart-Urruty, PUF, 1996
- Convex Optimization, S. Boyd et L. Vandenberghe, Cambridge University Press, 2004

Références principales (suite)

- Numerical optimization : Theoretical and practical aspects, F. Bonnans, J.C. Gilbert, C. Lemaréchal et C. Sagastizábal, Springer-Verlag, 2006
- Optimisation continue, F. Bonnans, Dunod, 2006
- Optimisation et contrôle des systèmes linéaires, M. Bergounioux, Dunod, 2001.
- Convex Analysis and Nonlinear Optimization, J.M. Borwein et A.S. Lewis, Springer, 2000
- Lectures on Modern Convex Optimization - Analysis, Algorithms and Engineering Applications, A. Ben-Tal et A. Nemirovski, SIAM, 2001
- Numerical Computing with MATLAB, Cleve Moler, SIAM, 2004
- Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing, William Press, Saul Teukolsky, William Vetterling et Brian Flannery, 3rd Edition, Cambridge University Press, 2007

Plan du cours

- Généralités sur les problèmes d'optimisation
- Optimisation en dimension 1
- Optimisation en dimension $n \geq 2$

Généralités sur les problèmes d'optimisation

Optimisation

- Étant donnés une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ et un ensemble $S \subset \mathbb{R}^n$, trouver $x^* \in S$ tel que $f(x^*) \leq f(x)$ pour tout $x \in S$
- x^* est appelé un minimun ou minimiseur de f sur S
- Il suffit de ne considérer que la minimisation car maximiser f revient à minimiser $-f$
- La fonction objectif f est en général différentiable et peut être linéaire ou non linéaire
- L'ensemble des contraintes S est défini par un système d'équations et d'inéquation qui peuvent être linéaires ou non linéaires
- Un point $x \in S$ est dit admissible, acceptable ou réalisable (*feasible* en anglais)
- Si $S = \mathbb{R}^n$, alors le problème est dit sans contrainte

Problème général en optimisation

- Un problème d'optimisation s'écrit généralement sous la forme

$$\min f(x) \quad \text{sous} \quad g(x) = 0 \text{ et } h(x) \leq 0.$$

avec $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ et $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$
- Programmation linéaire : f, g et g sont des fonctions linéaires
- Programmation non linéaire : au moins une des fonctions f, g et h est non linéaire

Exemples de problèmes d'optimisation

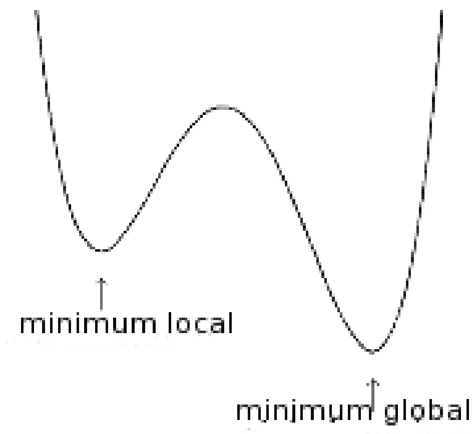
- Minimiser le poids d'une structure en prenant en compte des contraintes sur les forces
- Minimiser la surface d'un cylindre avec une contrainte sur le volume :

$$\min_{x_1,x_2} f(x_1,x_2) = 2\pi x_1(x_1+x_2)$$
$$\text{sous } g(x_1,x_2) = \pi x_1^2 x_2 - V = 0$$

où x_1 et x_2 sont respectivement le rayon et la hauteur du cylindre et V le volume requis

Optimisation locale vs globale

- $x^* \in S$ est un minimum global si $f(x^*) \leq f(x)$ pour tout $x \in S$.
- $x^* \in S$ est un minimum local si $f(x^*) \leq f(x)$ pour x dans un voisinage de x^*



Optimisation globale

- Trouver (ou même vérifier) un minimum global est en général très difficile
- La plupart des méthodes d'optimisation sont conçues pour trouver un minimum local (qui peut-être ou non global)
- Si un minimun global est recherché, on peut essayer d'appliquer une méthode d'optimisation avec des points initiaux différents
- Pour certains problèmes tels que la programmation linéaire, la recherche d'un minimum global est atteignable

Existence d'un minimum

- Si f est continue sur un fermé borné $S \subset \mathbb{R}^n$ alors f admet un minimum global sur S
- Si S n'est pas fermé ou non borné, alors f peut n'avoir ni minimum local, ni minimum global sur S
- Une fonction continue f sur un ensemble non borné S est dite coercive si
$$\lim_{\|x\| \to +\infty} f(x) = +\infty,$$
i.e. $f(x)$ devient grand quand $\|x\|$ devient grand
- Si f est coercive sur un ensemble fermé non borné $S \subset \mathbb{R}^n$ alors f admet un minimul global sur S

Courbe de niveau

- Une ligne de niveau pour une fonction $f : S \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ est l'ensemble des points de S pour lesquels f a une valeur donnée constante
- Étant donné $\gamma \in \mathbb{R}$, un ensemble de sous-niveau est défini par

$$L_\gamma = \{x \in S : f(x) \leq \gamma\}$$

- Si une fonction continue f sur $S \subset \mathbb{R}^n$ a un ensemble de sous-niveau fermé et borné alors f a un minimum global sur S
- Si f est non bornée alors f est coercive sur S si et seulement si tous ses ensembles de sous-niveau sont bornés

Unicité d'un minimum

- L'ensemble S est convexe s'il contient tous les segments compris entre deux de ses points

$$\forall x, y \in S, \forall \alpha \in [0; 1], \quad \alpha x + (1 - \alpha)y \in S$$

- Une fonction $f : S \subset \mathbb{R}^n \to S$ est convexe sur l'ensemble convexe S si

$$\forall x, y \in S, \forall \alpha \in [0; 1], \quad f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$$

- Tout minimum local d'une fonction convexe f sur un ensemble convexe $S \subset \mathbb{R}^n$ est un minimum global de f sur S
- Tout minimum local d'une fonction strictement convexe f sur un ensemble convexe $S \subset \mathbb{R}^n$ est le minimum global (unique) de f sur S

Condition nécessaire du premier ordre

- Pour des fonctions d'une variable, on trouve les extrémas en calculant les zéros de la dérivée
- Pour des fonctions à n variables, on cherche les points critiques, *i.e.* les solutions du système
$$\nabla f(x) = 0$$
où $\nabla f(x)$ est le gradient de f dont la i-ième composante est $\partial f(x)/\partial x_i$
- Si $f : S \subset \mathbb{R}^n \to R$ est de classe C^1 alors un minimum local x^* appartenant à l'intérieur de S est un point critique de f
- Attention : tous les points critiques ne sont pas forcément des minimas (ils peuvent être des maximas ou des points selle)

Condition nécessaire du second ordre

- Pour une fonction $f : S \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ de classe C^2, on distingue les points critiques en considérant la matrice Hessienne $H_f(x)$ définie par
$$(H_f(x))_{ij} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j}$$
qui est symétrique
- À un point critique x^*, si $H_f(x^*)$ est
  - définie-positive alors x^* est un minimum de f
  - définie-négative alors x^* est un maximum de f
  - indéfinie alors x^* est un point selle
  - singulière alors on ne peut rien dire

Condition sous contraintes

- Si le problème est contraint, alors seuls les points réalisables sont intéressants
- Pour le problème

$$\min f(x) \text{ sous } g(x) = 0$$

  où $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ et $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, une condition nécessaire pour qu'un point réalisable x^* soit solution est que

$$-\nabla f(x^*) = J_g(x^*)^T \lambda$$

  où J_g est la matrice jacobienne de g et λ est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange

Condition sous contraintes (suite)

- Le Lagrangien $\mathcal{L} : \mathbb{R}^{n+m} \to \mathbb{R}$ est défini par

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T g(x)$$

- Son gradient est donné par

$$\nabla \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) + J_g^T(x)\lambda \\ g(x) \end{pmatrix}$$

- La Hessienne est donnée par

$$H_{\mathcal{L}}(x, \lambda) = \begin{pmatrix} B(x, \lambda) & J_g^T(x) \\ J_g(x) & 0 \end{pmatrix}$$

  où

$$B(x, \lambda) = H_f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i H_{g_i}(x)$$

Condition sous contraintes (suite)

- Une condition nécessaire est donc un point critique du Lagrangien

$$\nabla \mathcal{L}(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) + J_g^T(x)\lambda \\ g(x) \end{pmatrix} = 0$$

- La Hessienne du Lagrangien est symétrique mais pas en général definie. Par conséquent un point critique de $\mathcal{L}$ est un point selle plus qu'un minimum ou un maximum
- Un point critique (x^*, λ^*) de $\mathcal{L}$ est un minimum contraint de f si $B(x^*, \lambda^*)$ est défini positif sur le noyau de $J_g(x^*)$
- Si les colonnes de Z forment une base du noyau de $J_g(x^*)$ alors il suffit de tester le caractère défini positif du Hessien projeté $Z^T BZ$

Sensibilité et conditionnement

- Développement de Taylor de f au voisinage de x^*

$$f(\widehat{x}) = f(x^* + h) = f(x^*) + f'(x^*)h + \frac{1}{2}f''(x^*)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Puisque $f'(x^*) = 0$, si $|f(\widehat{x}) - f(x^*)| \leq \varepsilon$ alors $|\widehat{x} - x^*|$ est de l'ordre de $\sqrt{2\varepsilon/|f''(x^*)|}$

- En conséquence, basée seulement sur l'évaluation de fonction, un minimum ne peut être calculé qu'avec une précision divisée par deux

Optimisation en dimension 1

L'unimodalité

- Pour minimiser une fonction d'une seule variable, on a besoin d'encadrer la solution par une méthode analogue à la dichotomie pour le calcul des racines d'une fonction
- Une fonction à valeur réelle f est unimodale sur l'intervalle $[a, b]$ s'il existe un unique point $x^* \in [a, b]$ tel que $f(x^*)$ soit minimal sur $[a, b]$, f soit strictement décroissant pour $x \leq x^*$ et strictement croissante pour $x^* \leq x$
- L'unimodalité permet de resteindre la recherche à un sous intervalle (analogue à la dichotomie)

Méthode de la section dorée (golden section search)

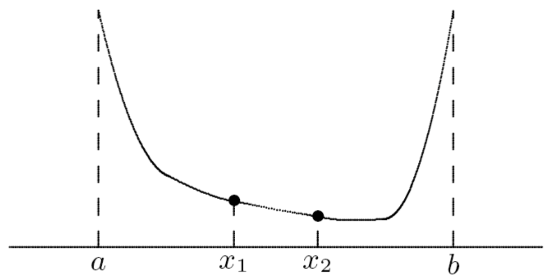
- On suppose f unimodale sur $[a, b]$ et soient x_1, x_2 deux points de $[a, b]$ avec $x_1 < x_2$
- En évaluant et comparant $f(x_1)$ et $f(x_2)$, on peut retirer un des intervalles $]x_2, b]$ ou $[a, x_1[$, le minimum appartenant à l'un des sous-intervalles restants
- On peut itérer le procédé en ne calculant à chaque fois qu'une seule évaluation de la fonction
- On veut réduire l'intervalle de recherche d'un même facteur à chaque itération et de plus, on veut conserver les mêmes relations entre les points du nouvel intervalle qu'avec celui de l'ancien

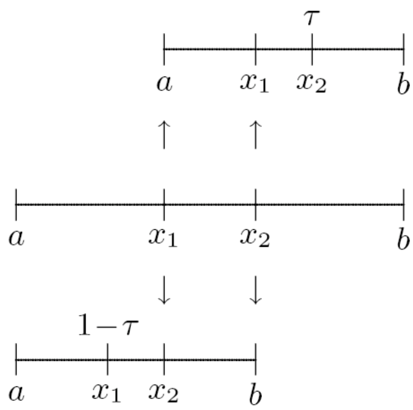
Méthode de la section dorée (suite)

- Pour se faire, on choisit les positions relatives des deux points par τ et $1 - \tau$ avec $\tau^2 = 1 - \tau$. Donc $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$ et $1 - \tau \approx 0.382$
- Quel que soit le sous-intervalle retenu, sa longueur sera de τ fois celui de l'intervalle précédent et les nouveaux points seront en position τ et $1 - \tau$ relativement au nouvel intervalle
- À chaque itération, on n'effectue qu'une seule évaluation de la fonction
- La taux de convergence est linéaire

Méthode de la section dorée (suite)

$\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$
$x_1 = a + (1 - \tau)(b - a)$; $f_1 = f(x_1)$
$x_2 = a + \tau(b - a)$; $f_2 = f(x_2)$
tant que $((b - a) > tol)$ **faire**
    si $(f_1 > f_2)$ **alors**
        $a = x_1$
        $x_1 = x_2$
        $f_1 = f_2$
        $x_2 = a + \tau(b - a)$
        $f_2 = f(x_2)$
    sinon
        $b = x_2$
        $x_2 = x_1$
        $f_2 = f_1$
        $x_1 = a + (1 - \tau)(b - a)$
        $f_1 = f(x_1)$
    fin
fin

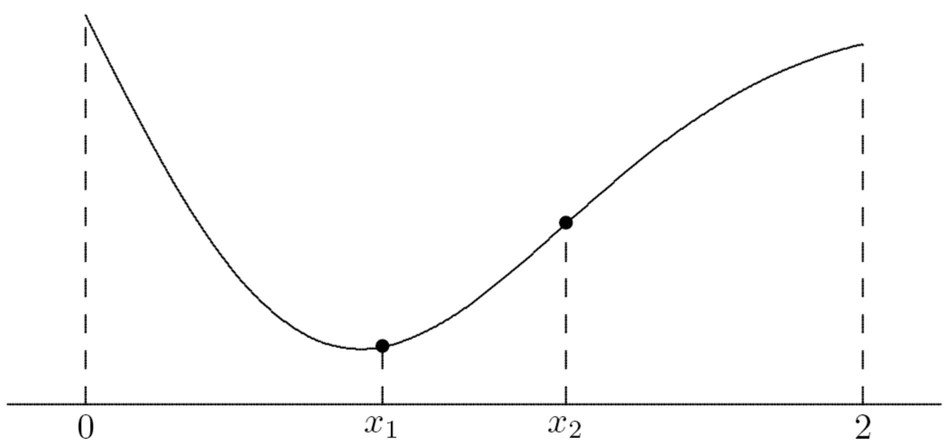




Méthode de la section dorée : exemple

Utilisation de la méthode de la section dorée pour minimiser

$$f(x) = 0.5 - xe^{-x^2}$$

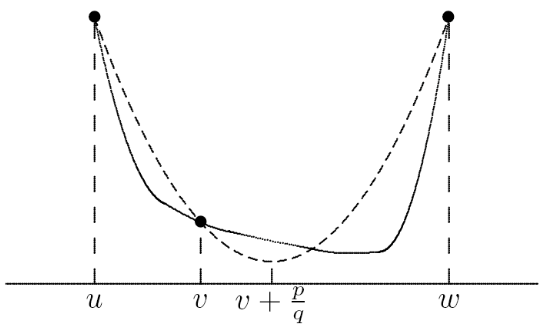


Méthode de la section dorée : exemple (suite)

x_1	f_1	x_2	f_2
0.764	0.074	1.236	0.232
0.472	0.122	0.764	0.074
0.764	0.074	0.944	0.113
0.656	0.074	0.764	0.074
0.584	0.085	0.652	0.074
0.652	0.075	0.695	0.071
0.695	0.071	0.721	0.071
0.679	0.072	0.695	0.071
0.695	0.071	0.705	0.071
0.705	0.071	0.711	0.071

Méthode d'interpolation quadratique

- On approxime la fonction par une fonction quadratique (polynôme de degré 2) en 3 valeurs
- On minimise la fonction quadratique pour obtenir une approximation du minimum

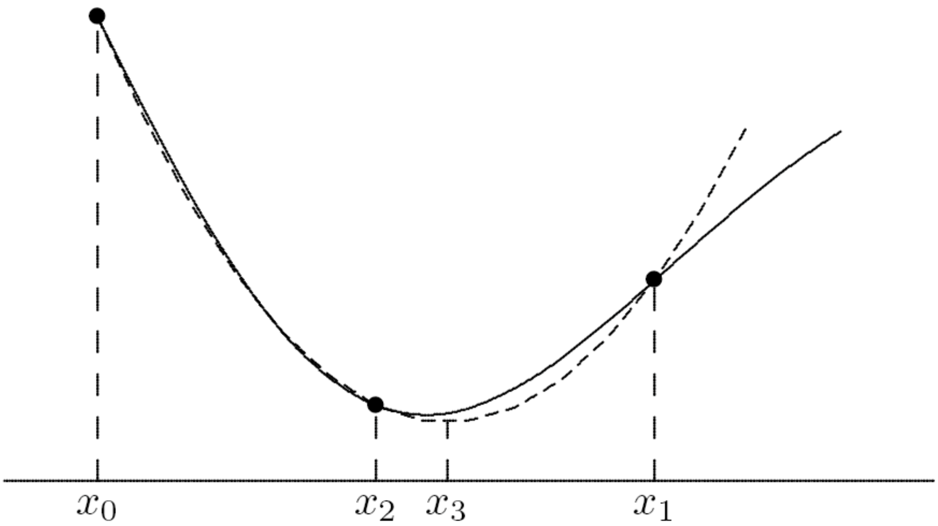


- on remplace un des trois points par le nouveau point et on itère le procédé jusqu'à convergence
- Le taux de convergence est superlinéaire

Méthode d'interpolation quadratique

Utilisation de la méthode d'interpolation quadratique pour minimiser

$$f(x) = 0.5 - xe^{-x^2}$$



Méthode d'interpolation quadratique

x_k	$f(x_k)$
0.000	0.500
0.600	0.081
1.200	0.216
0.754	0.073
0.721	0.071
0.692	0.071
0.707	0.071

Méthode de Newton

- Une autre approximation quadratique est la formule de Taylor à l'ordre 2
$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2$$
- Le minimum de cette fonction quadratique de h est donné par $h = -f'(x)/f''(x)$
- L'itération
$$x_{k+1} = x_k - f'(x_k)/f''(x_k)$$
est l'itération de Newton pour la résolution du système non linéaire $f'(x) = 0$
- La méthode de Newton pour trouver un minimun a donc une convergence quadratique à condition de commencer l'itération suffisamment près de la solution

Méthode de Newton : exemple

- Utiliser la méthode de Newton pour minimiser $f(x) = 0.5 - xe^{-x^2}$
- Les dérivées premières et secondes sont données par
$$f'(x) = (2x^2 - 1)e^{-x^2} \quad \text{et} \quad f''(x) = 2x(3 - 2x^2)e^{-x^2}$$
- L'itération de Newton est donc donnée par
$$x_{k+1} = x_k - (2x_k^2 - 1)/(2x_k(3 - 2x_k^2))$$
- En commençant à $x_0 = 1$, on obtient

x_k	$f(x_k)$
1.000	0.132
0.500	0.111
0.700	0.071
0.707	0.071

Conclusion

On a présenté

- des généralités sur les problèmes d'optimisation (existence, unicité, CNS, etc)
- des algorithmes pour résoudre des problèmes d'optimisation en dimension 1

La semaine prochaine, on présentera

- des algorithmes pour résoudre des problèmes d'optimisation en dimension $n \geq 2$